

ISSN 0002-3035

ФИЗИКА · ՖԻԶԻԿԱ · PHYSICS



ИЗВЕСТИЯ  
НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК АРМЕНИИ

ՏԵՂԵԿԱԳԻՐ  
ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԶԳԱՅԻՆ ԱԿԱԴԵՄԻԱՅԻ

PROCEEDINGS  
OF NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF ARMENIA

44, N1, 2009

ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ՀԱՆՐԱՊԵՏՈՒԹՅԱՆ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԶԳԱՅԻՆ ԱԿԱԴԵՄԻԱ  
НАЦИОНАЛЬНАЯ АКАДЕМИЯ НАУК РЕСПУБЛИКИ АРМЕНИЯ

ՏԵՂԵԿԱԳԻՐ ИЗВЕСТИЯ  
ՖԻԶԻԿԱ ФИЗИКА

ՀԱՏՈՐ ԾՈՄ

44

№ 1

ՀՀ ԳԱՍ "ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆ" ՀՐԱՏԱՐԱԿՉՈՒԹՅՈՒՆ

ИЗДАТЕЛЬСТВО "ТИТУТЮН" НАН РА

ԵՐԵՎԱՆ

ЕРЕВАН

2009

© 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. Շարոյան, 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.

|  |    |
|--|----|
| <b>Կ.Ս.Արամյան.</b> Բոլինի ձևափոխությունը հաստատուն մագնիսական դաշտում գտնվող երկչափ սինգուլյար օսցիլյատորի համար. ....  | 3  |
| <b>Գ.Ա.Մուրադյան, Ա.Ժ.Մուրադյան.</b> Սառը քվանտային գազի դինամիկան $\delta$ -ճեղքված միաչափ պոտենցիալային փոստում. ....  | 10 |
| <b>Ջ.Բ.Պուրսամադ.</b> Ջերմամեխանիկական վերակողմնորոշում նեմատիկ հեղուկ բյուրեղներում. ....   | 23 |
| <b>Ս.Լ.Հարությունյան.</b> Կուլոնյան ճեղքի ազդեցությունը $A^{III}B^V$ տիպի կիսահաղորդիչների խառնուրդային կլանման վրա. ....  | 29 |
| <b>Ա.Ս.Վարդանյան.</b> Դիսլոկացիոն կինկի դինամիկան պիննինգի կենտրոնի պոտենցիալում արտաքին ուժերի ազդեցության տակ. ....  | 35 |
| <b>Ռ.Կ.Հովսեփյան, Ն.Ռ.Աղամալյան, Ս.Ի.Պետրոսյան.</b> ZnO:Li թաղանթների ֆոտոհաղորդականության թռիչքային և դրեյֆային մեխանիզմները. ....  | 44 |
| <b>Ռ.Մ.Ավագյան, Գ.Հ.Հարությունյան, Վ.Ա.Աթոյան, Ա.Վ.Հովսեփյան, Կ.Ի.Փյունկույան, Է.Վ.Չուբարյան.</b> Հայկական ԱԷԿ-ի տեղակայման շրջանում հողում $^{137}\text{Cs}$ պարունակության տարածական բաշխման հետազոտումը. .... | 54 |
| <b>Հ.Ա.Պետրոսյան, Ռ.Ա.Ափրեյան, Ա.Ա.Հովհաննիսյան, Ա.Կ.Աթանեսյան, Ա.Մ.Պետրոսյան.</b> L-նիտրոհիստիդինի միահիդրատի ոչ գծային օպտիկական ակտիվությունը և սպեկտրազննությունը. ....                                      | 64 |
| Ակադեմիկոս <b>Դ.Մ.Սեդրակյանի</b> 70-ամյակին. ....  | 73 |

CONTENTS

|  |    |
|--|----|
| <b>K.S.Aramyan.</b> Bohlin transformation for a two-dimensional singular oscillator in a constant magnetic field. ....   | 3  |
| <b>G.A.Muradyan, A.Zh.Muradyan.</b> Dynamics of a cold quantum gas in a $\delta$ -split one-dimensional potential well. ....   | 10 |
| <b>J.B.Poursamad.</b> Thermomechanical reorientation in nematic liquid crystals. ....  | 23 |
| <b>S.L.Harutyunyan.</b> Influence of the Coulomb gap on the impurity absorption in $A^{III}B^V$ semiconductors. ....   | 29 |
| <b>A.S.Vardanyan.</b> Dynamics of dislocation kink in the pinning center potential under influence of external forces. ....  | 35 |
| <b>R.K.Hovsepyan, N.R.Aghamalyan, S.I.Petrosyan.</b> Hopping and drift mechanisms of photoconductivity in ZnO:Li films. ....   | 44 |
| <b>R.M.Avagyan, G.G.Haroutiunyan, V.A.Atoyan, A.V.Hovsepyan, K.I.Pyuskyulyan, E.V.Chubaryan.</b> Investigation of spatial distribution of $^{137}\text{Cs}$ in soil in area of the Armenian NPP location. .... | 54 |
| <b>H.A.Petrosyan, R.A.Apreyan, A.A.Hovhannesian, A.K.Atanessian, A.M.Petrosyan.</b> Nonlinear optical activity and spectroscopy of L-nitrohistidine monohydrate. ....  | 64 |
| On the 70-th birthday of Academician <b>D.M.Sedrakian.</b> ....  | 73 |

## СОДЕРЖАНИЕ

|   |    |
|---|----|
| <b>К.С.Арамян.</b> Преобразование Болина для двумерного сингулярного осциллятора в постоянном магнитном поле. ....  | 3  |
| <b>Г.А.Мурадян, А.Ж.Мурадян.</b> Динамика холодного квантового газа в $\delta$ -расщепленной одномерной потенциальной яме. ....   | 10 |
| <b>Дж.Б.Пурсамад.</b> Термомеханическая переориентация в нематических жидких кристаллах. ....   | 23 |
| <b>С.Л.Арутюнян.</b> Влияние кулоновской щели на примесное поглощение в полупроводниках типа $A^{III}B^V$ . ....  | 29 |
| <b>А.С.Вардадян.</b> Динамика дислокационного кинка в потенциале центра пиннинга при воздействии внешних сил. ....  | 35 |
| <b>Р.К.Овсепян, Н.Р.Агамалян, С.И.Петросян.</b> Прыжковый и дрейфовый механизмы в пленках $ZnO:Li$ . ....   | 44 |
| <b>Р.М.Авакян, Г.Г.Арутюнян, В.А.Атоян, А.В.Овсепян, К.И.Пюскюлян, Э.В.Чубарян.</b> Исследование пространственного распределения $^{137}Cs$ в почве в районе размещения Армянской АЭС. .... | 54 |
| <b>А.А.Петросян, Р.А.Апреян, А.А.Оганесян, А.К.Атанесян, А.М.Петросян.</b> Нелинейно-оптическая активность и спектроскопия L-нитрогистидина моногидрата. ....                               | 64 |
| К 70-летию академика <b>Д.М.Седракяна.</b> ....   | 73 |

Заказ № 223

Тираж 100. Сдано в набор 27.10.2008.

Подписано к печати 05.11.2008. Печ. л. 4,75.

Бумага офсетная. Цена договорная.

Типография НАН РА.

Ереван, пр. Маршала Баграмяна, 24.

УДК 530.145

## ПРЕОБРАЗОВАНИЕ БОЛИНА ДЛЯ ДВУМЕРНОГО СИНГУЛЯРНОГО ОСЦИЛЛЯТОРА В ПОСТОЯННОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

К.С. АРАМЯН

Арцахский государственный университет,  
Степанакерт, Нагорно-Карабахская Республика

(Поступила в редакцию 27 июня 2008 г.)

Рассмотрено преобразование Болина кругового сингулярного осциллятора в постоянном магнитном поле. Показано, что это преобразование приводит к двумерной задаче Кеплера с дополнительным центробежным потенциалом в присутствии постоянного магнитного поля, напряженность которого убывает обратно пропорционально расстоянию от центра притяжения системы. Построен энергетический спектр полученной системы.

### 1. Введение

Задачи Кулона и изотропного осциллятора (в  $d$ -мерном пространстве) являются наиболее известными системами классической и квантовой механики, обладающими скрытой симметрией. Несмотря на качественное различие этих систем, они обладают рядом общих черт. Так, еще в XIX веке отмечалось сходство осциллятора и задачи Кулона, проявляющееся, в частности, в эллиптичности классических траекторий. В начале XX века независимо Болиным и Леви-Чивитой было установлено соответствие между классической (двумерной) задачей Кеплера и круговым осциллятором [1]. Было показано, что траектории, соответствующие этим задачам, связаны преобразованием

$$w = z^2, \quad (1)$$

где комплексные координаты  $z = x_1 + ix_2/\sqrt{2}$  и  $w = y_1 + iy_2/\sqrt{2}$  параметризуют положение частицы в осцилляторной и в кеплеровой задачах. На классическом уровне это соответствие "один на один". Однако, было известно, что квантовомеханическая задача Кулона переходит в четные уровни кругового осциллятора. Проведя редукцию квантового кругового осциллятора по дискретной группе  $Z/2$  (действующей как оператор четности), мы получим, что, в то время как четные уровни переходят в двумерную задачу Кулона, нечетные переходят в двумерную задачу Кулона в присутствии потока бесконечно тонкого соленоида, снабжающего систему спином  $1/2$  [2]. Иными словами, нечетным состояниям кругового осциллятора отвечает двумерная задача Кулона со спином  $1/2$ , имеющая

по построению скрытую симметрию двумерной задачи Кулона. Преобразование Болина–Леви–Чивиты прямо рас-пространяется на пространства постоянной кривизны: сферу и гиперболоид [3]. Более того, имеется его аналог, связывающий системы со степенными потенциалами [4], приводящий на квантовом уровне [2] к системам с дроб-ным спином, введенным в физический оборот в работе [5]. Это обобщенное преобразование, которое уместно назвать преобразованием Болина–Леви–Чивиты–Арнольда, было распространено на поверхности непостоянной кривизны Болина в недавней работе автора [6].

С другой стороны, круговой осциллятор допускает естественные обобщения, точно решаемые как на классическом, так и на квантовом уровне. Наиболее простым обобщением такого вида является круговой осциллятор в постоянном магнитном поле. Если прибавить к этой системе центробежный потенциал, то есть потенциал с обратной зависимостью от квадрата расстояния, то система опять же останется точнорешаемой. Подобная система (без магнитного поля) обычно называется сингулярным круговым осциллятором, иногда – осциллятором Винтерница–Сморозинского. В связи с этим стоит отметить недавний цикл работ [7], в котором была предложена и исследована альтернативная модель сферического осциллятора: в отличие от стандартной модели сферического осциллятора Хиггса она остается точно-решаемой после включения постоянного магнитного поля. Ее точнорешаемый сингулярный аналог (то есть точнорешаемый альтернативный сферический сингулярный осциллятор) был предложен в работе [8]. Если в дополнение к магнитному полю ввести в систему центробежный потенциал, то система остается точнорешаемой. Ясно, что преобразование Болина такого модифицированного осциллятора приведет к некоторой точнорешаемой модификации задачи Кеплера. Ее изучению посвящена представляемая работа. Она организована следующим образом. Сперва мы дадим гамильтоново описание классического кругового осциллятора с двумерным центробежным потенциалом (именуемого также двумерным сингулярным осциллятором) в постоянном магнитном поле. Затем, совершив классическое преобразование Болина–Леви–Чивиты, мы получим двумерную задачу Кеплера с центробежным потенциалом, взаимодействующую с магнитным полем специфической конфигурации. Наконец, мы найдем энергетический спектр построенной системы.

## 2. Классическое преобразование Болина

Классический сингулярный осциллятор в постоянном магнитном поле удобно описывать в терминах фазового пространства  $T^*C$ , на котором заданы следующие канонические скобки Пуассона и гамильтониан:

$$\{\pi, z\} = 1, \quad \{\bar{\pi}, \bar{z}\} = 1, \quad \{\pi, \bar{\pi}\} = iB, \quad (2)$$

$$H_{\text{osc}} = \pi\bar{\pi} + \frac{\alpha^2}{4z\bar{z}} + w^2 z\bar{z}. \quad (3)$$

Здесь и далее

$$z = \frac{x_1 + ix_2}{\sqrt{2}}, \quad \pi = \frac{p_1 - ip_2}{\sqrt{2}}. \quad (4)$$

Вращательный момент осциллятора задается выражением

$$J = -i(z\pi - \bar{z}\bar{\pi}) + Bz\bar{z}. \quad (5)$$

Теперь совершим преобразование Болина  $(z, \pi) \rightarrow (w, p)$ , каноническое на всем фазовом пространстве (за исключением начала координат, в котором оно сингулярно):

$$w = z^2, \quad p = \frac{\pi}{2z} : \{w, w\} = 0, \{w, p\} = 1, \{p, \bar{p}\} = i \frac{B}{4|w|}. \quad (6)$$

Это преобразование переводит изоэнергетические поверхности сингулярного осциллятора  $H_{\text{osc}} = E_{\text{osc}}$  в изоэнергетические поверхности сингулярной задачи Кулона, где

$$H_c = \varepsilon, \quad H_c = p\bar{p} + \frac{\bar{\alpha}^2}{4|w|^2} - \frac{\gamma}{|w|}, \quad (7)$$

где мы ввели обозначения

$$\varepsilon = -\frac{\omega^2}{4}, \quad \gamma = \frac{E_{\text{osc}}}{4}, \quad \bar{\alpha} = \frac{\alpha}{2}. \quad (8)$$

Как видно из (6), в полученной системе имеется магнитное поле с напряженностью

$$\bar{B} = \frac{B}{4|w|}. \quad (9)$$

Итак, мы показали, что двумерный сингулярный осциллятор в постоянном магнитном поле переводится преобразованием Болина в двумерную задачу Кеплера с дополнительным центробежным потенциалом, характеризуемую наличием магнитного поля, напряженность которого обратно пропорциональна расстоянию до центра. Ясно, что, поскольку исходная система является классически интегрируемой, то полученная система также интегрируема. Найти такое решение не составляет никакого труда.

Конечно, такое магнитное поле трудно породить какой-либо элементарной конфигурацией (движущихся) зарядов или магнитов: его поток через окружность радиуса  $r$  равен  $Br/2$ . Но следует отметить, что постоянное магнитное поле также является не более, чем идеализацией реальных магнитных полей, неоднородностью которых можно пренебречь в условиях данной задачи. С этой точки зрения можно сказать, что (9) аппроксимирует магнитное поле, напряженность которого медленно спадает с расстоянием. Что касается сингулярности магнитного поля в силовом центре системы, то она "прикрыта" центробежным потенциалом, так что эффективное движение пробной частицы происходит в области с конечным

значением напряженности магнитного поля. Одним словом, построенная модель вполне может иметь отношение к реальности.

Отметим, что при преобразовании (6) вращательный момент исходной системы (5) переходит в удвоенный вращательный момент полученной системы:

$$J = 2\tilde{J}, \quad \tilde{J} = -i(wp - \bar{w}\bar{p}) + 2\tilde{B}(|w|)w\bar{w}. \quad (10)$$

Это удвоение вращательного момента обеспечивает возможность введения в систему спина  $1/2$ , о котором говорилось во введении.

### 3. Квантовое преобразование Болина

Теперь рассмотрим вкратце квантовомеханический аналог приведенного преобразования. Для облегчения восприятия мы ограничимся построением энергетического спектра, опустив рассмотрение явного вида волновых функций. При необходимости их можно без труда выписать.

Квантовомеханическая система, соответствующая гамильтоновой системе (2), (3), задается гамильтонианом (3), где классические импульсы  $\pi, \bar{\pi}$  заменены операторами

$$\hat{\pi} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} + \frac{B\bar{z}}{2}, \quad \hat{\bar{\pi}} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \bar{z}} - \frac{Bz}{2}. \quad (11)$$

Перейдя к полярным координатам,  $z = \sqrt{2}re^{i\phi}$ , мы приведем этот гамильтониан к виду

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\partial}{r\partial r} + i\frac{B}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{\partial^2}{r^2\partial \phi^2} \right) + \frac{\left( \omega^2 + \frac{B^2}{4} \right) r^2}{2} + \frac{\alpha^2}{2r^2}. \quad (12)$$

Квантовый оператор вращательного момента (5) в полярных координатах выглядит так:

$$\hat{J} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}. \quad (13)$$

Чтобы найти спектр системы, рассмотрим спектральную задачу

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad \hat{J}\psi = \hbar m\psi. \quad (14)$$

Она легко разделяется при выборе волновой функции вида

$$\psi = e^{im\phi} \psi_{mE}(r), \quad |m| = 0, 1, \dots \quad (15)$$

Подставив в спектральную задачу, мы придем к следующему радиальному уравнению Шредингера (см., например, [9]):

$$\frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{\partial^2 \Psi}{\partial r^2} + \frac{\partial \Psi}{r \partial r} \right) = \left( E - \frac{\hbar B m}{2} + \frac{\left( \omega^2 + \frac{B^2}{4} \right) r^2}{2} + \frac{\alpha^2 + \hbar^2 m^2}{r^2} \right) \Psi. \quad (16)$$

Как видим, оно совпадает с радиальным уравнением Шредингера кругового осциллятора с энергией

$$\tilde{E} = E + \frac{\hbar B m}{2},$$

частотой

$$\tilde{\omega} = \sqrt{\omega^2 + \frac{B^2}{4}}$$

и собственным значением вращательного момента (“магнитным числом”)

$$\tilde{m} = \sqrt{m^2 + \frac{\alpha^2}{\hbar^2}}$$

Для последней системы спектр задается выражением  $\tilde{E} = \hbar \tilde{\omega} (2n_r + \tilde{m} + 1)$ , где  $n_r = 1, 2, \dots$  есть радиальное квантовое число. Отсюда мы немедленно находим выражение для квантового гамильтониана (3):

$$\left| E_{n_r, m} - \frac{\hbar B m}{2} \right| = \hbar \sqrt{\omega^2 + \frac{B^2}{4}} \left( 2n_r + \sqrt{m^2 + \frac{\alpha^2}{\hbar^2}} + 1 \right), \quad n_r = 0, 1, \dots; \quad |m| = n_r = 0, 1, \dots \quad (17)$$

Теперь мы можем совершить квантовое преобразование Болина для спектральной задачи (14). Его удобно совершить в полярных координатах, в которых оно имеет вид:

$$2R = r^2, \quad 2\phi = \varphi, \quad (18)$$

где  $R$  играет роль радиальной координаты преобразований системы, а  $\phi$  – угловой. Прямыми преобразованиями убеждаемся, что уравнение Шредингера гамильтониана (12) переходит в уравнение Шредингера двумерной задачи Кулона с центробежным потенциалом, взаимодействующим с магнитным полем (9). При этом параметры полученной системы связаны с параметрами исходной соотношениями (8), то есть так же, как и в классическом случае. Как видно из (10), при преобразовании Болина вдвое уменьшается вращательный момент (см. также (13), (18)), так что магнитное число (собственное значение вращательного момента)  $M$  связано с магнитным числом исходной задачи выражением

$$M = \frac{m}{2}. \quad (19)$$

Подставив его в (17) и воспользовавшись соотношениями (8), мы получим, после несложных математических преобразований, спектр двумерной задачи Кулона с центробежным потенциалом, взаимодействующим с магнитным полем (9):

$$\varepsilon_{n_r, M} = - \frac{\left( \gamma - \frac{\hbar B M}{2} \right)^2}{\hbar^2 \left( n_r + \sqrt{M^2 + \frac{\tilde{\alpha}}{\hbar^2} + \frac{1}{2}} \right)^2} - \frac{B^2}{16}. \quad (20)$$

Здесь следует сделать небольшой комментарий. Как мы отмечали в начале статьи, на классическом уровне исходная система связана с полученной каноническим преобразованием, то есть между ними имеется взаимно-однозначное соответствие. Однако легко видеть, что при преобразовании Болина (6) мы совершаем редукцию по дискретной группе  $Z_2$ , задающей в исходной системе пространственные отражения:  $z \rightarrow -z$ . На классическом уровне это не приводит к каким-либо следствиям. Но на квантовом картина иная: результирующая система оказывается заданной не на плоскости, а на двулистной римановой поверхности (2). Поэтому для получения корректного результата мы должны выбрать лишь четные состояния осциллятора, то есть состояния с  $m = 0, \pm 2, \pm 4, \dots$ . Они перейдут в состояния модифицированной задачи Кулона с  $M = 0, \pm 2, \pm 4, \dots$ . А нечетные состояния с  $m = 1, 3, \dots$  будут описывать ситуацию, когда в результирующей системе имеется спин  $1/2$ . Спектр будет задаваться тем же выражением, с той разницей, что магнитное квантовое число будет принимать полуцелые значения  $M = \pm 1/2, \pm 3/2, \dots$ .

Рассмотрим подробнее выражение для спектра. Как видим, он, вообще говоря, невырожден при наличии магнитного поля и центробежного члена. Но при определенных значениях параметров в системе может получиться случайное вырождение. Более того, даже при отсутствии центробежного члена вырождение в системе отсутствует. При этом наличие магнитного поля разрушает пространственную четность системы: это приводит к тому, что спектр зависит от магнитного числа  $M$ , а не его абсолютного значения. При этом, в отличие от обычной двумерной задачи Кулона, система с магнитным полем может иметь нулевые значения энергии.

#### 4. Заключение

Таким образом, мы построили точнорешаемое обобщение задачи Кулона, характеризуемое, во-первых, наличием центробежного члена, во-вторых, наличием магнитного поля, обратно пропорционального расстоянию до центра притяжения системы. Более того, снабдив систему спином  $1/2$ , мы оставили ее точнорешаемой. Отметим, что построенная система может быть полезной в моделировании реальных ситуаций, когда внешнее магнитное поле нельзя считать постоянным. То, что его напряженность стремится к бесконечности в центре координатной системы,

несущественно, поскольку центробежный потенциал делает эту область недоступной для проникновения пробной частицы.

В начале статьи мы отмечали модель сферического осциллятора [7] (и его сингулярную версию [8]), остающуюся интегрируемой в присутствии постоянного магнитного поля. По нашему мнению, стоило бы, совершив над ним манипуляции, аналогичные проделанным выше, получить сферический аналог модели, представленной в этой работе.

В заключение хочу поблагодарить А. Нерсесяна за предложенную задачу и полезные обсуждения и Е. Саркисян за проверку некоторых формул. Работа выполнена в рамках проекта “Квантовомеханические исследования для физики конденсированных сред”, финансируемого Министерством образования и науки Нагорно-Карабахской республики.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. **K.Bolin.** Bull. Astr., **28**, 144 (1911); **T.Levi-Civita.** Opere Matematiche, **2**, 411 (1906).
2. **A.Nersessian, V.M.Antonjan, M.Tsulaia.** Mod. Phys. Lett. A, **11**, 1605 (1966).
3. **A.Nersessian, G.Pogosyan.** Phys. Rev. A, **63** 020103 (R) (2001); **A.Nersessian.** Phys. Atom. Nucl., **65**, 1070 (2002), [arXiv:math-ph/00110049].
4. **В.И.Арнольд.** Гюйгенс и Барроу, Ньютон и Гук. М., Наука, 1989.
5. **J.F.Schonfield.** Nucl.Phys. B, **185**, 117 (1981); **F.Wilczek.** Phys. Rev. Lett., **48**, 1144 (1982); *ibid.*, **49**, 957 (1982); **A.Goldhaber.** Phys. Rev. Lett., **49**, 905 (1982).
6. **К.С.Арамян.** Изв. НАН Армении, Физика, **41**, 412 (2006).
7. **S.Belucci, A.Nersessian.** Phys. Rev. D, **67**, 065013 (2003); **S.Belucci, A.Nersessian, A. Yeranyan.** Phys. Rev. D, **70**, 085013 (2004); *ibid.*, **70**, 045006 (2004); **A.Nersessian, A.Yeranyan.** J. Phys. A, **37**, 2791 (2004); **L.Mardoyan, A.Nersessian.** Phys. Rev. B, **72** 233303 (2005); **S.Belucci, L.Mardoyan, A.Nersessian.** Phys. Lett. B, **636**, 137 (2006); **L.Mardoyan.** The alternative model of spherical oscillator. [ArXiv:0708.1868]. **М.А.Алексян, К.С.Арамян.** Изв. НАН Армении, Физика, **42**, 75 (2007).
8. **К.С.Арамян.** Интегрируемая модель двумерного сингулярного сферического осциллятора в постоянном магнитном поле. ТМФ (2008).
9. **Л.Г.Мардоян, Г.С.Погосян, А.Н.Сисакян, В.М.Тер-Антонян.** Квантовые системы со скрытой симметрией. М., Физматлит, 2006.

#### BOHLIN TRANSFORMATION FOR A TWO-DIMENSIONAL SINGULAR OSCILLATOR IN A CONSTANT MAGNETIC FIELD

K. S. ARAMYAN

The Bohlin transformation of a two-dimensional singular oscillator in a constant magnetic field is considered. We show that the resulting system is a two-dimensional Kepler system with a centrifugal potential specified by the presence of a magnetic field whose strength is inversely proportional to the distance from the forced center. The energy spectrum of this system is derived.

УДК 539.12

## ДИНАМИКА ХОЛОДНОГО КВАНТОВОГО ГАЗА В $\delta$ -РАСЩЕПЛЕННОЙ ОДНОМЕРНОЙ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЕ

Г.А. МУРАДЯН, А.Ж. МУРАДЯН

Ереванский государственный университет, Армения

(Поступила в редакцию 12 декабря 2007 г.)

Рассмотрено динамическое поведение волновой функции внутри не-симметрично расщепленного (пространственно асимметричного) двухъямного потенциала. Исследована зависимость размеров ям от степени пространственной асимметрии и показано, что она очень быстро подавляет квантовый туннельный переход из одной ямы в другую. Практически полное подавление туннелирования наступает с пяти-десятипроцентной асимметрией. Это значение находится на грани чувствительности нынешних экспериментальных схем конструирования двухъямных потенциалов. Предсказано явление резонанса в квантовом туннелировании рассматриваемых состояний. Показано также, что некогерентно приготовленное суперпозиционное состояние в двухъямном потенциале туннелирует почти так же, как и абсолютно когерентное состояние.

### 1. Введение

Атомарный Бозе-газ, разреженный до концентраций  $10^{13}$ – $10^{14}$  см<sup>3</sup> и сверхохлажденный до температур  $10^{-7}$  К и ниже, переходит в бозе-эйнштейновское конденсированное состояние [1], которое обладает уникальными квантовомеханическими свойствами и вытекающими отсюда возможностями для высоких технологий. Атомарное облако конденсированного газа удерживается в вакуумном пространстве с помощью магнитных и/или оптических полей. Параметры полей, в частности, геометрические, могут легко и контролируемо меняться, создавая различные конфигурации удерживающего квантового потенциала. Если газ жестко ограничен в двух (радиальных) направлениях размерами, сопоставимыми с де Бройлевской длиной волны поступательного движения атома или меньшими, и одновременно слабо ограничен в третьем (аксиальном) направлении, то мы имеем дело с квазиодномерным потенциалом. Соответствующие радиальному движению энергетические уровни атома настолько удалены друг от друга, что переходы из заселенного основного энергетического уровня на возбужденные уровни практически отсутствуют. Таким образом, динамика квантового газа в радиальном направлении “замораживается” в основном состоянии и газ становится эффективно одномерным (см., например, [2] и приведенные там ссылки). В настоящее время представление об одномерном (1D) квантовом газе быстро прогрессирует от упрощенной теоретической модели [3,4] к

лабораторно доступным системам [5]. Выявлению квантовых закономерностей, присущих поступательному движению конденсированных атомов (так называемой фи-зики волновых пакетов), особенно способствует образование потенциально-го барьера в квантовой яме, делаая возможным экспериментальное исследо-вание ряда когерентно-динамических явлений, недоступных в других областях квантовой физики [6].

При исследовании динамики газа в квантовых ямах следует, строго говоря, учитывать также энергию межатомного взаимодействия. Обычно считается, что двухмодовое приближение, хорошо известное в учебной лите-ратуре для эволюции частицы в двухъямном потенциале, может быть ис-пользовано и для описания многочастичной задачи [7]. Рассмотрение эво-люции газа с учетом межатомной потенциальной энергии в рамках двух-модового представления показало, что интуитивно ожидаемые когерентно-периодические осцилляции между двумя ямами имеют место только при от-носительно малых числах атомов (при фиксированном значении квантовой проницаемости разделяющего ямы потенциального барьера) или при отно-сительно больших проницаемостях потенциального барьера (при фиксированном значении числа атомов). При переходах же плотного газа из одной ямы в другую он асимптотически долго задерживается в каждой из них. Происходит как бы самозахват макроскопического количества газа (macroscopic quantum self-trapping) в одной из сопряженных квантовых ям. Этот странный на первый взгляд результат приписывается нелинейному вкладу межатомного взаимодействия в эволюционное уравнение. Кратко говоря, математическое моделирование приводит уравнение эволюции к виду урав-нения для двумерного растяжимого маятника. Тогда режим самозахвата газа в одной из потенциальных ям выявляет себя как аналог однонаправленного (вращательного) движения маятника.

Долговременное задержание основного количества бозонного газа в одной из двух сопряженных потенциальных ям было недавно наблюдеено в сверхохлажденных парах  $^{87}\text{Rb}$  [8]. Для объяснения экспериментальных ре-зультатов авторы работы используют двухмодовое приближение и “замора-живание” поступательного движения газа в первоначально заселенной яме связывают с наличием нелинейного члена межатомного взаимодействия в эволюционном уравнении. Авторы же работы [9] для объяснения полученных в [8] экспериментальных результатов развили несколько иную модель. Она, правда, также существенно акцентирует роль нелинейного межатомно-го взаимодействия, однако базируется на многоуровневом строении одночас-тичного энергетического спектра и его когерентного заселения в ходе подго-товки начального состояния. Подход авторов работы [9] так же успешно вос-производит экспериментальные результаты, как и подход авторов [8]. Это, на наш взгляд, указывает на то, что вопрос туннелирования конденсированного газа в двухъямном потенциале требует детального рассмотрения всех обстоятельств задачи, которые могут оказать влияние на динамику газа и привести к подавлению его эволюции, как и двух- или

многомодовые нелинейные модели. Как обоснование такой возможности достаточно напомнить явление коллапса в тех же квантовых газах [10] или в населенности энергетических уровней отдельного атома [11]. Как шаг в этом направлении мы в настоящей работе рассмотрим случай пространственно-несимметричного потенциала и покажем, что при наличии даже малой неодинаковости ширины смежных потенциальных ям конденсированный газ практически полностью задерживается в первоначально заселенной потенциальной яме. Подавление эволюции в данном случае не основано на балансе энергии при переходе атома из одной потенциальной ямы в другую, как это имеет место для моделей, предложенных в [8,9]. В случае пространственной асимметрии потенциала тунелирующая через потенциальный барьер волновая функция деструктивно интерферирует в области первоначально незаселенной потенциальной ямы и самоподавляется. Пространственная асимметрия двухъямного потенциала, помимо самосогласованного межатомного взаимодействия, может на практике стать причиной резкого замедления и даже торможения квантового тунелирования между сопряженными потенциальными ямами.

Статья построена следующим образом. В разделе 2 мы представим модель пространственно-несимметричного двухъямного потенциала с рассмотрением эволюции волновой функции отдельного атома в нем. Согласно общепринятым представлениям, полностью вырожденный Бозе-газ (Бозе-конденсат нулевой температуры) и все его составные атомы описываются одной и той же волновой функцией [1]. Поэтому полученная в разделе 2 картина эволюции, в частности, подавление квантового тунелирования из-за пространственной асимметрии между двумя сопряженными ямами, относится и к эволюции полностью конденсированного Бозе-газа. В разделе 3 будет рассмотрен случай частично-когерентного начального состояния (моделируя тем самым случай ненулевых температур, когда в газе помимо конденсированного имеется и нормальное состояние). Будет показано, что декогерентность между различными частями (пространственная декогерентность) мало что меняет в динамике переходов атомов между сопряженными квантовыми ямами. Например, амплитуда колебаний не зависит от степени начальной декогерентности в газе. Отметим, что предложенная модель в приложении к Бозе-конденсированному состоянию исходит из того, что понятие макроскопической волновой функции (параметра порядка) при ненулевых температурах все еще является корректным понятием для всего конденсата [12], а наличие нормальной составляющей газа в этом плане проявляется как уменьшение длины когерентности относительно геометрических размеров газа [13]. Исходя из этих двух концепций, мы представляем частично когерентный газ, приготовленный в одной из ям, как совокупность пространственно смещенных и частично перекрываемых между собой частей, каждая из которых имеет длину, равную длине когерентности в газе. Общая длина этих частей равна геометрической длине газа. Волновые функции отдельных частей имеют свои протяженности и фазы, которые распределены случайно в некоторых интервалах. При увеличении

температуры пространственные размеры отдельных (когерентных) частей конденсата сокращаются, а ширина фазовой неопределенности увеличивается (стремясь в асимптотике к значению  $2\pi$ , то есть к полной дефазировке). Предсказан эффект резонансного туннелирования, основные результаты численного анализа которого представлены в разделе 4. Краткое обсуждение результатов приведено в разделе 5.

## 2. Волновой пакет в несимметричной двойной потенциальной яме

Потенциал пленения атомов считаем консервативным и простой прямоугольной формы (кстати, в работе [14] сообщается о достаточно хорошей реализации такого потенциала для нейтральных атомов). Потенциальная яма делится на две смежные, в общем случае неравные, части узким потенциальным барьером, который для простоты выберем в виде  $\delta$ -функции, т.е.,

$$V(x) = \begin{cases} V_0 \delta(x-a), & 0 < x < b, a < b, \\ \infty, & x \leq 0, x \geq b. \end{cases} \quad (1)$$

Временную эволюцию волновой функции  $\Psi(x, t)$  будем исследовать на основе разложения по полному базису стационарных состояний  $\Psi_n(x)$ , где  $n = 1, 2, 3, \dots$  нумерует энергетический уровень. Поэтому решение задачи начнем с определения стационарных состояний. Соответствующее уравнение Шредингера запишем в безразмерном виде

$$\left( -\frac{d^2}{dX^2} + U \delta(X - a/b) \right) \Psi_n(X) = \epsilon_n \Psi_n(X), \quad (2)$$

где  $X = x/b$ ,  $U = V_0 / (bE_r)$ ,  $E_r = \hbar^2 / 2mb^2$  – энергетический масштаб задачи,  $m$  – масса атома, а  $\epsilon_n = E_n / E_r$  – энергия атома в единицах  $E_r$ .

Уравнение (1) на собственные значения и собственные функции решается элементарно. Энергетический спектр определяется из трансцендентного уравнения

$$\sqrt{\epsilon_n} \sin[\sqrt{\epsilon_n}] + U \sin[(1-a/b)\sqrt{\epsilon_n}] \sin[(a/b)\sqrt{\epsilon_n}] = 0, \quad (3)$$

а собственные функции имеют вид

$$\Psi_n(X) = \begin{cases} \alpha_n \sin[\sqrt{\epsilon_n} X], & 0 \leq X \leq a/b, \\ \alpha_n \frac{\sqrt{\epsilon_n} \cos[(a/b)\sqrt{\epsilon_n}] + U \sin[(a/b)\sqrt{\epsilon_n}]}{\sqrt{\epsilon_n} \cos[(a/b-1)\sqrt{\epsilon_n}]} \sin[\sqrt{\epsilon_n}(X-1)], & a/b \leq X \leq 1 \end{cases} \quad (4)$$

с коэффициентом нормировки

$$\alpha_n = 2\varepsilon_n^{1/4} \sin\left(\left(1 - \frac{a}{b}\right)\sqrt{\varepsilon_n}\right) \left\{ \left[ \frac{2a}{b}\sqrt{\varepsilon_n} - \sin\left(\frac{2a}{b}\sqrt{\varepsilon_n}\right) \right] \sin^2\left(\left(1 - \frac{a}{b}\right)\sqrt{\varepsilon_n}\right) + \left[ 2\left(1 - \frac{a}{b}\right)\sqrt{\varepsilon_n} - \sin\left(2\left(1 - \frac{a}{b}\right)\sqrt{\varepsilon_n}\right) \right] \sin^2\left(\frac{a}{b}\sqrt{\varepsilon_n}\right) \right\}^{-1/2}. \quad (5)$$

Вне потенциальной ямы все собственные функции тождественно равны нулю.

Если ввести также безразмерное время,  $\tau = (E_r / \hbar)t$ , то вышеуказанное разложение по стационарным состояниям запишется в виде

$$\Psi(X, \tau) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Psi_n(X) \exp(-i\varepsilon_n \tau), \quad (6)$$

где искомые коэффициенты  $c_n$  не зависят от времени и поэтому могут быть выражены через начальную волновую функцию  $\Psi(X, 0)$ :

$$c_n = \int_0^1 \Psi_n^*(X) \Psi(X, 0) dX, \quad (7)$$

замыкая тем самым цепь соотношений, определяющих волновую функцию при выбранном ее начальном виде.

Предположим, как обычно для аналогичных задач, что волновая функция в начальный момент времени сосредоточена в одной (левой, в данном случае) стороне потенциального барьера и выберем для нее сперва следующий вид:

$$\Psi(X, 0) = \sqrt{\frac{2b}{a}} \sin\left(\frac{\pi b}{a} X\right). \quad (8)$$

Для функции (8) интеграл (7) элементарно вычисляется и для искомым коэффициентов получаем

$$c_n = A_n \sqrt{\frac{a}{2b}} \left[ \frac{\sin(\pi - a\sqrt{\varepsilon_n}/b)}{\pi - a\sqrt{\varepsilon_n}/b} - \frac{\sin(\pi + a\sqrt{\varepsilon_n}/b)}{\pi + a\sqrt{\varepsilon_n}/b} \right]. \quad (9)$$

Приступим теперь к численным расчетам и представим с их помощью, как ведут себя заселенности ям при отклонении формы потенциала от симметричного, в данном случае – при отклонении отношения  $a/b$  от значения  $1/2$ .

Интуитивные соображения о туннелировании как о результате интерференции волн материи (проходящих через барьер и отраженных от стен потенциала) показывают, что сильно неравномерное заселение потенциальных ям следует искать в области относительно больших “мощностей” потенциального барьера, когда левосторонняя и правосторонняя ямы проявляют некую самостоятельность. С точки зрения энергетического спектра это означает, что энергетический спектр полного потенциала близок к результату наложения спектров левосторонней и правосторонней ям. Исходя из этих соображений, мы

сразу заключаем, например, что причиной хорошего туннелирования между двумя ямами в случае симметрично разделенного потенциала является то, что каждая собственная мода одной части потенциала является собственной и для другой части потенциала. Переходя из одной ямы в другую и отражаясь от стен, они интерферируют конструктивно и самоподдерживаются без потерь. Увеличение “мощности” потенциала уменьшает вероятность туннелирования, но не влияет на величину заселения, периодически накапливающейся в каждой из смежных ям.

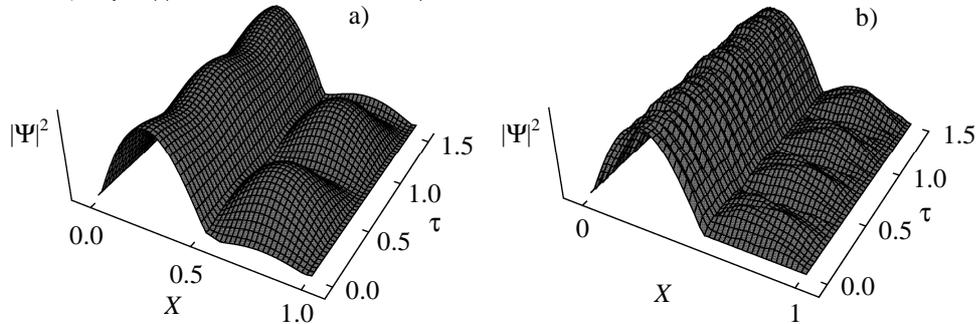


Рис.1. Эволюция волновой функции в пространственно-асимметричной двойной потенциальной яме. Асимметрия составляет 5% в случае (а) и 10% в случае (b). В обоих случаях “мощность”  $U = 75$ . В случае (b) состояние в два раза быстрее осциллирует, чем в случае (а).

На базе приведенной интерференционной картины туннелирования становится понятным, что с отклонением вида потенциала от симметрично-разделенного степень самоподдержания собственных мод (при переходе из одной ямы в другую) будет уменьшаться в общем случае. Интерференция будет принимать все более деструктивный характер, подавляя величину заселенности (вероятности), которая может накапливаться в первоначально пустой потенциальной яме в ходе периодических осцилляций. Вопрос фактически переходит в количественную плоскость, то есть насколько быстро это происходит. Наши численные расчеты показывают, что очень быстро. Для иллюстрации на рис.1 мы представили картину временной эволюции заселенности ям (модуля волновой функции) при значениях  $a/b = 0.525$  и  $a/b = 0.55$ , то есть, когда асимметрия составляет всего 5% и 10%, соответственно. Начальное заселение левосторонней ямы сохраняется из-за подавления туннелирования (особенно в случае 10%-ой асимметрии, когда подавление туннелирования почти полное). Отметим, что в расчетах сохранено до сорока членов суммы (6), хотя в данном случае эффективно населяется небольшое число нижних энергетических уровней. Причиной тому является необходимость как можно корректнее выяснить вопрос о возможности режимов коллапса и возрождения в заселении потенциальных ям, которые иногда сопровождают интерференцию амплитуд вероятности. Поиск в широком интервале времен, вплоть до  $10^6$  осцилляций (и при большем числе населенных энергетических уровней) не обнаружил, однако, этих явлений. Картина рис.1 практически без изменений

сохраняется и в дальнейшем. Отсутствие коллапсов и возрождений во временной эволюции объясняется, по-видимому, тем, что распределение энергетических уровней в рассматриваемом случае не является квазиравномерным. А это означает, что при выборе удерживающего потенциала в виде, близком к параболическому, будет возможен и такой специфический вид долговременного подавления эволюции заселения. Следует также добавить, что явления коллапса и возрождения в эволюции заселенности двухъямного потенциала предсказаны давно (см., например, [15]). Однако они объясняются наличием межямого взаимодействия (наличием нелинейного члена в уравнении Шредингера) и соответственно отсутствуют в рассматриваемой здесь линейной теории.

Рис.2 подтверждает приведенный выше интуитивный вывод о том, что подавления туннелирования из-за асимметрии двухъямного потенциала следует ожидать, если только ямы достаточно хорошо изолированы друг от друга потенциальным барьером. Видно, что понижение “мощности” потенциального барьера до значения  $U = 25$  (вместо значения  $U = 75$  на рис.1а) практически полностью возобновляет осцилляции между потенциальными ямами.

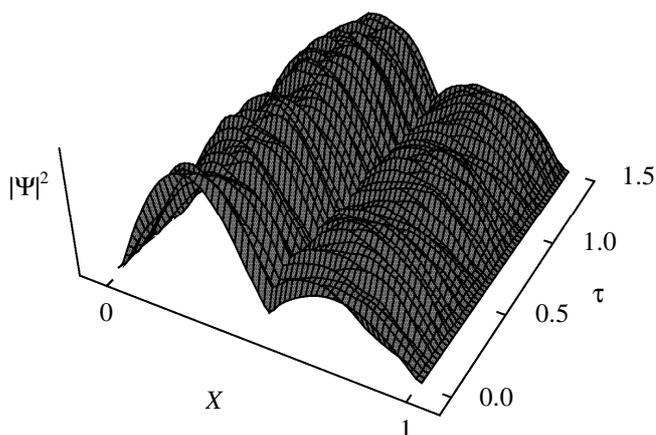


Рис.2. То же, что и на рис.1а, только “мощность” потенциального барьера  $U$  понижена до значения 25.

В явлении квантового туннелирования (квантовой транспортировки) существенную роль играет характер импульсных состояний, в частности, значение среднего импульса волнового пакета  $p = \langle \psi | p | \psi \rangle$  начального состояния. Рис.3 иллюстрирует начальный этап эволюции волнового пакета при относительно небольших значениях начального импульса  $p_0$ . Видно, что волновой пакет, двигаясь направо, сталкивается с потенциальным барьером; малая доля при этом проходит через барьер в правостороннюю яму, а основная часть сначала останавливается, а потом самоинтерферируя, отражается и двигается к левосторонней стенке потенциала. Отметим, что относительно малому значению импульса  $p_0 = 15$  (в единицах  $\hbar/b$ , для атомов  $^{87}\text{Rb}$  в потенциальной яме с характерным размером 50 мкм) на температурной шкале соответствует значение

$T = \hbar^2 p_0^2 / b^2 m k_B \approx 5 \text{ нК}$ . Это примерно на порядок ниже температуры конденсации в магнитооптических ловушках, реализованных в настоящее время. С чисто квантовомеханической точки зрения эти импульсы, тем не менее, нельзя считать малыми, поскольку соответствующая кинетическая энергия более чем в 15 раз больше расстояния первой возбужденной пары энергетических уровней от низколежащей пары. В более поздний период эволюции в условиях рис.3 туннелирование остается подавленным.

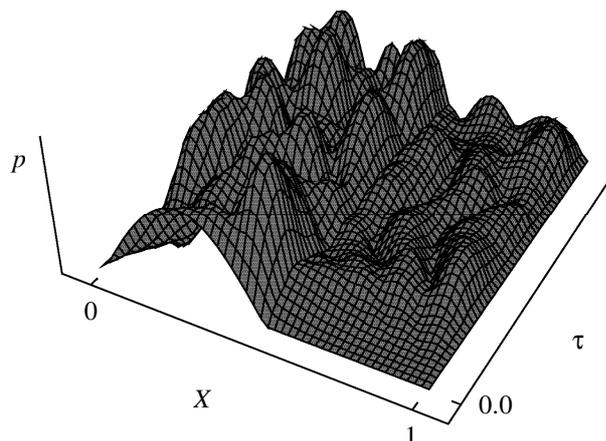


Рис.3. Начальный этап эволюции волновой функции в пространственно-асимметричной двойной потенциальной яме при относительно малом значении ( $p_0 = 15$ ) среднего значения импульса начального волнового пакета. Остальные параметры те же, что и на рис.1а.

В случае больших значений импульса  $p_0$  падающий на барьер пакет практически не отражается от него, целиком проходит в правостороннюю яму и, сильно сталкиваясь с потенциальной стенкой, распадается на части. В дальнейшем устанавливается в среднем равномерное распределение плотности по всей длине потенциальной ямы.

### 3. Некогерентная смесь волновых пакетов в симметричной двойной потенциальной яме

Другой, не менее важной стороной проблемы квантового туннелирования является вопрос о роли (или степени важности) декогерентности. Здесь мы будем отличать две различные по смыслу возможности. К первой категории мы отнесем случай, когда система сама по себе не содержит источника (механизма) генерации декогерентности, а декогерентность была наложена на начальное состояние. То есть это случай, когда система гамильтонова, эволюция может быть описана уравнением Шредингера, однако начальное состояние системы представляет собой некую некогерентную смесь волновых пакетов. Тогда ко второй категории мы отнесем

случай, когда начальное состояние является когерентным, но система содержит источник некогерентности (внутренний или внешний), который действует с начального момента времени. Вопрос о роли некогерентности в литературе обсуждается, как правило, для второй категории, когда источниками некогерентности в плененном квантованном газе являются его связь с внешним термостатом и отличная от нуля температура. В контексте туннелирования в двойной потенциальной яме, в частности, обоснован (см., например, [15]) интуитивно ожидаемый результат о том, что некогерентность уменьшает скорость туннелирования квантового газа через потенциальный барьер. При достаточно высоком уровне некогерентности она может полностью подавить квантовое туннелирование. В настоящем же параграфе мы рассмотрим первый тип некогерентности, моделируя начальную волновую функцию системы в следующем виде:

$$\Psi(X, 0) = C \sum_{j=0}^n \left[ \Theta \left( X - \frac{f_{\text{rand}} a j}{bN} \right) - \Theta \left( X - \frac{a - f_{\text{rand}} a(n-j)/N}{b} \right) \right] \times \sin \left( \frac{\pi b}{a(1 - f_{\text{rand}} n/N)} \left( X - \frac{f_{\text{rand}} a j}{bN} \right) \right) \exp(i2\pi g_{\text{rand}}), \quad (10)$$

где  $f_{\text{rand}}$  ( $g_{\text{rand}}$ ) – случайное число из интервала  $[0, f(g)]$ , причем  $f(g) \leq 1$ , а число членов в сумме  $n+1$  не превосходит наперед выбранное значение  $N$ . Выбором значения  $N$  мы предопределяем максимально возможное число волновых пакетов, которые совместно составляют начальное состояние системы. Каждый член представляет собой волновой пакет синусоидального вида, расположенный между точками  $x_{\text{min}} = f_{\text{rand}} a(j/N)$  и  $x_{\text{max}} = a - f_{\text{rand}} a(n-j)/N$ . Например, первый волновой пакет (с номером  $j=0$ ) простирается от левосторонней стенки потенциала до некоторой точки, удаленной влево от потенциального барьера на величину  $f_{\text{rand}} a(n/N)$ . Величина  $a[1 - f_{\text{rand}}(n/N)]$  составляет длину отдельного волнового пакета. Поскольку случайное число  $f_{\text{rand}}$  имеет в общем случае различные значения для различных  $j$ -слагаемых суммы (10), то все волновые пакеты начального состояния имеют разные длины (но большие, чем  $a[1 - (n/N)]$ ). Нумерация всех волновых пакетов произведена, как обычно, слева направо. Последний из пакетов (с  $j=n$ ) простирается от точки  $x_{\text{min}} = f_{\text{rand}} a(n/N)$  до точки нахождении потенциального барьера  $x_{\text{max}} = a$ . Каждый волновой пакет имеет некую случайную фазу из интервала  $[0, 2\pi g]$ . Таким образом, случайность в начальной волновой функции (10) имеет двойную природу: случайность по длине и расположению (в левосторонней потенциальной яме) и случайность по фазе. Их эффективности определяются выбором чисел  $f \in [0, 1]$  и  $g \in [0, 1]$ , соответственно.

Схема расчетов для начального суперпозиционного состояния остается той же, что и в предыдущем параграфе, только выражение (8) заменяется на выражение (10). Кроме того, поскольку некогерентность начального состояния интересует нас с

точки зрения возможного источника подавления квантового туннелирования, то в этом параграфе мы ограничимся только случаем симметрично расщепленного потенциала, когда когерентно-квантовое туннелирование максимально эффективно.

Мы провели детальный анализ режимов некогерентности начального состояния типа (10), в частности, режима фазовой некогерентности, и для всех режимов получили ту же самую качественную картину: степень декогерентности начального состояния практически не влияет на динамику туннелирования гамильтоновой системы. Один из случаев показан на рис.4. Хотя в некоторых случаях удавалось получить заметное, до 30–40%, подавление туннелирования, однако это подавление исчезало после двух-трех колебаний заселенности в квантовых ямах. Достаточно четко наблюдается и следующая закономерность: укорочение пространственных протяженностей некогерентных волновых пакетов, а также увеличение разброса их длительностей, сглаживает картину пространственно-временной эволюции модуля волновой функции и тем самым приближает к картине эволюции в полностью когерентном случае.

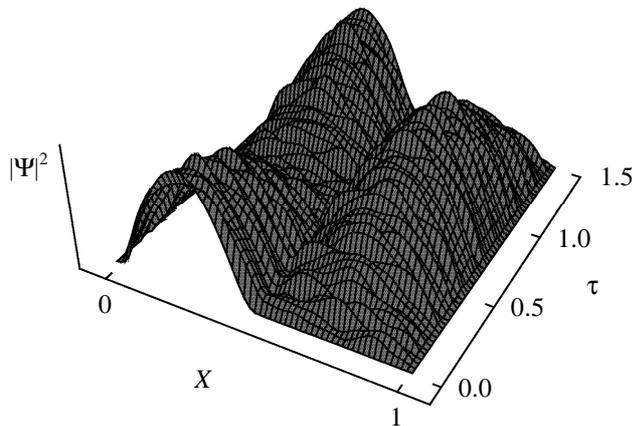


Рис.4. Картина эволюции волновой функции в симметрично расщепленной (с “мощностью”  $U = 75$ ) потенциальной яме в случае некогерентно приготовленного начального состояния. Эволюция происходит менее гладко, чем в случае полностью когерентного состояния, но практически не выявляет признаков подавления туннелирования.

#### 4. Резонансы в туннелировании в двойной потенциальной яме

Вышеприведенные рассуждения об интерференции в туннелировании приводят также к другому, не менее важному выводу, который может быть проверен на современном уровне эксперимента. Это наличие серии резонансов в квантовом туннелировании материальных волн в двойной потенциальной яме, если разделяющий потенциальный барьер, как и раньше, достаточно “мощный”. Для выяснения сути сделанного утверждения рассмотрим случай  $a/b=1/3$ , когда

правосторонняя, первоначально пустая яма в два раза шире левосторонней, первоначально заполненной ямы. Тогда собственные волновые функции левосторонней ямы дважды укладываются в правосторонней яме и поэтому интерференция снова, как и в симметричном случае  $a/b = 1/2$ , становится конструктивной и сохраняет состояния также в правосторонней яме. Результаты численных расчетов, которые представлены на рис.5 четко подтверждают сделанный вывод. Понятно, что эти, так сказать, геометрические резонансы составляют целую серию, определяемую условием  $a/b = 1/n$ , где  $n = 2, 3, 4, \dots$ . С этой точки зрения случай симметрично расщепленного потенциала представляет первый член серии резонансов.

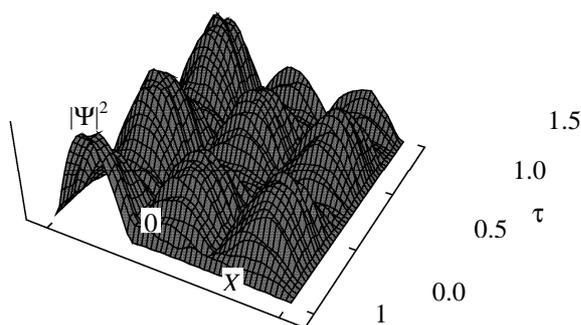


Рис.5. Резонансное усиление туннелирования в пространственно асимметричной двойной потенциальной яме, когда первоначально незаселенная яма в два раза шире первоначально заселенной (геометрический резонанс);  $b = 2a$ ,  $U = 75$ .

Следует иметь в виду, что с переходом к более высоким порядкам “мощность” разделяющего потенциального барьера постепенно все хуже будет удовлетворять условию хорошего разделения квантовых ям. Это означает, что ширина резонансов будет постепенно увеличиваться, а эффективность падать. Для их сохранения следует с увеличением  $n$  соответственно увеличивать и “мощность” барьера. Но с последней быстро растут и времена туннелирования. Поэтому высокие порядки резонансов не представляют практического интереса и не могут быть экспериментально наблюдаемы в настоящее время, если времена туннелирования будут порядка секунды и больше.

Следует добавить также, что геометрические резонансы несимметричны относительно начального заселения ям. Из вышеприведенного объяснения прямо следует, что первоначальное заселение широкой ямы не приводит к конструктивной интерференции в области узкой ямы и туннелирование оказывается сильно подавленным. Это показано на рис.6, условия которого отличаются от условий рис.5 только выбором начально заселенной ямы. Туннелирование из широкой ямы в узкую практически отсутствует.

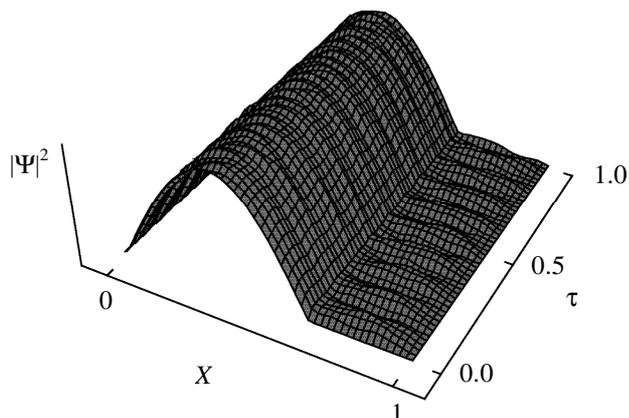


Рис.6. Картина эволюции модуля волновой функции показывает, что геометрический резонанс в явлении квантового туннелирования в двухъямном потенциале исчезает, если первоначально заселена широкая яма.

### 5. Заключение

Рассмотрев квантовое туннелирование в двухъямном потенциале с достаточно высоким потенциальным барьером, мы показали, что с отклонением от разделения потенциала на две равные части очень быстро наступает подавление квантового туннелирования. При начальном заселении более широкой ямы квантового потенциала подавление туннелирования универсальное и имеет место для любых соотношений ширин смежных ям. В обратном случае, когда первоначально заселена более узкая яма, мы показали, что имеет место резонансное восстановление полного туннелирования, как только ширина широкой ямы становится в целое число раз больше ширины более узкой ямы.

Мы также предложили модель учета некогерентности в начальном состоянии квантовой системы и показали, что если система гамильтонова, то некогерентный характер начального состояния практически не влияет на эволюцию заселения смежных потенциальных ям. Следует отметить, что этот результат не противоречит ранее полученным результатам других авторов, которые показали, что некогерентность подавляет квантовое туннелирование между квантовыми ямами. Дело в том, что последние рассматривают в некотором смысле обратный случай, когда источник некогерентности функционирует как раз в ходе всей эволюции системы. Это делает систему негамильтоновой и состояние системы описывается уже не волновой функцией, а матрицей плотности. И наконец, уравнением эволюции является не уравнение Шредингера, а уравнение Лиувилля с наличием слагаемого релаксационного типа.

## ЛИТЕРАТУРА

1. **E.A.Cornell, C.E.Wieman.** Rev. Mod. Phys., **74**, 875 (2002); **W.Ketterle.** Rev. Mod. Phys., **74**, 1131 (2002); **J.O.Andersen.** Rev. Mod. Phys., **76**, 599 (2004); **C.J.Pethick, H.Smith.** Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases. Cambridge, 2004.
2. **M.T.Batchelor, X.W.Guan, N.Oelkers, C.Lee.** arXiv:cond-mat/0505550.
3. **L.Tonks.** Phys. Rev., **50**, 955 (1936).
4. **M.Girardeau.** Phys. Rev., **139**, B500 (1965); *ibid.*, J. Math. Phys., **1**, 516 (1960).
5. **A.Gorlitz, J.M.Vogels, A.E.Leanhardt, et al.** Phys. Rev. Lett., **87**, 130402 (2001); **M.Greiner, I.Bloch, O.Mandel, et al.** Phys. Rev. Lett., **87**, 160405 (2001).
6. **J.Esteve, T.Schum, J.-B.Trebbia, I.Bouchoule, A.Aspect, C.I.Westbrook.** arXiv:physics/0503112; **T.Scumm, J.Schmiedmayer, P.Kruger.** Nature Physics, **1**, 57 (2005); **R.Gati, M.Albiez, J.Folling, B.Hemmerling, M.K.Oberthaler.** Appl. Phys. B, **82**, 207 (2006).
7. **G.J.Milburn, J.Corney, E.M.Wright, D.F.Walls.** Phys. Rev. A, **55**, 4318 (1997); **A.Smerzi, S.Fantoni, S.Giovanazzi, S.R.Shenoy.** Phys. Rev. Lett., **79**, 4950 (1997); **C.Menotti, J.R.Anglin, J.I.Cirac, P.Zoller.** Phys. Rev. A, **63**, 023601 (2001); **J.Chen, Y.Guo, H.Cao, H.Song.** arXiv:quant-ph/0507191v1; **K.M.Mahmud, H.Perry, W.P.Reinhardt.** Phys. Rev. A, **71**, 023615 (2005).
8. **M.Albiez, R.Gati, J.Folling, S.Hunsmann, M.Cristiani, M.K.Oberthaler.** Phys. Rev. Lett., **95**, 010402 (2005) [arXiv:cond-mat/0411757].
9. **A.N.Salgueiro, A.F.R. de Toledo Piza, et al.** arXiv:quant-ph/0608222.
10. **S.Dyrting, G.J.Milburn.** Phys. Rev. A, **47**, R2484 (1993); **M.Greiner, O.Mandel, T.W.Hansch, I.Bloch.** Nature, **419**, 51 (2002).
11. **A.Zh.Muradyan, G.A.Muradyan.** J.Phys. B, **37**, 4471 (2004).
12. **S.Franke-Arnold, G.Huyet, S.M.Barnett.** J. Phys. B, **34**, 945 (2001).
13. **F.Garbier, S.Richard, G.H.Thywissen, et al.** Phys. Rev. A, **67**, 051602 (2003).
14. **T.P.Meyrath, F.Schreck, J.L.Hanssen, et al.** Phys. Rev. A **71**, 041604(R) (2005).
15. **A.Smerzi, S.Raghavan.** Phys. Rev. A, **61**, 033601 (2000).

## DYNAMICS OF A COLD QUANTUM GAS IN A $\delta$ -SPLIT ONE-DIMENSIONAL POTENTIAL WELL

G.A. MURADYAN, A.Zh. MURADYAN

The dynamics of a wave function in a non-symmetrically split (space-asymmetric) double-well potential is considered. The dependence on the degree of space-asymmetry is studied and it is shown that the space-asymmetry very quickly suppresses the quantum tunneling between the neighboring wells. A space asymmetry of already of 5-10 percent almost totally suppresses the quantum tunneling. This is near the edge of sensitivity of the present experimental schemes of optical double-well potentials. The existence of resonances in asymmetrical configurations is predicted also. In addition, we show that any incoherently prepared superposition state in the double-well potential tunnels almost identically to the totally coherent state.

УДК 621.372

## **ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКАЯ ПЕРЕОРИЕНТАЦИЯ В НЕМАТИЧЕСКИХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛАХ**

ДЖ.Б. ПУРСАМАД

Ереванский государственный университет, Армения

(Поступила в редакцию 20 июня 2008 г.)

Предсказан и теоретически исследован термомеханический механизм переориентации директора в закрученном нематическом жидком кристалле, вызванный одномерным продольным градиентом температуры. Вычисленные величины переориентации директора находятся в пределах, в которых могут быть легко измерены экспериментально.

### **1. Введение**

В нематических жидких кристаллах (НЖК) очень важны термические эффекты, ввиду температурной зависимости таких параметров НЖК, как свободная энергия Франка, упругие постоянные, коэффициент поглощения света, массовая плотность, параметр порядка и показатель преломления [1]. Наиболее важными из термических эффектов являются те, которые предсказаны термомеханической теорией [2].

Термомеханические эффекты в газах [3], сверхтекучих жидкостях [4] и холестерических жидких кристаллах [5] известны давно. В частности, в [5] предполагается, что в нематических жидких кристаллах аналогов нет. Между тем, эффекты такого типа были предсказаны в [2]. На основе этой теории предсказываются три основных типа термомеханических эффектов; первый – гидродинамический поток, вызванный температурным градиентом. Второй – это возникновение падения температуры из-за неоднородного потока и третий тип – дополнительное отклонение директора, вызванное градиентом температуры. Все отмеченные эффекты можно вывести путем варьирования функции диссипации, введенной в [2]. Термомеханический эффект при гибридной и цилиндрически-гибридной ориентации исследован в [6] теоретически и экспериментально. Колебательные движения “гибкой ленты” из-за гидродинамических потоков получены в [7].

В данной работе исследована переориентация директора из-за термического градиента, которая может происходить в закрученном нематическом жидком кристалле при наличии любого теплового источника, например, элемента Пельтье. Термический нагрев приводит к вращающему моменту, действующему на директор наряду с остальными моментами. Этот момент либо стабилизирует, либо дестабилизирует первоначальную ориентацию в зависимости от отношения

термомеханических коэффициентов. Этот эффект может быть вызван также градиентом температуры из-за поглощения света.

## 2. Уравнение термомеханической переориентации в нематическом жидком кристалле

Рассмотрим первоначально закрученный ориентированный НЖК толщины  $L$ , заключенный между плоскостями  $z = 0$  и  $z = L$  декартовой системы координат. Среднее направление ориентации НЖК задается директором  $\hat{n}(\mathbf{r})$ . В отсутствие градиента температуры директор НЖК лежит в плоскости  $(x, y)$ . Пусть  $\theta(z) = \pi z / 2L$  есть угол между директором и осью  $x$ . Тогда директор имеет вид  $\hat{n}(\mathbf{r}) = \hat{e}_x \cos \theta(z) + \hat{e}_y \sin \theta(z)$ , где  $\hat{e}_x$  и  $\hat{e}_y$  суть единичные векторы в соответствующих направлениях (см. рис.1). Уравнение равновесной ориентации директора можно получить вариационным методом Эйлера–Лагранжа–Рэлея [8]:

$$\Pi_{ij} \left[ \frac{\delta R}{\delta \left( \frac{\partial n_i}{\partial t} \right)} - \frac{\partial}{\partial x_k} \frac{\delta R}{\delta \left( \frac{\partial^2 n_i}{\partial x_k \partial t} \right)} + \frac{\partial F}{\partial n_i} - \frac{\partial}{\partial x_k} \frac{\delta F}{\delta \left( \frac{\partial n_i}{\partial x_k} \right)} \right] = 0, \quad (1)$$

где

$$F = \frac{1}{2} K_1 (\text{div} \hat{n})^2 + \frac{1}{2} K_2 (\hat{n} \times \text{curl} \hat{n})^2 + \frac{1}{2} K_3 (\hat{n} \times \text{curl} \hat{n})^2 \quad (2)$$

есть плотность упругой свободной энергии нематического жидкого кристалла,  $\hat{n}$  – единичный вектор директора, причем  $\hat{n}$  и  $-\hat{n}$  эквивалентны,  $K_1$ ,  $K_2$  и  $K_3$  – постоянные Франка, проекционный оператор  $\Pi_{ij} = \delta_{ij} - n_i n_j$  обеспечивает сохранение нормировки, и

$$R = R^{VISC} + R^{TM}, \quad (3)$$

$$R^{VISC} = \frac{1}{2} \gamma \left( \frac{\partial \hat{n}}{\partial t} \right)^2. \quad (4)$$

Здесь  $\gamma$  (пуаз) – константа вязкости. Отметим, что в вязкостной диссипативной функции  $R^{VISC}$  мы пренебрегли связью директора с гидродинамическими степенями свободы, а  $R^{TM}$  – термомеханическая диссипативная функция, введенная в [2]. Ввиду сложности выражений для закрученного НЖК мы использовали приближение одной постоянной Франка:  $K_1 = K_2 = K_3 = K$ . Отсюда следует [9]

$$\frac{\partial F}{\partial n_i} - \frac{\partial}{\partial x_k} \frac{\delta F}{\delta (\partial n_i / \partial x_k)} = -K \nabla^2 n_i, \quad (5)$$

и получаем [2]

$$f_j^{TM} = \frac{\delta R^{TM}}{\delta (\partial n_i / \partial t)} = \frac{1}{2} (2\xi_1 - \xi_3) \nabla_i T \text{div} \hat{n} - \xi_2 (\hat{n} \cdot \text{curl} \hat{n}) [\hat{n} \times \nabla]_i T + \xi_3 m_{ik} \nabla_k T - (\xi_3 - \xi_4) m_{ik} n_k (\hat{n} \times \nabla) T \quad (6)$$

и

$$m_{ik} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial n_i}{\partial x_k} + \frac{\partial n_k}{\partial x_i} \right), \quad (7)$$

где  $f_j^{TM}$  ( происходящая из термомеханической диссипативной функции “сила”, действующая на директор,  $T(x)$  – локальная температура,  $\xi_i$  (эрг/К·см) – термомеханические коэффициенты и  $m_{ik}$  – симметричный тензор градиента директора. Здесь мы приняли одномерность температурного градиента – в направлении  $x$ .

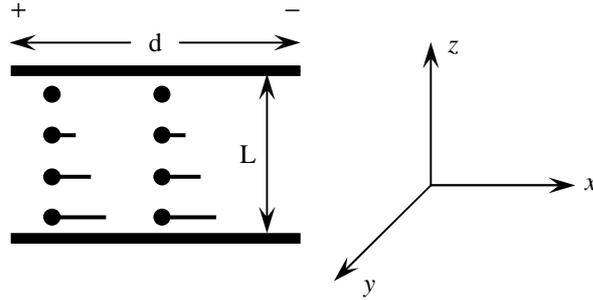


Рис.1. Ячейка с закрученной нематической жидкостью при наличии продольного градиента температуры.

В вычислениях будем рассматривать задачу, однородную в плоскости  $(x, y)$ , поэтому положим  $\partial/\partial x = \partial/\partial y = 0$  и линеаризуем соотношения по возмущению  $\delta \hat{n}$ , т.е. представим  $\hat{n} = \hat{n}^0 + \delta \hat{n}$  ( $\hat{n}^0 \delta \hat{n} = 0$ ).

В результате громоздких вычислений получаем новую компоненту директора в  $z$ -направлении, возникающую из-за термомеханического эффекта. Нормированное уравнение для  $z$ -компоненты директора имеет вид

$$\frac{\partial^2 \delta n_z(Z, \tau)}{\partial Z^2} + \frac{1}{4} \delta n_z(Z, \tau) + \eta \frac{dT}{dx} \sin\left(\frac{Z}{2}\right) = \frac{\partial \delta n_z(Z, \tau)}{\partial \tau} \quad (8)$$

где  $Z$  – нормированная координата ( $Z = \pi z/L$ ), время установления директора есть  $\tau_\gamma = \gamma L^2 / \pi^2 K$ ,  $\tau = t / \tau_\gamma$  и

$$\eta = \frac{L}{2\pi K} \left( \xi_2 + \frac{1}{2} \xi_3 \right) \text{ в см/К} \quad (9)$$

В стационарном случае ( $\partial/\partial \tau = 0$ ) с жесткими граничными условиями на поверхностях ( $\delta n_z(0, \tau) = \delta n_z(L, \tau) = 0$ ) получим

$$\delta n_z(Z) = \frac{L \left( \xi_2 + \frac{\xi_3}{2} \right)}{2\pi K} \frac{dT(x)}{dx} Z \cos\left(\frac{Z}{2}\right). \quad (10)$$

Это соотношение показывает, что переориентация директора растет линейно с ростом температурного градиента  $dT/dx$  и толщины ячейки  $L$ . При  $\xi_2 = \xi_3 = 10^{-6}$  эрг/К·см [2],  $K \sim 6.3 \times 10^{-7}$  эрг/см для НЖК 5СВ и при  $dT/dx \approx \Delta T/d = 30$  К/см ( $\Delta T$  – разность температур между нагретой и ненагретой частями, а  $d$  – расстояние между ними) в середине ячейки толщиной  $L = 10^{-2}$  см оценки дают  $\delta n_z \sim 0.13$ . Рис.2 показывает распределение переориентации директора вдоль ячейки.

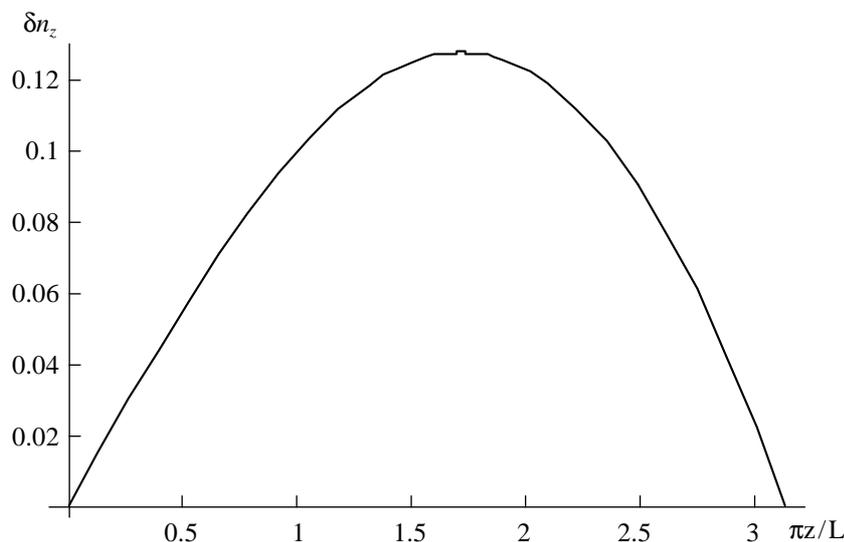


Рис.2. Стационарное решение для образовавшейся новой компоненты директора (формула (10)).

На графике видно, что наибольшая переориентация приходится примерно на середину ячейки ( $z \sim 0.55L$ ).

### 3. Численное решение и обсуждение

Мы решали уравнение (8) для переориентации директора, обусловленной градиентом температуры, при начальных и граничных условиях  $\delta n_z(0, \tau) = \delta n_z(L, \tau) = \delta n_z(Z, 0) = 0$ , используя программу “Mathematica 5.1”. В этих вычислениях были использованы параметры НЖК 5СВ.

На рис.3 приведено численное решение для переориентации директора при условии жесткого закрепления на границах; это означает, что ориентация директора на границах предполагается фиксированной и не зависящей от внешних возмущений.

Переориентация в середине ячейки НЖК в зависимости от нормированного времени  $\tau$  приведена на рис.4 для различных величин градиента температуры. Видно, что время установления директора при термомеханической и электрической (из-за гигантской оптической нелинейности [8]) переориентации имеет один и тот же порядок величины.

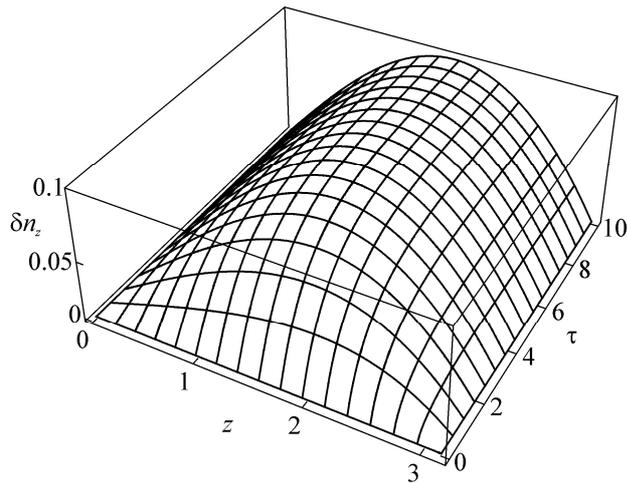


Рис.3. Трехмерный график образовавшейся новой компоненты директора в зависимости от нормированных координаты ( $Z = \pi z/L$ ) и времени  $\tau$  при  $dT/dx = 30$  К/см.

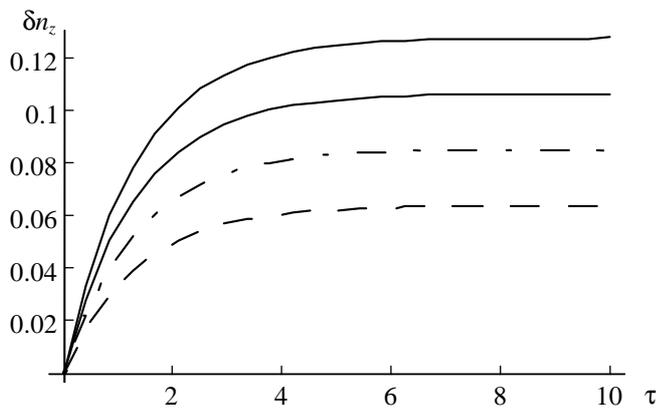


Рис.4. Двумерная кривая временной зависимости (от нормированного времени  $\tau$ ) образовавшейся новой компоненты директора в середине ячейки. Верхняя кривая (сплошная жирная линия) относится к случаю  $dT/dx = 30$  К/см, вторая кривая (сплошная линия) – к случаю  $dT/dx = 25$  К/см, третья кривая (штрихпунктирная линия) -  $dT/dx = 20$  К/см и четвертая кривая (пунктирная линия) –  $dT/dx = 15$  К/см.

Максимальная переориентация директора в случае  $dT/dx = 30$  К/см будет составлять  $8^\circ$ , а в случае  $dT/dx = 20$  К/см –  $5^\circ$ .

#### 4. Заключение

Таким образом, мы исследовали термомеханическую переориентацию директора закрученного НЖК, обусловленную тепловым градиентом (термомеханический эффект третьего типа). Такой термический градиент можно, в

частности, получить при поглощении гауссовского лазерного пучка. Такая переориентация оказывается сравнимой с переориентацией из-за гигантской оптической нелинейности [8]. Термомеханическая переориентация может вызвать в НЖК большие изменения показателя преломления (или диэлектрической проницаемости), что может привести ко многим нелинейным свойствам, таким как самофокусировка или дефокусировка, самодифракция и т.д. Необходимо отметить, что указанные температурные градиенты можно легко получить в наиболее интересном случае термического нагрева вследствие поглощения света в слое с небольшими изменениями температуры. Поэтому мы пренебрегли температурной зависимостью констант НЖК, которая может приводить к ряду других эффектов, например, к гидродинамическим потокам, термическому делению и т.д.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. **F.Simoni.** Nonlinear Optical Properties of Liquid Crystals. World Scientific, 1997.
2. **R.S.Akopyan, B.Ya.Zel'dovich.** Sov. Phys. JETP, **60**, 953 (1984).
3. **E.M.Lifshitz, L.P.Pitaevskii.** Physical Kinetics. Butterworth-Heinmann, 1981.
4. **L.D.Landau, E.M.Lifshitz.** Fluid Mechanics. Oxford, Pergamon, 1987.
5. **F.M.Leslie.** Proc. Roy. Soc., **A307**, 359 (1968).
6. **R.S.Akopyan, R.B.Alaverdian, E.A.Santrosian, Y.S.Chilingarian.** J. Appl. Phys., **90**, 3371 (2001).
7. **R.S.Akopyan, G.L.Yesayan, B.Ya.Zel'dovich.** Phys. Rev. E, **73**, 61707 (2006).
8. **B.Ya.Zel'dovich, N.V.Tabiryanyan.** Usp. Fiz. Nauk, **147**, 674 (1985).
9. **P.G. de Gennes.** The Physics of Liquid Crystals. Oxford Univ. Press, 1974.

ZnO:Li ԹԱՂԱՆԹՆԵՐԻ ՖՈՏՈՆԱՂՈՐԴԱԿԱՆՈՒԹՅԱՆ ԹՈՒՉՔԱՅԻՆ ԵՎ  
ԴԵՖՔՍՅԱՅԻՆ ՄԵԽԱՆԻԶՄՆԵՐԸ

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

Կանխագուշակված և տեսականորեն ուսումնասիրված է նեմատիկ հեղուկ բյուրեղի ուղղորդչի վերակողմնորոշման ջերմամեխանիկական մեխանիզմը պայմանավորված միաչափ երկայնական ջերմաստիճանային գրադիենտով: Ուղղորդչի վերակողմնորոշման հաշվարկված մեծությունները գտնվում են այն տիրույթում, որտեղ կարող են հեշտությամբ չափվել փորձնականորեն:

#### THERMOMECHANICAL REORIENTATION IN NEMATIC LIQUID CRYSTALS

J.B. POURSAMAD

Thermomechanical mechanism of the director reorientation in twisted nematic liquid crystals caused by one-dimensional longitudinal temperature gradient is predicted and studied theoretically. The calculated director reorientations are in the range that can be measured experimentally very easily.

УДК 621.315

## ВЛИЯНИЕ КУЛОНОВСКОЙ ЩЕЛИ НА ПРИМЕСНОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ ТИПА $A^{\text{III}}V^{\text{V}}$

С.Л. АРУТЮНЯН

Гюмрийский филиал государственного инженерного университета Армении

(Поступила в редакцию 5 мая 2008 г.)

Используя интерполяционную формулу, которая независимо от степени компенсации адекватно описывает структуру примесной зоны в широком интервале энергий, получено явное выражение коэффициента поглощения света, связанного с переходами примесная зона–зона проводимости. Показано, что при низких температурах коэффициент поглощения имеет четко выраженный частотный порог. Получена явная частотная зависимость коэффициента поглощения в широком интервале частот падающего излучения. Исследована также зависимость коэффициента поглощения от степени легирования полупроводника.

### 1. Введение

Имеющиеся в настоящее время многочисленные теоретические работы доказывают, а экспериментальные факты прямо или косвенно подтверждают наличие кулоновской щели в плотности состояний носителей зарядов вблизи уровня Ферми, как в двумерных, так и в трехмерных слабо легированных и компенсированных полупроводниках. Популярность концепции кулоновской щели связана также с успехами ряда экспериментальных методик, к числу которых в первую очередь относятся VRH (variable range hopping) спектроскопия, изучение перехода металл-диэлектрик [1,2] и туннельная спектроскопия 2D-электронов в магнитном поле [3].

Несмотря на это, в настоящее время строгую аналитическую теорию структуры примесной зоны в слабо легированных и компенсированных полупроводниках удалось построить лишь в случаях предельно сильных и слабых компенсаций [4]. Это связано с тем, что в области промежуточной компенсации заведомо нет никаких малых параметров, и исследование состояния системы электронов в примесных центрах представляет крайне сложную многоэлектронную задачу, которую решить аналитически принципиально невозможно (см., напр., [4-6]).

Поэтому для исследования структуры примесной зоны широко применяются различные полуэмпирические методы [7-9], где для описания структуры примесной зоны выбирается определенная пробная функция, которая, как правило, справедлива в некотором узком интервале изменения степени компенсации и энергии электронов.

В отличие от указанных работ, в работе [10] предложена интерполяционная формула для функции плотности состояний  $g(\varepsilon)$  примесной зоны, имеющая вид

$$g(\varepsilon) = \frac{4N_D(\varepsilon - \mu)^2}{\varepsilon_D^3} \exp \frac{\mu^2 - \varepsilon^2}{\gamma^2}, \quad (1)$$

которая адекватно описывает как особенности электронных состояний в примесной зоне, так и его эволюцию при плавном изменении степени компенсации образца в широком интервале энергий. В формуле (1) энергия  $\varepsilon$  отсчитывается от значения энергии основного состояния изолированного донора ( $E_D = m_c e^4 / 2\chi^2 \hbar^2$ , где  $m_c$  – эффективная масса электронов в зоне проводимости,  $\chi$  – диэлектрическая проницаемость образца),  $N_D$  – концентрация основных примесей-доноров,  $\varepsilon_D = e^2 / \chi r_D$  – энергия кулоновского взаимодействия на среднем расстоянии  $r_D = (4\pi N_D / 3)^{-1/3}$  между донорами.

Подгоночные параметры  $\mu$  и  $\gamma$  ( $\mu$  – уровень Ферми, а  $\gamma$  характеризует ширину побочных пиков) определяются из системы трансцендентных уравнений, которые получаются из условий нормировки  $g(\varepsilon)$  и электронейтральности образца. В работе [10] приведены численные значения параметров  $\mu$  и  $\gamma$  в широком интервале изменения степени компенсации  $K = N_A / N_D$  ( $N_A$  – концентрация компенсирующих примесей-акцепторов).

В данной работе теоретически исследовано влияние кулоновской щели на частотную зависимость коэффициента поглощения электромагнитной волны в широком интервале частот, связанного с переходами электронов из примесной зоны в зону проводимости в слабо легированных и компенсированных полупроводниках. Данная задача представляет определенный практический интерес в связи с тем, что одним из эффективных методов зондирования примесных образцов с целью определения структуры и параметров примесной зоны является экспериментальное исследование частотной зависимости коэффициента примесного поглощения в широком частотном интервале падающего излучения.

## 2. Коэффициент поглощения, связанного с переходами примесная зона–зона проводимости и обсуждение результатов

При вычислении коэффициента поглощения электромагнитной волны, связанного с переходами примесная зона–зона проводимости будем предполагать, что в исходном состоянии (примесная зона) плотность электронных состояний дается формулой (1), а волновые функции исходного и конечного состояний имеют вид

$$\Psi_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_D) = U_{c0}(\mathbf{r}) F(\mathbf{r} - \mathbf{R}_D), \quad \Psi_f(\mathbf{r}) = (U_{cp}(\mathbf{r}) / \sqrt{V}) \exp i \mathbf{p} \mathbf{r} / \hbar, \quad (2)$$

где  $U_{c0}(\mathbf{r})$ ,  $U_{cp}(\mathbf{r})$  – бловские множители, соответствующие точкам  $\mathbf{p} = 0$  и произвольного  $\mathbf{p}$  зоны Бриллюэна,  $F(\mathbf{r} - \mathbf{R}_D) = (\pi a_D)^{3/2} \exp(-|\mathbf{r} - \mathbf{R}_D| / a_D)$  – волновая функция основного состояния донорного электрона,  $a_D = \chi \hbar^2 / m_c e^2$  – боровский радиус донорного центра,  $\mathbf{R}_D$  – радиус-вектор донора.

Для квадратичного и изотропного закона дисперсии электронов в зоне проводимости (конечное состояние) энергетический спектр и плотность состояний имеют вид

$$\varepsilon_f = E_D + \frac{p^2}{2m_c}, \quad (3)$$

$$g(\varepsilon_f) = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m_c}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\varepsilon_f - E_D} \Theta(\varepsilon_f - E_D), \quad (4)$$

где  $\Theta(x)$  – единичная ступенчатая функция.

Если слабое электромагнитное поле с частотой  $\omega$  считать как возмущение, то для вычисления вероятности переходов можно использовать стандартную методику Кубо–Гринвуда (см., напр., [11]). Тогда, имея в виду, что в случае  $T = 0$  К донорная зона заполнена до уровня Ферми, а зона проводимости полностью пуста, с учетом (1–4) для коэффициента поглощения  $K(\omega)$ , связанного с переходами “донорная зона–зона проводимости”, получается следующее выражение:

$$K(\omega) = \frac{2^9 \pi^3}{n_0} \alpha \frac{m_c}{m_0^2} \frac{\hbar N_D}{\omega} \left( \frac{E_D}{\varepsilon_D} \right)^3 F \left( \frac{\hbar\omega - I_0}{E_D} \right) \Theta \left( \frac{\hbar\omega - I_0}{E_D} \right). \quad (5)$$

Здесь  $\alpha = e^2/\hbar c$  – постоянная тонкой структуры,  $n_0$  – показатель преломления кристалла,  $m_0$  – масса свободного электрона,

$$I_0 = E_D - \mu \quad (6)$$

есть энергетический порог оптического поглощения. Функция  $F(\Omega)$  имеет следующий вид:

$$F(\Omega) = \Omega^{\frac{9}{2}} \int_0^1 \frac{t^{\frac{3}{2}} (1-t)^2}{(\Omega t + 1)^4} \exp \left\{ - \left( \frac{E_D}{\gamma} \right)^2 \left( \Omega^2 (1-t)^2 - 2\Omega(1-t) \frac{\mu}{E_D} \right) \right\} dt, \quad (7)$$

где  $\Omega = (\hbar\omega - I_0)/E_D$ .

Из формулы (5) следует, что коэффициент поглощения имеет четкий порог, определяемый формулой (6). С увеличением степени компенсации энергия Ферми  $\mu$  уменьшается (см. [10]) и, следовательно, увеличивается  $I_0$ . Вследствие этого порог поглощения смещается в область коротких волн, а за порогом частотная зависимость определяется в основном только функцией  $F(\Omega)$ .

Как видно из формулы (7), функция  $F(\Omega)$  зависит от параметров  $(E_D/\gamma)^2 = (\chi^2 r_D^2 / 4a_D^2) \alpha$  и  $\mu/E_D = (2a_D/\chi r_D) c$ , где численные значения параметров  $\alpha$  и  $c$  которые определяются соотношениями  $\mu = c\varepsilon_D$ ,  $\gamma = \varepsilon_D \alpha^{-1/2}$ , при различных значениях степени компенсации приведены в работе [10].

Например, для кристалла GaAs ( $a_D = 104 \text{ \AA}$ ,  $\chi = 13.18$ ) при концентрации основных примесей  $N_D = 10^{15} \text{ см}^{-3}$  при  $K = 0,1$   $(E_D/\gamma)^2 = 5.42 \times 10^3$ ,

$\mu/E_D = 6.563 \times 10^{-3}$ ; при  $K = 0,5$   $(E_D/\gamma)^2 = 3.593 \times 10^3$ ,  $\mu/E_D = 0$ ; при  $K = 0,9$   $(E_D/\gamma)^2 = 5.42 \times 10^3$ ,  $\mu/E_D = -6.563 \times 10^{-3}$ .

На рис.1 с учетом вышеприведенных численных оценок приведены графики зависимости функции  $F(\Omega)$  от безразмерной расстройки  $\Omega$  для трех значений степени компенсации  $K$ . Как видно из рис.1, с увеличением степени компенсации значение функции  $F(\Omega)$  уменьшается, что, очевидно, связано с уменьшением высоты низкоэнергетического пика функции  $g(\epsilon)$ , т.е. с уменьшением числа электронов в примесной зоне.

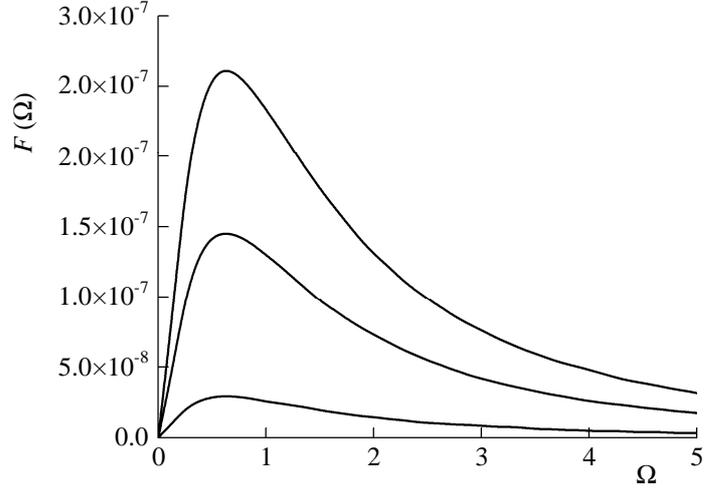


Рис.1. Зависимость функции  $F(\Omega)$  от безразмерной расстройки  $\Omega$  при разных степенях компенсации  $K$ ; 1 –  $K = 0.9$ ; 2 –  $K = 0.5$ ; 3 –  $K = 0.1$ .

Явную зависимость коэффициента поглощения от частоты излучения можно получить в следующих частных случаях, представляющих реальный практический интерес.

а) Вблизи порога поглощения  $\hbar\omega \approx I_0$  т.е.  $\Omega \ll 1$ ,  $F(\Omega) \approx 16\Omega^{9/2}/15$ . Если учесть, что  $I_0 \approx E_D$  (т.к.  $E_D \gg \mu$ ), то из формул (5)-(7) следует, что за порогом поглощения коэффициент поглощения имеет вид

$$K(\omega) = \frac{2^9 \pi^2}{3} \alpha \left( \frac{m_C}{m_0} \right)^2 \frac{\chi}{n_0 a_0} \left( \frac{\hbar\omega - E_D}{E_D} \right)^{9/2}, \quad (8)$$

где  $a_0 = \hbar^2/m_0 e^2$  – боровский радиус. Как видно из формулы (8), коэффициент поглощения зависит только от характеристик матрицы и не зависит от степени легирования и компенсации. Это, очевидно, связано с универсальным характером функции плотности состояний (1) в окрестности уровня Ферми.

б) Вдали от порога  $\Omega \gg 1$  и вычисление интеграла (7) по методу Лапласа дает результат  $F(\Omega) = (\sqrt{\pi}/\sqrt{2}e)(\gamma/E_D)^2 \Omega^{-5/2}$ , где  $e$  – число Эйлера. Следовательно, для  $K(\omega)$  будем иметь

$$K(\omega) = \frac{2^9 \pi^3 \sqrt{2\pi}}{e} \alpha \frac{\chi^2}{n_0} a_0^2 N_D \left( \frac{\gamma}{\epsilon_D} \right)^3 \left( \frac{E_D}{\hbar\omega} \right)^{\frac{7}{2}} \quad (9)$$

Из формулы (9) следует, что частотная зависимость коэффициента поглощения примесной зоны определяется степенной зависимостью  $\omega^{-3.5}$ , что совпадает с законом спада коэффициента поглощения для случая водородоподобного изолированного донора. Это связано с тем, что при энергиях квантов, существенно превышающих порог фотоионизации, решающими будут являться переходы тех электронов, энергетические уровни которых находятся вблизи низкоэнергетического пика плотности состояний (1). В свою очередь энергия, соответствующая низкоэнергетическому пику, расположена вблизи уровня изолированного донорного центра  $E_D$ .

Исходя из полученных результатов, можно утверждать, что при температурах, близких к абсолютному нулю, коэффициент поглощения в общих чертах повторяет вышеописанное поведение и имеет следующие особенности: во-первых, в результате термических эффектов с увеличением энергии Ферми порог поглощения смещается в сторону низких частот, а во-вторых, пик поглощения уменьшается по высоте.

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

#### ЛИТЕРАТУРА

1. А.Г.Забродский. УФН, **168**, 804 (1998).
2. А.Г.Андреев, А.Г.Забродский, И.П.Вязгин, С.В.Егоров. ФТП, **31**, 1174 (1997).
3. Э.В.Девятов, А.А.Шашкин, В.Т.Долгополов, В.Ханзен, М.Холланд. УФН, **170**, 327 (2000).
4. Б.И.Шкловский, А.Л.Эфрос. Электронные свойства легированных полупроводников. М., Наука, 1979.
5. В.Л.Бонч-Бруевич и др. Электронная теория неупорядоченных полупроводников, М., Наука, 1981.
6. В.И.Шкловский, А.Л.Эфрос. Electronic properties of doped semiconductors. Berlin, Springer-Verlag, 1984.
7. Д.В.Николенков, В.И.Архипов, В.Р.Никитенко. ФТП, **34**, 682 (2000).
8. Н.А.Поклонский, С.Ю.Лопатин, А.Г.Забродский. ФТП, **42**, 432 (2000).
9. С.Л.Арутюнян. Изв. НАН Армении, Физика, **37**, 297 (2002).
10. С.Л.Арутюнян. ФТТ, **47**, 581 (2005).
11. Н.Мотт, Э.Дэвис. Электронные процессы в некристаллических веществах, т. 1, М., Мир, 1982.

ԿՈՒԼՈՆՅԱՆ ՃԵՂՔԻ ԱԶԴԵՅՈՒԹՅՈՒՆԸ  $A^{III} B^V$  ՏԻՊԻ

ԿԻՍԱՀԱՂՈՐԴԻՉՆԵՐԻ ԽԱՌՆՈՒՐԴԱՅԻՆ ԿԼԱՆՄԱՆ ՎՐԱ

Ս.Լ. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ

Վիճակների խտության համար ներմոտարկման բանաձևի օգնությամբ, որը համարժեքորեն նկարագրում է խառնուրդային գոտու կառուցվածքը լայն էներգիական տիրույթում, ստացված է «խառնուրդային գոտի-հաղորդական գոտի» անցումներով պայմանավորված կլանման գործակցի արտահայտությունը: Ցույց է տրված, որ ցածր ջերմաստիճաններում գոյություն ունի հստակ արտահայտված կլանման շեմ: Ստացված է կլանման գործակցի հաճախական կախումն ընկնող լոյսի հաճախությունների լայն տիրույթում: Ուսումնասիրված է նաև կլանման գործակցի կախումը կիսահաղորդչի լեգիրացման աստիճանից:

INFLUENCE OF THE COULOMB GAP ON THE IMPURITY ABSORPTION  
IN  $A^{III} B^V$  SEMICONDUCTORS

S.L. HARUTYUNYAN

Using the interpolation formula, an explicit expression is obtained for the light absorption coefficient related to the transitions from the impurity band to the conductivity band is obtained. The interpolation formula adequately describes the impurity band structure in a broad energy range regardless of the degree of compensation. It is shown that at low temperatures the absorption coefficient shows a clearly expressed threshold of absorption. The explicit frequency dependence of the absorption coefficient is obtained in a broad frequency range of the incident radiation. The dependence of the absorption coefficient on the doping degree of a semiconductor is also investigated.

УДК 517.957

## **ДИНАМИКА ДИСЛОКАЦИОННОГО КИНКА В ПОТЕНЦИАЛЕ ЦЕНТРА ПИННИНГА ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ВНЕШНИХ СИЛ**

А.С. ВАРДАНЯН

Институт радиофизики и электроники НАН Армении, Аштарак

(Поступила в редакцию 2 июня 2008 г.)

Для изучения воздействия точечных дефектов на движение дислокаций по механизму Пайерлса исследована динамика дислокационного перегиба в потенциале пиннинга при воздействии внешних постоянной и переменной сил. В рамках теории возмущений линеаризация уравнений движения кинка позволяет получить уравнение линейных колебаний для скорости кинка.

### **1. Введение**

В ковалентных полупроводниках движение дислокаций контролируется механизмом Пайерлса, что подразумевает образование и миграцию пар кинк-антикинк. Дислокационный перегиб (кинк) образуется, когда различные участки дислокации находятся в соседних долинах периодического рельефа решетки (потенциала Пайерлса). Кинки и антикинки на дислокации описываются уравнением син-Гордон (СГ) солитона. Движение дислокации по механизму Пайерлса принято делить на три этапа [1,2]: образование двойных перегибов, миграция кинка и антикинка в противоположные стороны и аннигиляция движущихся навстречу друг другу кинков различных знаков.

Известно, что различные точечные дефекты (атомы примесей, вакансии) могут препятствовать движению кинка вдоль дислокации, т.е. служить центрами пиннинга кинка. В отсутствие внешних или внутренних напряжений дислокационный перегиб удерживается в потенциале центра пиннинга, а при воздействии постоянной силы может открепляться с определенной вероятностью. Для теоретического определения вероятности открепления кинка от центра пиннинга необходимо исследовать его стохастическую динамику. Однако, так как кинк представляет собой нелинейный объект, т.е. его движение описывается нелинейным уравнением, исследование флуктуационного преодоления кинком потенциала пиннинга представляет собой довольно труднореализуемую проблему. Простой подход к решению этой проблемы применен в работе [3], где динамика кинка описана уравнением линейного гармонического осциллятора, которому приписана масса кинка. Такое упрощение позволяет в основном описать процесс, однако для дальнейшего развития теории, которое позволит полностью учесть

зависимость вероятности открепления от параметров кинка, необходимо правильно линеаризовать уравнения движения кинка. Получение линейных уравнений колебания кинка в потенциале центра пиннинга под воздействием внешних переменной и постоянной сил является целью данной работы.

Линеаризация уравнения движения кинка возможна при помощи своеобразной теории возмущений, развитой в работе Маклафлина и Скотта [4]. Эта теория, хотя и основанная на некоторых допущениях и предположениях, на сегодняшний день представляет, по сути единственный надежный подход к исследованию влияния внешних воздействий на кинк, который применялся в ряде работ (см., например, работу [5] и ссылки в ней). В данной работе будет применена модификация этой теории возмущений, развитая в работе [6]. Этот метод позволяет при линеаризации уравнений движения кинка избежать сложных вычислений, использованных авторами работы [4].

## 2. Динамика кинка под влиянием переменной силы

Рассмотрим плавный кинк на дислокации, направленной вдоль оси  $x$ , т.е. кинк, ширина  $w$  которого много больше высоты  $a$ . Высота кинка  $a$ , которая порядка межатомных расстояний, представляет собой период рельефа Пайерлса (рис.1). Кинк описывается поперечным смещением дислокации  $\varphi$ , равным нулю при  $x \rightarrow -\infty$  и равным  $a$  при  $x \rightarrow \infty$ ; ширина кинка соответствует области, в которой  $0 < \varphi < a$  (для антикинка, наоборот,  $\varphi$  убывает от  $a$  до нуля). Критерием, определяющим плавность перегиба, является малость параметра  $\tau_p/G$ , где  $\tau_p$  – напряжение Пайерлса и  $G$  – модуль сдвига. Ширина перегиба связана с его высотой соотношением

$$w = a \left( \frac{\pi/2}{\tau_p/G} \right), \quad (1)$$

и, следовательно, при  $\tau_p/G \ll 1$  имеем  $w \gg a$ , т.е. перегиб является плавным. В этом случае для описания кинка применима модель струны. Предположим, что кинк находится вблизи точки пиннинга; следуя работам [4,6], взаимодействие кинка с центром пиннинга будем описывать потенциалом

$$U = -\frac{a}{2\pi} \mu \delta(x - \varepsilon) \left( 1 - \cos \frac{2\pi\varphi}{a} \right), \quad (2)$$

где параметр  $\mu$  характеризует силу взаимодействия, а  $\varepsilon$  указывает положение точки пиннинга на дислокации. Множитель  $1 - \cos(2\pi\varphi/a)$  в (2) обеспечивает обращение в нуль потенциала пиннинга  $U$  вне области кинка.

Как указывалось во введении, нас интересует динамика кинка под действием постоянной и переменной сил. Необходимость учета постоянной силы очевидна – дислокация может двигаться, только если существует напряжение решетки. Учет же переменной силы представляет интерес в основном в связи с рекомбинационно-стимулированным движением дислокаций, суть которого состоит в следующем. В полупроводниках дислокационный перегиб может создавать электронные уровни в запрещенной зоне и способствовать тепловому

захвату и рекомбинации носителей заряда [7]. При такой рекомбинации на дислокации выделяется энергия, которая возбуждает дополнительные колебания решетки. Эти колебания, локализованные вблизи дислокационного перегиба, могут стимулировать движение дислокации. Считается, что при движении по механизму Пайерлса рекомбинация в основном способствует миграции кинка вдоль дислокации [2,8]. Рекомбинационно-стимулированное движение дислокаций приводит, в частности, к деградации полупроводниковых устройств. Колебания решетки, которые происходят вследствие рекомбинации, и исполняют роль указанной переменной силы.

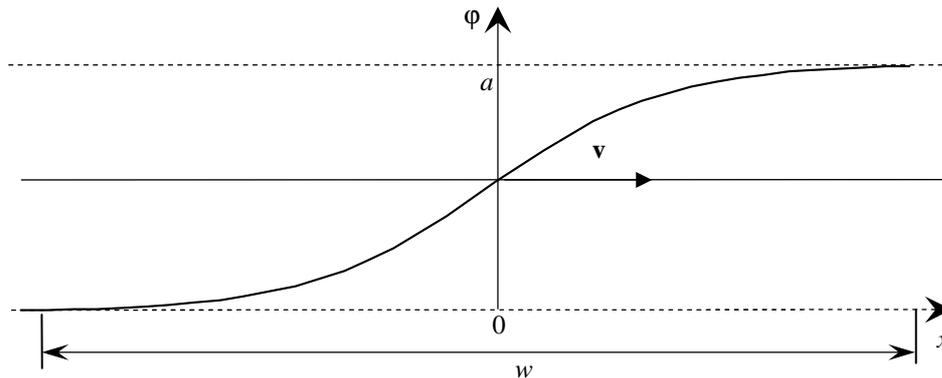


Рис.1. Схематическое изображение плавного кинка. Пунктирными линиями обозначены долины рельефа Пайерлса;  $v$  есть скорость движения кинка.

Постоянная сила  $\Gamma$ , обусловленная внутренними или внешними напряжениями решетки, стремится удалить кинк от центра пиннинга. Переменную силу  $\gamma(t)$ , описывающую колебания решетки, возникшие в процессе рекомбинации, будем считать синусоидальной во времени и изотропной в пространстве. Полагая, что энергия внешних воздействий, а также диссипация за счет трения, малы по сравнению с потенциалом Пайерлса, рассмотрим влияние внешних сил как возмущение по отношению к идеальной системе. Напишем возмущенное уравнение колебаний струны при наличии диссипации в периодическом потенциале Пайерлса, который имеет следующий вид [9]:

$$V_p = \frac{a^2 \tau_p}{2\pi} \sin^2\left(\frac{\pi\phi}{a}\right), \quad (3)$$

т.е. возмущенное уравнение СГ [4]

$$m\phi_{tt} - \chi\phi_{xx} = -\frac{\pi a \chi}{2w^2} \sin \frac{2\pi\phi}{a} + f, \quad (4)$$

где  $m$  – масса струны (дислокации) на единицу длины,  $\chi$  – линейное натяжение единицы длины дислокации. Сила  $f$  представляет собой общий параметр возмущения:

$$f = -\eta\dot{\varphi}_i - \Gamma - \gamma(t) + \mu\delta(x - \varepsilon) \sin \frac{2\pi\varphi}{a}, \quad (5)$$

где  $\eta$  характеризует дислокационное затухание на единицу длины ( $\eta > 0$ ). В (4) учтено, что  $\chi \cong Gb^2/2$  [9], где  $b$  – модуль вектора Бюргерса (который порядка  $a$ ),  $s$  – скорость звука в твердом теле, а отношение  $\tau_p/G$  определяется выражением (1).

Если  $f = 0$ , т.е. система не возмущена, решение уравнения (4) имеет следующий вид [4]:  $\varphi = 2a \arctan \left[ \exp(\pm \pi g(v)(x - x_0 - vt)/w) \right] / \pi$ , где  $x_0$  – начальная координата кинка,  $v$  – скорость его перемещения вдоль дис-

локации ( $v < s$ ) и  $g(v) = 1/\sqrt{1 - (v/s)^2}$ . Здесь знак “плюс” соответствует кинку, а “минус” – антикинку. Такое решение соответствует трансляционной инвариантности кинка вдоль дислокации. Энергия невозмущенной СГ системы дается следующим гамильтонианом [4,6]:

$$H^{CG} = \int_{-\infty}^{\infty} \left( \frac{w\tau_p}{2s^2} \dot{\varphi}^2 + \frac{w\tau_p}{2} \varphi_x^2 + \frac{\pi}{w} V_p \right) dx. \quad (6)$$

Подставив решение невозмущенного уравнения СГ в (6) и интегрируя по  $x$ , получим гамильтониан невозмущенной системы

$$H^{CG} = \frac{2a^2\chi}{w^2} \left( 1 - (v/s)^2 \right)^{-1/2}. \quad (7)$$

Если  $f \ll a\tau_p/2$ , т.е. все сторонние силы малы по сравнению с амплитудой потенциала Пайерлса, для решения уравнения (4) можно использовать метод возмущения, развитый в работах [4,6]. Полагаем, что решение уравнения (4) имеет вид решения невозмущенного уравнения СГ, однако действие возмущения приводит к модуляции скорости, т.е. здесь  $v$  уже является функцией от времени  $t$ :

$$\varphi = \frac{2a}{\pi} \arctan \left[ \exp \left( \pm \frac{\pi}{w} (g(v)x - X(t)) \right) \right], \quad (8)$$

где  $X(t) = \int_0^t g(v(t'))v(t')dt'$  указывает местонахождение центра кинка (в пред-

положении, что  $x_0 = 0$ ). В отсутствие членов, описывающих диссипацию и пе-

ременную силу в выражении (5), гамильтониан возмущенной системы мож-

можно написать в виде

$$H(\varphi) = H^{CG} + H^B, \quad (9)$$

где

$$H^B = \frac{\pi}{w} \int_{-\infty}^{\infty} \left( \Gamma \phi - \frac{a}{2\pi} \mu \delta(x - \varepsilon) \left( 1 - \cos \frac{2\pi \phi}{a} \right) \right) dx \quad (10)$$

описывает энергию стационарного возмущения. В этом случае  $H(\phi)$  постоянна во времени:  $dH/dt = 0$ . При наличии же нестационарных сил (т.е. силы трения и переменной внешней силы), уравнения движения определяются из условия [10]

$$\frac{dH}{dt} = -\frac{\pi}{w} \int_{-\infty}^{\infty} (\eta \dot{\phi}^2 + \gamma(t) \dot{\phi}) dx. \quad (11)$$

Подставляя (9) в (11), получим уравнение для импульса СГ системы

$$\frac{dH^{CR}}{dv} \dot{v} = \frac{\pi}{w} \int_{-\infty}^{\infty} f(\phi) \dot{\phi} dx, \quad (12)$$

где  $\phi = \phi(g(v)x, X)$  есть решение возмущенного уравнения СГ (4), а производная  $\phi$  по времени равна  $\dot{\phi} \equiv \phi_x g(v)v$  [6]. Уравнение (12), вместе с уравнением для производной по времени от переменной  $X$

$$\dot{X} = g(v)v \quad (13)$$

описывает движение кинка. Гамильтониан  $H^{CR}$  в (12) имеет тот же вид, что и гамильтониан невозмущенной системы СГ (6), при этом смещение струны  $\phi$  определяется выражением (8). Подставляя (8) в (6), после интегрирования получаем выражение для энергии солитона, аналогичное выражению (7):

$$H^{CR} \left[ \phi(g(v(t))x, X(t), v(t)) \right] \cong \frac{2a^2 \chi}{w^2} \left( 1 - (v(t)/s)^2 \right)^{-1/2}. \quad (14)$$

Предположим теперь, что координата точки пиннинга  $\varepsilon = 0$ . Подставляя выражения (14) и (5) в (12), после интегрирования получим дифференциальные уравнения с переменными  $v(t)$  и  $X(t)$ :

$$\begin{cases} M \frac{dv}{dt} = \pm [\Gamma + \gamma(t)] (g(v))^{-3} - \frac{2a\eta}{\pi w} v (g(v))^{-2} - \frac{2\mu}{w} (g(v))^{-2} \operatorname{sech}^2 \left( \frac{\pi X}{w} \right) \tanh \left( \frac{\pi X}{w} \right), \\ \frac{dX}{dt} = g(v)v, \end{cases} \quad (15)$$

где учтено, что  $\chi = ms^2$  и  $M = 2am/\pi w$  есть эффективная масса кинка. Система уравнений (15) определяет динамику изолированного кинка (т.е. не взаимодействующего с другими кинками), обусловленную общим возмущением  $f$ .

Исследуем движение кинка в окрестности точки пиннинга. Уравнения (15) обычно анализируются в фазовой плоскости  $(v, X)$ . Сингулярная точка, где  $\dot{v} = 0$  и  $\dot{X} = 0$ , в присутствии внешней постоянной силы соответствует

состоянию равновесия кинка [4]. Однако, когда действует также внешняя периодическая сила, определим положение равновесия, учитывая только постоянную силу, в то время как переменная сила приводит к дополнительному смещению от положения равновесия. Иначе говоря, положение равновесия определяется как координата кинка, усредненная на промежутках времени, больших периода переменной силы. Как следует из уравнения (15), положению равновесия соответствуют условия  $v=0$  и  $X=X_0$ , где  $X_0$  является корнем уравнения

$$\frac{w\Gamma}{2\mu} - \operatorname{sech}^2\left(\frac{\pi X_0}{w}\right) \tanh\left(\frac{\pi X_0}{w}\right) = 0. \quad (16)$$

Для аналитического рассмотрения колебания кинка вокруг точки  $X_0$  линеаризируем уравнения (15) по  $v$ , считая, что движение кинка нерелятивистское ( $v \ll s$ ), а также по  $X - X_0$ , полагая, что смещение меньше ширины перегиба ( $X - X_0 \ll w$ ). В отсутствие внешней переменной силы (т.е. при  $\gamma(t) = 0$ ), кинк совершает затухающие колебания вокруг точки пиннинга, где он окончательно приходит в состояние покоя [4]. Если же на кинк действует еще и периодическая сила  $\gamma(t) = f_0 \sin \Omega t$ , где  $f_0$  – амплитуда внешней периодической силы, а  $\Omega$  – его частота, то получим

$$M \frac{dv}{dt} = \pm [\Gamma + f_0 \sin \Omega t] - \frac{2a\eta}{\pi w} v - \frac{2\mu}{w} \operatorname{sech}^2\left(\frac{\pi X}{w}\right) \tanh\left(\frac{\pi X}{w}\right), \quad (17a)$$

Дифференцируя (17 а) по  $t$  и используя затем (17б), получим

$$M \frac{d^2v}{dt^2} = \pm f_0 \Omega \cos \Omega t - \frac{2a\eta}{\pi w} \frac{dv}{dt} - \frac{2\pi\mu}{w^2} v \left[ \operatorname{sech}^4\left(\frac{\pi X_0}{w}\right) - 2 \operatorname{sech}^2\left(\frac{\pi X_0}{w}\right) \tanh^2\left(\frac{\pi X_0}{w}\right) \right]. \quad (17б) 8$$

Введем следующие обозначения:  $\lambda = a\eta/\pi w M$  ( $\lambda$  представляет эффективный коэффициент трения кинка) и

$$\omega_0^2 = \frac{2\pi\mu}{w^2 M} \left[ \operatorname{sech}^4\left(\frac{\pi X_0}{w}\right) - 2 \operatorname{sech}^2\left(\frac{\pi X_0}{w}\right) \tanh^2\left(\frac{\pi X_0}{w}\right) \right]. \quad (19)$$

Уравнение (18), которое характеризует динамику кинка в потенциале центра пиннинга, принимает вид

$$\ddot{v} + 2\lambda \dot{v} + \omega_0^2 v = \pm \frac{f_0 \Omega}{M} \cos \Omega t. \quad (20)$$

Уравнение (20) представляет собой уравнение линейных колебаний для скорости кинка  $v$ , где  $\omega_0$  играет роль частоты свободных колебаний. Отметим, что в правой части уравнения (20) есть только переменная сила, а постоянная сила определяет лишь положение равновесия и входит неявным образом в выражение для  $\omega_0$ .

Как следует из уравнения (16), при  $\Gamma = 0$  положение равновесия  $X_0 = 0$ , и из (19) получаем  $\omega_0^2 = 2\pi\mu/w^2 M$ . С ростом постоянной силы  $\omega_0^2$  уменьшается; условию  $\omega_0^2 = 0$  соответствует критическое значения силы  $\Gamma_c = 4\mu/3\sqrt{3} w$ , которое

определяется из уравнений (16) и (19). Иначе говоря, при значениях  $\Gamma$  больше  $\Gamma_c$  уравнение (16) не имеет корней, т.е. при  $\Gamma > \Gamma_c$  дислокационный перегиб преодолевает потенциал пиннинга и может рассматриваться как свободный перегиб.

Как известно, решение уравнения (20) при  $\omega_0 > \lambda$  имеет вид

$$v = Ae^{-\lambda t} \cos(\omega t + \alpha) + B \cos(\Omega t + \delta), \quad (21)$$

где  $\omega = \sqrt{\omega_0^2 - \lambda^2}$ ,  $A$  и  $\alpha$  – вещественные постоянные,  $B$  – амплитуда колебания кинка  $\left( B = f_0 \Omega / M \sqrt{(\omega_0^2 - \Omega^2) + 4\lambda^2 \Omega^2} \right)$  и  $\delta$  – его начальная фаза  $\left( \operatorname{tg} \delta = 2\lambda \Omega / (\Omega^2 - \omega_0^2) \right)$ . В выражении (21) первый член экспоненциально убывает со временем, так что через достаточно большой промежуток времени остается только второй член, описывающий вынужденные колебания:  $v = B \cos(\Omega t + \delta)$ ; частота  $\Omega = \sqrt{\omega_0^2 - 2\lambda^2}$  представляет собой резонансную частоту.

### 3. Динамика кинка в потенциале колеблющейся примеси

С точки зрения рекомбинационно-стимулированных процессов, рассмотренное выше воздействие переменной силы на дислокационный кинк соответствует случаю, когда имеет место захват носителя на кинк. Однако, возможен также случай, когда происходит захват на примесь, которая одновременно является центром пиннинга, что приводит к колебанию этой примеси [11]. Для описания такого процесса учтем в формуле (5), что координата центра пиннинга  $\varepsilon$  становится функцией от времени, и общее возмущение имеет вид

$$f = -\eta \varphi_t - \Gamma + \mu \delta(x - \varepsilon(t)) \sin \frac{2\pi \varphi}{a}.$$

Подставив  $f$  в уравнение (4), учитывая, что  $\varepsilon(t) \ll w$ , и проделав вычисления, аналогичные вышеприведенным, получим для этого случая уравнения, которые равнозначны системе уравнений (17):

$$\begin{cases} M \frac{dv}{dt} = \pm \Gamma - \frac{2a\eta}{\pi w} v - \frac{2\mu}{w} \operatorname{sech}^2 \left( \frac{\pi}{w} (X - \varepsilon(t)) \right) \tanh \left( \frac{\pi}{w} (X - \varepsilon(t)) \right), & (22a) \\ \frac{dX}{dt} = v. & (22б) \end{cases}$$

Если  $\varepsilon(t)$  описывается периодической функцией:  $\varepsilon(t) = c \sin \Omega t$ , то дифференцируя (22а) по  $t$  и подставляя в него (22б), получим уравнение движения кинка

$$\ddot{v} + 2\lambda \dot{v} + \omega_0^2 v = F, \quad (23)$$

где

$$F = \frac{2\pi\mu}{w^2M} c\Omega \left[ \operatorname{sech}^4\left(\frac{\pi X_0}{w}\right) - 2\operatorname{sech}^2\left(\frac{\pi X_0}{w}\right) \tanh^2\left(\frac{\pi X_0}{w}\right) \right] \cos \Omega t . \quad (24)$$

Таким образом, колебание точки пиннинга может быть описано при помощи силы  $F$  (24), которая играет ту же роль, что и действующая на кинк внешняя периодическая сила.

#### 4. Заключение

Линеаризуя систему нелинейных уравнений, которые характеризуют динамику дислокационного кинка в потенциале центра пиннинга при воздействии внешних сил, мы показали, что скорость кинка можно описать уравнением линейных колебаний (20). В дальнейшем этот результат может быть использован для описания флуктуационного открепления кинка от центра пиннинга. Это уравнение справедливо также в случае, когда вместо воздействия переменной силы на кинк имеет место колебание центра пиннинга. Однако в этом случае роль переменной силы играет выражение (24), которое определяется как амплитудой колебания примеси, так и пара-метрами кинка.

Автор выражает благодарность А.А. Ктеяну и Р.А. Варданыану за плодотворные обсуждения и ценные замечания.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. **T.Suzuki, S.Takeuchi, H.Yoshinaga.** Dislocation dynamics and plasticity. Berlin–New York, Springer-Verlag, 1991.
2. **K.Maeda, S.Takeuchi,** in: F.R.N.Nabarro and M.S.Duesbery (eds.), Dislocations in Solids, Amsterdam, North-Holland, 1996, pp.443-504.
3. **R.A.Vardanian, T.V.Zakarian.** Solid State Commun., **86**, 7 (1993).
4. **D.W.McLaughlin, A.C.Scott.** Phys. Rev. A, **18**, 4 (1978).
5. **N.R.Quintero, A.Sanchez.** Eur. Phys. J. B, **6**, 133 (1998).
6. **D.R.Gulevich, F.V.Kusmartsev.** Phys. Rev. B, **74**, 214303 (2006).
7. **A.S.Vardanyan, R.A.Vardanyan, A.A.Kteyan.** J. Phys. Chem. Sol., **69**, 2785 (2008). (dx.doi.org/10.1016/j.jpcs.2008.06.138). **А.С.Варданыан, Р.А.Варданыан.** Ученые Записки ЕГУ, **2**, 41 (2008).
8. **J.W.Yang, X.J.Ning, P.Pirouz.** Proc. Japan–U.S. Workshop on Functional Fronts in Advanced Ceramics, Tsukuba, 1994, p.55.
9. **Дж.Хирт, И.Лоте.** Теория дислокаций. М., Атомиздат, 1972.
10. **И.Р.Свиньин.** ТМФ, **22**, 1 (1975).
11. **Р.А.Варданыан, В.Я.Кравченко.** ДАН СССР, **266**, 82 (1982).

ԴԻՍԼՈՎԱՑԻՈՆ ԿԻՆԿԻ ԴԻՆԱՄԻԿԱՆ ՊԻՆՆԻՆԳԻ ԿԵՆՏՐՈՆԻ  
ՊՈՏԵՆՑԻԱԼՈՒՄ ԱՐՏԱՔԻՆ ՈՒԺԵՐԻ ԱԶԴԵՑՈՒԹՅԱՆ ՏԱԿ

Ա.Ս. ՎԱՐԴԱՆՅԱՆ

Պայերլսի մեխանիզմով դիսլոկացիայի շարժման վրա կետային արատների ազդեցությունը ուսումնասիրելու համար հետազոտված է դիսլոկացիոն կինկի շարժման դինամիկան պիննինգի պոտենցիալում արտաքին հաստատուն և փոփոխական ուժերի ազդեցության տակ: Խոտորման տեսության շրջանակներում գծայնացնելով կինկի շարժման հավասարումները ստացված է գծային տատանումների հավասարում կինկի արագության համար:

DYNAMICS OF DISLOCATION KINK IN THE PINNING CENTER  
POTENTIAL UNDER INFLUENCE OF EXTERNAL FORCES

A.S. VARDANYAN

Dynamics of dislocation kink affected by external dc and ac forces in the pinning potential is analyzed for study of the point defects role in dislocation motion by the Peierls mechanism. Within the framework of perturbation theory, the linearization of equations of motion of the kink results in the linear oscillation equation for the kink velocity.

УДК 621.3

## ПРЫЖКОВЫЙ И ДРЕЙФОВЫЙ МЕХАНИЗМЫ ФОТОПРОВОДИМОСТИ В ПЛЕНКАХ ZnO:Li

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

Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак

(Поступила в редакцию 12 июня 2008 г.)

Исследованы механизмы темновой и фотопроводимости пленок ZnO:Li. Полученные результаты интерпретируются на основе прыжкового механизма транспорта носителей заряда для темновой проводимости и прыжкового или дрейфового механизма для фотопроводимости в зависимости от энергии возбуждающего фотона. Для фотонов с энергией больше ширины запрещенной зоны имеет место дрейфовый механизм транспорта носителей заряда, а для фотонов с энергией меньше ширины запрещенной зоны – прыжковый механизм.

### 1. Введение

Широкозонный полупроводник оксид цинка (ZnO), обладающий множеством интересных свойств, представляет интерес для применения в качестве светодиодов и лазеров, работающих в сине-зеленом и УФ диапазонах, прозрачных дисплеев, УФ фотодетекторов, газовых сенсоров, прозрачных электродов и в преобразователях солнечного излучения. Введение акцепторной или донорной примеси позволяет управлять величиной и типом проводимости этих пленок и создавать *p-n*-переходы на их основе. Введение акцепторной примеси Li позволяет уменьшить проводимость и фактически получить компенсированный полупроводник с *n*-типом проводимости и высокой фоточувствительностью в УФ области спектра [1-4].

В широкозонных полупроводниках, как правило, существует три основных механизма транспорта носителей заряда [5,6]: 1) дрейфовый транспорт носителей заряда, возбужденных в нелокализованные состояния в зоне проводимости. Для таких носителей частотная зависимость проводимости  $\sigma(\omega)$  описывается формулой Друде

$$\sigma(\omega) = \sigma(0) / [1 + (\omega\tau)^2], \quad (1)$$

где  $\omega$ -циклическая частота ( $\omega = 2\pi f$ ) и  $\tau$  – время релаксации носителей; 2) прыжковый транспорт носителей заряда, возбужденных в локализованные состояния вблизи дна зоны проводимости. Эти носители подчиняются статистике невырожденного электронного газа; 3) прыжковый транспорт носителей заряда по локализованным состояниям вблизи уровня Ферми по примесной зоне

проводимости. Эти носители подчиняются статистике вырожденного электронного газа. В случае прыжковых механизмов (2) и (3) имеет место частотная зависимость проводимости [5]

$$\sigma(\omega) = \sigma(0) + A\omega^s, \quad (2)$$

где  $s = 0.8$  и  $A$  (некая константа). Транспорт фотовозбужденных носителей заряда для механизмов 1 и 2 осуществляется по зоне проводимости. В первом случае дрейфовая фотопроводимость наблюдается при межзонном фотовозбуждении с энергией фотона  $h\nu > E_g$  ( $E_g$  (ширина запрещенной зоны)). Во втором случае прыжковая фотопроводимость наблюдается при межзонном фотовозбуждении с энергией фотона  $h\nu = E_g$ . Необходимо отметить, что прыжковая фотопроводимость существует в том же диапазоне температур, что и равновесная темновая прыжковая проводимость.

В широкозонных полупроводниках, содержащих центры прилипания и рекомбинации, в которых транспорт носителей заряда осуществляется за счет дрейфового механизма, релаксация обусловлена несколькими процессами. В этом случае наблюдается неэкспоненциальный спад тока фотопроводимости. В пленках  $\text{ZnO:Li}$  с прыжковым механизмом транспорта фотоносителей наблюдается неэкспоненциальная релаксация фотопроводимости с двумя временными параметрами [7]. Однако недостаточно изучена стационарная прыжковая фотопроводимость в широкозонных полупроводниках, а также процесс релаксации при таком механизме проводимости. Поэтому необходимы дальнейшие исследования механизмов транспорта и релаксации фотовозбужденных носителей заряда.

В настоящей работе исследована фотопроводимость слабопроводящих пленок  $\text{ZnO:Li}$ , полученных электронно-лучевым напылением, на постоянном и переменном токах с монохроматическим световым возбуждением. Предложен механизм транспорта и релаксации фотовозбужденных носителей в зависимости от энергии возбуждающих фотонов.

## 2. Эксперимент

Легированные литием пленки  $\text{ZnO}$  были получены методом электронно-лучевого вакуумного напыления на подложках из сапфира с ориентацией (0001) [8]. Используемый метод обеспечивает получение пленок с дефицитом кислорода, поэтому они подвергались послеростовому отжигу на воздухе для насыщения их кислородом, что приводит к уменьшению кислородных вакансий и, как следствие, к уменьшению донорных центров. В результате были получены компенсированные полупроводники, содержащие как донорные, так и акцепторные центры [9].

Рентгеновские измерения показали преимущественную ориентацию полученных пленок вдоль оси (0002), перпендикулярной плоскости подложки. В качестве омических контактов использовались алюминиевые электроды, полученные методом вакуумного термического напыления. Для исключения фотохимических

процессов на поверхности пленок их покрывали защитным слоем  $MgF_2$  [10]. Измерения фото- и темновой проводимости осуществлялись на планарной структуре  $Al|ZnO:Li|Al$ . Фотопроводимость измерялась при постоянном и переменном напряжениях смещения. Регистрация фототока осуществлялась с помощью синхронно-фазового усилителя. Измерения на постоянном и переменном токе проводились при напряженности электрического поля 10 В/см. При измерении спектральной зависимости фотопроводимости планарные структуры освещались немодулированным монохроматическим излучением в спектральном диапазоне 4.6-2.5 эВ (270-500 нм) с использованием галогенной лампы (100 Вт) и дифракционного монохроматора МДР-4. Измерение времени релаксации фотопроводимости проводилось модулированным оптическим излучением при постоянном напряжении смещения. Калибровка системы по интенсивности осуществлялась UV-Si фотодиодом. Регистрация электрического сигнала и управление моно-хроматором осуществлялись с использованием DAC-системы фирмы "National Instruments". Было разработано математическое обеспечение и созданы виртуальные инструменты для измерения характеристик пленок. Холловская подвижность измерялась методом Ван-дер-Пау при напряженности магнитного поля 1(2 Т.

### 3. Результаты и их обсуждение

В результате отжига на воздухе (450°C, 60 мин) темновая проводимость пленок  $ZnO:Li$  уменьшалась от 0.33 до  $2.1 \times 10^{-6}$  (Ом·см)<sup>-1</sup>, холловская подвижность увеличивалась от 12 до 80 см<sup>2</sup>/В с и концентрация электронов уменьшалась от  $1.7 \times 10^{17}$  до  $1.6 \times 10^{11}$  см<sup>-3</sup>. Темновая проводимость пленок  $MgF_2$  составляла  $4.5 \times 10^{-13}$  (Ом·см)<sup>-1</sup> и изменения проводимости под действием УФ в них не наблюдалось, т.е. пленки  $MgF_2$  не оказывают влияния на фотоэлектрические измерения. Ширина запрещенной зоны  $E_g$  пленок  $ZnO:Li$  была оценена в предположении прямозонных переходов между валентной зоной и зоной проводимости по формуле  $(\alpha h\nu)^2 = A(h\nu - E_g)$  и составляла  $E_g = 3.29$  эВ.

На рис.1 приведена зависимость темновой и фотопроводимости от частоты  $\omega$  переменного электрического поля для пленок  $ZnO:Li$ . Зависимость темновой проводимости пленок (кривая 1) имеет возрастающий нелинейный характер и аппроксимируется формулой (2) с параметром  $s = 0.79$ , т.е. темновая проводимость осуществляется за счет прыжкового механизма 3 транспорта носителей вблизи уровня Ферми по примесной зоне проводимости. Фотопроводимость исследуемых пленок при освещении монохроматическим светом с энергией фотонов 3.1 эВ (кривая 2) и 3.3 эВ (кривая 3), равной или незначительно уступающей энергии запрещенной зоны  $E_g$  (на ширину урбаховского края), имеет похожий характер и может быть описана формулой (2) с параметрами, соответственно,  $s = 0.44$  и  $s = 0.27$ . Величина  $s$  меняется с изменением энергии возбуждающих фотонов, и существенно отличается от теоретического предела 0.8 [5]. Фотопроводимость при энергии возбуждающих фотонов, равной или незначительно превышающей энергию запрещенной зоны  $E_g$ , осуществляется по зоне проводимости за счет прыжкового механизма 2. Из рисунка видно, что частотная зависимость фотопроводимости при

возбуждении фотонами с энергией 3.87 эВ, существенно превышающей ширину запрещенной зоны (кривая 4), имеет линейный характер. Эта зависимость аппроксимируется формулой (1), что соответствует транспорту носителей по механизму 1. Спада частотной зависимости не наблюдается, т.к. время релаксации носителей  $\tau$  в этих пленках  $\approx 10^{-9}$  с.

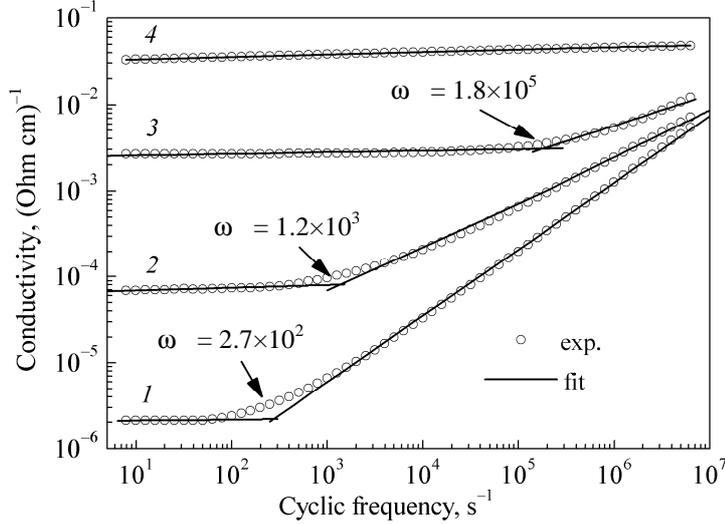


Рис.1. Частотная зависимость темновой (1) и фотопроводимости пленок ZnO:Li при энергии фотона 3.1 эВ (2); 3.3 эВ (3); 3.87 эВ (4).

Полученные нами экспериментальные результаты можно интерпретировать на основе модели Поллака и Эллиота [11,12], разработанной для описания прыжковой проводимости на переменном токе. Как видно из рис.1, при определенной частоте, указанной стрелкой, начинается увеличение проводимости. Эта частота изгиба зависит от энергии возбуждающего излучения и не зависит от его интенсивности. Из этой модели следует, что, если длина прыжка носителей заряда на переменном токе меньше длины прыжка на постоянном токе (низкие частоты), то начинается увеличение проводимости с увеличением частоты. Исходя из этого, можно оценить длину прыжка на переменном и постоянном токах из экспериментальных измерений частоты изгиба. Для случая проводимости на постоянном токе длина прыжка  $r_0$  определяется выражением [11,12]

$$r_0 = (3/4)[3/2\pi\alpha N(E_F)k_B T]^{1/4}, \quad (3)$$

где  $N(E_F)$  (плотность состояний вблизи уровня Ферми,  $k_B$  (постоянная Больцмана,  $T$  (температура и  $\alpha^{-1}$  (величина, обратная длине локализации. Последнюю величину мы оцениваем как половину эффективного боровского радиуса ( $0.5a^*$ ))

$$a^* = a_B \epsilon (m/m^*),$$

где  $a_b = 0.0529$  нм. Поскольку для пленок ZnO эффективная масса электрона  $m^* = 0.35m$  и диэлектрическая проницаемость среды  $\epsilon = 8.5$ , то получаем значения  $a^* = 1.29 \times 10^{-7}$  см и  $\alpha^{-1} \approx 6.4 \times 10^{-8}$  см для исследуемых пленок.

Для случая проводимости на переменном токе длина прыжка  $r_\omega$  описывается выражением [11,12]

$$r_\omega = \frac{1}{2\alpha} \ln \left( \frac{v_{ph}}{\omega} \right), \quad (4)$$

где  $v_{ph}$  (частота оптического фонона). Таким образом, для темновой проводимости при комнатной температуре ( $k_B T = 0.0259$  эВ), когда частота оптического фонона  $v_{ph} \approx 6.2 \times 10^{12} \text{ с}^{-1} = 0.0259$  эВ, переход от проводимости на постоянном токе к проводимости на переменном токе (рис.1) происходит при частоте  $\omega_{(dark)} = 2.7 \times 10^2 \text{ с}^{-1}$ . Это означает, что в нашем случае длина прыжка  $r_\omega = 9,97$  нм. Для фотопроводимости частота перехода составляет  $\omega(3.1 \text{ эВ}) \approx 1.2 \times 10^3 \text{ с}^{-1}$  и  $\omega(3.3 \text{ эВ}) \approx 1.8 \times 10^5 \text{ с}^{-1}$ , поэтому длина прыжка для фотовозбужденных носителей составляет 9.31 нм и 7.21 нм, соответственно. Плотность состояний на уровне Ферми  $N(E_F)$ , определяемая с помощью выражения (4) при условии  $r_\omega = r_0$ , составляет  $\sim 10^{19} \text{ см}^{-3} \text{ эВ}^{-1}$  для темновых носителей и  $10^{16} \div 10^{18} \text{ см}^{-3} \text{ эВ}^{-1}$  для фотовозбужденных носителей.

В этой модели для парных центров при проводимости на переменном токе параметр  $s$  и высота потенциального барьера  $W$ , разделяющего эти пары, связаны соотношением

$$W = 6k_B T / (1 - s). \quad (5)$$

Для халькогенидов величина  $W$  приблизительно равна ширине запрещенной зоны [13]. Параметр  $s$  для темновой проводимости пленок ZnO:Li, согласно нашим данным, равен 0.79, поэтому из выражения (5) получаем  $W = 0.7$  эВ и согласно [14], ширина примесной зоны оценивается  $0.8 \div 1$  эВ. Для пленок ZnO, в которых транспорт темновых носителей осуществляется по локализованным состояниям примесной зоны (механизм 3), величина  $W$  приблизительно равна ширине примесной зоны. Для фотовозбужденных электронов, транспорт которых осуществляется, согласно механизму 2, в локализованные состояния на дне зоны проводимости, величина  $W$  обусловлена разбросом уровня энергии в прямоугольных ямах локализованных состояний, т.е. шириной урбаховского края. Для фотовозбужденных электронов параметр  $s$ , согласно проведенным измерениям, находится в диапазоне  $0.27 \div 0.44$  в зависимости от энергии возбуждающего фотона. Из выражения (5) для  $W$  фотовозбужденных электронов получаем диапазон значений  $0.219 \div 0.268$  эВ. Ранее проведенные измерения показали, что разброс уровня энергии в прямоугольных ямах локализованных состояний на дне зоны проводимости, т.е. ширина урбаховского края для тех же пленок, составляет  $\sim 0.120$  эВ [15].

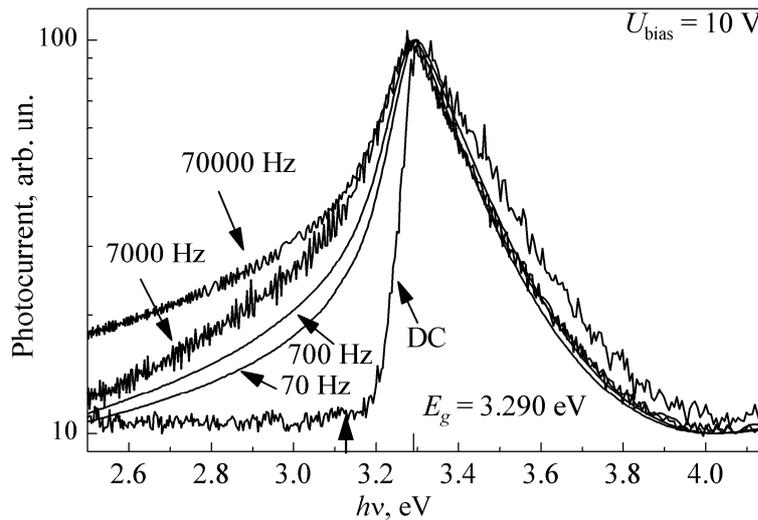


Рис.2. Нормализованная спектральная чувствительность фотопроводимости пленок ZnO:Li на постоянном и переменном токе при различных частотах напряжения смещения ( $U_{\text{bias}}=10$  В). Стрелкой указана ширина запрещенной зоны.

На рис.2 приведена нормализованная спектральная зависимость фотопроводимости в спектральном диапазоне 2.5(4.1 эВ при различных частотах переменного электрического поля. Максимум чувствительности лежит вблизи края поглощения полупроводника. Стрелкой показана энергия запрещенной зоны  $E_g = 3.29$  эВ. При измерениях на постоянном токе происходит быстрый спад фототока, обусловленный красной границей фотоэффекта, при энергии возбуждающего фотона меньше ширины запрещенной зоны. При измерениях на переменном токе этот спад более пологий, причем с увеличением частоты крутизна спада уменьшается. Предположив, что фотоны с энергией немного меньше ширины запрещенной зоны возбуждают электроны в локализованные состояния на дне зоны проводимости, которые не дают вклада в проводимость на постоянном токе и могут давать вклад в проводимость на переменном токе, можно объяснить уменьшение крутизны спада фотопроводимости на переменном токе с увеличением частоты.

На рис.3а приведена кинетика нарастания и спада тока фотопроводимости планарной структуры Al|ZnO:Li|Al при постоянных значениях напряжения смещения  $U_{\text{bias}} = 10$  В и интенсивности УФ излучения  $I_{\text{UV}} = 150$  мВт/см<sup>2</sup>. Кинетика нарастания тока фотопроводимости в пленках ZnO:Li

имеет экспоненциальный характер и аппроксимируется функцией

$$I_{\text{ph}} = A_1(1 - \exp(-t/\tau_1)). \quad (6)$$

Спад, обусловленный двумя временными компонентами, которые можно разделить на быструю ( $\tau_{\text{fast}}$ ) и медленную ( $\tau_{\text{slow}}$ ), аппроксимируется функцией

$$I_{\text{dark}} = A_1(\exp(-t/\tau_{\text{fast}})) + A_2(\exp(-t/\tau_{\text{slow}})). \quad (7)$$

Две временные компоненты свидетельствуют о различных механизмах релаксации: первого, обусловленного концентрацией делокализованных фотоэлектронов, и второго, обусловленного энергией локализованных фотоэлектронов. Аналогичные зависимости спада тока фотопроводимости с двумя временными параметрами наблюдались и в работе [16].

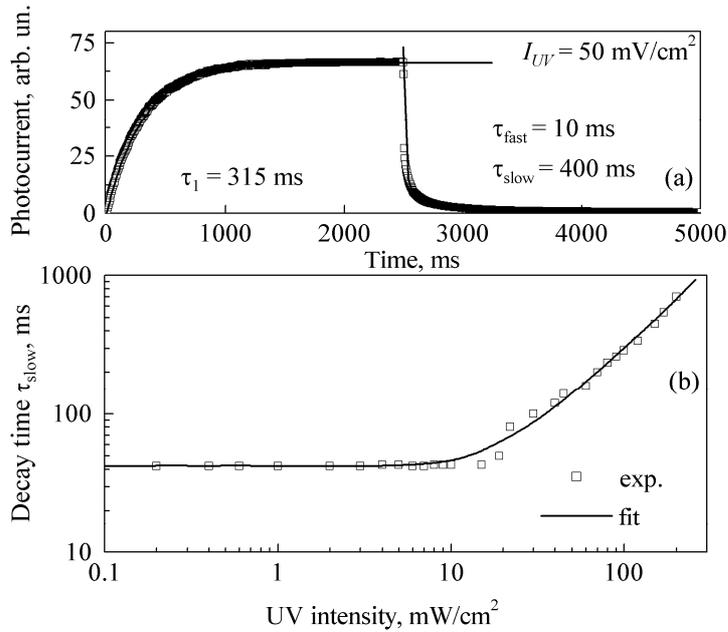
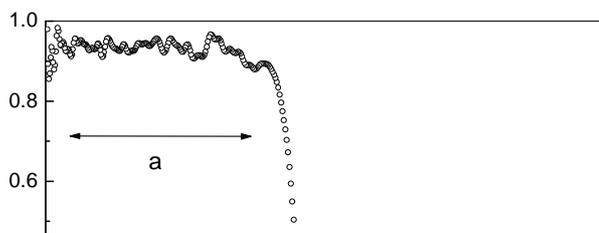


Рис.3. а) Кинетика нарастания и спада тока фотопроводимости, б) зависимость медленной компоненты времени спада фотопроводимости от интенсивности возбуждающего излучения.

На рис.3б приведена экспериментальная зависимость медленной компоненты времени релаксации, полученная аппроксимацией кинетики спада по формуле (7), от интенсивности возбуждающего излучения. В этом случае использовались фотоны с энергией  $3.4 \div 3.8$  эВ, вызывающие обусловленный делокализованными электронами дрейфовый механизм фотопроводимости. Медленная компонента времени релаксации ( $\tau_{\text{slow}}$ ) изменялась в диапазоне  $40 \div 1000$  мс в зависимости от интенсивности возбуждающего излучения. Аналогичные зависимости времени релаксации от интенсивности наблюдались в работе [16]. Как видно из приведенной зависимости, с увеличением интенсивности, т.е. с увеличением концентрации фотовозбужденных электронов, происходит увеличение времени релаксации, определяемое прямой рекомбинацией электронов с дырками на центрах с большим сечением рекомбинации. Время релаксации остается неизменным при низких интенсивностях возбуждающего излучения, т.е. при малой концентрации



фотовозбужденных электронов в зоне проводимости. При малых интенсивностях медленная компонента определяется релаксацией электронов, обладающих малым сечением захвата, на центры с большим сечением захвата [17,18].

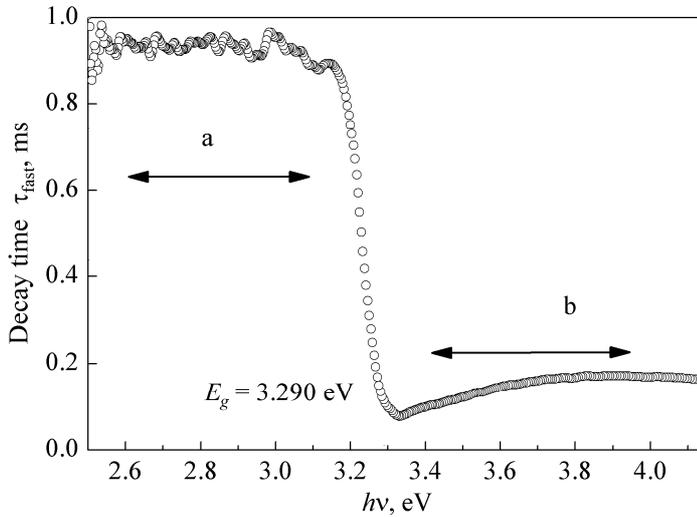


Рис.4. Зависимость быстрой компоненты времени спада фотопроводимости от энергии возбуждающего излучения.

На рис.4 представлена зависимость быстрой компоненты времени релаксации фотопроводимости от энергии фотона возбуждающего излучения. Как видно из рисунка, существует два времени релаксации: для фотоэлектронов с прыжковым механизмом транспорта носителей, возбужденных в локализованные состояния вблизи дна зоны проводимости (область а,  $\tau_{fast} \approx 0.93$  мс), и для фотоэлектронов с дрейфовым механизмом проводимости (область b,  $\tau_{fast} \approx 0.13$  мс). При возбуждении фотоэлектронов фотонами с энергией  $h\nu > E_g$  (область b) релаксация обусловлена переходом делокализованных электронов, обладающих малым сечением захвата, на центры с большим сечением захвата (глубокие ловушки, обусловленные ионами лития в ZnO [19]). Этот механизм релаксации наиболее быстрый. При возбуждении фотоэлектронов фотонами с энергией  $h\nu < E_g$  (область а) релаксация определяется переходом локализованных электронов, обладающих большим сечением захвата (т.к. электроны находятся в узких квантовых ямах), на центры с большим сечением захвата (глубокие ловушки). Этот механизм релаксации более медленный, чем предыдущий [18].

#### 4. Заключение

В результате исследований темновой и фотопроводимости в зависимости от частоты переменного напряжения смещения выявлено, что темновая проводимость в пленках ZnO:Li осуществляется прыжковым механизмом транспорта носителей, а фотопроводимость осуществляется дрейфовым механизмом транспорта носителей, если энергия фотона возбуждающего излучения существенно больше (на ширину урбаховского края) запрещенной зоны, и прыжковым механизмом транспорта заряда, если энергия фотона меньше или равна ширине запрещенной зоны. Выявлено изменение длины прыжка в зависимости от энергии возбуждающего фотона, а также изменение времени релаксации фотопроводимости от энергии фотона возбуждающего излучения, т.е. от механизма транспорта фотовозбужденных носителей. При прыжковой фотопроводимости время релаксации существенно выше, чем при дрейфовой фотопроводимости.

Работа выполнена при частичной поддержке фонда ANSEF, грант No PS-condmатех-1137. Авторы выражают благодарность Ю.П. Власову за проведение магнитоэлектрических измерений.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. **Y.Liu, C.R.Gorla.** J. Electronic Materials, **29**, 69 (2000).
2. **W.Yang, R.D.Vispute.** Appl. Phys. Lett., **78**, 2787 (2001).
3. **S.A.Studenikin, M.Cocivera.** J. Appl. Phys., **91**, 5060 (2002)
4. **N.R.Aghamalyan, R.K.Hovsepyan, A.R.Poghosyan, V.G.Lazaryan.** Proc. SPIE, **5560**, 235 (2004).
5. **Н.Мотт, Э.Дэвис.** Электронные процессы в некристаллических веществах. М., Мир, 1982.
6. **В.Ф.Гантмахер.** Электроны в неупорядоченных средах. М., Физматлит, 2005.
7. **Е.М.Гершензон, Ф.М.Исмагилов, Л.Б.Литвак-Горская, А.П.Мельников.** ЖЭТФ, **100**, 1029 (1991).
8. **N.R.Aghamalyan, I.A.Ghambaryan, E.Kh.Goulanian, R.K.Hovsepyan, R.B.Kostanyan, S.I.Petrosyan, E.S.Vardanyan, A.F.Zerrouk.** Semicon. Sci. and Technol., **18**, 525, (2003).
9. **Н.Р.Агамалян, Р.К.Овсепян, С.И.Петросян.** Изв. НАН Армении, Физика, **43**, 274 (2008).
10. **Н.Р.Агамалян, Р.К.Овсепян.** Изв. НАН Армении, Физика, **43**, 143 (2008)
11. **M.Pollak.** Phys. Rev., **122**, 1742 (1961).
12. **S.R.Elliott.** Phil. Mag B, **37**, 553 (1978).
13. **S.R.Elliott, E.A.Davis, G.D.Pitt.** Solid State Commun., **22**, 481 (1977).
14. **N.R.Aghamalyan, R.K.Hovsepyan, A.R.Poghosyan, B. von Roedern, E.S.Vardanyan.** Journal of Optoelectronics and Advanced Materials, **9**, 1418 (2007).
15. **N.R.Aghamalyan, E.A.Kafadaryan, R.K.Hovsepyan.** Effect of lithium and gallium impurities on opto-electrical properties of ZnO films. Chapter in book "Trends in Semiconductor Science". Nova Science Publishers, New York, 2005, pp.81-110.
16. **P.Sharma, K.Sreenivas, K.V.Rao.** J. Appl. Phys., **93**, 3963 (2003).
17. **Р.Бьюб.** Фотопроводимость твердых тел. М., Мир, 1962.
18. **D.V.Lang.** J. Appl. Phys., **45**, 3023 (1974)
19. **O.Lopatiuk, I.Chernyak.** Appl. Phys. Let., **87**, 214110 (2005).

ZnO:Li ԹԱՂԱՆԹՆԵՐԻ ՖՈՏՈՀԱՂՈՐԴԱԿԱՆՈՒԹՅԱՆ ԹՈՒՉՔԱՅԻՆ ԵՎ  
ԴՆԵՅՖԱՅԻՆ ՄԵԽԱՆԻԶՄՆԵՐԸ

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

Ուսումնասիրված են ZnO:Li թաղանթների մթնային (չլուսավորված) և ֆոտոհաղորդակա-  
նության մեխանիզմները: Ըստ ստացված արդյունքների, մթնային (չլուսավորված)  
հաղորդակա-նությունը բացատրվում է թռիչքային կամ դրեյֆային մեխանիզմներով, իսկ  
ֆոտոհաղորդակա-նությունը, կախված կլանված ֆոտոնի էներգիայից թռիչքային կամ  
դրեյֆային մեխանիզմներով: Արգելված գոտուց մեծ էներգիայով ֆոտոնների դեպքում  
գործում է լիցքակիրների տեղափոխման դրեյֆային մեխանիզմը, իսկ արգելված գոտուց  
փոքր էներգիայով ֆոտոնների դեպքում՝ թռիչքային մեխանիզմը:

HOPPING AND DRIFT MECHANISMS  
OF PHOTOCANDUCTIVITY IN ZnO:Li FILMS

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

The mechanisms of dark- and photoconductivity of ZnO:Li films are investigated. The  
obtained results are interpreted on the basis of the hopping mechanism of charge carriers transport  
for the dark conductivity and the hopping or drift mechanism for the photoconductivity depending  
on the energy of an exciting photon. For photons with the energy more than the forbidden band gap  
the drift mechanism of carriers transport takes place, while for photons with the energy less than  
the forbidden band gap the hopping mechanism takes place.

УДК 539.104

## ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ $^{137}\text{Cs}$ В ПОЧВЕ В РАЙОНЕ РАЗМЕЩЕНИЯ АРМЯНСКОЙ АЭС

Р.М. АВАКЯН<sup>1</sup>, Г.Г. АРУТЮНЯН<sup>1</sup>, В.А. АТОЯН<sup>2</sup>,  
А.В. ОВСЕПЯН<sup>2</sup>, К.И. ПЮСКЮЛЯН<sup>2</sup>, Э.В. ЧУБАРЯН<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Ереванский государственный университет, Армения

<sup>2</sup>Армянская атомная электростанция, Мецамор

(Поступила в редакцию 13 марта 2008 г.)

Решена задача по оценке пространственного распределения  $^{137}\text{Cs}$  в почве и величины прямого радиационного воздействия Армянской АЭС на население, проживающее в районе ее размещения на фоне радиокативных глобальных выпадений и последствий аварии на Чернобыльской АЭС. Исследовано содержание радиационно опасного радионуклида  $^{137}\text{Cs}$  в почве на территории радиусом 50 км, в том числе вблизи Армянской АЭС. На основе анализа метеорологических данных и расчетов расстояния, на котором радиоактивные выбросы с атомной станции имеют максимальную концентрацию в воздухе, были выбраны точки мониторинга. Полученные данные хорошо согласуются с данными Научного Комитета по действию атомной радиации при ООН.

В результате длительного мониторинга в зоне наблюдения Армянской АЭС (территория радиусом 30 км с контрольным пунктом на расстоянии 50 км от АЭС) в окружающей среде (ОС) было зафиксировано постоянное наличие радионуклидов техногенного происхождения  $^{137}\text{Cs}$  и  $^{90}\text{Sr}$ . В контрольных точках, расположенных вблизи ААЭС эпизодически регистрировались радионуклиды коррозионного происхождения  $^{60}\text{Co}$ ,  $^{110\text{m}}\text{Ag}$  и  $^{54}\text{Mn}$ . Кроме того, в атмосфере и в выпадениях, в зоне наблюдения ААЭС в 1982 г. были отмечены радионуклиды  $^{106}\text{Ru}$ ,  $^{103}\text{Ru}$ ,  $^{144}\text{Ce}$ ,  $^{141}\text{Ce}$ ,  $^{95}\text{Zr}$ ,  $^{95}\text{Nb}$ . Как оказалось, это было последствием испытания Китаем ядерного устройства, осуществленного в 1981 г. Естественно, что в 1986-87 гг. на территории Араратской долины четко проявили себя радиационные последствия аварии на Чернобыльской АЭС (вышеупомянутые радионуклиды плюс  $^{131}\text{I}$  и  $^{134}\text{Cs}$ ).

Поскольку в объектах окружающей среды постоянно присутствовали только  $^{137}\text{Cs}$  и  $^{90}\text{Sr}$ , в качестве основного радионуклида для определения вклада ААЭС в радиационный фон был выбран  $^{137}\text{Cs}$ , так как его концентрация в ОС намного больше, чем  $^{90}\text{Sr}$ , и ошибка измерения, естественно, меньше. Кроме того,  $^{90}\text{Sr}$  является чистым бета-излучателем и для его измерения необходимо применение радиохимических методик, что вносит дополнительный вклад в ошибку измерения.

Образование и поступление  $^{137}\text{Cs}$  в ОС обусловлено природными источниками, радиоактивными глобальными выпадениями и, в гораздо меньшей

степени по сравнению с глобальными выпадениями, выбросами с АЭС. Природный  $^{137}\text{Cs}$  практически является продуктом спонтанного деления  $^{238}\text{U}$ . Вклад остальных источников в суммарное количество природного  $^{137}\text{Cs}$  пренебрежимо мал. По данным различных авторов, равновесная удельная активность природного  $^{137}\text{Cs}$  в почве колеблется от 3,7 до 370 мкБк/кг [1]. Эта величина на 4–5 порядков меньше концентрации всего  $^{137}\text{Cs}$  в почве. Следовательно, содержание цезия в почве в районах размещения атомных станций в первую очередь обусловлено глобальными выпадениями, а также воздействием АЭС.

Табл.1. Широтное распределение глобальных выпадений  $^{137}\text{Cs}$ .

| Широтный пояс, град. | Временной интеграл выпадения, ПБк | Площадь пояса, $10^{12}$ м <sup>2</sup> | Временной интеграл плотности выпадения, кБк/м <sup>2</sup> |
|----------------------|-----------------------------------|---|--|
| Северное полушарие   |                                   |   |  |
| 80-90                | 1,6                               | 3,9                                     | 0,42   |
| 70-80                | 12,6                              | 11,6                                    | 1,09   |
| 60-70                | 52,6                              | 18,9                                    | 2,78   |
| 50-60                | 118,2                             | 25,6                                    | 4,62   |
| 40-50                | 162,6                             | 31,6                                    | 5,17   |
| 30-40                | 136,5                             | 36,4                                    | 3,74   |
| 20-30                | 113,9                             | 40,2                                    | 2,83   |
| 10-20                | 81,4                              | 42,8                                    | 1,9  |
| 0-10                 | 57,1                              | 44,1                                    | 1,3  |
| Суммарно             | 736,5                             |   |  |
| Южное полушарие      |                                   |   |  |
| 0-10                 | 33,6                              | 44,1                                    | 0,77   |
| 10-20                | 28,5                              | 42,8                                    | 0,67   |
| 20-30                | 45,0                              | 40,2                                    | 1,12   |
| 30-40                | 44,2                              | 36,4                                    | 1,22   |
| 40-50                | 45,0                              | 31,5                                    | 1,42   |
| 50-60                | 19,4                              | 26,6                                    | 0,76   |
| 60-70                | 10,7                              | 18,9                                    | 0,56   |
| 70-80                | 4,0                               | 11,6                                    | 0,35   |
| 80-90                | 0,5                               | 3,9                                     | 0,13   |
| Суммарно             | 230,9                             |   |  |

Как известно,  $^{137}\text{Cs}$  является одним из основных дозообразующих радионуклидов в глобальных выпадениях, он обуславливает около 40% всей ожидаемой эффективной эквивалентной дозы облучения населения от всех радионуклидов, образовавшихся при проведении испытаний ядерного оружия. Закономерности переноса воздушными массами радиоактивных веществ, поступивших в тропосферу и стратосферу при ядерных взрывах, и их выпадения на поверхность Земли изучены достаточно полно. Результаты этих исследований обобщены в ряде оригинальных монографий, сборников трудов и обзорах отечественных и зарубежных авторов. В табл.1 представлены данные о содержании  $^{137}\text{Cs}$  в глобальных выпадениях в зависимости от широтного пояса по 1980 г. включительно [1].

В качестве основного объекта окружающей среды, в котором исследовалось содержание  $^{137}\text{Cs}$ , нами была выбрана почва, поскольку она хорошо аккумулирует цезий и, анализируя его концентрацию в ней, можно исследовать эффект длительного воздействия АЭС. По данным различных источников радиоактивный цезий аккумулируется в верхнем пятисантиметровом слое почвы, поэтому все пробы почвы отбирались нами с верхнего слоя 0–5 см.

На рис.1 приведены усредненные по всей зоне мониторинга данные о содержании  $^{137}\text{Cs}$  в почве за весь период эксплуатации Армянской АЭС [2]. Повышенное содержание  $^{137}\text{Cs}$  в почве в 1978, 1979, 1980 гг. (период, близкий по времени к интенсивным испытаниям ядерных устройств) обусловлено глобальными выпадениями (последствия испытания ядерных устройств в атмосфере, проводимых различными странами). Повышение содержания  $^{137}\text{Cs}$  в почве в 1982 г. было результатом испытания ядерного устройства, проведенного Китаем в 1981 г. Отчетливо видны последствия аварии на Чернобыльской АЭС 1986 года и временные “хвосты” от них (см. рис.1).

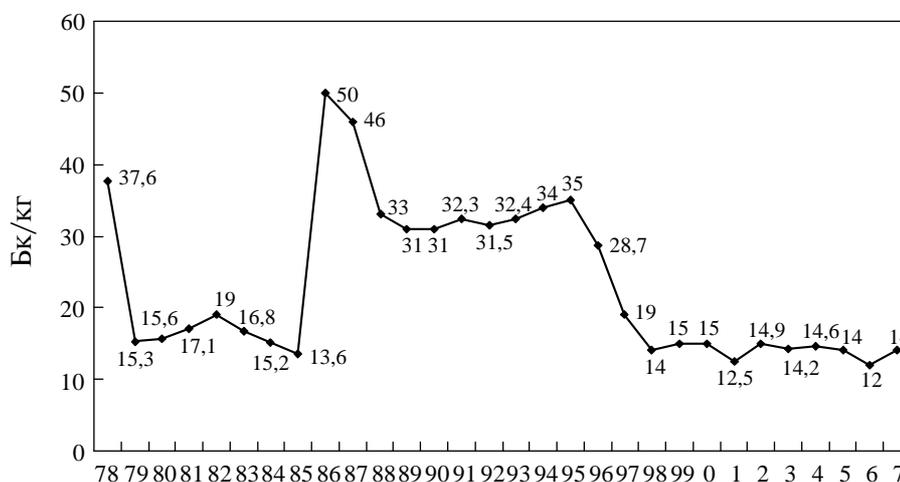


Рис.1. Среднее по зоне наблюдения среднегодовое содержание  $^{137}\text{Cs}$  в верхнем (пятисантиметровом) слое почвы за весь период эксплуатации ААЭС (1978–2007) [2].

Кроме почвы, в качестве других объектов ОС, за которым ведется мониторинг, были выбраны атмосферный воздух и выпадения из атмосферы. Подход к анализу пространственного распределения выбросов  $^{137}\text{Cs}$  в объектах окружающей среды, а именно, в почве и седиментации (выпадения в атмосфере), состоит в предположении, что они должны быть анизотропными из-за наличия преимущественного направления ветров в районе промплощадки АЭС, в результате чего радиоактивные выбросы со станции будут распространяться неравномерно по разным направлениям.

При определении пространственного распределения концентрации  $^{137}\text{Cs}$  в выпадениях из воздуха и в почве применялся следующий подход. Рассеяние примеси

в атмосфере описывается с помощью методики Пасквилла, рассматривающей три вида точечных источников: мгновенный, непрерывный в течение небольшого периода времени (от 20 минут до нескольких часов) и постоянно действующий [3]. Концентрация радиоактивных примесей в струе при выбросе из мгновенно действующего точечного источника, в соответствии с этой моделью, записывается в виде

$$q(x, y, z) = \frac{Q}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} \exp \left\{ - \left[ \frac{(x - \bar{u}t)^2}{2\sigma_x^2} + \frac{y^2}{2\sigma_y^2} + \frac{z^2}{2\sigma_z^2} \right] \right\}, \quad (1)$$

где  $Q$  – мощность источника,  $\bar{u}$  – средняя скорость ветра,  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  – дисперсии распределения концентрации в направлении осей  $x, y, z$ . Дисперсии  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  являются возрастающими функциями, зависящими от стратификации атмосферы, и определяются из экспериментальных данных.

При выводе формул, описывающих диффузию примеси от источника непрерывного и конечного времени действия, Пасквиллом используется принцип суперпозиции, осуществляемый при дискретном суммировании или функциональном интегрировании результатов, полученных для мгновенного источника. Выражение для расчета концентрации, при условии пренебрежения диффузией вдоль оси  $x$  по сравнению с ветровым переносом в том же направлении, приобретает вид

$$q(x, y, z) = \frac{Q}{(2\pi)\bar{u}\sigma_y\sigma_z} \exp \left[ \left( -\frac{y^2}{2\sigma_y^2} + \frac{z^2}{2\sigma_z^2} \right) \right]. \quad (2)$$

Для источника, расположенного на некоторой высоте  $H$ , выражение для расчета концентрации на уровне земли (при  $z \square 0$ ) выглядит следующим образом [3]:

$$q(x, y) = \frac{Q}{\pi\bar{u}\sigma_y\sigma_z} \left[ \exp - \left( \frac{y^2}{2\sigma_y^2} + \frac{H^2}{2\sigma_z^2} \right) \right]. \quad (3)$$

Известно, что при рассеянии радиоактивных аэрозолей, выброшенных в вентиляционную трубу, их концентрация на уровне земли вблизи источника равна нулю, затем увеличивается с удалением от трубы, достигает максимума на определенном расстоянии ( $X_m$ ), зависящем от метеорологических условий и состояния газо-аэрозольной смеси, а далее опять уменьшается. Нами, с учетом реальных метеорологических условий в районе размещения ААЭС и технологических характеристик выбрасываемой газоаэрозольной смеси, было рассчитано расстояние от вентиляционной трубы до точки максимума. Расчеты проводились с помощью методик, приведенных в работе [1]. Исходя из них, расстояние  $X_m$  определяется по формулам [3]:

$$X_m (v_m < 2) = 4.95v_m (1 + 0.28f^{1/3})gH, \quad (4)$$

$$X_m(v_m > 2) = 7(1.947)^{1/2} [1 + 0,28(0,66)^{1/3}] gH, \quad (5)$$

где  $v_m = 0.65 \sqrt[3]{V \delta T / H}$ ;  $f$  – фактор, учитывающий тепловой подъем газовой-душной смеси при выходе из трубы,  $f = 10^3 \omega^2 D / H^2 \delta T$ ;  $g$  – фактор, учитывающий ландшафт (рельеф) местности (в нашем случае  $g = 1,22$ ). При этом использовались следующие исходные данные, характеризующие метеорологические условия в районе размещения Армянской АЭС за 15 летний период, рельеф местности и источник выбросов: средняя скорость выхода газовой-душной смеси из устья венттрубы  $\omega = 11.8$  м/сек; диаметр устья трубы  $D = 3.6$  м; ежесекундный расход газовой-душной смеси  $V = 120$  м<sup>3</sup>/сек; высота трубы  $H = 150$  м; разность температур выбрасываемой газовой-душной смеси и среднегодовой температуры воздуха  $\delta T = 33.6^\circ\text{C}$ ; среднегодовая скорость ветра в районе промплощадки Армянской АЭС  $\approx 2$  м/с.

Зависимость расстояния  $X_m$  от среднегодовой скорости ветра  $u$  ( $X_m^u$ ) определяется по формуле [3]

$$X_m^u(u_m) = \rho X_m, \quad (6)$$

где  $u_m$  – опасная скорость ветра на высоте флюгера (10 м), значения которой определяют в зависимости от параметра  $v_m$  по соотношениям

$$\text{при } v_m \leq 0.5 \text{ м/с} \quad u_m = 0.5, \quad (7)$$

$$\text{при } 0.5 \leq v_m \leq 2 \text{ м/с} \quad u_m = v_m, \quad (8)$$

$$\text{при } v_m > 2 \text{ м/с} \quad u_m = (1 + 0.12 f^{1/2}), \quad (9)$$

$\rho$  – безразмерный коэффициент, определяемый в зависимости от отношения  $u/u_m$  по формулам

$$\text{при } u/v_m \leq 0.25 \quad \rho = 3, \quad (10)$$

$$\text{при } 0.25 \leq u/v_m \leq 1 \quad \rho = 8.43(1 - u/v_m)^5 + 1, \quad (11)$$

$$\text{при } u/v_m > 1 \quad \rho = 0.32(u/v_m) + 0.68, \quad (12)$$

В нашем случае, поскольку  $v_m = 1.947$ , то, согласно формуле (8),  $u_m = v_m = 1.947$ . Так как среднегодовая скорость ветра равна 2 м/с, то  $u/v_m = 1.03 > 1$  и величина  $\rho$  определяется по формуле (12) и равна  $\rho = 1.009$ . Как видно, в нашем случае учет среднегодовой скорости ветра практически не влияет на величину  $X_m^u$ .

Расчеты показали, что, с учетом всех вышеуказанных параметров, расстояние от вентиляционной трубы, на котором приземная концентрация радиоактивных аэрозолей максимальна, равно 2200 м. Именно в этой точке нами были установлены три кюветы для отбора седиментационных проб и на протяжении более чем трех лет отбирались пробы почвы.

В качестве точек для отбора проб почвы были использованы имеющиеся ранее точки наблюдения, расположенные по различным направлениям от ААЭС и на

различных расстояниях от станции: от 800 м до 30 км. Наряду с этими точками, были выбраны основные точки контроля, которым уделялось особое внимание. Они располагались вдоль основного направления ветров в этом районе: на северо-восток (наветренная сторона) и юго-запад (подветренная сторона) от Армянской АЭС. Северо-восточное направление: г. Ошакан – 17 км от ААЭС, с. Агавнатун – 10 км от ААЭС. Юго-западное направление: точка М-1 (расстояние на котором приземная концентрация выбросов от ААЭС максимальна – 2,2 км), г. Мецамор – 5 км от ААЭС, г. Армавир – 10 км от ААЭС, с. Нор-Армавир – 17 км от ААЭС.

В точке М-1 ожидается максимальное содержание  $^{137}\text{Cs}$  в выпадениях, равно как и содержание его в почве, поскольку в этой точке на глобальные выпадения (равномерно распределяемые по всей зоне наблюдения, так как предполагается, что метеословия в этой зоне, небольшой по площади, одинаковы) накладывалось максимальное воздействие выбросов с атомной станции. Пробы почвы отбирались за период с мая 2006 г. по август 2007 г. Отбор проб производился с помощью специальной стальной рамки размерами 10 на 15 см и высотой 5 см. Каждая проба состояла из пяти рамок почвы, отобранных методом конверта. В основном это были бурые, полупустынные почвы. Перед измерением пробы почвы, в соответствии с принятыми методиками, высушивались, размельчались, а потом взвешивались.

Кроме того, в качестве фоновых проб, нами были отобраны пробы почвы из точек, удаленных от ААЭС на расстояние до 60 км. Тип почвы в этом районе соответствовал типу почвы в районе размещения атомной станции. Вес каждой пробы составлял от 1200 до 1400 г., в зависимости от типа почвы. В каждой точке наблюдения было отобрано до 35 проб.

Измерения концентрации  $^{137}\text{Cs}$  в почве проводились на низкофоновой гамма-спектрометрической установке с детектором NaI в геометрии Маринелли. Параллельно пробы измерялись на низкофоновой гамма-спектрометрической установке с GeLi детектором и программным обеспечением "PRORESS". В 2006 г. рабочей группой с Армянской АЭС была приобретена особо чувствительная гамма-спектрометрическая установка (производство фирмы CNBERRA) с чистым германиевым детектором и программной поддержкой "GENIE-2000", что позволило существенно увеличить точность измерений. Величина минимально детектируемой активности установки равна 40 Бк/м<sup>2</sup>. Удельное содержание  $^{137}\text{Cs}$  в каждой пробе почвы определялось серией из трех измерений.

Гамма-спектрометрический анализ проб показал, что почва содержит естественные радионуклиды  $^{40}\text{K}$ ,  $^{226}\text{Ra}$  и  $^{232}\text{Th}$ , а также  $^{137}\text{Cs}$ . В табл.1 и на рис.2 представлены данные, характеризующие концентрацию  $^{137}\text{Cs}$  и естественных радионуклидов в почве в некоторых точках наблюдения. В табл.2 приведены средние за три года наблюдения данные по содержанию цезия-137 и других радионуклидов в точках, удаленных от Армянской АЭС.

Табл.2. Содержание радионуклидов в почве в контрольных точках.

| Контрольные точки  | Расстояние от АЭС, км | <sup>137</sup> Cs | <sup>40</sup> K | <sup>226</sup> Ra | <sup>232</sup> Th |
|--------------------|-----------------------|-------------------|-----------------|-------------------|-------------------|
|                    |                       | Бк/м <sup>2</sup> | Бк/кг           | Бк/кг             | Бк/кг             |
| с. Айгешат         | 15                    | 490               | 510             | 26,2              | 48,7              |
| с. Муган           | 24                    | 472               | 427             | 30,6              | 44,5              |
| г. Эчмиадзин       | 18                    | 487               | 469             | 35,4              | 48,6              |
| г. Ереван          | 38                    | 510               | 515             | 31,7              | 34,3              |
| с. Наири           | 26                    | 487               | 476             | 29,8              | 47,8              |
| Среднее содержание |                       | 489,2             | 479,4           | 30,74             | 44,78             |

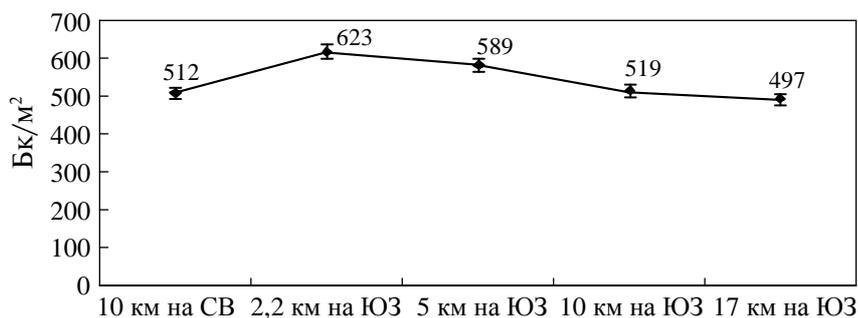


Рис.2. Содержание <sup>137</sup>Cs в верхнем пятисантиметровом слое почвы в некоторых точках наблюдения в районе расположения Армянской АЭС, усредненное за весь период наблюдения.

Согласно ранее высказанному предположению, максимальное содержание <sup>137</sup>Cs в почве ожидалось в точке М-1, поскольку в этой точке на глобальные выпадения (равномерно распределенные по всей зоне наблюдения) накладывалось максимальное воздействие выбросов с атомной станции. Анализ графика, представленного на рис.2, показывает, что это предположение верно: концентрация цезия в почве в точке, расположенной с наветренной стороны от ААЭС (с. Агавнатун), где нет влияния выбросов ААЭС, мала по сравнению с его концентрацией в точках М-1 и Мецамор. В точке М-1 его концентрация максимальна и, далее, по мере удаления от станции, убывает.

Что касается содержания цезия в атмосферных выпадениях (рис.3), то картина, аналогичная представленной на рис.2, не наблюдается. Дело в том, что с помощью анализа выпадений из атмосферы невозможно проследить длительное воздействие выбросов со станции.

Была определена также эффективная доза облучения населения, проживающего в районе размещения Армянской АЭС от техногенных радионуклидов. Поскольку в объектах окружающей среды из техногенных радионуклидов постоянно присутствовал в основном только <sup>137</sup>Cs (содержание <sup>90</sup>Sr существенно меньше), то в качестве основного радионуклида был выбран <sup>137</sup>Cs. В

итоге, доза облучения населения, проживающего вокруг Армянской атомной станции, обусловленная глобальными выпадениями и радиоактивными выбросами с АЭС, имеет величины, представленные в табл.3.

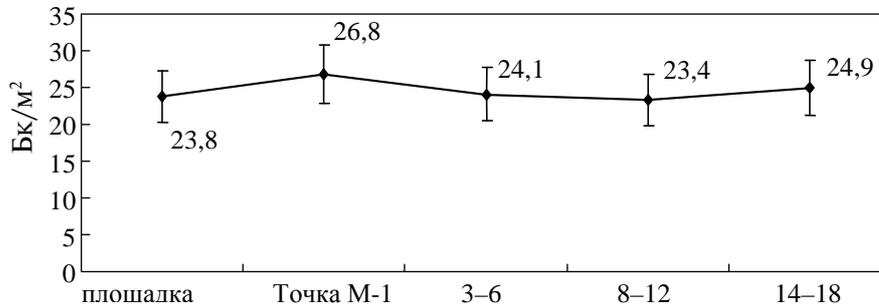


Рис.3. Величина содержания <sup>137</sup>Cs в выпадениях вблизи ААЭС за период с мая 2006 года по август 2007 г.

Табл.3. Дозы облучения от <sup>137</sup>Cs.

| Точки наблюдения   | Доза облучения от <sup>137</sup> Cs (глобальные выпадения и выбросы с АЭС), мкЗв/год |           |                         |       | Средняя по зо-не наблюдения доза внешнего облучения от естественного фона, мкЗв/год |
|--|--|-----------|-------------------------|-------|---|
|  | Внешнее облучение  | Ингаляция | Пероральное поступление | Сумма |   |
| точка М-1  | 1,142  | 0,000117  | 15,7                    | 16,84 |   |
| г. Мецамор   | 1,038  | 0,000117  | 15,7                    | 16,74 |   |
| фоновые значения   | 0,907  | 0,000117  | 15,7                    | 16,61 |   |
| Доза, обусловленная только выбросами АЭС, в точке ее максимального воздействия | 0,235  | --        | 3,14                    | 3,375 | 1314  |

При расчете ингаляционных и пероральных доз принимались средние по зоне наблюдения концентрации цезия в воздухе и продуктах питания.

Таким образом, из данных, приведенных в таблице, следует, что величина дозы внешнего и внутреннего облучения населения, обусловленная выб

росами с АЭС, равна 3,375 мкЗв/год и составляет около 20% от глобальных выпадений и около 0,26% от внешнего облучения, обусловленного естественным фоном. Эти данные хорошо согласуются с данными, приведенными Научным комитетом по действию атомной радиации при ООН [4] (см. табл.4).

Анализ данных удельного содержания  $^{137}\text{Cs}$  в почве показывает, что в точках, расположенных на различных расстояниях в направлении максимального значения усредненной розы ветров, выявляется неравномерность пространственного распределения этой величины. Концентрация  $^{137}\text{Cs}$  в точках, расположенных на этом направлении, изменяется от минимума до максимума, а затем, по мере удаления от станции, плавно уменьшается. В частности, на расстоянии 10 км от ААЭС с наветренной стороны (с. Агавнатун) удельное содержание  $^{137}\text{Cs}$  в почве приблизительно в 1,2 раза меньше, чем в точке М-1. Содержание цезия в почве на этом участке обусловлено только глобальными выпадениями, т.к. он расположен с наветренной стороны от АЭС и на достаточно удаленном расстоянии, и концентрация  $^{137}\text{Cs}$  в почве в этой точке близка к фоновым значениям, полученным в точках, удаленных от АЭС более чем на 50 км. Напротив, в точке М-1 влияние выбросов с АЭС максимально. Следовательно, разница между величинами концентраций цезия в этих точках обусловлена воздействием выбросов с АЭС. По мере удаления от АЭС с подветренной стороны, естественно, это воздействие уменьшается за счет рассеивания выбросов и поэтому разница между М-1 и остальными точками увеличивается. Концентрация цезия по мере удаления от станции уменьшается, приближаясь к фоновому значению.

Табл.4. Средние годовые эффективные эквивалентные дозы от естественных и техногенных источников радиации.

| Естественные | Медицина | Глобальные выпадения | Атомная энергетика |
|--------------|----------|----------------------|--------------------|
| 2 мЗв        | 0,4 мЗв  | 0,02 мЗв             | 0,001 мЗв          |

Согласно данным измерения проб почв, отобранных в точках наблюдения, расположенных на расстоянии более чем 10 км от ААЭС (т.е. точек, где воздействие станции не должно ощущаться), фоновое содержание  $^{137}\text{Cs}$  составляет около 500 Бк/кг.

Итак, можно утверждать, что, согласно данным графика, представленного на рис.2, разница в удельном содержании цезия в почве в вышеуказанных точках наблюдения обусловлена воздействием выбросов с АЭС, уменьшающимся по мере удаления от станции. Причем разница между содержанием  $^{137}\text{Cs}$  в точках М-1, Мецамор и остальными точками наблюдения существенно выше ошибки измерения. Разница содержания  $^{137}\text{Cs}$  в почве в точках М-1 и фоновых точках будет равна 6–7 Бк/кг или 115–120 Бк/м<sup>2</sup>, что составляет около 20% от величины фоновых концентраций, обусловленных глобальными выпадениями.

Исходя из всего вышеизложенного, следует, что в зоне радиусом 17 км, в направлении максимальной повторяемости ветров, в точке вероятной максимальной приземной концентрации выбросов с АЭС (точка М-1) зафиксирован вклад станции в удельное содержание  $^{137}\text{Cs}$  в почве, составляющий примерно 20% от фона, обусловленного глобальными выпадениями.

На основе вышеизложенного можно сделать следующие выводы:

1. Для определения величины воздействия Армянской АЭС на окружающую среду и население необходимо использование специальных методик и длительный период наблюдения за радиационной обстановкой в районе размещения станции.
2. Воздействие Армянской АЭС на население и окружающую среду ничтожно мало по сравнению с остальными внешними факторами радиационного воздействия (естественный фон и глобальные выпадения). В частности, в точке, где оно максимально, оно составляет менее 0,26% от внешнего облучения, обусловленного естественным фоном, и около 20% от глобальных выпадений.
3. На расстоянии более 7–8 км от Армянской АЭС воздействие станции на окружающую среду вообще не проявляется.

Работа выполнена в рамках проекта МНТЦ А-1368.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. **А.А.Моисеев.** Цезий-137. Окружающая среда. человек. М., Энергоатомиздат, 1985.
2. Отчеты “Радиационная обстановка в районе расположения Армянской АЭС” (1978–2007 гг.), Мецамор.
3. **Е.Н.Теверовский, Н.Е.Артемова, А.А.Бондарев** и др. Допустимые выбросы радиоактивных и химических веществ в атмосферу. М., Энергоатомиздат, 1985.
4. Радиация. Дозы, эффекты, риск. М., Мир, 1988.

#### INVESTIGATION OF SPATIAL DISTRIBUTION OF $^{137}\text{Cs}$ IN SOIL IN AREA OF THE ARMENIAN NPP LOCATION

R.M. AVAGYAN, G.G. HAROUTIUNYAN, V.A. ATOYAN, A.V. HOVSEPYAN,  
K.I. PYUSKYULYAN, E.V. CHUBARYAN

The problem of evaluation of the spatial distribution of  $^{137}\text{Cs}$  in soil and direct radiation impact of the Armenian NPP on population living in the NPP location area, as well as on the environment, on the background of global radioactive fallouts and Chernobyl accident aftermaths is solved. The contents of radiation dangerous radionuclide  $^{137}\text{Cs}$  in soil on the territory with the radius of 50 km, including the area near the Armenian nuclear power plant, have been investigated. On the basis of the analysis of meteorological data and calculations of the distance at which radioactive emissions from the nuclear station have the maximal concentration in air, the monitoring points have been chosen. The obtained data, describing the net effect of the nuclear power plant on the population and environment, are in good agreement with data of the United Nations Scientific Committee of Radiation Action.

УДК 535.343

## НЕЛИНЕЙНО-ОПТИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ И СПЕКТРОСКОПИЯ L-НИТРОГИСТИДИНА МОНОГИДРАТА

А.А. ПЕТРОСЯН<sup>1</sup>, Р.А. АПРЕЯН<sup>2</sup>, А.А. ОГАНЕСЯН<sup>2</sup>,  
А.К. АТАНЕСЯН<sup>1</sup>, А.М. ПЕТРОСЯН<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Институт прикладных проблем физики НАН Армении, Ереван

<sup>2</sup> Научно-технологический центр органической и фармацевтической химии  
НАН Армении, Ереван

(Поступила в редакцию 26 мая 2008 г.)

С учетом структурных данных проведено сравнительное исследование колебательных (ИК и Раман) и ЯМР спектров L-нитрогистидина моногидрата (L-NH·H<sub>2</sub>O) и L-гистидина (L-His). Определены нелинейно-оптическая активность и область прозрачности L-NH·H<sub>2</sub>O. Выявлено влияние нитрогруппы на структурные, спектральные и нелинейно-оптические свойства.

### 1. Введение

Кристаллические соли оптически активных аминокислот, в особенности L-аргинина и L-гистидина, привлекают значительное внимание в качестве нелинейно-оптических материалов, благодаря возможности выращивания из водного раствора, широкой области прозрачности, хорошим механическим и термическим свойствам, а также возможности достижения высокой нелинейности путем изменения химического состава. Взаимодействие с азотной кислотой в зависимости от условий реакции может привести к образованию как нитратов L-аргинина [1,2] и L-гистидина [3,4], так и соответствующих нитропроизводных. Нитропроизводные L-аргинина и L-гистидина могут проявлять еще большую нелинейность из-за наличия наряду с электронодонорной аминогруппой также электроноакцепторной нитрогруппы. Хотя нитропроизводные L-аргинина и L-гистидина известны давно, ранее они представляли лишь биохимический интерес и не рассматривались в качестве нелинейно-оптических материалов. Недавно было показано [5,6], что новая форма L-нитроаргинина и некоторые соли на его основе могут представлять значительный интерес в качестве нелинейно-оптических материалов. Было показано, что низкая нелинейно-оптическая активность ранее известного кристалла L-нитроаргинина гидрохлорида моногидрата, а также, возможно, известной формы L-нитроаргинина обусловлена неблагоприятной кристаллической упаковкой (псевдоцентросимметричностью), а не молекулярной структурой. В этой связи представляет интерес также исследование L-нитрогистидина моногидрата (L-NH·H<sub>2</sub>O), структура которого известна [7].

Целью настоящей работы было определение влияния введения нитрогруппы в молекулу L-гистидина на его нелинейно-оптическую активность, а также на колебательные и ЯМР спектры.

## 2. Экспериментальная часть

L-нитрогистидин был получен прямым нитрованием L-гистидина (Sigma Chem. Co.), согласно методике [8]. Препарат был очищен многократной перекристаллизацией из водного раствора. Медленным испарением водного раствора были получены прозрачные кристаллы L-NH·H<sub>2</sub>O с размерами порядка нескольких миллиметров.

Спектры протонного магнитного резонанса были получены на спектрометре ядерного магнитного резонанса Varian Mercury-300VX. Рамановские спектры регистрировались на спектрометре Nicolet 5700 (NXP FT-Raman Module) (число сканирований 256, лазерная мощность на образце 0.01 Вт, разрешение 4 см<sup>-1</sup>). Тот же спектрометр был использован для измерения ИК спектров методом суспензии в вазелиновом масле в интервале 650-400 см<sup>-1</sup> (число сканирований 32, разрешение 2 см<sup>-1</sup>). Спектры нарушенного полного внутреннего отражения (Attenuated total reflection Fourier-transform infrared spectra (FTIR ATR)) были измерены на спектрометре Nicolet "Nexus" с призмой из ZnSe (4000-650 см<sup>-1</sup>, число сканирований 32, разрешение 4 см<sup>-1</sup>). Спектры пропускания в ультрафиолетовой и видимой области были получены на спектрофотометре "Helios Gamma".

Нелинейно-оптическая активность измерялась модифицированным методом порошка [9] на установке, схема которой приведена в разделе 3.4.

## 3. Результаты и обсуждение

### 3.1. Строение молекул L-гистидина и L-нитрогистидина

Для удобства обсуждения полученных результатов полезно представить молекулярные структуры L-гистидина и L-нитрогистидина моногидрата. На рис.1 приведены схематические молекулярные структуры. Указаны длины связей в Å, взятые из работ [7,10]. Как видно из рис.1, как L-His, так и L-NH·H<sub>2</sub>O существуют в кристалле в виде биполярного иона с отрицательно заряженной депротонированной карбоксилатной группой COO<sup>-</sup> и протонированной группой NH<sub>3</sub><sup>+</sup>. Нитрогруппа замещает атом водорода при атоме углерода C5. Наличие нитрогруппы с сильным электроноакцепторным свойством оказывает существенное влияние на распределение электронной плотности в имидазольном кольце. В первую очередь это проявляется в том, что атом водорода, связанный с атомом азота N2 в молекуле L-гистидина, оказывается присоединенным к атому N3, в результате чего двойная связь перемещается от связи N3(C6 к связи C6(N2). Имеет место также частичная де-локализация электронной плотности связи C4=C5, что отражается в укорочении связей C4-N3 и C5-N2. Длины связей C=O в обеих структурах (~2.5 Å) типичны для группы COO<sup>-</sup>.

В структуре кристалла L-гистидина все активные атомы водорода вовлечены в водородные связи. Атом кислорода O1 образует водородную связь O1...H-N2. Атом азота N3 образует внутримолекулярную водородную связь N3...H-N1. Два других атома

водорода  $\text{N1H}_3^+$  образуют водородные связи с атомами кислорода O2 двух ближайших молекул.

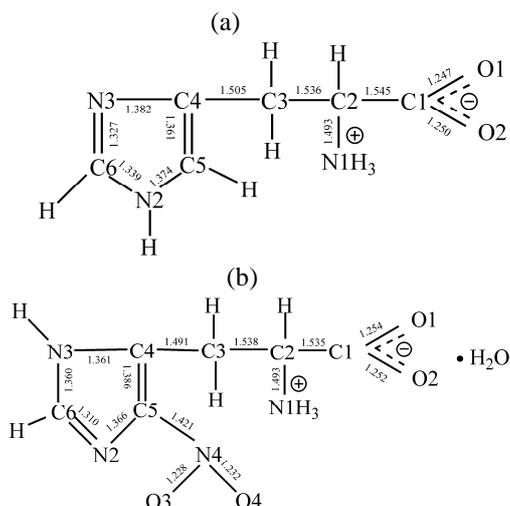


Рис.1. Схематическое строение молекул L-гистидина (a) и L-нитрогистидина моногидрата (b).

В структуре кристалла  $\text{L-NH}\cdot\text{H}_2\text{O}$  также все активные атомы водорода вовлечены в водородные связи. Молекула L-нитрогистидина в качестве протонодонора образует водородные связи с двумя ближайшими молекулами, а также с молекулой воды. Молекула воды образует водородные связи с тремя ближайшими молекулами L-нитрогистидина. В качестве акцептора протона молекула воды образует водородную связь  $\text{OW}\dots\text{H(B)-N1}$  с расстоянием  $2.850 \text{ \AA}$  ( $\text{OW}\dots\text{N1}$ ), а в качестве донора образует водородные связи  $\text{OW-H(A)}\dots\text{O2}$  и  $\text{OW-H(B)}\dots\text{O1}$  с расстояниями  $2.848 \text{ \AA}$  ( $\text{OW}\dots\text{O2}$ ) и  $2.907 \text{ \AA}$  ( $\text{OW}\dots\text{O1}$ ). Атом O(1), кроме того, образует водородную связь  $\text{N1-H(A)}\dots\text{O1}$  с расстоянием  $2.903 \text{ \AA}$  ( $\text{N1}\dots\text{O1}$ ). Оставшийся атом водорода группы  $\text{N1H}_3^+$  образует с атомом азота имидазольной группы водородную связь  $\text{N1-H(C)}\dots\text{N2}$  с расстоянием  $2.987 \text{ \AA}$  ( $\text{N1}\dots\text{N2}$ ). Наиболее сильной водородной связью является связь  $\text{N3(H)}\dots\text{O2}$  с расстоянием  $2.677 \text{ \AA}$  ( $\text{N3}\dots\text{O2}$ ). Таким образом, атомы O1 и O2 образуют по две водородные связи.

### 3.2. Спектры протонного магнитного резонанса

На рис.2 приведены спектры ЯМР  $^1\text{H}$  растворов L-His (a) и  $\text{L-NH}\cdot\text{H}_2\text{O}$  (b) в  $\text{D}_2\text{O}$ . Из-за быстрого обмена атомов водорода, связанных с атомом азота, с атомами дейтерия в спектре видны лишь резонансные сигналы атомов водорода, связанных с атомами углерода.

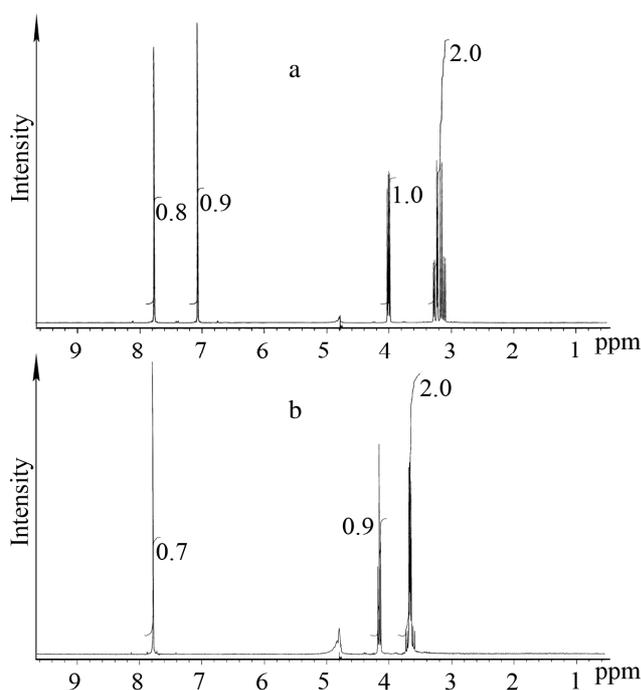


Рис.2. Спектры протонного магнитного резонанса растворов L-гистидина (a) и L-нитрогистидина моногидрата (b) в D<sub>2</sub>O.

Положение сигналов и интегральные интенсивности позволяют сделать отнесения резонансных линий. Сигнал группы CH<sub>2</sub> в спектре L-гистидина находится вблизи 3.2 ppm, а сигнал группы CH - вблизи 4.0 ppm из-за влияния группы NH<sub>3</sub><sup>+</sup>. Узкий синглет со значением химического сдвига 7.1 ppm относится к группе C(5)H, а сигнал при 7.8 ppm (к группе C(6)H ими-дазольного кольца. Смещение сигнала протона C(6)H в слабopольную область обусловлено наличием соседних, более электроотрицательных атомов азота N(2) и N(3). В спектре L-нитрогистидина сигналы групп CH<sub>2</sub> и CH несколько сдвинуты в область слабых полей (3.65 ppm и 4.18 ppm, соответственно). Сигнал группы C(6)H не изменил своего положения, а сигнал при 7.1 ppm, как и ожидалось, отсутствует, что подтверждает сделанное отнесение.

### 3.3. Колебательные спектры

Инфракрасные (ИК) спектры поглощения и спектры рамановского (комбинационного) рассеяния L-гистидина и L-нитрогистидина моногидрата приведены на рис.3 и 4, соответственно. Сравнение со спектром L-гистидина, который достаточно изучен [11], облегчает интерпретацию колебательных спектров L-нитрогистидина. В высокочастотной области (3500(2500 см<sup>-1</sup>) находятся полосы, обусловленные валентными колебаниями OH, NH и CH связей. Полосу поглощения при 3430 см<sup>-1</sup>, которой в спектре рассеяния отвечает слабый пик при 3440 см<sup>-1</sup>, мы относим к валентным колебаниям ν(OH) молекулы воды. В спектре L-гистидина эта полоса отсутствует.

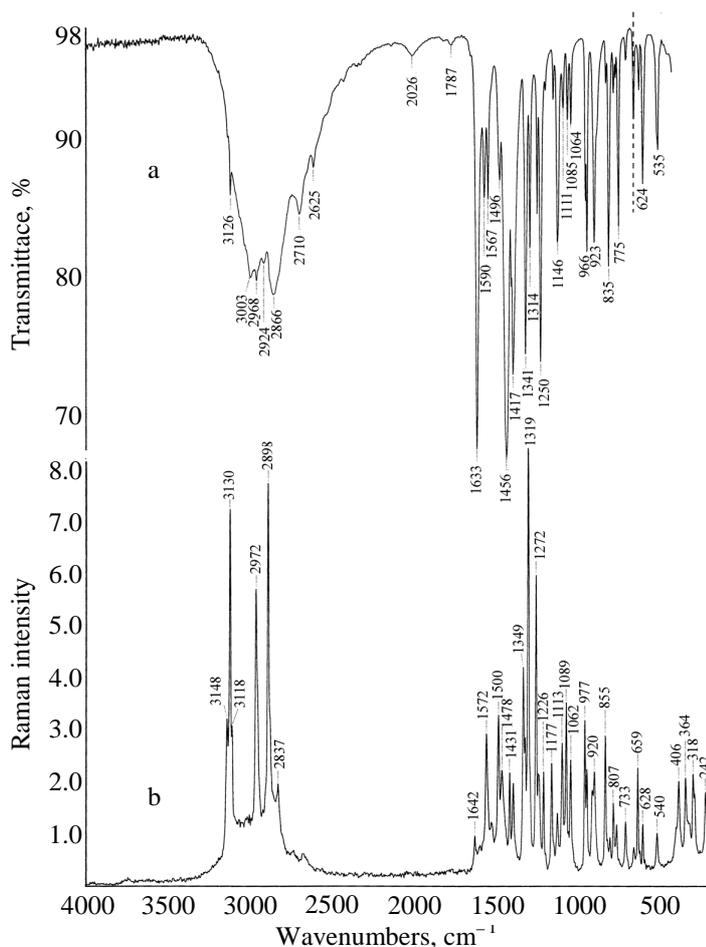


Рис.3. Инфракрасный (а) и рамановский (б) спектры L-гистидина.

Мы исследовали также процесс дегидратации  $\text{L-NH}\cdot\text{H}_2\text{O}$  методом термического анализа. Потеря кристаллизационной воды происходит выше  $185^\circ\text{C}$ . Однако полностью обезвожить образец не удастся, т.к. эндотермический процесс, связанный с потерей воды, резко переходит в экзотермический процесс, связанный с разложением L-нитрогистидина в интервале  $185^\circ\text{C}$ – $220^\circ\text{C}$ . В спектре частично обезвоженного образца, нагретого до  $185^\circ\text{C}$ , наблюдается значительное уменьшение полосы при  $3430\text{ cm}^{-1}$ , что подтверждает его отнесение. Узкий пик при  $3157\text{ cm}^{-1}$ , которому в спектре рассеяния соответствует пик при  $3158\text{ cm}^{-1}$ , относится к валентному колебанию  $\nu(\text{CH})$  связи C(6)-H имидазольного кольца. Аналогичные пики имеются также в ИК спектре (при  $3126\text{ cm}^{-1}$ ) и в рамановском спектре (при  $3130\text{ cm}^{-1}$ ) L-гистидина (рис.3). Наличие этих узких полос характерно для СН связей имидазольного кольца: они наблюдаются в имидазоле и других солях L-гистидина [12]. Ниже этого пика находятся полосы, обусловленные валентными колебаниями групп

NH и NH<sub>3</sub><sup>+</sup>, а также C(H связей групп CH и CH<sub>2</sub>, не входящих в имидазольное кольцо. Уширение полосы в ИК спектре обусловлено водо-родными связями N-H...O. В спектре рассеяния линии  $\nu(\text{CH})$  колебаний, как правило, бывают более интенсивными. Поэтому наиболее интенсивные пики при 2981 и 2945 см<sup>-1</sup> мы относим к  $\nu(\text{CH})$  колебаниям, а пик при 3020 см<sup>-1</sup>, которому отвечает пик при 3004 см<sup>-1</sup> в ИК спектре, к  $\nu(\text{NH})$  колебаниям. Полосы в средней области ниже 2841 см<sup>-1</sup> и кончая пиком при 1673 см<sup>-1</sup> мы относим к обертонам и комбинационным частотам. Как это обычно наблюдается, в рамановском спектре они почти не проявляются. В области 1633(400 см<sup>-1</sup> находятся полосы, обусловленные валентными колебаниями связей атомов углерода и азота, связанных с более тяжелыми атомами (C-O, C=C, C-N, N-O), а также различными деформационными колебаниями.

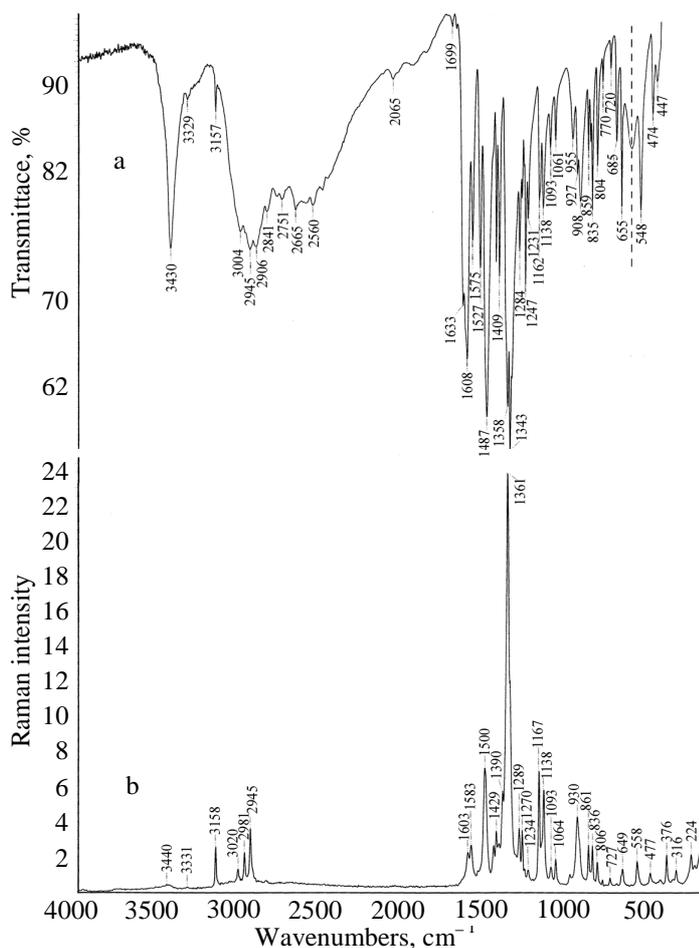


Рис.4. Инфракрасный (а) и рамановский (б) спектры L-нитрогистидина моногидрата.

Карбоксилатная ( $\text{COO}^-$ ) и нитрогруппа ( $\text{NO}_2$ ) имеют характерные полосы, обусловленные асимметричными и симметричными валентными колебаниями. В ИК спектре L-гистидина (рис.3)  $\nu_{\text{as}}(\text{COO}^-)$  и  $\nu_{\text{s}}(\text{COO}^-)$  находятся при  $1633 \text{ см}^{-1}$  и  $1417 \text{ см}^{-1}$ , соответственно. Соответствующие полосы в ИК спектре L-NH $\cdot$ H $_2$ O находятся при  $1633 \text{ см}^{-1}$  и  $1409 \text{ см}^{-1}$ . Нитрогруппа характеризуется интенсивными полосами поглощения  $\nu_{\text{as}}(\text{NO}_2)$  и  $\nu_{\text{s}}(\text{NO}_2)$  в ИК спектре, из которых в рамановском спектре интенсивным является лишь  $\nu_{\text{s}}(\text{NO}_2)$  [5,6]. На этой основе доминирующую линию с волновым числом  $1361 \text{ см}^{-1}$  мы относим к валентному симметричному колебанию нитрогруппы.

### 3.4. Нелинейно-оптическая активность и область прозрачности

Нелинейно-оптическая активность измерялась на установке, схема которой показана на рис.5. В качестве источника излучения был использован импульсный YAG:Nd лазер с пассивной модуляцией добротности (длительность импульсов 20 нс, частота повторения 8 Гц). Измерительная ячейка 3 состояла из двух тонких стеклянных пластинок, между которыми находится образец в виде порошка. Фракция с размерами частиц в интервале 60-100 мкм была получена при помощи набора сит. Постоянная толщина слоя порошка обеспечивалась прокладкой толщиной 0.2 мм. Светофильтр 2 служил для пропускания излучения лазера 1064 нм. Излучение второй гармоники при помощи линзы 4 направлялось на фотоумножитель 6. Свето-фильтр 5 поглощал инфракрасное излучение и пропускал излучение второй гармоники (532 нм). В качестве образца для сравнения был использован порошок дигидрофосфата калия (KDP). Сигналы от фотоумножителя дополнительно усиливались и подавались на аналого-цифровой преобразователь 8, который синхронизирован с лазером 1. Компьютер 9 позволял задавать число импульсов (в данном эксперименте использованы 300 импульсов), обеспечивал суммирование и усреднение сигналов и представление результатов в табличном и графическом виде.

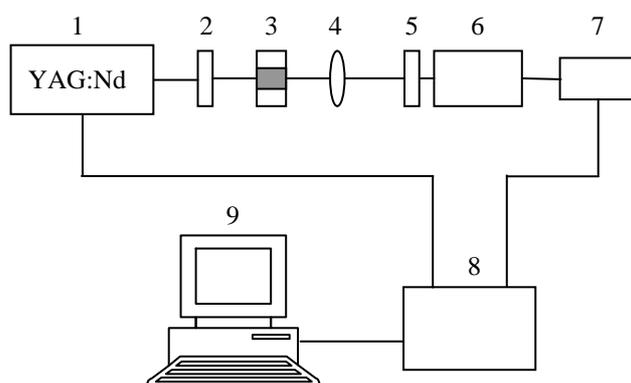


Рис.5. Схема экспериментальной установки для определения эффективности нелинейного преобразования.

Результаты измерений приведены в табл.1, откуда видно, что эффективность преобразования L-нитрогистидина моногидрата вчетверо выше, чем у эталонного образца KDP. Хотя это значение ниже, чем в образце  $\beta$ -формы L-нитроаргинина, однако относительное увеличение по сравнению с L-гистидином существенно больше, чем увеличение L-нитроаргинина по сравнению с L-аргинином. Таким образом, введение нитрогруппы в молекулу L-гистидина при отсутствии псевдоцентросимметрии (пространственная группа L-NH $\cdot$ H<sub>2</sub>O P2<sub>1</sub>2<sub>1</sub>2<sub>1</sub>, Z=4 [8]) приводит к существенному увеличению квадратичной нелинейности.

Табл.1. Нелинейно-оптическая активность L-аргинина, L-гистидина и их нитропроизводных.

| Образец                          | $I^{2\omega}/I_{KDP}^{2\omega}$ | Ссылки        |
|----------------------------------|---------------------------------|---------------|
| L-аргинин                        | 0.6                             | [13]          |
| L-нитроаргинин ( $\beta$ -форма) | 10.0                            | [13]          |
| L-гистидин                       | 0.1                             | [14]          |
| L-нитрогистидин моногидрат       | 4.3                             | Данная работа |

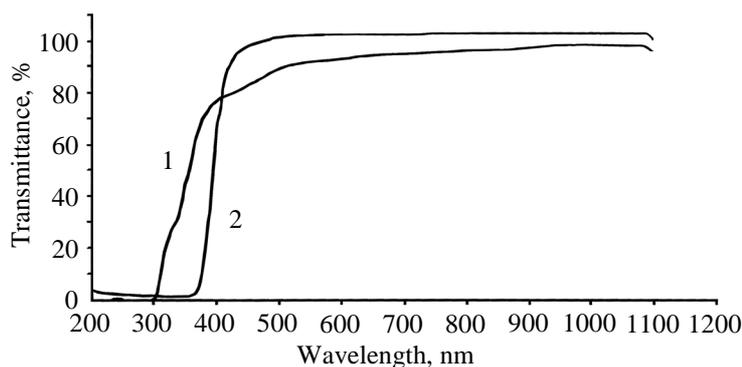


Рис.6. Области прозрачности водных растворов L-гистидина (1) и L-нитрогистидина (2).

Существенное увеличение нелинейности обычно приводит к смещению края поглощения в сторону сужения области прозрачности. Сравнение спектров пропускания водных растворов L-гистидина и L-нитрогистидина (рис.6) действительно показывает, что это правило имеет место также и в данном случае.

#### 4. Заключение

L-нитрогистидин моногидрат (L-NH $\cdot$ H<sub>2</sub>O) исследован в качестве нелинейно-оптического материала. Колебательные спектры и спектры протонного магнитного резонанса L-нитрогистидина и L-гистидина измерены и проанализированы с учетом их структур. Введение нитрогруппы приводит к существенному увеличению нелинейно-

оптических свойств, что, однако, сопровождается некоторым сужением области прозрачности.

Данная работа выполнена благодаря финансовой поддержке Правительства Армении (грант № 0233). Авторы благодарны В.О.Топузяну за полезные советы при синтезе L-нитрогистидина, а также Г.Г.Мартirosяну и Г.А.Паносяну за помощь при регистрации колебательных и ЯМР спектров.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. **S.S.Terzyan, H.A.Karapetyan, R.P.Sukiasyan, A.M.Petrosyan.** J. Molec. Structure, **687**, 111 (2004).
2. **A.M.Petrosyan, R.P.Sukiasyan.** J. Molec. Structure, **874**, 51 (2008).
3. **H.A.Petrosyan, H.A.Karapetyan, M.Yu.Antipin, A.M.Petrosyan.** J. Crystal Growth, **275**, e1919 (2005).
4. **H.A.Petrosyan, H.A.Karapetyan, A.M.Petrosyan.** J. Molec. Structure, **794**, 160 (2006).
5. **R.A.Apreyan, H.A.Karapetyan, A.M.Petrosyan.** J. Molec. Structure, **874**, 187 (2008).
6. **R.A.Apreyan, H.A.Karapetyan, A.M.Petrosyan.** J. Molec. Structure, **875**, 272 (2008).
7. **X.Solans, M.Font-Altaba.** Acta Crystallogr., **B37**, 2111 (1981).
8. **W.Tautz, S.Teitel, A.Brossi.** J. Med. Chem., **16**, 705 (1973).
9. **S.K.Kurtz, T.T.Perry.** J. Appl. Phys., **39**, 3798 (1968).
10. **J.J.Madden, E.L.McGandy, N.Seeman.** Acta Crystallogr., **B28**, 2377 (1972).
11. **J.G.Mesu, T.Visser, et al.** Vibrational Spectroscopy, **39**, 114 (2005).
12. **A.M.Petrosyan.** Vibrational Spectroscopy, **43**, 284 (2007).
13. **R.A.Apreyan, H.A.Karapetyan, A.M.Petrosyan.** Technical Digest of XIX Intern. Conf. on Coherent and Nonlinear Optics (ICONO 2007), 2007, Minsk, pp. 110-11.
14. **S.Gokul Raj, G.Ramesh Kumar, et al.** Phys. stat. sol. (b), **244**, 558 (2007).

#### L-ՆԻՏՐՈՅԻՍՏԻՆԻ ՄԻԱԶԻԴՐԱՏԻ ՈՉ ԳԾՍՅԻՆ ՕՊՏԻԿԱԿԱՆ ԱԿՏԻՎՈՒԹՅՈՒՆԸ ԵՎ ՍՊԵԿՏՐԱԶՆՆՈՒԹՅՈՒՆԸ

Հ.Ա. ՊԵՏՐՈՍՅԱՆ, Ռ.Ա. ԱՓՐԵՍՅԱՆ,  
Ա.Ա. ԱԹԱՆԵՍՅԱՆ, Ա.Մ. ՊԵՏՐՈՍՅԱՆ

Կատարված է L-նիտրոհիստիդին միահիդրատի (L-NHqH<sub>2</sub>O) և L-հիստիդինի (L-His) տատանողական (ԻԿ և Ռաման) և միջուկային մագնիսական ռեզոնանսի սպեկտրների համեմատական ուսումնասիրությունը՝ հաշվի առնելով կառուցվածքային տվյալները: Չափված են L-NHqH<sub>2</sub>O-ի ոչ գծային օպտիկական ակտիվությունը և թափանցելիության տիրույթը: Քննարկված է նիտրո-խմբի ազդեցությունը կառուցվածքային, սպեկտրալ և ոչ գծային հատկությունների վրա:

#### NONLINEAR OPTICAL ACTIVITY AND SPECTROSCOPY OF L-NITROHISTIDINE MONOHYDRATE

H.A. PETROSYAN, R.A. APREYAN, A.A. HOVHANNESYAN,  
A.K. ATANESYAN, A.M. PETROSYAN

Comparative study of vibrational (IR and Raman) and nuclear magnetic resonance spectra of L-nitrohistidine monohydrate and L-histidine is carried out, taking into account the structural data. The nonlinear optical activity and transparency window of L-NH·H<sub>2</sub>O is measured. The influence of nitrogroup on the structural, spectral and nonlinear optical properties is discussed.

## К 70-ЛЕТИЮ АКАДЕМИКА Д.М. СЕДРАКЯНА

Исполняется 70 лет со дня рождения и 45 лет научно-преподавательской деятельности известного ученого и преподавателя, в течение многих лет возглавляющего кафедру общей физики Ереванского государственного университета, доктора физико-математических наук, профессора, академика Национальной Академии Наук Армении Давида Мгеровича Седракяна.

Д.М.Седракян родился в Ереване 9 декабря 1938 года. В 1955 г. после окончания с золотой медалью ереванской средней школы № 4 поступает на физико-математический факультет ЕГУ по отделению «Физика». В 1960 г. с отличием заканчивает Ереванский государственный университет и в 1962 г. поступает в аспирантуру Физического института АН СССР имени П.Н.Лебедева, где и защищает кандидатскую диссертацию в 1964 г. По окончании аспирантуры в 1964 г. Д.Седракян возвращается в Ереван и начинает свою трудовую деятельность на должности доцента кафедры теоретической физики ЕГУ.

В 1972 г. он успешно защищает докторскую диссертацию и получает звание профессора. В 1986-1994 гг. Д.Седракян работает в Президиуме Академии Наук Арм. ССР, вначале на должности академика-секретаря, а затем вице-президента. Начиная с 1994 г. он вновь переходит на работу в ЕГУ и руководит работой кафедры общей физики.

Значительны успехи Д.Седракяна в науке и, в первую очередь, в области астрофизики. Результаты его исследований относятся к изучению вращения сверхплотных небесных тел, генерации магнитных полей во вращающихся нейтронных звездах, механизмов радиоизлучения пульсаров. Научную деятельность Д.М.Седракяна можно разделить на три основных периода.

В первом периоде совместно с академиком Э.В.Чубаряном им была построена описываемая однопараметрическим уравнением состояния теория вращения звездных конфигураций как в ньютоновской, так и в эйнштейновской теории. Решение, полученное Д.Седракяном, послужило основанием для предложения новой методики расчета параметров вращательных конфигураций, которая далее была применена для расчета новых моделей вращающихся небесных тел.

С 1973 по 1993 гг. Д.Седракян занимается изучением физических явлений внутри нейтронной звезды, предлагает механизм генерации магнитных полей в пульсарах, изучает динамику их вращательного движения. Д.Седракяном был предложен новый механизм радиоизлучения пульсаров, который принципиально отличается от всех других ранее предложенных. По Седракяну, излучение образуется в приграничной области между ядром и оболочкой звезды и излучается в виде магнитоакустических волн. Его исследования были также посвящены процессам, связанным с наблюдаемым замедлением вращательного движения пульсаров. Д.Седракяном был предложен механизм торможения вращательного движения пульсаров, которое сопровождается «скачками» угловой скорости пульсаров (глич). Им, совместно с его учениками, была создана теория этих «скачков», которая подтверждается наблюдениями.

1994-ый год явился для Д.Седракяна началом новой научной деятельности: параллельно с исследованием теории нейтронных звезд, он вместе со своими сотрудниками проводит серию научных исследований, которые были посвящены

расчетам энергетического спектра электронов, а также расчету коэффициентов прохождения и отражения электронов, наряду с изучением их локализации.

Плодотворной является также преподавательская деятельность Д.Седракяна. За тот период, когда Д.Седракян возглавлял кафедру общей физики, 12 сотрудников защитили докторские диссертации, 11 – кандидатские. С 1977 г. и по сей день на кафедре функционирует научно-методический семи-нар, где ученые докладывают важнейшие результаты своих исследований.

Более 250-и научных трудов академика Давида Мгеровича Седракяна приобрели всемирную известность. Им получены приглашения для чтения лекций, докладов, проведения совместных научно-исследовательских работ из Франции, США, Германии, Англии и других стран. Он был активным участником и организатором ряда научных конференций и семинаров как в Армении, так и за рубежом.

Долгое время Д.Седракян был главным редактором научного журнала «Доклады АН Арм. ССР». В настоящее время он является главным редактором международного журнала «Астрофизика» НАН РА, членом двух специализированных советов по защите докторских диссертаций. Награжден медалью «Ананя Ширакаци».

Д.Седракян – человек высоких нравственных качеств: честный, неподкупный, высоких гражданских принципов и деятельного темперамента. Большой патриот, Д.Седракян всегда бурно реагирует на все общественные процессы, никогда не подлаживается под ситуацию и всегда находится в гуще событий.

В.А.Амбарцумян так охарактеризовал Д.М.Седракяна на заседании Ученого Совета Бюраканской обсерватории в 1989 г.: «Наша республика в лице Д.Седракяна имеет активного организатора науки, многосторонне развитого исследователя-ученого, педагога, исследования которого вносят достойный вклад в отечественную науку».

Редколлегия нашего журнала, поздравляя Давида Мгеровича Седракяна с 70-летним юбилеем, желает ему крепкого здоровья и новых успехов в науке.

*Редколлегия*