

ՓԻԶԻԿԱ • ՖԻԶԻԿԱ • PHYSICS



ИЗВЕСТИЯ
НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК АРМЕНИИ

ՏԵՂԵԿԱԳԻՐ
ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ԳԻՏՈՒԴՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԶԳԱՅԻՆ ԱԿԱԴԵՄԻԱՅԻ

PROCEEDINGS
OF NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF ARMENIA

47, N6, 2012

АЖС 413

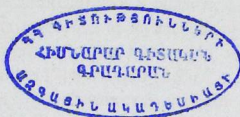
ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ՀԱՆՐԱՊԵՏՈՒԹՅԱՆ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԶԳԱՅԻՆ ԱԿԱԴԵՄԻԱ
НАЦИОНАЛЬНАЯ АКАДЕМИЯ НАУК РЕСПУБЛИКИ АРМЕНИЯ

ՏԵՂԵԿԱԳԻՐ ИЗВЕСТИЯ
ՖԻԶԻԿԱ ФИЗИКА

ՀԱՏՈՐ ТОМ

47

№ 6

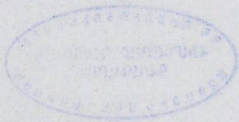


ՀՀ ԳԱՍ "ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆ" ՀՐԱՏԱՐԱԿՉՈՒԹՅՈՒՆ

ИЗДАТЕЛЬСТВО "ТИТУТЮН" НАН РА

ԵՐԵՎԱՆ ԵՐԵՎԱՆ

2012



© Национальная Академия наук Армении
Известия НАН Армении, Физика

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

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

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

ԽՐԱԳՐԱԿԱՆ ԿՈՆԵԳԻԱ

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

EDITORIAL BOARD

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

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

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

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

УДК 530.12

ИНВАРИАНТНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ОБОБЩЕННОГО ИМПУЛЬСА

В.М. МЫХИТАРЯН

Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак

(Поступила в редакцию 26 января 2012 г.)

Предложено релятивистски инвариантное представление обобщенного импульса частицы во внешнем поле. В таком представлении учитывается зависимость потенциалов взаимодействия частицы с полем от скорости движения частицы. Установлено точное соответствие выражений энергии и потенциальной энергии для классического гамильтониана, что делает идентичным решения задач механики при релятивистском и нерелятивистском подходах. Инвариантность предлагаемого представления обобщенного импульса позволяет эквивалентно описывать физическую систему в геометрически сопряженных пространствах кинематических и динамических переменных.

1. Введение

Вопросы теории движения заряда в переменном магнитном поле, помимо теоретического, имеют важное прикладное значение в областях ускорения частиц (бетатрон, линейный индукционный ускоритель и т.п.) [1,2], физики плазмы [3], индукционного разряда и обработки материалов [4]. В последние годы ведутся интенсивные исследования в области физики и техники индукционного разряда, ускорения плазмы и возбуждения сред индукцией магнитного поля с целью создания мощных плазмотронов [5], плазмореактивных двигателей [6], источников излучения [7] и лазеров [8,9].

Хотя индукционный разряд известен уже 125 лет [10], а индукционный ускоритель электронов – бетатрон, 90 лет [10], имеющаяся на сегодня теория движения и ускорения зарядов в переменном магнитном поле неудовлетворительно описывает реальные процессы ускорения и нагрева зарядов индуцированным электрическим полем. В частности, условие Видероз для кругового движения заряда в бетатроне при отношении полей 2:1 так и не было подтверждено и теория ускорения заряда индуцированным электрическим полем в бетатроне не нашло соответствующего развития: решались только задачи устойчивости движения [1,10]. А при индукционном разряде не объясняется само существование разряда в центральной части соленоида, где индуцированное электрическое поле и ток равны нулю [7].

Последовательное построение теории движения зарядов в электромагнитных полях базируется на уравнениях электромагнитных полей и уравнении

движения зарядов. Если рассматривается движение одной заряженной частицы в заданном поле, то можно считать, что токи и поля самой частицы, в известных пределах, не влияют на движение частицы. В такой постановке решение задачи можно разделить на два этапа:

- I. Нахождение электрического и магнитного полей $\mathbf{E}$ и $\mathbf{B}$ для заданных граничных условий и источников,
- II. Решение уравнения движения частицы с массой m и зарядом q в полях $\mathbf{E}$ и $\mathbf{B}$.

Электромагнитные поля описываются уравнениями Максвелла, которые в представлении Герца–Хевисайда имеют вид

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \mathbf{B} &= \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}, \quad \operatorname{div} \mathbf{E} = 4\pi\rho, \\ \operatorname{rot} \mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad \operatorname{div} \mathbf{B} = 0. \end{aligned} \quad (1)$$

Поля $\mathbf{E}$ и $\mathbf{B}$ являются решениями этих уравнений при заданных граничных условиях и источниках ρ и $\mathbf{j}$. Эти поля существуют независимо от наличия рассматриваемой частицы и состояния ее движения. Из уравнений Максвелла направления и величины полей определяются только симметрией и граничными условиями задачи.

Следующий этап – это решение уравнения движения заряженной частицы при заданных полях

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{F}(q, \mathbf{r}, \mathbf{v}, \mathbf{E}, \mathbf{B}), \quad (2)$$

в котором еще предстоит определить, как зависит действующая на движущийся заряд сила $\mathbf{F}$ от скорости частицы $\mathbf{v}$, заряда q и полей $\mathbf{E}$, $\mathbf{B}$. Ни эта зависимость, ни само уравнение движения уже не связаны с уравнениями Максвелла (поля $\mathbf{E}$ и $\mathbf{B}$ уже заданы и присутствуют), поэтому для определения силы в (2) следует использовать другие законы. Обычно это закон Фарадея, который формулируется следующим образом: Работа силы индукции $\mathbf{F}_I$ над зарядом q по замкнутой кривой L определяется скоростью изменения потока Φ магнитного поля $\mathbf{B}$ через площадь S замкнутой кривой:

$$\oint_L \mathbf{F}_I \cdot d\mathbf{L} = -\frac{q}{c} \frac{d\Phi}{dt} = -\frac{q}{c} \frac{d}{dt} \iint_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S}, \quad (3)$$

вне зависимости от причин изменения этого потока.

Такая формулировка объединяет два различных явления: возникновение электрического поля в некоторой точке пространства при изменении во времени магнитного поля в этой точке и возникновение силы, действующей на заряженную частицу при ее движении в переменном или постоянном магнитном поле.

Выраженные из (1) в интегральной форме соотношения

$$\oint_L \mathbf{E} \cdot d\mathbf{L} = -\frac{1}{c} \iint_S \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} d\mathbf{S} \quad \text{или} \quad \oint_L \mathbf{B} \cdot d\mathbf{L} = \frac{1}{c} \iint_S \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} d\mathbf{S} \quad (4)$$

с частной производной под интегралом выражают только свойства самих полей и для выражения этих свойств нет нужды в посторонней частице с зарядом q и массой m или ее движении. Это есть свойство самих полей, а не свойство взаимодействия полей с заряженной частицей или эффект движения частицы. Вопрос о том, какими свойствами обладает взаимодействие полей с частицей, не может быть обсужден в рамках уравнений Максвелла, так как в уравнениях полей рассматриваемая частица просто не существует.

Р. Фейнман, описывая попытки объединения закона Фарадея (3) и свойства полей (4), пишет, что такое объединение должно исходить из "глубокого единого основополагающего принципа. Но в данном случае какого-либо особого глубокого принципа не видно. Мы должны воспринимать "правило" как совместный эффект двух совершенно различных явлений".

Предложенный еще в 1922 г. Рольфом Видероз индукционный ускоритель электронов – бетатрон [1,10], должен был напрямую подтвердить формулу силы Лоренца

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = q\mathbf{E} + \frac{q}{c}[\mathbf{v} \times \mathbf{B}] \quad (5)$$

в случае переменных магнитных полей. Из формулы следует, что для обеспечения кругового движения электрона по орбите в переменном магнитном поле, среднее значение отклоняющего поля должно находиться в соотношении со значением поля на циклической орбите (то есть с ускоряющим полем) как 2:1 – соотношение Видероз. Но на своей точно собранной установке Видероз "ни одного ускоренного электрона не увидел" и отказался от дальнейших попыток осуществить свой замысел [11]. За последующие 20 лет ученым так и не удалось получить хоть один виток ускоренного индукцией магнитного поля электрона, хотя и условие кругового движения Видероз напрямую следовало из формулы Лоренца (5).

И только в 1941 г. Д.В. Керст и Р. Сербер сообщили о создании работающего бетатрона с энергией ускорения 2.3 МэВ [12,13]. Они решили задачу в лоб – создали неравномерное распределение магнитного поля (яму) на орбите и выяснили, что для удержания электрона на орбите нужны поля, спадающие в зависимости от радиуса r вблизи орбиты как r^{-n} , где $1 > n > 0$. Устойчивость орбиты в неоднородном магнитном поле уже не определялась условием Видероз, а современные бетатроны работают почти при всяком соотношении полей – соответствующим выбором неоднородности магнитного поля на орбите всегда можно получить устойчивое движение.

Расчеты Р. Видероз и В.В. Ясинского по ускорению электрона индуцированным электрическим полем (трансформаторный подход) так и не дали соответствующих результатов и от таковых отказались. А Д.В. Керст, Р. Сербер,

Я.П. Терлецкий и другие развили теорию индукционного ускорения, рассматривая только условия устойчивого движения одного электрона при его малых отклонениях от равновесной орбиты в неоднородном магнитном поле (барьере) [1]. И то, что при отношении полей 2:1 не обеспечивается хоть какое-то многократное ускорение (даже один устойчивый виток!), наводит на мысль о принципиальном ограничении в самой основе вывода условия Видероз – в формуле силы Лоренца (5) в случае переменных магнитных полей.

При описании явлений магнитного резонанса, когда рассматривается движение магнитного момента в переменном магнитном поле, тоже возникают принципиальные трудности. Известно, что уравнение движения магнитного момента в виде

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = -[\boldsymbol{\omega}_L \times \mathbf{L}] \quad (6)$$

(где $\boldsymbol{\omega}_L = (q/2mc)\mathbf{B}$ – ларморовская угловая скорость вращения) относится к случаю постоянного магнитного поля (теорема Лармора) [14]. А если умножить уравнение (6) на $\mathbf{L}$ скалярно, то получается $\mathbf{L}_2 = \text{const}$ и становится очевидным, что данное уравнение никак не описывает возбуждение момента в переменном магнитном поле. Несмотря на это, в 1946 г. Ф. Блох для описания ядерного магнитного резонанса добавил в уравнение (6) релаксационные члены и использовал его для случая переменных полей [15]

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} + \frac{\mathbf{L} - \mathbf{L}_0}{\hat{\tau}} = -[\boldsymbol{\omega}_L \times \mathbf{L}], \quad (7)$$

где $\hat{\tau}$ – характерные времена продольной и поперечной релаксаций, а $\mathbf{L}_0$ – равновесное значение момента. В дальнейшем уравнение Блоха (7) часто использовали для описания явлений магнитного резонанса в переменных магнитных полях.

Однако такое рассмотрение неверно, так как уравнение для момента частицы $\mathbf{L}$ имеет указанный вид только в случае постоянного магнитного поля; в случае переменного поля в уравнения (6) и (7) должен входить очевидный член, пропорциональный $\mathbf{S} \cdot d\mathbf{B}/dt$, отвечающий за возбуждение любой токовой петли площадью $\mathbf{S}$ (магнитного момента) индукцией переменного магнитного поля $\mathbf{B}$.

На основе традиционно используемого выражения силы Лоренца (5) можно вывести точное уравнение движения для момента в переменном во времени однородном магнитном поле. В этом случае электрическое поле $\mathbf{E}$ задается в виде $\mathbf{E} = (1/2c)[\mathbf{r} \times d\mathbf{B}/dt]$ и из (5) имеем

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{q}{2c} \left[\mathbf{r} \times \frac{d\mathbf{B}}{dt} \right] + \frac{q}{c} [\mathbf{v} \times \mathbf{B}]. \quad (8)$$

Умножая на $\mathbf{r}$ векторно, после преобразования и перегруппировки выражений правой части, получим

$$\frac{d}{dt} \left(m[\mathbf{r} \times \mathbf{v}] + \frac{q}{2c} [[\mathbf{r} \times \mathbf{B}] \times \mathbf{r}] \right) = -\frac{q}{2c} [\mathbf{B} \times [\mathbf{r} \times \mathbf{v}]]. \quad (9)$$

Для частицы, у которой масса и заряд распределены в объеме с одной и той же закономерностью, для элемента массы dm и заряда $dq = (q/m)dm$ имеем

$$\frac{d}{dt} \left([\mathbf{r} \times \mathbf{v}]dm + \frac{q}{2mc} [\mathbf{r} \times [\mathbf{B} \times \mathbf{r}]]dm \right) = -\frac{q}{2mc} [\mathbf{B} \times [\mathbf{r} \times \mathbf{v}]]dm. \quad (10)$$

В результате интегрирования по объему V имеем

$$\frac{d}{dt} (\mathbf{L} + \hat{I} \boldsymbol{\omega}_L) = -[\boldsymbol{\omega}_L \times \mathbf{L}], \quad (11)$$

где $\mathbf{L}$ – момент импульса, $\boldsymbol{\omega}_L = (q/2mc)\mathbf{B}$ – ларморовская угловая скорость вращения, $\hat{I} = I_{i,k} = \int_V [r_i^2 \delta_{i,k} - r_i r_k] dm$ – тензор момента инерции частицы. В случае сферического волчка момент инерции $\hat{I} = I$ просто скаляр, поэтому для обобщенного момента импульса $\mathbf{J} = \mathbf{L} + I\boldsymbol{\omega}_L$ получаем

$$d\mathbf{J}/dt = -[\boldsymbol{\omega}_L \times \mathbf{J}]. \quad (12)$$

С учетом релаксационных членов Блоха имеем

$$d\mathbf{L}/dt + (\mathbf{L} - \mathbf{L}_0)/\hat{\tau} + I(d\boldsymbol{\omega}_L/dt) = -[\boldsymbol{\omega}_L \times \mathbf{L}], \quad (13)$$

где I – момент инерции. Умножив скалярно на $\mathbf{L}$, получим выражение

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\mathbf{L}^2}{2I} \right) = -\mathbf{L} \frac{d\boldsymbol{\omega}_L}{dt} = -\mathbf{M} \frac{d\mathbf{B}}{dt}, \quad (14)$$

где $\mathbf{M} = (q/2mc)\mathbf{L}$ – магнитный момент частицы. Отсюда видно, почему и как меняется кинетическая энергия вращения $\mathbf{L}^2/2I$ частицы с магнитным моментом $\mathbf{M}$ в переменном магнитном поле $\mathbf{B}$. Как видим, в случае переменного магнитного поля в уравнениях Блоха (7) отсутствует именно член, отвечающий за возбуждение магнитного момента индукцией переменного магнитного поля.

При вращении в плоскости, перпендикулярной направлению магнитного поля, угловая скорость в постоянном поле из (5) получается $\boldsymbol{\omega}_C = (q/mc)\mathbf{B}$ (циклотронная частота), а из (13) – $\boldsymbol{\omega}_L = (q/2mc)\mathbf{B}$ (ларморовская частота прецессии). Например, при установлении нового значения постоянного магнитного поля, согласно (13), в процессе изменения имеем ларморовскую частоту вращения $(q/2mc)\mathbf{B}$, которая должна быть и в итоге. С другой стороны, в постоянном магнитном поле из формулы силы Лоренца (5) имеем $(q/mc)\mathbf{B}$. То есть описывается только случай прецессии – случай поперечного поля, когда направленный по полю момент отсутствует. А наблюдаемый электронный парамагнитный резонанс при возбуждении продольным переменным магнитным полем не описывается не только уравнениями Блоха (7), но и уравнениями (13).

Ограниченность формулы силы Лоренца (5) при описании движения заряда заложена в самом выводе этой формулы. При выводе уравнения движения заряженной частицы во внешнем поле [14] при заданных потенциалах поля φ и $\mathbf{A}$ из лагранжиана в виде

$$L = -mc^2 \sqrt{1 - v^2/c^2} - q\varphi + (q/c) \mathbf{A} \cdot \mathbf{v} \quad (15)$$

предполагается, что взаимодействие частицы с полем не зависит от скорости движения частицы $\mathbf{v}$. Как следствие, из (15) обобщенный импульс представляется как $\mathbf{P} = \partial L / \partial \mathbf{v} = \mathbf{p} + q\mathbf{A}/c$ и уравнения движения представляются в следующем виде:

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\text{grad } \varphi - \frac{q}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \frac{q}{c} [\mathbf{v} \times \text{rot } \mathbf{A}] = q\mathbf{E} + \frac{q}{c} [\mathbf{v} \times \mathbf{B}], \quad (16)$$

т.е. формула силы Лоренца получается вследствие подстановки в выражение лагранжиана частицы потенциалов φ и $\mathbf{A}$ самого поля (действующего на неподвижный в данной точке заряд), вместо потенциалов $q\varphi'$ и $q\mathbf{A}'$ взаимодействия поля с движущейся частицей.

Поэтому при использовании формулы (5) в ряде задач возникают противоречия. В частности, в задаче водородоподобного атома с зарядом ядра Ze [16] возникает физически ничем не обоснованное ограничение на величину заряда ядра в виде $Z < 137$, указывающее на отсутствие устойчивых атомов с порядковым номером $Z > 137$.

По тем же причинам, отсутствуют какие-либо разумные уравнения, описывающие движение элементарных частиц при сильных взаимодействиях, а в ядерной физике вынуждены пользоваться уравнением Шредингера, хотя и в данном случае абсурдность такого подхода очевидна.

В данной работе предложено релятивистски инвариантное представление обобщенного импульса частицы во внешнем поле, в котором учитывается зависимость потенциалов взаимодействия частицы с полем от скорости движения частицы.

2. Инвариантность представления обобщенного импульса.

Классическое соответствие

Если электромагнитное поле задано потенциалами $(\varphi, \mathbf{A})$, то электрическое $\mathbf{E}$ и магнитное $\mathbf{B}$ поля определяются формулами

$$\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}, \quad \mathbf{E} = -\partial\varphi/\partial\mathbf{r} - \partial\mathbf{A}/\partial t. \quad (17)$$

Если заряд неподвижен, то он чувствует именно эти поля $\mathbf{E}$ и $\mathbf{B}$. Если же заряд в этой точке имеет отличную от нуля скорость $\mathbf{v}$, то он будет чувствовать поля иначе и энергия взаимодействия будет другая.

Для определения силы или энергии взаимодействия для движущегося со скоростью $\mathbf{v}$ заряда можно исходить из принципа относительности движения. Действующие значения силы или взаимодействия движущегося со скоростью $\mathbf{v}$

заряда с полем то же самое, что и в случае, когда заряд неподвижен, а поле движется со скоростью $(-\mathbf{v})$.

Таким образом, для движущегося заряда действующие значения полей взаимодействия $(\varphi', \mathbf{A}')$, $\mathbf{E}'$ и $\mathbf{B}'$ представляются в виде [14]

$$\left. \begin{aligned} (\varphi', \mathbf{A}') &= \left(\frac{\varphi + \boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{A}}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \mathbf{A}_{\perp} + \frac{\mathbf{A}_{\parallel} + \varphi \boldsymbol{\beta}}{\sqrt{1 - \beta^2}} \right) \\ \mathbf{E}' &= \mathbf{E}_{\parallel} + \frac{\mathbf{E}_{\perp} + [\boldsymbol{\beta} \times \mathbf{B}]}{\sqrt{1 - \beta^2}} \\ \mathbf{B}' &= \mathbf{B}_{\parallel} + \frac{\mathbf{B}_{\perp} - [\boldsymbol{\beta} \times \mathbf{E}]}{\sqrt{1 - \beta^2}} \end{aligned} \right\} \begin{aligned} \varphi'^2 - \mathbf{A}'^2 &= \varphi^2 - \mathbf{A}^2, \\ \mathbf{E}'^2 - \mathbf{B}'^2 &= \mathbf{E}^2 - \mathbf{B}^2, \\ \mathbf{E}' \cdot \mathbf{B}' &= \mathbf{E} \cdot \mathbf{B}. \end{aligned} \quad (18)$$

Тогда обобщенный импульс частицы во внешнем поле представиться в виде

$$\mathbf{P} = \frac{1}{c} \left(\frac{mc^2 + q\varphi + q(\boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{A})}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \frac{(mc^2 + q\varphi)\boldsymbol{\beta} + q\mathbf{A}_{\parallel}}{\sqrt{1 - \beta^2}} + q\mathbf{A}_{\perp} \right), \quad (19)$$

а для модуля I четырехмерного вектора обобщенного импульса $\mathbf{P}$ получим

$$I^2 = \mathbf{P}^2 = \varepsilon^2 - \mathbf{p}^2 = \frac{(mc^2 + q\varphi)^2 - (q\mathbf{A})^2}{c^2}. \quad (20)$$

Таким образом, обобщенный импульс частицы во внешнем поле не только инвариантен относительно преобразований при переходе из одной системы отсчета в другой, но и имеет инвариантное представление через скорость движения частицы (19), а значение инварианта I в каждой точке пространства задается выражением (20). Другими словами, таким свойством обладает не только представление собственного импульса частицы (механическая часть), но и обобщенный импульс частицы вообще. Инвариантное представление обобщенного импульса через скорость частицы означает, что природа физических процессов такова, что изменение состояния системы математически описывается только поворотом вектора обобщенного импульса в четырехмерном пространстве.

Мы обобщим этот результат в случае представления обобщенного импульса любых систем, утверждая, что вне зависимости от состояния движения системы обобщенный четырехмерный импульс всегда имеет инвариантное представление

$$\mathbf{P} = (\varepsilon, \mathbf{p}) \rightarrow \mathbf{P}^2 = \varepsilon^2 - \mathbf{p}^2 = \text{inv}, \quad (21)$$

где ε и $\mathbf{p}$ – энергия и импульс системы. Представляя выражение инварианта $\varepsilon^2 - \mathbf{p}^2$ в виде

$$\varepsilon^2 = \frac{E^2}{c^2} = \mathbf{p}^2 + \frac{(mc^2 + q\varphi)^2 - (q\mathbf{A})^2}{c^2} = \mathbf{p}^2 + m^2c^2 + 2m\varphi + \frac{q^2}{c^2}(\varphi^2 - \mathbf{A}^2) \quad (22)$$

и разделяя на $2m$ и группируя, получим

$$H = \frac{\varepsilon^2 - m^2c^2}{2m} = \frac{E^2 - m^2c^4}{2mc^2} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + q\varphi + \frac{q^2}{2mc^2}(\varphi^2 - \mathbf{A}^2), \quad (23)$$

формулу соответствия энергии системы E и энергии системы в классическом понимании H . Классическое соответствие в виде $H = \mathbf{p}^2/2m + U(\mathbf{r})$ [17] будет полным и точным, если определить в классическом понимании потенциальную энергию взаимодействия U и энергию системы H как

$$U = q\varphi + \frac{q^2}{2mc^2}(\varphi^2 - \mathbf{A}^2), \quad H = \frac{E^2 - m^2c^4}{2mc^2}, \quad \rightarrow \quad E = \pm mc^2 \sqrt{1 + \frac{2H}{mc^2}}. \quad (24)$$

Например, потенциальная энергия электрона U в поле кулоновского потенциала $\varphi = Ze/r$ и в однородном магнитном поле $\mathbf{B}$ с векторным потенциалом $\mathbf{A} = [\mathbf{r} \times \mathbf{B}]/2$ есть

$$U = -e\varphi + \frac{e^2}{2mc^2}(\varphi^2 - \mathbf{A}^2) = -\frac{Ze^2}{r} + \frac{1}{2mc^2} \frac{Z^2 e^4}{r^2} - \frac{e^2 B^2}{8mc^2} r^2 \sin^2 \theta. \quad (25)$$

В нерелятивистском случае выражение (23) можно представить в виде

$$H = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + \frac{e}{mc} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \cdot \mathbf{A} + e\varphi + \frac{e^2}{2mc^2} \varphi^2 \approx \frac{mv^2}{2} + \frac{e}{c} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}) + e\varphi, \quad (26)$$

где $\mathbf{p} - e\mathbf{A}/c \approx m\mathbf{v}$ принято называть собственным (механическим) импульсом частицы. Полученное для классической энергии H выражение существенно отличается от традиционного наличием недостающей в классической электродинамике энергии взаимодействия частицы с магнитным полем (линейный член по вектор-потенциалу $\mathbf{A}$). В случае однородного магнитного поля $\mathbf{B}$, когда векторный потенциал можно представить в виде $[\mathbf{B} \times \mathbf{r}]/2$, имеем

$$H = \frac{mv^2}{2} + \mathbf{B} \cdot \mathbf{M} + e\varphi. \quad (27)$$

В квантовой механике [18] при представлении гамильтониана в операторном виде появление этих дополнительных членов приводит к заключению, что магнитное взаимодействие – это чисто квантовый эффект. Однако в рамках вышеизложенного подхода эти различия отсутствуют, и магнитное взаимодействие входит одинаковым образом в виде $H_M = q^2 A^2 / 2mc^2$.

3. Представление обобщенных частиц

Если представить обобщенный импульс системы в виде

$$\mathbf{P} = \varepsilon \sqrt{1 - (\mathbf{p}/\varepsilon)^2} \left(\frac{1}{\sqrt{1 - (\mathbf{p}/\varepsilon)^2}}, \frac{\mathbf{p}/\varepsilon}{\sqrt{1 - (\mathbf{p}/\varepsilon)^2}} \right) = I \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \eta^2}}, \frac{\boldsymbol{\eta}}{\sqrt{1 - \eta^2}} \right), \quad (28)$$

то можно ввести понятие обобщенной скорости $\boldsymbol{\eta} = \mathbf{p}/\varepsilon$ и инварианта I в виде $I = \varepsilon \sqrt{1 - (\mathbf{p}/\varepsilon)^2}$. Для частицы во внешнем электромагнитном поле из (19) получаем

$$\boldsymbol{\eta} = \frac{\boldsymbol{\beta} + \frac{q\mathbf{A}_{\square}}{mc^2 + q\varphi} + \frac{q\mathbf{A}_{\perp}}{mc^2 + q\varphi} \sqrt{1 - \beta^2}}{1 + \frac{q\mathbf{A}}{mc^2 + q\varphi} \cdot \boldsymbol{\beta}} = \frac{\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}_{0\square} - \boldsymbol{\beta}_{0\perp} \sqrt{1 - \beta^2}}{1 - \boldsymbol{\beta} \cdot \boldsymbol{\beta}_0}, \quad (29)$$

$$\varepsilon = \frac{mc^2 + q\varphi + q(\boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{A})}{c\sqrt{1 - \beta^2}} = \frac{I}{\sqrt{1 - \eta^2}}, \quad (30)$$

$$\mathbf{p} = \frac{(mc^2 + q\varphi)\boldsymbol{\beta} + q\mathbf{A}_{\square}}{c\sqrt{1 - \beta^2}} + \frac{q}{c}\mathbf{A}_{\perp} = \frac{I}{\sqrt{1 - \eta^2}} \boldsymbol{\eta}. \quad (31)$$

Отсюда следует, что (при $I > 0$) система представлена как обобщенная частица со скоростью $\boldsymbol{\eta}$ и с энергией покоя ε_0 :

$$\varepsilon_0 = (mc^2 + q\varphi) \sqrt{1 - \frac{(q\mathbf{A})^2}{(mc^2 + q\varphi)^2}}. \quad (32)$$

Если скорость частицы в рассматриваемой точке имеет величину

$$\boldsymbol{\beta} = -\boldsymbol{\beta}_0 = -\frac{q\mathbf{A}}{mc^2 + q\varphi}, \quad (33)$$

то это соответствует покоящейся обобщенной частице ($\boldsymbol{\eta} = 0$). Если же скорость частицы $\boldsymbol{\beta} = 0$, то это соответствует движению обобщенной частицы со скоростью

$$\boldsymbol{\eta} = \boldsymbol{\beta}_0 = \frac{q\mathbf{A}}{mc^2 + q\varphi}. \quad (34)$$

Инвариантное представление четырехмерного импульса обобщенной частицы обеспечивается представлением в виде

$$\mathbf{P} = \left(\frac{\pi_0 + \boldsymbol{\beta} \cdot \boldsymbol{\pi}}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \frac{\pi_0 + \boldsymbol{\beta} \cdot \boldsymbol{\pi}/\beta^2}{\sqrt{1 - \beta^2}} \boldsymbol{\beta} + \frac{[\boldsymbol{\beta} \times [\boldsymbol{\pi} \times \boldsymbol{\beta}]]}{\beta^2} \right) = \left(\frac{\pi_0 + \boldsymbol{\beta} \cdot \boldsymbol{\pi}}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \frac{\pi_0 \boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\pi}_{\parallel}}{\sqrt{1 - \beta^2}} + \boldsymbol{\pi}_{\perp} \right), \quad (35)$$

где $\mathbf{P}_0 = (\pi_0, \boldsymbol{\pi})$ – четырехмерный импульс покоящейся частицы с $\mathbf{P}^2 = \pi_0^2 - \boldsymbol{\pi}^2$. Выражение (35) можно представить в матричной форме

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} \pi_0 + \frac{\beta}{\sqrt{1-\beta^2}} \left(\frac{\boldsymbol{\beta} \cdot \boldsymbol{\pi}}{\beta} \right) + \frac{\beta^2}{\sqrt{1-\beta^2} (1 + \sqrt{1-\beta^2})} \pi_0, \\ \boldsymbol{\pi} + \frac{\beta}{\sqrt{1-\beta^2}} \left(\frac{\boldsymbol{\beta}}{\beta} \right) \pi_0 + \frac{\beta^2}{\sqrt{1-\beta^2} (1 + \sqrt{1-\beta^2})} \left(\frac{\boldsymbol{\beta} \cdot \boldsymbol{\pi}}{\beta} \right) \frac{\boldsymbol{\beta}}{\beta} \end{pmatrix} = \overset{\square}{T} \begin{pmatrix} \pi_0 \\ \pi_1 \\ \pi_2 \\ \pi_3 \end{pmatrix}, \quad (36)$$

где $\overset{\square}{T}$ – матрица представления (преобразования), задаваемая в явном виде как [19]

$$\overset{\square}{T} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{\beta}{\sqrt{1-\beta^2}} \begin{pmatrix} 0 & \frac{\beta_1}{\beta} & \frac{\beta_2}{\beta} & \frac{\beta_3}{\beta} \\ \frac{\beta_1}{\beta} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\beta_2}{\beta} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\beta_3}{\beta} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{\beta^2}{(1 + \sqrt{1-\beta^2})\sqrt{1-\beta^2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\beta_1\beta_1}{\beta^2} & \frac{\beta_1\beta_2}{\beta^2} & \frac{\beta_1\beta_3}{\beta^2} \\ 0 & \frac{\beta_2\beta_1}{\beta^2} & \frac{\beta_2\beta_2}{\beta^2} & \frac{\beta_2\beta_3}{\beta^2} \\ 0 & \frac{\beta_3\beta_1}{\beta^2} & \frac{\beta_3\beta_2}{\beta^2} & \frac{\beta_3\beta_3}{\beta^2} \end{pmatrix}. \quad (37)$$

Матрицы инвариантного представления четырехмерного вектора, сохраняющие модуль вектора в четырехмерном пространстве, образуют группу Пуанкаре (неоднородная группа Лоренца). Кроме смещений и вращений, группа содержит представления отражения пространства-времени P , T и инверсию $PT = I$.

Таким образом, с математической точки зрения, группа преобразования четырехмерного вектора и группа представления самого четырехмерного вектора идентичны – как следствие принципа относительности движения и сохранения четырехмерных свойств обобщенного импульса. Это, в свою очередь, означает, что произвольный четырехмерный вектор представим через некоторые основные четырехмерные векторы “в покое”. Приведем представления обобщенного импульса этих частиц в покое

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_+ &= \varepsilon_0 (1, 0), \quad \mathbf{P}_+^2 = +\varepsilon_0^2, \\ \mathbf{P}_- &= \varepsilon_0 (0, \mathbf{n}_0), \quad \mathbf{P}_-^2 = -\varepsilon_0^2, \\ \mathbf{P}_0 &= \varepsilon_0 (1, \mathbf{n}_0), \quad \mathbf{P}_0^2 = 0, \end{aligned} \quad (38)$$

и в движении

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_+ &= \frac{\varepsilon_0}{\sqrt{1-\beta^2}} (1, \boldsymbol{\beta}), & \mathbf{P}_+^2 &= +\varepsilon_0^2, \\ \mathbf{P}_- &= \frac{\varepsilon_0}{\sqrt{1-\beta^2}} \left(\boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{n}_0, \mathbf{n}_0 + \mathbf{n}_{0\perp} \sqrt{1-\beta^2} \right), & \mathbf{P}_-^2 &= -\varepsilon_0^2, \\ \mathbf{P}_0 &= \frac{\varepsilon_0}{\sqrt{1-\beta^2}} \left(1 + \boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{n}_0, \boldsymbol{\beta} + \mathbf{n}_{0\parallel} + \mathbf{n}_{0\perp} \sqrt{1-\beta^2} \right), & \mathbf{P}_0^2 &= 0. \end{aligned} \quad (39)$$

В последних формулах удобно использовать направление движения (импульса) $\mathbf{n}$ в системе отсчета наблюдателя. Тогда имеем

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_+ &= \left(\varepsilon_0 / \sqrt{1 - \beta^2} \right) (1, \boldsymbol{\beta}), \\ \mathbf{P}_- &= \frac{\varepsilon_0}{\sqrt{1 - (\boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{n})^2}} (\boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{n}, \mathbf{n}), \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{n}_{0\perp} + \mathbf{n}_{0\parallel} / \sqrt{1 - \beta^2}}{\sqrt{1 + (\boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{n}_0 / \sqrt{1 - \beta^2})^2}}, \\ \mathbf{P}_0 &= \frac{\varepsilon_0 \sqrt{1 - \beta^2}}{1 - \boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{n}} (1, \mathbf{n}), \quad \mathbf{n} = \frac{\boldsymbol{\beta} + \mathbf{n}_{0\parallel} + \mathbf{n}_{0\perp} \sqrt{1 - \beta^2}}{1 + \boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{n}_0}, \end{aligned} \quad (40)$$

где последняя формула выражает эффект Доплера.

Если рассматривать обобщенный импульс частицы во внешнем поле, то его также можно представить в виде выражений (40) в зависимости от знака инварианта (20).

4. Заключение

Таким образом, учет зависимости взаимодействия от скорости движения частицы приводит к инвариантности представления обобщенного импульса.

Релятивистски инвариантное представление обобщенного импульса частицы во внешнем поле позволяет установить точное соответствие выражений энергии и потенциальной энергии для классического гамильтониана, что делает идентичным решения задач механики при релятивистском и классическом подходах. Инвариантность представления обобщенного импульса позволяет эквивалентно описывать физическую систему в геометрически сопряженных координатном и импульсном (кинематическом и динамическом) пространствах кинематическими и динамическими (каноническими) переменными. Эти пространства должны быть взаимно представляемы и равноценны при описании свойств физической системы. Соответственно, представление физической системы в кинематическом и динамическом пространствах должно отражаться метрическим и дифференциальным соответствием кинематического и динамического пространств.

Физические и геометрические свойства этих сопряженных пространств в полной мере могут быть описаны в рамках вариационных подходов, которые изложены в последующей работе.

Автор признателен профессору В.О. Чалтыкяну за полезные обсуждения и ценные замечания в ходе подготовки рукописи.

ЛИТЕРАТУРА

1. Л.М.Ананьев, А.А.Воробьев, В.И.Горбунов. Индукционный ускоритель электронов – бетатрон. М., Госатомиздат, 1961.
2. Ю.П.Вахрушин, А.И.Анацкий. Линейные индукционные ускорители. М., Атомиздат, 1978.
3. J.Hopwood. Plasma Sources Sci. Technol., **1**, 109 (1992).

4. **M.A.Lieberman, A.J.Lichtenberg.** Principles of Plasma Discharges and Materials Processing. New York, Wiley, 1994.
5. **B.Bottin et al.** Predicted and measured capability of the VKI 1.2 MW plasmatron regarding re-entry simulation. ESA SP-426, 1998.
6. **M.R.LaPointe, P.G.Mikellides.** High-Power Magnetoplasma dynamic and Pulsed Inductive Thrusters. NASA Glenn Research Center, OAT, OSS, Project ASTP, 2002.
7. **G.G.Lister, J.E.Lawler, et al.** Rev. Modern Phys., **76**, 542 (2004).
8. **A.M.Razhev, V.M.Mekhitarian, D.S.Churkin.** JETP Lett., **82**, 259 (2005).
9. **A.M.Razhev, D.S.Churkin.** Opt. Precis. Eng., **19**, 237 (2011).
10. **W.Hittorf.** Ann. Phys. and Chem., **21**, 90 (1884).
11. Развитие ускорителей элементарных частиц – жизнь и работа Рольфа Видероз, 1902–1996. Сост. и ред. **П.Валошек.** М., ФИАН, 1998.
12. **D.W.Kerst.** Phys. Rev., **60**, 47 (1941).
13. **D.W.Kerst, R.Serber.** Phys. Rev., **60**, 53 (1941).
14. **Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц.** Теория поля. М., Физматлит, 2003.
15. **F.Bloch.** Phys. Rev., **70**, 460 (1946).
16. **В.Б.Берестецкий, Е.М.Лифшиц, Л.П.Питаевский.** Квантовая электродинамика. М., Физматлит, 2002.
17. **Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц.** Механика. М., Физматлит, 2004.
18. **Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц.** Квантовая механика. М., Физматлит, 2004.
19. **М.-А.Тонелла.** Основы электромагнетизма и теории относительности. М., ИИЛ, 1962.

ԸՆԴՀԱՆՐԱՅՎԱԾ ԻՄՊՈԻՆՍԻ ԻՆՎԱՐԻԱՆՏ ՆԵՐԿԱՅԱՅՈՒՄ

Վ.Մ. ՄԵԽԻՏՐԻԱՆ

Առաջարկված է արտաքին դաշտում գտնվող մասնիկի ընդհանրացված իմպուլսի ռելյատիվիստիկ ինվարիանտ ներկայացում: Այդպիսի ներկայացումը հաշվի է առնում դաշտի հետ մասնիկի փոխազդեցության պոտենցիալների կախումը մասնիկի շարժման արագությունից: Պարզված է էներգիայի և պոտենցիալ էներգիայի արտահայտությունների ճշգրիտ համապատասխանությունը դասական համիլտոնյանի համար, ինչը նույնացնում է մեխանիկայի խնդիրների լուծումը ռելյատիվիստիկ և դասական մոտեցումների դեպքում: Ընդհանրացված իմպուլսի ինվարիանտ ներկայացումը թույլ է տալիս ֆիզիկական համակարգերը համարժեք նկարագրել կինեմատիկ և դինամիկ փոփոխականների երկրաչափորեն համալուծ տարածություններում:

THE INVARIANT REPRESENTATION OF GENERALIZED MOMENTUM

V.M. MEKHITARIAN

The relativistically invariant representation of generalized momentum of a particle in the external field is proposed. In this representation the dependence of potentials of the particle-field interaction on the particle velocity is taken into account. An exact correspondence of expressions for the energy and potential energy for the classical Hamiltonian is established, which makes identical the solutions of problems of mechanics with relativistic and classical approaches. The invariance of the generalized momentum representation allows one to describe equivalently a physical system in geometrically conjugated spaces of kinematical and dynamical variables.

УДК 537.312

ВРЕМЕННЫЕ УРАВНЕНИЯ ГИНЗБУРГА–ЛАНДАУ ДЛЯ ВРАЩАЮЩИХСЯ СВЕРХПРОВОДНИКОВ С ПАРАМАГНИТНЫМИ ПРИМЕСЯМИ

К.М. ШАХАБАСЯН, М.К. ШАХАБАСЯН

Ереванский государственный университет, Армения

(Поступила в редакцию 11 июня 2012 г.)

Получены временные уравнения Гинзбурга–Ландау для вращающихся сверхпроводящих сплавов с парамагнитными примесями, учитывающие одновременное наличие в них однородного магнитного поля (лондоновского момента) и неоднородного электрического поля, обусловленных силами инерции. Получено уравнение, определяющее проникновение постоянного электрического поля во вращающийся сверхпроводник. Найдена диссипативная функция.

1. Введение

Нестационарные уравнения Гинзбурга–Ландау для покоящихся сверхпроводников с парамагнитными примесями были получены в работе [1]. Твердотельное вращение сверхпроводников с постоянной угловой скоростью ω приводит к появлению внутри однородного магнитного поля $-2m\omega/e$ (лондоновского момента) [2-4]. Простейшее объяснение возникновения этого поля заключается в том, что силы во вращающейся системе отсчета должны компенсироваться – это поле необходимо для компенсации силы Кориолиса. Наличие же центробежной силы приводит к возникновению неоднородного электрического поля $m\omega^2 r/e$ [5]. Релятивистское уравнение Лондона во вращающейся системе координат, из которого следует наличие лондоновского момента и неоднородного электрического поля, было получено в [6]. Ковариантные уравнения электродинамики вращающихся сверхпроводников, подтверждающие наличие этих полей, были выведены в [7]. Отметим, что в работах [5-7] рассматривалось только поведение сверхпроводящего конденсата электронов, то есть ионная решетка предполагалась несжимаемой. Однако деформация ионной решетки сверхпроводника при вращении и взаимодействие ионов с электронами проводимости посредством обмена фононами приводит к следующему изменению выражения напряженности неоднородного электрического поля [8,9]:

$$\mathbf{E}_r = -\left(\frac{2}{3}\rho_i E_F \frac{1-2\sigma}{Y} - m\right) \frac{\omega^2}{e} \mathbf{r} = -G\omega^2 \mathbf{r}, \quad (1)$$

где $\rho_i = Mn_i$ – плотность массы ионов, M – масса иона, E_F – энергия Ферми

электронов, m – инертная масса электрона, Y – модуль Юнга, σ – коэффициент Пуассона, $\mathbf{r}$ – расстояние от оси вращения. Отметим, что первое слагаемое в (1) является главным. Таким образом, возникает необходимость учета в нестационарных уравнениях Гинзбурга–Ландау деформаций ионной решетки вращающегося сверхпроводника.

Настоящая работа посвящена выводу нестационарных уравнений Гинзбурга–Ландау для вращающихся сверхпроводников с парамагнитными примесями.

2. Основные уравнения

Как упоминалось выше, зависящие от времени уравнения Гинзбурга–Ландау для покоящихся сверхпроводящих сплавов с парамагнитными примесями были получены при помощи метода функций Грина в работе [1]:

$$-\tau_{\Delta} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{2ie}{\hbar} \varphi \right) \Delta + \left(1 - \frac{|\Delta|^2}{\Delta_{\infty}^2} \right) \Delta + \xi^2 \left(\nabla - \frac{2ie}{\hbar c} \mathbf{A} \right)^2 \Delta = 0, \quad (2)$$

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar c^2}{16\pi e \lambda^2 \Delta_{\infty}^2} \left[i(\Delta \nabla \Delta^* - \Delta^* \nabla \Delta) - \frac{4e}{\hbar c} |\Delta|^2 \mathbf{A} \right] + \sigma_n \mathbf{E}, \quad (3)$$

где длина когерентности $\xi(T)$ и лондоновская глубина проникновения магнитного поля $\lambda(T)$ определяются следующим образом:

$$\xi(T) = (6D\hbar^2/\tau_s \Delta_{\infty}^2)^{1/2}, \quad \lambda(T) = \hbar c / (8\pi \sigma_n \tau_s \Delta_{\infty}^2)^{1/2}. \quad (4)$$

Здесь $D = \tau v_F^2/3$ – коэффициент диффузии, τ_s – среднее время между соударениями электронов с примесью, сопровождающееся переворотом спина, τ – время свободного пробега электронов по отношению к соударениям с атомами примесей, $\sigma_n = ne^2 \tau/m$ – проводимость нормального металла, n – плотность электронов, $\Delta_{\infty} = \sqrt{2\pi k(T_c - T)}$ – значение параметра порядка Δ в отсутствие магнитного поля, T_c – критическая температура, k – постоянная Больцмана, $\mathbf{A}$ – векторный потенциал магнитного поля, φ – скалярный потенциал электрического поля. Электрическое поле $\mathbf{E}$ и магнитная индукция $\mathbf{B}$ определяются обычным образом:

$$\mathbf{E} = -(1/c) \partial \mathbf{A} / \partial t - \nabla \varphi, \quad \mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}. \quad (5)$$

Временные уравнения Гинзбурга–Ландау (2) и (3) получены в предположении $\tau \Delta \ll \hbar$. Это предположение представляет собой условие бесщелевой сверхпроводимости. Эти уравнения определяют характерные времена релаксации параметра порядка τ_{Δ} и тока τ_j :

$$\tau_{\Delta} = 6\hbar^2/\tau_s \Delta_{\infty}^2, \quad \tau_j = \hbar^2/2\tau_s \Delta_{\infty}^2. \quad (6)$$

Независящие от времени уравнения Гинзбурга–Ландау для вращающихся сверхпроводников, учитывающие наличие лондоновского момента, были получены в работах [10-12].

Из вышесказанного следует, что зависящие от времени уравнения Гинзбурга–Ландау для вращающегося сверхпроводника с парамагнитными примесями запишутся в виде:

$$-\tau_{\Delta} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{2ie}{\hbar} (\varphi + \varphi_r) \right) \Delta + \left(1 - \frac{|\Delta|^2}{\Delta_{\infty}^2} \right) \Delta + \xi^2 \left(\nabla - \frac{2ie}{\hbar c} (\mathbf{A} + \mathbf{A}_r) \right)^2 \Delta = 0, \quad (7)$$

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar c^2}{16\pi e \lambda^2 \Delta_{\infty}^2} \left[i (\Delta \nabla \Delta^* - \Delta^* \nabla \Delta) - \frac{4e}{\hbar c} |\Delta|^2 (\mathbf{A} + \mathbf{A}_r) \right] + \sigma_n (\mathbf{E} - \mathbf{E}_r), \quad (8)$$

где скалярный потенциал φ_r и векторный потенциал $\mathbf{A}_r$, обусловленные силами инерции, определяются как

$$\varphi_r = \frac{1}{2} G \omega^2 r^2, \quad \mathbf{A}_r = \frac{mc}{e} [\boldsymbol{\omega} \mathbf{r}]. \quad (9)$$

Заметим, что выражение для плотности тока (8) представляет собой сумму плотностей сверхпроводящего тока $\mathbf{j}_s$ и тока нормальных электронов $\mathbf{j}_n$.

Записав параметр порядка в виде $\Delta = |\Delta| e^{i\theta}$, введя новые градиентно-инвариантные потенциалы следующим образом:

$$\mathbf{Q} = \mathbf{A} - \frac{\hbar c}{2e} \nabla \theta + \mathbf{A}_r, \quad \Phi = \varphi + \frac{\hbar}{2e} \frac{\partial \theta}{\partial t} + \varphi_r, \quad (10)$$

и разделяя действительную и мнимую части уравнения (7), получаем

$$\tau_{\Delta} \frac{\partial |\Delta|}{\partial t} = |\Delta| - \frac{|\Delta|^3}{\Delta_{\infty}^2} + \xi^2 \left(\nabla^2 - \frac{4e^2}{\hbar^2 c^2} \mathbf{Q}^2 \right) |\Delta|, \quad (11)$$

$$c \tau_{\Delta} |\Delta|^2 \Phi + \xi^2 \nabla (\mathbf{Q} |\Delta|^2) = 0. \quad (12)$$

Вычитая из уравнения (7) его комплексно сопряженное, имеем

$$\frac{2e\Gamma |\Delta|^2}{\hbar} = \frac{\hbar}{4e} \operatorname{div} \mathbf{j}_s, \quad (13)$$

где $\Gamma = n\tau\tau_s/4mD$. Далее используем закон сохранения полного тока, вытекающий из постоянства плотности электронов. Представляя нормальный ток в виде

$$\mathbf{j}_n = -\sigma_n \left(\nabla \Phi + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} \right), \quad (14)$$

получаем окончательно следующее уравнение:

$$l_E^2 \left(\nabla^2 \Phi + \frac{1}{c} \operatorname{div} \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} \right) = \frac{|\Delta|^2}{\Delta_{\infty}^2} \Phi, \quad (15)$$

где $l_E = (\hbar^2 \sigma_n / 8e^2 \Gamma \Delta_\infty^2)^{1/2} = \xi / \sqrt{12}$ – глубина проникновения постоянного электрического поля и постоянного нормального тока в сверхпроводник. Диссипативная же функция W запишется в виде

$$W = 2\Gamma \left| \hbar \frac{\partial \Delta}{\partial t} + 2ie\Phi \Delta \right|^2 + \sigma_n \left| \nabla \Phi + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} \right|^2. \quad (16)$$

Первое слагаемое в (16) представляет собой вклад в диссипацию энергии за счет релаксации параметра порядка, второе слагаемое – вклад за счет омической диссипации нормальных электронов.

Таким образом, нами получены уравнения для параметра порядка (7) и плотности полного тока (8) во вращающихся сверхпроводящих сплавах с парамагнитными примесями, учитывающие одновременное наличие в них однородного магнитного поля (лондоновского момента) и неоднородного электрического поля, обусловленных силами инерции. Получено также уравнение (15), определяющее проникновение постоянного электрического поля в сверхпроводник. Найдена диссипативная функция (16). Полученные уравнения могут быть использованы для исследования квантовых когерентных эффектов во вращающихся сверхпроводниках.

Данная работа выполнена при поддержке гранта Государственного комитета по науке 11-1с107, а также при поддержке гранта фонда Volkswagen Stiftung Az: 85 182.

ЛИТЕРАТУРА

1. Л.П.Горьков, Г.М.Элиашберг. ЖЭТФ, **54**, 612 (1968).
2. F.London. Superfluids. New York, Dover, 1960.
3. Y.Jiang, M.Liu. Phys. Rev. B, **63**, 185406 (2001).
4. H.Essen. Eur. J. Phys., **26**, 279 (2005).
5. H.Peng, D.G.Torr, E.K.Hu, B.Peng. Phys. Rev. B, **43**, 2700 (1991).
6. R.A.Krikorian, D.M. Sedrakian. Nuovo Cimento, **120B**, 217 (2005).
7. R.A.Krikorian, D.M. Sedrakian. Nuovo Cimento, **120B**, 1329 (2005).
8. M.C.Leung, G.Papini, R.G.Rystephanick. Canad. J. Phys., **49**, 2754 (1971).
9. M.C.Leung. Nuovo Cimento, **7B**, 220 (1972).
10. Б.И.Веркин, И.О.Кулик. ЖЭТФ, **61**, 2067 (1971).
11. Д.М.Седракян, К.М.Шахабасян. Изв. АН Арм. ССР, Физика, **11**, 385 (1976).
12. H.Capellmann, Eur. Phys. J. B, **25**, 25 (2002).

TIME-DEPENDENT GINZBURG–LANDAU EQUATIONS FOR ROTATING SUPERCONDUCTORS WITH PARAMAGNETIC IMPURITIES

K.M. SHAHABASYAN, M.K. SHAHABASYAN

The time-dependent Ginzburg–Landau equations for rotating superconducting alloys with paramagnetic impurities are derived. The simultaneous occurrence of a homogeneous magnetic field (the London moment) and an inhomogeneous electric field, created by inertial forces, is taken into account. The equation describing constant electric field penetration into a rotating superconductor is derived. The dissipative function is obtained as well.

УДК 539.18

СТОЛКНОВЕНИЕ АТОМОВ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ВНЕШНЕГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ И ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ С ОБРАЗОВАНИЕМ РЕЗОНАНСОВ ФАНО–ФЕШБАХА

Э.А. ГАЗАЗЯН, А.Д. ГАЗАЗЯН, В.О. ЧАЛТЫКЯН

Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак

(Поступила в редакцию 20 июня 2012г.)

Рассмотрено столкновение двух атомов во внешнем магнитном поле и в поле лазерного излучения с образованием резонансов Фано–Фешбаха. При однофотонно-резонансном взаимодействии лазерного излучения с двумя дискретными колебательными состояниями молекулы образуются одетые состояния (эффект Ауслера–Таунса), которые при взаимодействии с внешним магнитным полем образуют резонансы Фано–Фешбаха. С другой стороны, нижнее молекулярное колебательное состояние связывается с континуумом упругого канала также посредством LICS (лазерно-индуцированная структура континуума), образуя лазерно-индуцированный резонанс. Получены поперечные сечения упругого и неупругого резонансного рассеяния, а также выражения для длины рассеяния в зависимости от величин внешнего магнитного поля и напряженности поля лазерного излучения.

1. Введение

Исследование резонансов Фано–Фешбаха при столкновении атомов важно для понимания и интерпретации явлений в квантовой системе конденсата Бозе–Эйнштейна. Этой проблеме посвящено большое количество работ (см., в частности, работы [1-3]). Резонансы Фано–Фешбаха возникают, когда энергия связанного молекулярного состояния в закрытом канале близка к энергии двух сталкивающихся атомов в системе центра масс в открытом канале (см. рис.1). В этом случае даже слабая связь может привести к сильному смешиванию каналов. Промежуточное квазисвязанное состояние в открытом канале имеет конечное время жизни и может распасться при взаимодействии с континуумом в начальное состояние или в другой канал. Когда связанное состояние в закрытом канале и состояния начальных атомов в открытом канале являются разными сверхтонкими подуровнями, то в магнитном поле два канала имеют разные зеемановские сдвиги. Этой разностью можно управлять, меняя величину магнитного поля. При отсутствии магнитного взаимодействия может играть роль слабое взаимодействие между ядерным движением и электронным. Учет этого взаимодействия по теории возмущений приводит к переходам между различными электронными состояниями.

При резонансном столкновении атомов большое значение имеет получение стабильной молекулы. Эта проблема была экспериментально решена в работе [4] на атомах ^{87}Rb по механизму STIRAP (Stimulated Raman Adiabatic Passage) [5]. В работе [6] обсуждалась возможность переноса в нижнее стабильное молекулярное состояние при резонансном столкновении атомов Na по механизму STIRAP с двумя лазерными импульсами.

Большое количество работ посвящено важной проблеме исследования длины рассеяния в зависимости от величины внешнего магнитного поля и от напряженности лазерного излучения, как при упругом, так и при неупругом столкновении атомов (см. [1-3]).

В данной работе мы рассматриваем столкновение двух атомов с образованием резонансов Фано–Фешбаха при комбинированном воздействии внешнего магнитного поля и резонансного лазерного излучения. Резонансное лазерное излучение образует одетые состояния дискретных молекулярных уровней $|1\rangle$ и $|2\rangle$ (эффект Аутлера–Таунса), которые при взаимодействии с магнитным полем образуют резонансы Фано–Фешбаха. То же лазерное излучение связывает нижележащее молекулярное колебательное состояние с континуумом упругого канала и образует лазерно-индуцированные резонансы по механизму LICS. Таким образом, мы имеем дело с комбинированным эффектом образования резонанса Фано–Фешбаха. Это дает возможность управлять образованием резонансов, меняя величину магнитного поля, интенсивность и частоту лазерного излучения. При этом ширины резонансов зависят от величины магнитного поля и от напряженности поля лазерного излучения, которая увеличивает ширину резонанса, что облегчает экспериментальное обнаружение асимметрии в полном поперечном сечении рассеяния из-за интерференции между резонансным и потенциальным рассеянием. Получены выражения для поперечных сечений упругого и неупругого рассеяния, а также для длины рассеяния в зависимости от величины магнитного поля и напряженности поля лазерного излучения.

2. Образование резонансов Фано–Фешбаха при комбинированном воздействии магнитного поля и лазерного излучения

Рассмотрим упругое и неупругое столкновение атомов с формированием резонансов Фано–Фешбаха во внешнем магнитном поле, которое связывает электронные состояния в открытом и закрытом каналах (взаимодействие U).

Лазерное излучение связывает резонансным взаимодействием (Ω) дискретные молекулярные состояния $|1\rangle$ и $|2\rangle$, которые описываются квазиэнергетическими волновыми функциями. Оно также связывает взаимодействием Ω_E нижнее стабильное молекулярное состояние с континуумом упругого канала, а взаимодействие Ω'_E связывает верхнее состояние со вторым континуумом (неупругого канала) (рис.1).

Отметим, что нижнее состояние $|1\rangle$ может распадаться под действием лазерного излучения как непосредственно в континуум 1 в упругом канале, так и в континуум 2 в неупругом канале из-за эффекта Аутлера–Таунса.

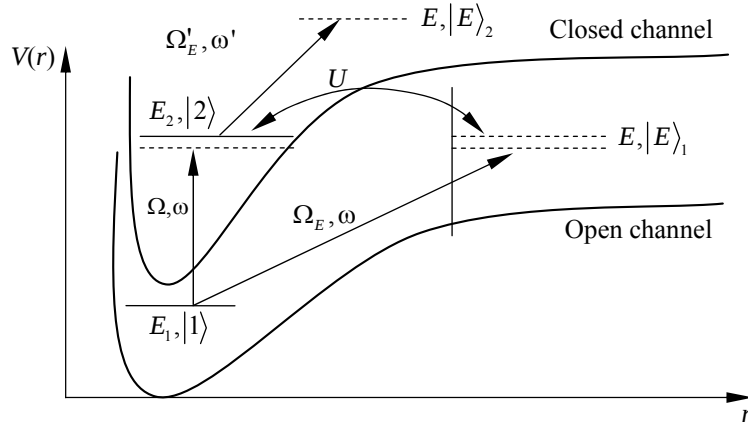


Рис. 1. Схема образования резонансов Фешбаха во внешнем магнитном поле и в поле лазерного излучения.

Гамильтониан для рассматриваемого процесса имеет следующий вид:

$$H = H_1 + H_2, \quad (1a)$$

$$H_1 = E_1 |1\rangle\langle 1| + E_2 |2\rangle\langle 2| + \Omega(t) |2\rangle\langle 1| + \Omega^*(t) |1\rangle\langle 2|, \quad (1b)$$

$$H_2 = \int E (|E\rangle_{11} \langle E| + |E\rangle_{22} \langle E|) dE + \int (\Omega_E(t) |E\rangle_1 \langle 1| + \Omega_E^*(t) |1\rangle_1 \langle E| + \Omega_E(t) |E\rangle_2 \langle 2| + \Omega_E^*(t) |2\rangle_2 \langle E| + U_E |E\rangle_1 \langle 2| + U_E^* |2\rangle_1 \langle E|) dE. \quad (1c)$$

В качестве базисных волновых функций для дискретного спектра с гамильтонианом (1b) выбираем квазиэнергетические волновые функции $\varphi_1(t)$ и $\varphi_2(t)$ при адиабатическом включении взаимодействия $\Omega(t)$:

$$|\varphi_k(t)\rangle = e^{-i(\lambda_k - \omega)t} (\alpha_k |1\rangle + \beta_k e^{-i\omega t} |2\rangle), \quad k = 1, 2, \quad (2)$$

где $|1\rangle$, $|2\rangle$ и $E_{1,2}$ – соответственно, волновые функции и энергии невозмущенных состояний;

$$\lambda_k = E_1 + \mu_k + \omega, \quad (k = 1, 2), \quad \mu_{1,2} = \frac{1}{2} \left(v \mp \sqrt{v^2 + 4|\Omega|^2} \right), \quad v = E_2 - E_1 - \omega, \quad (3)$$

$$\alpha_{1,2} = \left(\frac{\mu_{2,1}}{\mu_{2,1} - \mu_{1,2}} \right)^{1/2}, \quad \beta_{1,2} = \pm \frac{\Omega}{|\Omega|} \left(\frac{\mu_{1,2}}{\mu_{1,2} - \mu_{2,1}} \right)^{1/2}.$$

Решение уравнения Шредингера с гамильтонианом (1) представим в следующем виде:

$$\Phi_\lambda(t) = \sum_k e^{i\lambda_k t} a_k(\lambda) |\varphi_k(t)\rangle + \int dE \left[b_E^{(1)}(\lambda) |E\rangle_1 + e^{-i\omega t} b_E^{(2)}(\lambda) |E + \omega\rangle_1 \right]. \quad (4)$$

Тогда для фурье-компонент коэффициентов разложения получим следующую систему уравнений:

$$(\lambda - \lambda_k) a_k(\lambda) = \sum_{\alpha} \int W_k^{*(\alpha)}(E) b_E^{(\alpha)}(\lambda), \quad (5a)$$

$$(\lambda - E) b_E^{(\alpha)}(\lambda) = \sum_k W_k^{(\alpha)}(E) a_k(\lambda), \quad \alpha = 1, 2, \quad (5b)$$

где

$$W_k^{(\alpha)} = \begin{cases} \alpha_k \Omega_E + \beta_k U_E, & \alpha = 1, \\ \beta_k \Omega'_{E+\omega'}, & \alpha = 2. \end{cases} \quad (6)$$

Из уравнения (5b) имеем [7]

$$b_E^{(\alpha)}(\lambda) = \left[\frac{P}{E - \lambda} + z(\lambda) \delta(E - \lambda) \right] \sum_k W_k^{(\alpha)}(E) a_k(\lambda). \quad (7)$$

Подстановка выражения (7) в (4) приводит к следующему выражению для квазиэнергетической волновой функции:

$$\begin{aligned} \Phi_{\lambda}(t) = & \sum_k e^{i\lambda_k t} a_k(\lambda) |\Phi_k(t)\rangle + \int dE \left[\frac{P}{\lambda - E} + z(\lambda) \delta(\lambda - E) \right] \times \\ & \times \left(\sum_k \left[W_k^{(1)}(E) |E\rangle_1 + e^{-i\omega' t} W_k^{(2)}(E) |E + \omega'\rangle_2 \right] a_k(\lambda) \right). \end{aligned} \quad (8)$$

После подстановки выражения (7) в уравнение (5a) получим следующую систему алгебраических уравнений:

$$\sum_{k'} [\lambda_{k'} \delta_{kk'} + \Delta_{kk'}(\lambda)] a_{k'}(\lambda) + z(\lambda) \sum_k W_k^{*(\alpha)}(\lambda) X^{(\alpha)}(\lambda) = \lambda a_k(\lambda), \quad (9)$$

где

$$\Delta_{kk'}(\lambda) = \sum_{\alpha} P \int \frac{W_k^{*(\alpha)}(E) W_{k'}^{(\alpha)}(E)}{\lambda - E} dE \quad (10)$$

и

$$X^{(\alpha)}(\lambda) = \sum_k W_k^{(\alpha)}(\lambda) a_k(\lambda). \quad (11)$$

После диагонализации матрицы $\|\lambda_{k'} \delta_{kk'} + \Delta_{kk'}(\lambda)\|$ получим следующую систему уравнений:

$$(\lambda - \tilde{\lambda}_{\mu}) \tilde{a}_{\mu}(\lambda) = z(\lambda) \sum_{\alpha} \tilde{W}_{\mu}^{*(\alpha)}(\lambda) X^{(\alpha)}(\lambda), \quad (12)$$

где знак $\sim$ означает унитарно преобразованные величины,

$$\tilde{\lambda}_{\mu} = \frac{1}{2} \left[\lambda_1 + \Delta_{11}(\lambda) + \lambda_2 + \Delta_{22}(\lambda) \pm \sqrt{(\lambda_1 + \Delta_{11}(\lambda) - \lambda_2 - \Delta_{22}(\lambda))^2 + 4|\Delta_{12}(\lambda)|^2} \right], \quad (13)$$

$X^{(\alpha)}(\lambda)$ является собственным вектором эрмитовой матрицы реакции $K^{(\alpha)}(\lambda)$:

$$K^{(\alpha)}(\lambda) = -2\pi W^{(\alpha)}(\lambda) [\lambda I - \Lambda - \Delta(\lambda)]^{-1} W^{+(\alpha)}(\lambda), \quad (14)$$

а

$$\Lambda_{ik} = \lambda_i \delta_{ik} \quad (15)$$

с собственным значением $-2\pi/z_j(\lambda)$, где $z_j(\lambda)$ имеет вид ($j=1,2$)

$$z_L^{(j)}(\lambda) = \frac{1}{2} \frac{1}{\left(\sum_{\mu} \frac{|\tilde{W}_{\mu}^{(1)}(\lambda)|^2}{\lambda - \tilde{\lambda}_{\mu}} \right) \left(\sum_{\mu} \frac{|\tilde{W}_{\mu}^{(2)}(\lambda)|^2}{\lambda - \tilde{\lambda}_{\mu}} \right) - \left| \sum_{\mu} \frac{\tilde{W}_{\mu}^{*(1)}(\lambda) \tilde{W}_{\mu}^{(2)}(\lambda)}{\lambda - \tilde{\lambda}_{\mu}} \right|^2} \times$$

$$\times \left\{ \sum_{\mu} \frac{|\tilde{W}_{\mu}^{(1)}(\lambda)|^2 + |\tilde{W}_{\mu}^{(2)}(\lambda)|^2}{\lambda - \tilde{\lambda}_{\mu}} \pm \left[\sum_{\mu} \left(\frac{|\tilde{W}_{\mu}^{(1)}(\lambda)|^2 - |\tilde{W}_{\mu}^{(2)}(\lambda)|^2}{\lambda - \tilde{\lambda}_{\mu}} \right)^2 + 4 \left| \sum_{\mu} \frac{\tilde{W}_{\mu}^{*(2)}(\lambda) \tilde{W}_{\mu}^{(2)}(\lambda)}{\lambda - \tilde{\lambda}_{\mu}} \right|^2 \right]^{\frac{1}{2}} \right\}. \quad (16)$$

Функции $X_{j'}^{(\alpha)}(\lambda)$ удовлетворяют условию

$$\sum_{\alpha} X_{j'}^{*(\alpha)}(\lambda) X_{j'}^{(\alpha)}(\lambda) = \delta_{jj'} / (\pi^2 + z_l^{(j)2}(\lambda)). \quad \alpha, j=1,2. \quad (17)$$

Из соотношения (17) получаем следующее условие ортонормировки для квазиэнергетических функций (8):

$$\langle \Phi_{\lambda'}^{(j')}(\lambda) | \Phi_{\lambda}^{(j)}(\lambda) \rangle = \delta(\lambda - \lambda') \delta_{j'j}. \quad (18)$$

Функции $X_{j'}^{(\alpha)}(\lambda)$ ($\alpha=1,2$) связаны следующими соотношениями:

$$X_j^{(2)}(\lambda) = \frac{1 - z_j(\lambda) \sum_{\mu} \frac{|\tilde{W}_{\mu}^{(1)}(\lambda)|^2}{\lambda - \tilde{\lambda}_{\mu}}}{z_j(\lambda) \sum_{\mu} \frac{\tilde{W}_{\mu}^{(1)}(\lambda) \tilde{W}_{\mu}^{*(2)}(\lambda)}{\lambda - \tilde{\lambda}_{\mu}}} X_j^{(1)}(\lambda), \quad (19a)$$

или

$$X_j^{(2)}(\lambda) = \frac{z_j(\lambda) \sum_{\mu} \frac{\tilde{W}_{\mu}^{*(1)}(\lambda) \tilde{W}_{\mu}^{(2)}(\lambda)}{\lambda - \tilde{\lambda}_{\mu}}}{1 - z_j(\lambda) \sum_{\mu} \frac{|\tilde{W}_{\mu}^{(2)}(\lambda)|^2}{\lambda - \tilde{\lambda}_{\mu}}} X_j^{(1)}(\lambda). \quad (19b)$$

Из условия (17) и исходя из выражений (19a,b) получаем:

$$|X_j^{(1)}(\lambda)|^2 = \frac{1}{\pi^2 + z_j^2(\lambda)} \frac{1 - z_j(\lambda) \sum_{\mu} \frac{|\tilde{W}_{\mu}^{(2)}(\lambda)|^2}{\lambda - \tilde{\lambda}_{\mu}}}{2 - z_j(\lambda) \sum_{\mu} \frac{|\tilde{W}_{\mu}^{(1)}(\lambda)|^2 + |\tilde{W}_{\mu}^{(2)}(\lambda)|^2}{\lambda - \tilde{\lambda}_{\mu}}}, \quad (20a)$$

$$\left|X_j^{(2)}(\lambda)\right|^2 = \frac{1}{\pi^2 + z_j^2(\lambda)} \frac{1 - z_j(\lambda) \sum_{\mu} \left|\tilde{W}_{\mu}^{(1)}(\lambda)\right|^2 / (\lambda - \tilde{\lambda}_{\mu})}{2 - z_l(\lambda) \sum_{\mu} \left(\left|\tilde{W}_{\mu}^{(1)}(\lambda)\right|^2 + \left|\tilde{W}_{\mu}^{(2)}(\lambda)\right|^2\right) / (\lambda - \tilde{\lambda}_{\mu})}. \quad (20b)$$

3. Поперечные сечения упругого и неупругого рассеяния, длина рассеяния

Асимптотические выражения волновых функций непрерывного спектра с орбитальным моментом l $|E\rangle_1^{(l)}$ и $|E + \omega'\rangle_2^{(l)}$ на больших расстояниях ($r \rightarrow \infty$) имеют следующий вид:

$$|E\rangle_1^{(l)} \propto \frac{1}{k_1(E)r_1} \sin\left[k_1(E)r_1 + \delta_l - \frac{1}{2}l\pi\right] P_l(\cos\Theta_1), \quad (21a)$$

$$|E + \omega'\rangle_2^{(l)} \propto \frac{1}{k_2(E + \omega')r_2} \sin\left[k_2(E + \omega')r_2 + \delta_l - \frac{1}{2}l\pi\right] P_l(\cos\Theta_2), \quad (21b)$$

где $P_l(\cos\Theta)$ – полином Лежандра.

Учитывая, что волновые функции связанных состояний атомов $|\varphi_k(t)\rangle = 0$ при больших расстояниях между атомами ($r \rightarrow \infty$), можем записать квазиэнергетические функции (8), после подстановки выражений (21a,b), в следующем виде:

$$\begin{aligned} \Phi_{\lambda,j}^{(l)}(t) \propto & -\frac{\pi}{k_1(\lambda)r_1} X_{j1}^{(l)} \frac{1}{\sin\eta_l^{(j)}(\lambda)} \sin\left(k(\lambda)r_1 + \delta_l + \eta_l^{(j)}(\lambda) - \frac{l\pi}{2}\right) P_l(\cos\Theta_1) - \\ & -\frac{\pi}{k_2(\lambda + \omega')r_2} X_{j2}^{(l)} \frac{e^{-i\omega t}}{\sin\eta_l^{(j)}(\lambda)} \sin\left(k(\lambda + \omega')r_2 + \delta_l + \eta_l^{(j)}(\lambda) - \frac{l\pi}{2}\right) P_l(\cos\Theta_2), \end{aligned} \quad (22)$$

где δ_l – фаза потенциального (нерезонансного) рассеяния, а $\eta_l^{(j)}$ – фаза, обусловленная резонансным рассеянием с образованием резонансов Фешбаха, индекс j ($j = 1, 2$) соответствует двум значениям функции $z_l^{(j)}(\lambda)$ (16):

$$\tan\eta_l^{(j)}(\lambda) = -1/\bar{z}_l^{(j)}(\lambda), \quad \bar{z}_l^{(j)}(\lambda) = z_l^{(j)}(\lambda)/\pi. \quad (23)$$

Представим вектор состояния для рассеяния, когда $r \rightarrow \infty$, в виде суперпозиции квазиэнергетических функций (22):

$$\begin{aligned} \Phi_{\lambda}(t, 1 \rightarrow 1, 2) = & -\sum_j \sum_l B_j^{(l)}(\lambda) (2l+1) i^l e^{i(\delta_l + \eta_l^{(j)}(\lambda))} \times \\ & \times \left\{ \frac{X_{j1}^{(l)}(\lambda)}{k_1(\lambda)r_1} \frac{\pi}{k(\lambda)r_1} \sin\left(k_1(\lambda)r_1 + \delta_l + \eta_l^{(j)}(\lambda) - \frac{l\pi}{2}\right) P_l(\cos\Theta_1) + \right. \\ & \left. + \frac{X_{j2}^{(l)}}{k_2(\lambda + \omega')r_2} e^{-i\omega t} \sin\left(k_2(\lambda + \omega')r_2 + \delta_l + \eta_l^{(j)}(\lambda) - \frac{l\pi}{2}\right) P_l(\cos\Theta_2) \right\}. \end{aligned} \quad (24)$$

Из требования, чтобы в первом упругом канале присутствовали падающая и расходящаяся волны, а во втором неупругом канале отсутствовала падающая волна, для коэффициентов разложения (24) $B_j^{(l)}(\lambda)$ получим

$$B_1^{(j)}(\lambda) = \frac{X_{2,2}^{(l)}}{\det[X_{ij}^{(l)}(\lambda)]}, \quad (25a)$$

$$B_2^{(j)}(\lambda) = \frac{X_{1,2}^{(l)}}{\det[X_{ij}^{(l)}(\lambda)]}. \quad (25b)$$

Исходя из выражения для вектора состояния (24), для амплитуд упругого и неупругого рассеяний будем иметь следующие выражения:

$$f_{\text{el}}(\Theta) = -\frac{1}{2ik} \sum_j \sum_l B_j^{(l)}(\lambda) (2l+1) i^l X_{j1}^{(l)}(\lambda) (S_l^{(j)}(\lambda) - 1) P_l(\cos \Theta), \quad (26a)$$

$$f_{\text{inel}}(\Theta) = -\frac{1}{2ik} \sum_j \sum_l B_j^{(l)}(\lambda) (2l+1) i^l X_{j2}^{(l)}(\lambda) S_l^{(j)}(\lambda) P_l(\cos \Theta), \quad (26b)$$

где

$$S_l^{(j)}(\lambda) = e^{2i(\delta_l + \eta_l^{(j)}(\lambda))}. \quad (27)$$

Подставляя выражение для коэффициентов $B_j^{(l)}(\lambda)$ из (25a,b) в выражения (26a,b), для амплитуд рассеяния получим

$$f_{\text{el}}(\Theta) = -\frac{1}{2ik} \sum_l (2l+1) i^l (S_l(\lambda) - 1) P_l(\cos \Theta), \quad (28a)$$

$$f_{\text{inel}}(\Theta) = -\frac{1}{2ik} \sum_l (2l+1) A_3(\lambda) i^l (S_l^{(1)}(\lambda) - S_l^{(2)}(\lambda)) P_l(\cos \Theta), \quad (28b)$$

где $S_l(\lambda)$ – диагональный элемент S -матрицы:

$$S_l(\lambda) = A_1^{(l)}(\lambda) S_l^{(1)}(\lambda) + A_2^{(l)}(\lambda) S_l^{(2)}(\lambda), \quad (29)$$

и

$$A_1^{(l)}(\lambda) = \frac{X_{11}^{(l)}(\lambda) X_{22}^{(l)}(\lambda)}{\det[X_{ij}^{(l)}(\lambda)]}, \quad (30a)$$

$$A_2^{(l)}(\lambda) = -\frac{X_{12}^{(l)}(\lambda) X_{21}^{(l)}(\lambda)}{\det[X_{ij}^{(l)}(\lambda)]}, \quad (30b)$$

$$A_3^{(l)}(\lambda) = \frac{X_{12}^{(l)}(\lambda) X_{22}^{(l)}(\lambda)}{\det[X_{ij}^{(l)}(\lambda)]}. \quad (30c)$$

Последние величины можно представить в следующем виде:

$$A_1^{(l)}(\lambda) = \frac{z_1^{(L)}(\lambda)}{z_1^{(L)}(\lambda) - z_2^{(L)}(\lambda)} \left(1 - z_2^{(j)}(\lambda) \sum_{\mu} \frac{|\tilde{W}_{\mu}^{(1)}(\lambda)|^2}{\lambda - \tilde{\lambda}_{\mu}} \right), \quad (31a)$$

$$A_2^{(l)}(\lambda) = \frac{z_2^{(L)}(\lambda)}{z_1^{(L)}(\lambda) - z_2^{(L)}(\lambda)} \left(1 - z_1^{(j)}(\lambda) \sum_{\mu} \frac{|\tilde{W}_{\mu}^{(2)}(\lambda)|^2}{\lambda - \tilde{\lambda}_{\mu}} \right), \quad (31b)$$

$$A_3^{(l)}(\lambda) = \frac{1}{z_1^{(L)}(\lambda) - z_2^{(L)}(\lambda)} \frac{\left(1 - z_1^{(j)}(\lambda) \sum_{\mu} \frac{|\tilde{W}_{\mu}^{(1)}(\lambda)|^2}{\lambda - \tilde{\lambda}_{\mu}} \right) \left(1 - z_2^{(j)}(\lambda) \sum_{\mu} \frac{|\tilde{W}_{\mu}^{(2)}(\lambda)|^2}{\lambda - \tilde{\lambda}_{\mu}} \right)}{\sum_{\mu} \frac{\tilde{W}_{\mu}^{(1)}(\lambda) \tilde{W}_{\mu}^{(2)*}(\lambda)}{\lambda - \tilde{\lambda}_{\mu}}}. \quad (31c)$$

Исходя из выражений для амплитуд упругого (28a) и неупругого (28b) рассеяния, для поперечных сечений получим следующие известные выражения:

$$\sigma_{el} = \frac{\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) |1 - S_l(\lambda)|^2, \quad (32a)$$

$$\sigma_{inel} = \frac{\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) (1 - |S_l(\lambda)|^2). \quad (32b)$$

Выражение (29) для $S_l(\lambda)$ при $\eta_l^{(j)}(\lambda) = 0$ ($j = 1, 2$) и с учетом равенства $A_1^{(l)}(\lambda) + A_2^{(l)}(\lambda) = 1$ дает

$$S_l(\lambda) = e^{2i\delta_l}, \quad (33)$$

т.е. сечение неупругого рассеяния обращается в нуль, а сечение упругого рассеяния переходит в сечение потенциального рассеяния. После подстановки выражения (29) в (31a,b) получим

$$\sigma_{el} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \left| \sin \delta_l - \left[A_1(\lambda) e^{i\eta_l^{(1)}(\lambda)} \sin \eta_l^{(1)}(\lambda) + A_2(\lambda) e^{i\eta_l^{(2)}(\lambda)} \sin \eta_l^{(2)}(\lambda) \right] e^{i\delta_l} \right|^2, \quad (34a)$$

$$\sigma_{inel} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) |A_3(\lambda)|^2 \sin^2(\eta_l^{(2)}(\lambda) - \eta_l^{(1)}(\lambda)). \quad (34b)$$

Выделим в формулах (34a,b) резонансное состояние с орбитальным моментом L и представим потенциальную часть рассеяния в виде

$$\sigma_{pot} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l \neq L} (2l+1) \sin^2 \delta_l. \quad (35)$$

Полное поперечное сечение упругого рассеяния представим в виде

$$\sigma_{\text{tot}}^{\text{el}} = \sigma_{\text{pot}} + \sigma_{\text{res}}^{\text{el}}, \quad (36)$$

где резонансное слагаемое определяется выражением

$$\frac{\sigma_{\text{res}}^{\text{el}}}{\sigma_{\text{nonres}}} = \left| A_1^{(L)}(\lambda) \right|^2 F_1(\lambda) + \left| A_2^{(L)}(\lambda) \right|^2 F_2(\lambda) + 2 \left| A_3^{(L)}(\lambda) \right|^2 F_3(\lambda). \quad (37)$$

Здесь σ_{nonres} – поперечное сечение с орбитальным моментом L при отсутствии резонансного состояния [8]:

$$\sigma_{\text{nonres}} = \frac{4\pi}{k^2} (2L+1) \sin^2 \delta_L, \quad (38)$$

а

$$F_j(\lambda) = \frac{\left(\chi_L + \bar{z}_j^{(L)}(\lambda) \right)^2}{1 + \bar{z}_j^{(L)}(\lambda)^2}, \quad (j=1,2) \quad (39a)$$

$$F_3(\lambda) = \frac{\chi_L^2 (1 + \bar{z}_1^{(L)}(\lambda) \bar{z}_2^{(L)}(\lambda)) (\chi_L + \bar{z}_1^{(L)}(\lambda)) (\chi_L + \bar{z}_2^{(L)}(\lambda))}{(1 + \bar{z}_1^{(L)}(\lambda)) (1 + \bar{z}_2^{(L)}(\lambda))}, \quad (39b)$$

где

$$\chi_L = -\cot \delta_L. \quad (40)$$

Исходя из выражения (34b), для сечения неупругого резонансного рассеяния с орбитальным моментом L получаем

$$\sigma_{\text{inel}} = \frac{4\pi}{k^2} (2L+1) \left| A_3(\lambda) \right|^2 \sin^2 \left(\eta_L^{(2)}(\lambda) - \eta_L^{(1)}(\lambda) \right). \quad (41)$$

Графическое представление выражений (37) и (41) для упругого и неупругого рассеяния приведено на рис.2. В полученные выражения для сечений входят две фазы рассеяния – $\eta_L^{(1)}(\lambda)$ и $\eta_L^{(2)}(\lambda)$, связанные соотношением

$$\tan \eta_L^{(1)}(\lambda) + \tan \eta_L^{(2)}(\lambda) = - \sum_{\mu} \frac{\tilde{\Gamma}_{\mu}^{(L)}(\lambda)}{\lambda - \tilde{\lambda}_{\mu}}, \quad (42)$$

где

$$\tilde{\Gamma}_{\mu}^{(\alpha)L}(\lambda) = 2\pi \left| \tilde{W}_{\mu}^{(\alpha)L}(\lambda) \right|^2, \quad \tilde{\Gamma}_{\mu}^{(L)}(\lambda) = \sum_{\alpha} \tilde{\Gamma}_{\mu}^{(\alpha)}(\lambda), \quad \alpha, \mu = 1, 2. \quad (43)$$

Вводя приведенное значение для величин $\bar{z}_j^{(L)}(\lambda)$

$$Z^{(L)}(\lambda) = \frac{\bar{z}_1^{(L)}(\lambda) \bar{z}_2^{(L)}(\lambda)}{\bar{z}_1^{(L)}(\lambda) + \bar{z}_2^{(L)}(\lambda)}, \quad (44)$$

выражение (42) можно записать в виде

$$Z^{(L)}(\lambda) = \left[\sum_{\mu} \frac{\tilde{\Gamma}_{\mu}^{(L)}(\lambda)/2}{\lambda - \tilde{\lambda}_{\mu}} \right]^{-1}. \quad (45)$$

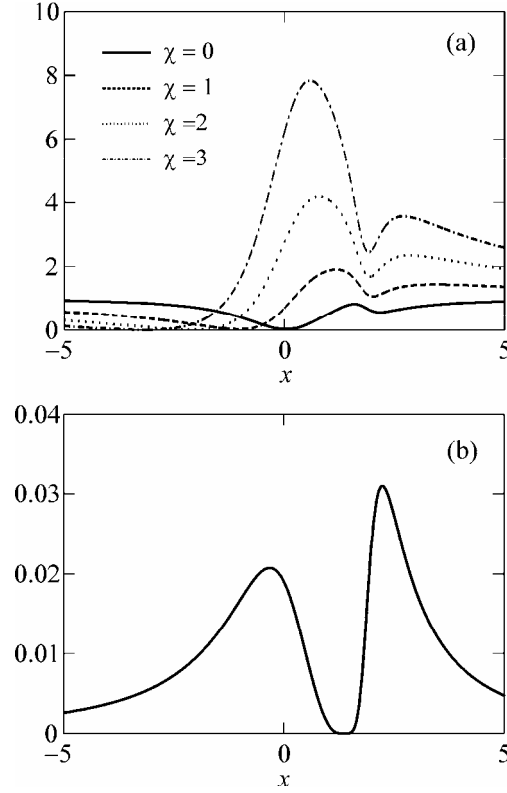


Рис.2. Графические представления поперечных сечений упругого (a) и неупругого (b) рассеяний в зависимости от $x = (\lambda - \tilde{\lambda}_1) / (\tilde{\Gamma}_1^{(1)}/2)$ при значениях $\tilde{\Gamma}_2^{(1)}/2 = 0.1$, $\tilde{\Gamma}_1^{(2)}/2 = 0.2$, $\tilde{\Gamma}_2^{(2)}/2 = 0.4$, $\Omega = 1$, $\nu = 0$ (все величины приведены в единицах $\tilde{\Gamma}_1^{(1)}/2$).

Для нахождения длины рассеяния рассмотрим амплитуды (28), где $S_l(\lambda)$ определяется соотношением (29). Введем комплексную фазу $\bar{\eta}_L(\lambda)$:

$$S_l(\lambda) = e^{2i\bar{\eta}_L(\lambda)}. \quad (46)$$

Исходя из выражения (29), для комплексной фазы $\bar{\eta}_L(\lambda)$ из (46) получим

$$\bar{\eta}_L(\lambda) = \delta_L + \frac{1}{2i} \ln \sum_j A_j^{(L)}(\lambda) e^{2i\eta_j^{(L)}(\lambda)}. \quad (47)$$

Из выражений (23) имеем

$$e^{2i\eta_j^{(L)}(\lambda)} = \left(\bar{Z}_j^{(L)}(\lambda) - i \right) / \left(\bar{Z}_j^{(L)}(\lambda) + i \right). \quad (48)$$

Тогда выражение (47) принимает вид

$$\bar{\eta}_L(\lambda) = \delta_L + \frac{1}{2i} \ln \sum_j A_j^{(L)}(\lambda) \frac{\bar{z}_j^{(L)}(\lambda) - i}{\bar{z}_j^{(L)}(\lambda) + i}. \quad (49)$$

Определим «эффективную» длину рассеяния:

$$a_{\text{eff}}^{(L)}(k) = -\frac{\bar{\eta}_L(k)}{k}, \quad (50)$$

где $k = \sqrt{m\lambda/\hbar^2}$, а m – масса отдельного атома. Подставляя выражение для фазы $\bar{\eta}_L(k)$ из (49) в «эффективную» длину рассеяния (50), можно представить ее в виде

$$a_{\text{eff}}^{(L)}(k) = a_0^{(L)}(k) + a_{\text{eff}}^{(L)\text{res}}(k), \quad (51)$$

где $a_0^{(L)}(k) = -\delta_L(k)/k$ суть фоновая длина, обусловленная потенциальным рассеянием; при этом величина

$$a_{\text{eff}}^{(L)\text{res}}(k) = -\frac{1}{2i} \frac{1}{k} \ln \sum_j A_j^{(L)}(k) \frac{\bar{z}_j^{(L)}(k) - i}{\bar{z}_j^{(L)}(k) + i} \quad (52)$$

является комплексной.

В случае холодных атомов $k \rightarrow 0$ и с угловым моментом $L = 0$ (S -волна) мы можем ввести «приведенную» ширину $\tilde{\gamma}$ лазерно-индуцированных распадов. Для длины рассеяния, когда $k \rightarrow 0$, получаем

$$a = a_0 + a_{\text{res}}, \quad (53)$$

где a_0 – фоновое значение, а a_{res} – резонансная часть длины рассеяния. Для a_{res} получим следующее выражение:

$$a_{\text{res}} = -\left(\frac{\tilde{\gamma}_1^{(1)}}{\tilde{\lambda}_1} + \frac{\tilde{\gamma}_2^{(1)}}{\tilde{\lambda}_2} \right), \quad (54)$$

где $\tilde{\lambda}_1$ и $\tilde{\lambda}_2$ определяются выражением (13). Длина рассеяния (54), как видно, совпадает с выражением для случая упругого рассеяния, полученным в [9]. Из выражения (54) видно, что длина рассеяния зависит от напряженности поля лазерного излучения и величины индукции магнитного поля.

4. Заключение

Мы рассмотрели столкновение двух атомов с образованием резонанса Фешбаха во внешнем магнитном поле под действием лазерного излучения. Лазерное излучение связывает однофотонным резонансным взаимодействием Ω нижнее колебательное молекулярное состояние в открытом канале с вышележащим молекулярным состоянием в закрытом канале и с атомными состояниями в континууме (взаимодействие Ω_E). Взаимодействием Ω'_E верхнее дискрет-

ное состояние связывается со вторым континуумом и обуславливает лазерно-индуцированное неупругое рассеяние. Одновременное воздействие магнитного поля и лазерного излучения дает возможность управлять образованием фешбаховского резонанса посредством изменения величины магнитного поля и частоты лазерного излучения. Получены поперечные сечения упругого и неупругого резонансного столкновения двух атомов и длина рассеяния в зависимости от величины магнитного поля и интенсивности лазерного излучения. Показано, что эти сечения определяются двумя фазами и получена связь между ними. При отсутствии неупругого канала рассеяния выражения для сечений переходят в соответствующие выражения работы [9].

Работа выполнена в рамках Международных грантов Volkswagen Stiftung I/84 953, ANSEF-optPS-2911 и гранта Министерства образования и науки РА 11-1с124.

ЛИТЕРАТУРА

1. **E.Timmermans, P.Tommasini, M.Hussein, A.Kerman.** Phys. Rep., **315**, 199 (1999).
2. **R.A.Duine, H.T.C.Stoof.** Phys. Rep., **396**, 115 (2004).
3. **Ch.Chin, R.Grimm, P.Julienne, E.Tiesinga.** Rev. Mod. Phys., **82**, 1225 (2010).
4. **K.Winkler, F.Lang, G.Thalhammer, P.v.d. Straten, R.Grimm, J.Hecker Denschlag.** Phys. Rev. Lett., **98**, 043201 (2007).
5. **K.Bergmann, H.Theuer, B.W.Shore.** Rev. Phys., **70**, 1003 (1998).
6. **S.J.Kokkelmans, H.M.J.Vissers, B.J.Verhaar.** Phys. Rev. A, **63**, 031601 (2001).
7. **U.Fano.** Phys. Rev., **124**, 1866 (1961).
8. **H.Messy.** Negative Ions. Cambridge, London, New York, Melbourne, Cambridge University Press, 1976.
9. **Э.А.Газазян, А.Д.Газазян, В.О.Чалтыкян.** Изв. НАН Армении, Физика, **46**, 321 (2011).

COLLISION OF ATOMS UNDER ACTION OF EXTERNAL MAGNETIC AND LASER RADIATION FIELDS WITH FORMATION OF FANO–FESHBACH RESONANCES

E.A. GAZAZYAN, A.D. GAZAZYAN, V.O. CHALTYKYAN

We investigate collision of two atoms in an external magnetic field and in the field of laser radiation with formation of Fano–Feshbach resonances. At one-photon resonance of laser radiation with two discrete vibrational states of molecule the dressed states are formed (Autler–Townes effect) which form Fano–Feshbach resonances in interaction with the external magnetic field. In addition, the lower molecular vibrational state is coupled with the continuum of the elastic channel via also LICS (laser-induced continuum structure) forming laser-induced resonance. We obtain cross-sections of elastic and inelastic resonant scattering and expression for the scattering length depending on the external magnetic and laser radiation fields.

УДК 548.0

**РАСПРОСТРАНЕНИЕ СВЕТА ЧЕРЕЗ СТОПКУ ИЗ ПРАВО-
И ЛЕВОВРАЩАЮЩИХ СЛОЕВ ХОЛЕСТЕРИЧЕСКОГО
ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА С ИНДЕФИНИТНЫМИ
ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ И МАГНИТНОЙ ПРОНИЦАЕМОСТЯМИ.
I. ОСОБЕННОСТИ ОТРАЖЕНИЯ**

А.А. ГЕВОРГЯН

Ереванский государственный университет, Армения

(Поступила в редакцию 25 мая 2012 г.)

Исследованы оптические свойства стопки из право- и левовращающих слоев холестерического жидкого кристалла (ХЖК) с локально индефинитной диэлектрической и магнитной проницаемостями. Задача решена модифицированным методом сложения слоев Амбарцумяна. Исследованы особенности спектров отражения этой системы и показано, что, в отличие от единичного слоя ХЖК, эта система имеет многократные фотонные запрещенные зоны (ФЗЗ). Показано, что индефинитный характер диэлектрической и магнитной проницаемостей существенно влияет на карту ФЗЗ системы. Эти многократные ФЗЗ могут найти широкое применение, в частности, в производстве дисплеев.

1. Введение

В последние годы возрос интерес к созданию новых сред (метаматериалов) в связи с их применением в фотонике и оптоэлектронике [1-3]. Метаматериалы – это искусственно созданные композиты, содержащие суб-длинноволновые структуры и демонстрирующие такие линейные и нелинейные оптические свойства, как отрицательное преломление, обратный эффект Доплера, распространение энергии электромагнитной волны в сторону, обратную волновому вектору, и др. [1-9]. По-прежнему остаются в центре внимания фотонные кристаллы (ФК). В их спектре пропускания существует фотонная запрещенная зона (ФЗЗ), частотную ширину и частотное местоположение которой можно изменить либо внешними полями, либо изменением внутренней структуры кристалла [10-13]. Оптические устройства, изготовленные на основе ФК, обладают такими ценными свойствами, как многофункциональность и управляемость, компактность и малые энергетические потери, высокая надежность и хорошая совместимость с другими оптическими устройствами. ФК с управляемыми параметрами представляют особенно большой интерес. Классическим примером ФК с легко управляемыми параметрами является холестерический жидкий кристалл (ХЖК). ХЖК обладают свойством спонтанной самоорганизации своей периодической структуры и образуются из палочкоподобных и хиральных молекул.

Последние придают среде геликоидальную структуру. ХЖК обладают единственной ФЗЗ (при нормальном падении света) и связанную с этим одноцветным отражением циркулярно поляризованной падающей волны, совпадающей со знаком хиральности среды. Параметры ХЖК могут легко управляться внешними электрическим, магнитным или сильным световым полями, термическим градиентом, или УФ излучением, и т.д. Подходящим изменением параметров слоя ХЖК можно управлять также его ФЗЗ и другими оптическими характеристиками.

С другой стороны, в последнее время представляют большой интерес ФК с многократными (многоцветными) ФЗЗ. Они находят широкое применение, в частности, в производстве дисплеев. О формировании многократных ФЗЗ в одномерных многослойных структурах, содержащих слои ХЖК и изотропные (анизотропные) слои, а также в квазипериодических системах, описываемых рядом Фибоначчи, сообщалось в ряде теоретических и экспериментальных работ [14-20]. Исследования в этом направлении продолжают оставаться актуальными.

В работе [21] теоретически исследованы особенности отражения от двух слоев ХЖК, отличающихся друг от друга только знаком спирали. Показано, что эта система позволяет получить 100%-ное поляризованное дифракционное отражение. Собственные поляризации этой системы вырождены. С другой стороны, экспериментально показано, что введение фотополимеризующего мономера в холестерическую среду может генерировать области с обратной спиральностью (после термоотвердевания УФ светом) [22,23]. Таким примером является, например, полимер-холестерический гель, который работает как ультрафиолетовый (практически не зависящий от поляризации падающей волны) сверх-отражатель. В работе [24] экспериментально исследованы оптические свойства новой гибридной структуры (состоящей из активированного красителем ХЖК с низкой молекулярной массой, обложенной с обеих сторон стопками из слоев право- и левовращающих полимеризованных слоев ХЖК), и установлены ее генерационные свойства. Показано, что при этом порог лазерной генерации значительно уменьшается. В работе [25] предложен поляризационно-универсальный режекторный фильтр на основе закрученного нематического ЖК. В этом устройстве директор нематика не вращается геликоидально (вокруг фиксированной оси, как в ХЖК). Вместо этого он осциллирует в поперечной плоскости. Другими словами, предложенный в [25] ФК является структурно хиральным с периодическим поперечным возмущением. В работе [26] теоретически исследованы оптические свойства структурно хиральной среды с периодическим поперечным возмущением, таким, что ее элементарная ячейка состоит из структурно левовращающего и правовращающего половинок. Показано, что эта система имеет электрически управляемую поляризационно нечувствительную ФЗЗ (при нормальном падении света). В наших недавних работах [27,28] исследованы оптические свойства стопки, состоящей из право- и левовращающих слоев ХЖК, при слабой локальной диэлектрической анизотропии. В работе [29]

проведены аналогичные исследования в случае стопки из право- и левовращающих ХЖК с локальными (как диэлектрической, так и магнитной) анизотропиями.

В данной работе исследованы отражательные свойства многослойной системы, состоящей из стопки право- и левовращающих слоев ХЖК в общем случае, при локально индефинитных диэлектрической и магнитной проницаемостях (рис.1). (Среда называется индефинитной, если реальные части тензоров диэлектрической и магнитной проницаемостей имеют разные знаки.) Найдено много новых и интересных свойств этой системы, которые могут иметь важные применения.

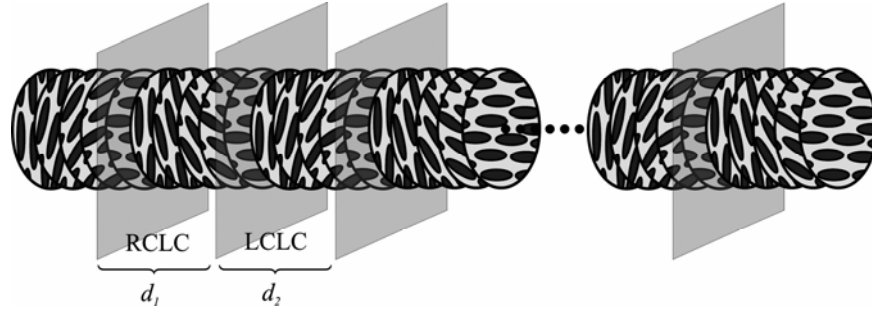


Рис.1. Схема стопки из право- и левовращающих слоев ХЖК.

2. Метод анализа

Задача решена модифицированным методом сложения слоев Амбарцумяна [20,27]. Согласно этому методу, если имеется система, состоящая из двух приложенных друг к другу (слева направо) слоев A и B , то матрицы отражения и пропускания системы $A+B$, а именно, $\hat{R}_{A+B}$ и $\hat{T}_{A+B}$, выражаются через соответствующие матрицы составляющих слоев A и B с помощью следующих матричных уравнений:

$$\hat{R}_{A+B} = \hat{R}_A + \tilde{\hat{T}}_A \hat{R}_B \left[\hat{I} - \tilde{\hat{R}}_A \hat{R}_B \right]^{-1} \hat{T}_A, \quad \hat{T}_{A+B} = \hat{T}_B \left[\hat{I} - \tilde{\hat{R}}_A \hat{R}_B \right]^{-1} \hat{T}_A, \quad (1)$$

где $\hat{I}$ – единичная матрица, а тильдой обозначены матрицы отражения и пропускания при обратном направлении распространения света. Например, в том случае, когда рассматриваемый слой с обеих сторон граничит с одной и той же средой, матрицы отражения и пропускания (при падении света справа и слева) связаны следующими соотношениями:

$$\tilde{\hat{T}} = \hat{F}^{-1} \hat{T} \hat{F}, \quad \tilde{\hat{R}} = \hat{F}^{-1} \hat{R} \hat{F}, \quad (2)$$

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

Расчет прохождения (отражения) через стопки слоев право- и левовращающих слоев ХЖК выполнен на основании матричных уравнений (1), путем их последовательного применения по мере добавления новых подслоев ХЖК к стопке, которая рассматривается как слой A , а вновь добавленная – как слой B . Поэтому для организации вычислений удобнее систему (1) представить в виде системы разностных матричных уравнений:

$$\hat{R}_j = \hat{r}_j + \tilde{t}_j \hat{R}_{j-1} \left(\hat{I} - \tilde{r}_j \hat{R}_{j-1} \right)^{-1} \hat{t}_j, \quad \hat{T}_j = \hat{T}_{j-1} \left(\hat{I} - \tilde{r}_j \hat{R}_{j-1} \right)^{-1} \hat{t}_j, \quad (3)$$

с $\hat{R}_0 = \hat{0}$ и $\hat{T}_0 = \hat{I}$. Здесь $\hat{R}_j$, $\hat{T}_j$, $\hat{R}_{j-1}$ и $\hat{T}_{j-1}$ – матрицы отражения и пропускания для системы с j и $j-1$ подслоями, соответственно, $\hat{r}_j$, $\hat{t}_j$ – матрицы отражения и пропускания j -ого подслоя, $\hat{0}$ – нулевая матрица.

3. Спектры отражения

Рассмотрим спектральные свойства многослойной структуры, представляющей стопку из право- и левовращающих слоев ХЖК.

С экспериментальной точки зрения, создание стопки из право- и левовращающих слоев ХЖК может реализоваться, в частности, на основе слоев полимеризованных ХЖК, как это было выполнено, например, в работе [24]. И, кроме того, как уже экспериментально было показано [22,23], введение фотополимеризующего мономера в холестерическую среду может генерировать области с обратной спиральностью (после термоотверждения УФ светом).

Диэлектрическая анизотропия $\Delta = (\epsilon_1 - \epsilon_2)/2$ для обычных ХЖК порядка 0.5 и меньше. Но в последние годы создаются искусственные кристаллы (метаматериалы), диэлектрическая и магнитная анизотропии которых могут варьироваться в существенно больших пределах. По-видимому, на их основе могут быть созданы также спиральные периодические среды, подобные ХЖК, имеющие огромную локальную анизотропию. Такие среды со сравнительно слабой анизотропией уже давно созданы [30,31]. С другой стороны, в последнее время интерес к ХЖК, обогащенным наночастицами (либо ферроэлектрическими, либо ферромагнитными) также сильно возрос (см. [32], а также цитируемую там литературу). Присутствие наночастиц в структуре ХЖК приводит к существенному увеличению локальной (и диэлектрической, и магнитной) анизотропии; к значительному изменению температуры перехода изотропная фаза–жидкокристаллическая фаза; к значительному изменению частотной ширины и частотного местоположения ФЗЗ; к изменению коэффициентов упругости ХЖК; к значительному увеличению управляемости ХЖК и т.д.

Из вышесказанного следует, что исследование особенностей оптических свойств стопки из право- и левовращающих слоев ХЖК (при различных значениях локальных диэлектрической и магнитной анизотропий) представляет большой интерес.

Для лучшего понимания нижепредставленных результатов, обсудим некоторые особенности оптических свойств единственного слоя ХЖК с диэлек-

трической и магнитной анизотропиями (при нормальном падении). Как известно, решение уравнений Максвелла для ХЖК с тензорами диэлектрической и магнитной проницаемости вида

$$\begin{aligned}\hat{\varepsilon}(z) &= \varepsilon_m \begin{pmatrix} 1 + \delta_\varepsilon \cos 2az & \delta_\varepsilon \sin 2az & 0 \\ \delta_\varepsilon \sin 2az & 1 - \delta_\varepsilon \cos 2az & 0 \\ 0 & 0 & 1 - \delta_\varepsilon \end{pmatrix}, \\ \hat{\mu}(z) &= \mu_m \begin{pmatrix} 1 + \delta_\mu \cos 2az & \delta_\mu \sin 2az & 0 \\ \delta_\mu \sin 2az & 1 - \delta_\mu \cos 2az & 0 \\ 0 & 0 & 1 - \delta_\mu \end{pmatrix},\end{aligned}\quad (4)$$

(где обозначено $\varepsilon_m = (\varepsilon_1 + \varepsilon_2)/2$, $\mu_m = (\mu_1 + \mu_2)/2$, $\delta_\varepsilon = (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)/(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)$, $\delta_\mu = (\mu_1 - \mu_2)/(\mu_1 + \mu_2)$, ε_1 и ε_2 – главные значения тензора диэлектрической проницаемости, а μ_1 и μ_2 – главные значения тензора магнитной проницаемости, $a = 2\pi/p$, p – шаг спирали), имеет вид:

$$\mathbf{E}(z, t) = \sum_{j=1}^4 \left[E_j^+ \mathbf{n}_+ \exp(ik_j^+ z) + E_j^- \mathbf{n}_- \exp(ik_j^- z) \right] \exp(-i\omega t). \quad (5)$$

Здесь $\mathbf{n}_\pm = (\mathbf{x} \pm i\mathbf{y})/\sqrt{2}$ – орты круговых поляризаций; k_j^+ и k_j^- – z -компоненты волновых векторов ($k_j^+ - k_j^- = 2a$), и они определяются из дисперсионного уравнения и имеют вид

$$k_j^+ = 2\pi\sqrt{\varepsilon_m\mu_m}(\chi \pm b^\pm)/\lambda, \quad k_j^- = 2\pi\sqrt{\varepsilon_m\mu_m}(-\chi \pm b^\pm)/\lambda, \quad (6)$$

где $\chi = \lambda/p\sqrt{\varepsilon_m\mu_m}$, λ – длина волны в вакууме и

$$b^\pm = \sqrt{1 + \chi^2 - \delta_\varepsilon\delta_\mu \pm \gamma}, \quad \gamma = \sqrt{4\chi^2 + (\delta_\varepsilon - \delta_\mu)^2}. \quad (7)$$

Границы ФЗЗ определяются из условия $b^- = 0$ и имеют вид [33,34]

$$\lambda_{1,2} = p\sqrt{\varepsilon_m\mu_m(1 \mp |\delta_\mu|)(1 \mp |\delta_\varepsilon|)} \quad \text{или} \quad \lambda_1 = p\sqrt{\varepsilon_1\mu_2}, \quad \lambda_2 = p\sqrt{\varepsilon_2\mu_1}. \quad (8)$$

В зависимости от значений компонент тензоров диэлектрической и магнитной проницаемостей, можно выделить следующие характерные случаи.

1. $\varepsilon_m\mu_m > 0$. При $\varepsilon_m > 0$, $\mu_m > 0$, $|\delta_\varepsilon| < 1$, $|\delta_\mu| < 1$ или при $\varepsilon_m < 0$, $\mu_m < 0$, $|\delta_\varepsilon| < 1$, $|\delta_\mu| < 1$ существует конечная область дифракционного отражения, границы которой определяются выражением (8). Вне этой области отражение – френелевское. При $\varepsilon_m > 0$, $\mu_m > 0$, $|\delta_\varepsilon| < 1$, $|\delta_\mu| > 1$ ($|\delta_\varepsilon| > 1$, $|\delta_\mu| < 1$) или при $\varepsilon_m < 0$, $\mu_m < 0$, $|\delta_\varepsilon| < 1$, $|\delta_\mu| > 1$ ($|\delta_\varepsilon| > 1$, $|\delta_\mu| < 1$) уравнение (8) имеет только одно решение, а это означает, что ФЗЗ простирается от длины волны $\lambda = 0$ до длинноволновой границы $\lambda_2 = p\sqrt{\varepsilon_m\mu_m(1 + |\delta_\mu|)(1 + |\delta_\varepsilon|)}$. В области $\lambda > \lambda_2$ отражение – френелевское. При $\varepsilon_m > 0$, $\mu_m > 0$, $|\delta_\varepsilon| > 1$, $|\delta_\mu| > 1$ или при $\varepsilon_m < 0$, $\mu_m < 0$, $|\delta_\varepsilon| > 1$, $|\delta_\mu| > 1$ существует конечная область ФЗЗ, поскольку и λ_1 , и λ_2

реальны и отличны от нуля. В области $\lambda < \lambda_1$ (λ_1 – коротковолновая граница ФЗЗ) формируется ФЗЗ нового (небрэгговского) типа. Здесь все волновые числа – чисто мнимые, и происходит полное (не зависящее от поляризации) отражение. В области $\lambda > \lambda_2$ (λ_2 – длинноволновая граница ФЗЗ) отражение – френелевское.

2. $\varepsilon_m \mu_m < 0$. Этот случай существенно отличается от других. В этом случае появляется еще одна характерная частота, определяемая условием $\gamma = 0$.

Определяемая из этого условия длина волны $\lambda_0 = p \left| |\delta_\varepsilon| - |\delta_\mu| \right| \sqrt{|\varepsilon_m \mu_m|} / 2$ больше λ_2 . В области $\lambda > \lambda_0$ величина γ становится чисто мнимой, и поэтому все волновые числа становятся комплексными. Поэтому в этой области опять формируется ФЗЗ нового (небрэгговского) типа. Здесь также происходит полное (не зависящее от поляризации) отражение. В случае $|\delta_\varepsilon| < 1$, $|\delta_\mu| > 1$ или $|\delta_\varepsilon| > 1$, $|\delta_\mu| < 1$ уравнение $b^- = 0$ имеет только одно решение $\lambda = \lambda_2 = p \times \sqrt{\varepsilon_m \mu_m (1 + |\delta_\mu|)(1 + |\delta_\varepsilon|)}$. Поэтому в области $0 < \lambda < \lambda_2$ имеет место зависящее от поляризации дифракционное отражение. В области $\lambda_2 < \lambda < \lambda_0$ отражение – френелевское. В случае $|\delta_\varepsilon| > 1$, $|\delta_\mu| > 1$ опять имеется конечная область дифракционного отражения, и поэтому в области $\lambda_1 < \lambda < \lambda_2$ имеет место зависящее от поляризации дифракционное отражение. В области $\lambda_2 < \lambda < \lambda_0$ отражение – френелевское. В областях $0 < \lambda < \lambda_1$ и $\lambda > \lambda_0$ формируются ФЗЗ нового (небрэгговского) типа.

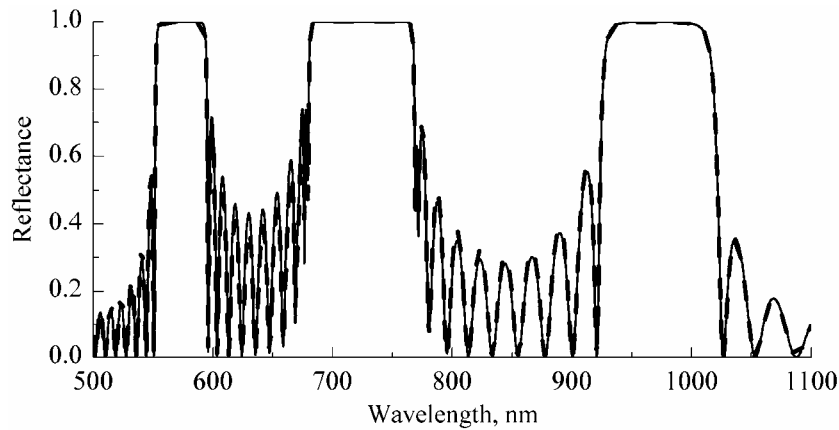


Рис.2. Спектры отражения системы в случае нормального падения света. Падающий на систему свет имеет правую круговую поляризацию (сплошные кривые) и левую круговую поляризацию (штриховые кривые). Параметры системы таковы: $\varepsilon_1 = 2.5$, $\varepsilon_2 = 2.1$, $\mu_1 = 1.5$, $\mu_2 = 1.1$, $p = 420$ нм, толщины подслоев $d_1 = d_2 = 420$ нм, число подслоев $s = 20$, $\alpha = \sqrt{\varepsilon_m / \mu_m} \varepsilon = \sqrt{\varepsilon_m / \mu_m}$, ε – диэлектрическая проницаемость среды, ограничивающей с обеих сторон систему.

Переходим к стопке из право- и левовращающих слоев ХЖК. Рассмотрим случай, когда подслои двух типов имеют одинаковые параметры и отлича-

ются друг от друга только знаком спиральности. На рис.2 представлены спектры отражения для двух ортогональных круговых поляризаций падающего света в случае $\varepsilon_m > 0$, $\mu_m > 0$, $|\delta_\varepsilon| < 1$, $|\delta_\mu| < 1$. Как видно из рис.2, в отличие от одного слоя ХЖК, эта система имеет многократные ФЗЗ. При нулевом порядке отражения, система имеет три пика дифракционного отражения (так называемое красно-зелено-синее отражение). Как показывают наши расчеты, эта система практически не проявляет свойства селективности по отношению к поляризациям падающего света в случае четного числа подслоев системы (при малых числах подслоев в системе). Наоборот, при нечетном числе подслоев в системе она проявляет сильную селективность по отношению к поляризациям падающего света, особенно по отношению к круговым поляризациям, и особенно вне ФЗЗ. Различие в отражениях для ортогональных круговых поляризаций падающего света в областях дифракционного отражения стремится к нулю при увеличении числа подслоев в системе. При увеличении числа подслоев увеличивается дифракционная эффективность в других порядках отражения.

Отметим также, что при четном числе подслоев вращение плоскости поляризации не равно нулю, а в областях ФЗЗ оно значительно отличается от нуля. Отличие вращения плоскости поляризации от нуля в этом случае обусловлено как многократными дифракционными отражениями от каждой границы подслоев, так и зависимостями отражения (пропускания и т.д.) в каждом подслое от азимута и от эллиптичности поляризации падающего на этот слой света.

Существенной особенностью рассматриваемой системы является сильная зависимость оптических характеристик (особенно поляризационных) от числа подслоев в системе и от характера спиральности первого подслоя (он является правовращающим или левовращающим).

Прежде всего, отметим, что в отличие от амплитудных характеристик, которые практически теряют чувствительность по отношению к изменению числа подслоев и характера спиральности первого подслоя в системе уже при $s > 20$, поляризационные характеристики эту чувствительность практически не теряют (на длинах волн в ФЗЗ). С увеличением числа подслоев эти характеристики изменяются скачкообразно, совершая модулированные осцилляции.

Отметим также, что при четном числе подслоев, собственные поляризации вырождены, т.е. обе собственные поляризации совпадают; при нечетном числе подслоев системы собственные поляризации суть эллиптические квазиортогональные поляризации, причем $e_2 \approx -e_1$ и $\psi_2 \approx -\psi_1$. Заметим, что спектры собственных поляризаций (при четном и нечетном числах подслоев) существенно отличаются друг от друга.

На рис.3 представлены спектры отражения для двух ортогональных круговых поляризаций падающего света в случае $\varepsilon_m < 0$, $\mu_m > 0$, $|\delta_\varepsilon| > 1$, $|\delta_\mu| < 1$. Сравнение этих спектров с аналогичными спектрами на рис.2, а также со спектрами в работах [27-29] показывает, что существование магнитной анизотропии приводит к существенному расширению ФЗЗ, причем, $\Delta\lambda \sim 200$ нм и более. Далее, индефинитный характер диэлектрической и магнитной проницаемостей

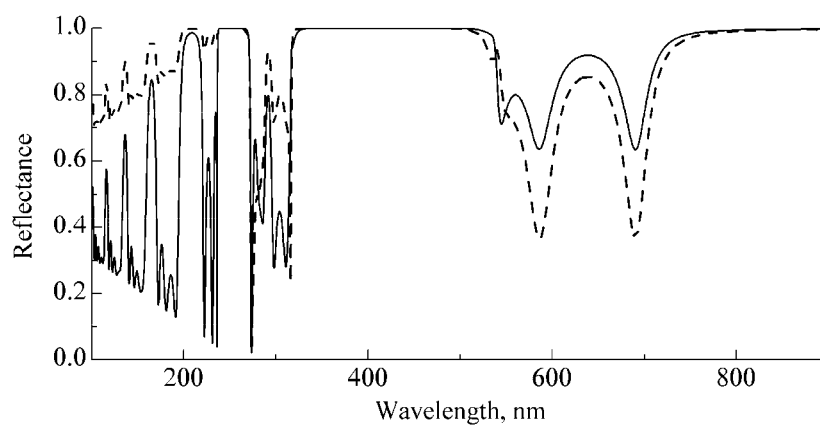


Рис.3. Спектры отражения системы в случае нормального падения света. Параметры системы таковы: $\varepsilon_1 = -0.9$, $\varepsilon_2 = 0.7$, $\mu_1 = 1.25$, $\mu_2 = 0.5$, $s = 5$. Остальные параметры те же, что и на рис.2.

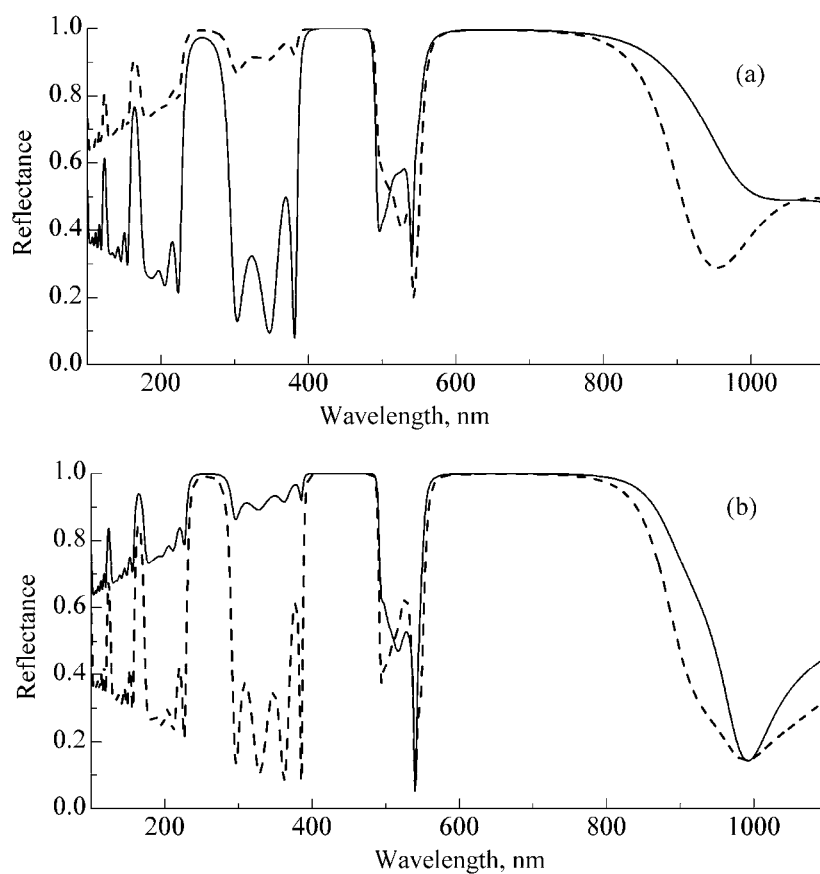


Рис.4. Спектры отражения в случае нечетного ($s = 5$; (a)) и четного ($s = 6$; (b)) числа подслоев в системе. Параметры системы таковы: $\varepsilon_1 = -0.9$, $\varepsilon_2 = -0.7$, $\mu_1 = 1.25$, $\mu_2 = 0.5$. Остальные параметры те же, что и на рис.2.

подслоев может привести к формированию ФЗЗ нового типа, а именно, неограниченной со стороны длинных волн ФЗЗ, как это имеет место в данном случае.

Индефинитный характер диэлектрической и магнитной проницаемостей подслоев не только изменяет карту ФЗЗ, но и существенно влияет на характер отражения вне ФЗЗ. Как было отмечено выше, при $\epsilon_m \mu_m > 0$ и при слабой локальной анизотропии изменение числа подслоев мало влияет на характер отражения вне ФЗЗ. Индефинитный характер диэлектрической и магнитной проницаемостей подслоев существенно влияет на характер отражения света вне ФЗЗ при изменении числа подслоев в системе. Для сравнения, на рис.4а,б представлены спектры отражения ортогональных круговых поляризаций при нечетном (а) и четном (б) числе подслоев, в случае $\epsilon_m > 0$, $\mu_m > 0$, $|\delta_\epsilon| > 1$, $|\delta_\mu| < 1$.

4. Заключение

В работе исследованы особенности спектров отражения стопки из право- и левовращающих слоев ХЖК в общем случае, при локально индефинитной диэлектрической и магнитной проницаемостях. Эти исследования дают много информации о новых возможных применениях ФК в оптике и фотонике. Показано, что рассматриваемая система обладает многократными ФЗЗ и что индефинитный характер локальной диэлектрической и магнитной проницаемостей существенно влияет на карту ФЗЗ. Возникновение многократных ФЗЗ может найти широкое применение, в частности, в производстве дисплеев. У традиционных (бок-о-бок расположенных) красных, зеленых и синих цветных фильтров две трети энергии падающего света теряется. У альтернативной стопки из голубого, красного и желтого слоев также есть проблема – 10%-ная потеря для каждого слоя, что в сумме составляет 50%-ную потерю. Рассматриваемая нами система может дать три цвета без потерь. Учитывая возможность управления шириной, числом и частотным местоположением этих областей с помощью внешних полей (электрического, магнитного, механического, теплового, светового и т.д.) или изменением внутренней структуры системы, рассмотренная нами система представляется перспективной.

Предложенная система может также найти применение как управляемый оптический фильтр или зеркало, и т.д. Эта система может также быть использована как система, позволяющая получить 100%-но поляризованное излучение из неполяризованного света, причем без всяких потерь.

ЛИТЕРАТУРА

1. **E.Nader, Z.W.Richard, eds.** Metamaterials: Physics and Engineering Explorations. New Jersey, Wiley-IEEE Press, 2006.
2. **S.A.Ramakrishna, T.M.Grzegorzcyk.** Physics and Applications of Negative Refractive Index Materials. New York, Taylor & Francis, 2009.
3. **W.Cai, V.Shalaev.** Optical Metamaterials. Dordrecht, Springer, 2010.
4. **В.Г.Веселаго.** УФН, **92**, 517 (1967).
5. **D.R.Smith, W.J.Padilla, et al.** Phys. Rev. Lett., **84**, 4184 (2000).
6. **R.A.Shelby, D.R.Smith, S.Schultz.** Science, **292**, 77 (2001).

7. **V.M.Shalaev**. Nature Photonics, **1**, 41 (2007).
8. **S.H.Lee, C.M.Park, Y.M.Seo, C.K.Kim**. Phys. Rev. B., **81**, 241102 (2010).
9. **J.B.Pendry**. Phys. Rev. Let., **85**, 3966 (2000).
10. **J.Joannopoulos, R.Meade, J.Winn**. Photonic Crystals, Princeton, Princeton Univ., 1995.
11. **K.Sakoda**. Optical Properties of Photonic Crystals, Berlin, Springer, 2001.
12. **S.G.Johnson, J.Joannopoulos**. Photonic Crystals: The Road from Theory to Practice, Boston, Kluwer, 2002.
13. Photonic Crystals and Light Localization in the 21st Century. **C.M.Soukoulis**, ed. NATO Science Series C: **563**, 616 (2001).
14. **N.Y.Ha, Y.Takanishi, K.Ishikawa, H.Takezoe**. Opt. Express., **15**, 1024 (2007).
15. **N.Y.Ha, Y.Ohtsuka, S.M.Jeong, S.Nishimura, G.Suzaki, Y.Takanishi, K.Ishikawa, H.Takezoe**. Nature Mat., **7**, 43 (2008).
16. **E.M.Nascimento, I.N. de Oliveira, M.L.Lyra**. J. Appl. Phys. **104**, 103511 (2008).
17. **E.M.Nascimento, F.M.Zanetti, M.L.Lyra, I.N. de Oliveira**. Phys. Rev. E, **81**, 031713 (2010).
18. **N.Y.Ha, S.M.Jeong, S.Nishimura, H.Takezoe**. Adv. Matter., **22**, 1617 (2010).
19. **Z.He, Z.Ye, Q.Cui, J.Zhu, H.Gao, Y.Ling, H.Cui, J.Lu, X.Gao, Y.Su**. Opt. Commun., **284**, 4022 (2011).
20. **A.H.Gevorgyan**. Phys. Rev. E, **83**, 011702 (2011).
21. **A.A.Gevorgyan, K.V.Papoyan, O.V.Pikichyan**. Opt. Spectrosc., **88**, 586 (2000).
22. **M.Mitov, N.Dessaud**. Nature Mat., **5**, 361 (2006).
23. **M.Mitov, N.Dessaud**. Liq. Cryst., **34**, 183 (2007).
24. **Y.Takanishi, Y.Ohtsuka, G.Suzaki, S.Nishimara, H.Takazoe**. Opt. Express., **18**, 12909 (2010).
25. **H.Sarkissian, B.Ya.Zeldovich, N.V.Tabiryan**. Opt. Lett., **31**, 1678 (2006).
26. **J.A.Reyes, A.Lakhtakia**. Opt. Commun., **270**, 51 (2007).
27. **A.H.Gevorgyan**. Phys. Rev. E, **85**, 021704 (2012).
28. **A.H.Gevorgyan**. Opt. Spectrosc., **113**, 141 (2012).
29. **A.H.Gevorgyan**. Mol. Cryst. Liq. Cryst., **559**, 76 (2012).
30. **K.Robbie, M.J.Brett, A.Lakhtakia**. Nature, **384**, 616 (1996).
31. **L.J.Hodgkinson, Q.H.Wu, B.Knight, et al**. Appl. Opt., **39**, 642 (2000).
32. **S.-C.Jeng, S.-J.Hwang, Y.-H.Hung, S.-C.Chen**. Opt. Express, **18**, 22572 (2010).
33. **A.A.Gevorgyan**. Opt. Spectrosc., **89**, 631 (2000).
34. **A.H.Gevorgyan**. Opt. Spectrosc., **92**, 207 (2002).

LIGHT TRANSMISSION THROUGH A STACK OF A RIGHT- AND
LEFT-HAND CHOLESTERIC LIQUID CRYSTAL LAYERS
WITH INDEFINITE DIELECTRIC AND MAGNETIC PERMITTIVITIES.
I. REFLECTION PECULIARITIES

A.H. GEVORGYAN

Optical properties of a stack of right- and left-hand cholesteric liquid crystal layers are investigated. The problem is solved by Ambartsumian's layer addition modified method. The reflection spectra peculiarities of this system are studied and it is shown that, in contrast to a single cholesteric liquid crystal layer, this system has multiple photonic band gaps (PBG). It is shown that the indefinite character of the dielectric and magnetic permittivities essentially affects the PBG map of the system. These multiple PBG can find wide application, in particular, in display technologies.

УДК 621.315

ЭЛЕКТРОННЫЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ МЕТАЛЛ–ИЗОЛЯТОР В ШИРОКОЗОННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ ZnO

Н.Р. АГАМАЛЯН, Т.А. АСЛАНЯН, Э.С. ВАРДАНИЯН, Е.А. КАФАДАРЯН,
Р.К. ОВСЕПЯН, С.И. ПЕТРОСЯН, А.Р. ПОГОСЯН

Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак

(Поступила в редакцию 3 мая 2012 г.)

Исследованы электронные фазовые переходы металл–изолятор в широкозонных полупроводниках ZnO. Рассмотрено влияние дефектного комплекса, обусловленного кислородной вакансией и междоузельным атомом цинка, на переход металл–изолятор. Изучены особенности этого перехода в легированных донорной или акцепторной примесью пленках ZnO и влияние вышеуказанного дефектного комплекса на механизм транспорта носителей заряда.

1. Введение

Пленки оксида цинка (ZnO), относящиеся к широкозонным полупроводникам и обладающие множеством интересных свойств, находят широкое применение в оптоэлектронике при создании светодиодов, работающих в сине-зеленом или УФ диапазонах. Важным достоинством пленок оксида цинка является возможность управления их свойствами, в частности, величиной и типом проводимости, путем введения донорной или акцепторной примеси [1,2]. Так, примесь Ga в пленках ZnO действует как донор, увеличивая проводимость без ухудшения оптической прозрачности, а примесь Li действует как акцептор и уменьшает проводимость [3,4]. Донорным центром является также дефектный комплекс междоузельный атом цинка–кислородная вакансия. Послеростовой отжиг на воздухе приводит к насыщению пленок кислородом, т.е. к уменьшению кислородных вакансий и, как следствие, к уменьшению донорных центров. В результате, можно получать компенсированные полупроводники с возможностью изменения проводимости на несколько порядков [3].

Важнейшее место в теории фазовых переходов в твердом теле занимают переходы металл–изолятор. Такие фазовые переходы сопровождаются изменением величины электропроводности и механизма транспорта носителей заряда при изменении состава вещества. Известно, что переходы металл–изолятор наблюдаются в оксидах металлов, где в результате перехода проводимость материала может меняться на несколько порядков. Например, в оксиде ванадия V_2O_3 она изменяется приблизительно в 10^7 раз, а в нестехиометрическом оксиде европия EuO до 10^{10} раз [5,6]. В то же время, фазовый переход металл–изолятор в

тонких пенках ZnO, обусловленный изменением состава вещества, недостаточно изучен.

Данная работа посвящена исследованию электронных фазовых переходов металл–изолятор в пленках ZnO:Ga и ZnO:Li, а также исследованию механизмов транспорта носителей заряда в этих пленках.

2. Методика эксперимента

Чистые и легированные литием и галлием пленки ZnO были изготовлены методом вакуумного электронно-лучевого напыления [7,8] на подложках из сапфира с ориентацией (0001). Синтезированные керамические таблетки ZnO с примесями Ga (2 и 0.7 вес.%) и Li (0.5, 1 и 5 вес.%) использовались в качестве мишеней для напыления (см. табл.1). Используемый метод обеспечивает получение пленок с дефицитом кислорода, поэтому они подвергались дополнительному отжигу на воздухе для насыщения кислородом, что приводило к уменьшению кислородных вакансий и, как следствие, к уменьшению донорных центров, которые обусловлены комплексом кислородная вакансия–междоузельный атом цинка. В процессе отжига контролировалось изменение проводимости пленок. В результате послеростовой обработки были получены компенсированные полупроводники, содержащие как донорные, так и акцепторные центры [3,9].

Табл. 1. Параметры носителей заряда пленок ZnO:Li в зависимости от продолжительности и температуры отжига на воздухе: μ_H – холловская подвижность, D – зонная проводимость термически возбужденных носителей заряда, H – прыжковый механизм транспорта носителей заряда.

	Примесь	Температура и длительность отжига, $T, ^\circ\text{C}; t, \text{min}$	Проводимость σ , $(\text{Ohm cm})^{-1}$	Подвижность μ_H , $\text{cm}^2 / \text{V s}$	Концентрация носителей n , cm^{-3}	$E_C - E_F$, eV	Механизм транспорта носителей заряда
1	Li 1%	as-deposited	0.33	12.3	1.7×10^{17}	-0.28	D
2	Li 1%	200°C, 5 min	0.12	5.3	1.4×10^{17}	+0.88	D
3	Li 1%	250°C, 5 min	0.086	7.6	7.1×10^{16}	+1.05	H
4	Li 1%	300°C, 5 min	0.034	10.2	2.1×10^{16}	+1.37	H
5	Li 1%	350°C, 5 min	0.0077	6.2	7.7×10^{15}	+1.63	H
6	Li 1%	380°C, 5 min	0.0017	8.6	1.3×10^{15}	+2.09	H
7	Li 1%	400°C, 20min	0.00052	80	4.1×10^{13}	+2.98	H
8	Li 1%	520°C, 30 min	0.00043	70	4.0×10^{13}	+2.98	H
9	Ga 2%	as-deposited	3.1×10^3	9.8	1.8×10^{21}	-0.54	D
10	Ga 2%	450°C, 10 min	780	5.7	7.4×10^{20}	-0.3	D
11	Ga 1%	as-deposited	1.4×10^3	9.8	8.9×10^{20}	-0.34	D
12	Ga 1%	700°C, 10 min	501	11.9	2.6×10^{20}	+0.15	D

Измерения проводимости проводились как на постоянном токе, так и в частотном диапазоне 10 Гц–35 МГц. Частотные зависимости измерялись с помощью свип-генератора и синхронно-фазового детектора. Измерения проводи-

мости осуществлялись на планарных структурах Al|ZnO:Li|Al и Al|ZnO:Ga|Al. Измерения на постоянном и переменном токе проводились при напряженности электрического поля 10 В/см. Холловская подвижность измерялась методом Ван-дер-Пау при напряженности магнитного поля 1–2 Т. Спектры пропускания и отражения регистрировались при комнатной температуре в УФ и видимом диапазонах. Полученные экспериментальные результаты приведены в табл.1.

3. Результаты и их обсуждение

Для электрических и оптических исследований был получен набор пленок ZnO:Ga, ZnO:Li. Известно, что недостаток кислорода в ZnO приводит к возникновению собственных дефектов донорного типа (междоузельный цинк и вакансии кислорода), пленка ZnO:Ga была легирована двумя типами донорной примеси – вышеуказанным комплексом и ионом Ga^{3+} . Пленки ZnO:Li содержат как донорные примеси (вышеуказанный комплекс), так и акцепторные центры, обусловленные ионами Li^+ .

Для экспериментального наблюдения перехода металл–изолятор в качестве управляющего параметра перехода был выбран состав вещества, а точнее, концентрация донорного дефектного комплекса, обусловленного кислородной вакансией и междоузельным атомом цинка. Послеростовой отжиг приводит к изменению концентрации этого донорного комплекса и не приводит к изменению концентрации донорных и акцепторных центров, обусловленных ионами Ga^{3+} и Li^+ , соответственно. Были проведены измерения зависимости проводимости от температуры при разных значениях управляющего параметра.

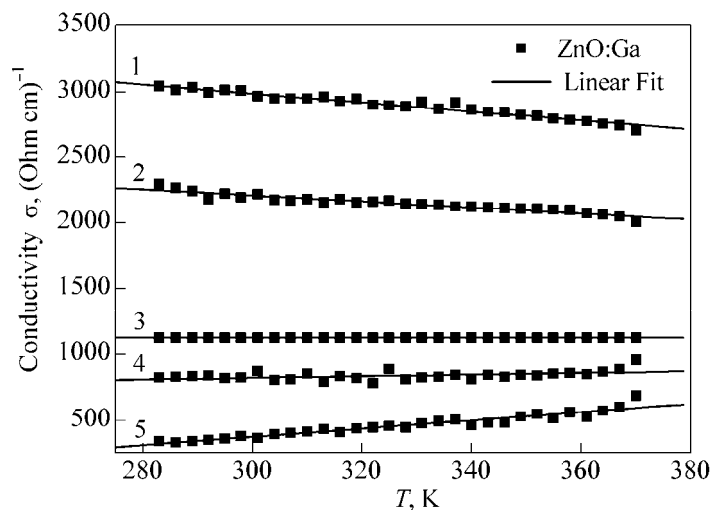


Рис.1. Температурные зависимости проводимости пленок ZnO:Ga с разной концентрацией кислородных вакансий в соответствии с температурой отжига на воздухе: 1) as-deposited, 2) 280°C, 3) 320°C, 4) 450°C, 5) 520°C. Точки соответствуют экспериментальным данным, а прямые линии получены аппроксимацией.

На рис.1 приведены температурные зависимости проводимости пленок ZnO:Ga с использованием постоянного напряжения смещения. Эти плёнки обладают электронной проводимостью. Полученные результаты могут быть аппроксимированы линейной функцией зависимости проводимости σ от температуры T : $\sigma(T) = \sigma_0 + \alpha T$. В случае, когда пленка не подвергалась послеростовому отжигу (as-deposited) и обладает высокой удельной проводимостью, наблюдается уменьшение проводимости с повышением температуры (кривая 1), то есть имеется отрицательный температурный коэффициент проводимости ($\alpha = d\sigma/dT < 0$). По мере увеличения концентрации кислорода, т.е. уменьшения кислородных вакансий в пленке (кривые 2–5), проводимость при комнатной температуре уменьшается. Также уменьшается температурное изменение проводимости, а дальнейший отжиг приводит к изменению знака температурного коэффициента с отрицательного на положительный ($\alpha > 0$).

Предполагается, что пленки as-deposited с большой концентрацией кислородных вакансий являются вырожденными полупроводниками. Величина концентрации носителей заряда n в зоне проводимости обусловлена энергией Ферми E_F и для сильно вырожденного полупроводника описывается соотношением

$$n = \left(4N_C / 3\sqrt{\pi} \right) \left[(E_F - E_C) / kT \right]^{3/2}, \quad (1)$$

где $N_C = (2/h^3) (2\pi m_e^* kT)^{3/2}$ – эффективное число состояний в зоне проводимости и $m_e^* = 0.27m_e$ эффективная масса электрона в ZnO [10]; E_C – край подвижности, т.е. критическая энергия, отделяющая локализованные состояния от нелокализованных. Эффективное число состояний в зоне проводимости для пленок ZnO равно $N_C = 4.1 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$ ($T = 300 \text{ K}$), т.к. $N_C = 4.83 \times 10^{15} (T m_e^*)^{3/2} \text{ см}^{-3}$. Как видно из (1), с учетом зависимости эффективного числа состояний N_C от температуры, получим, что при сильном вырождении концентрация перестает зависеть от температуры, а слабой зависимостью энергии Ферми можно пренебречь, т.к. температурный диапазон измерения мал. Отрицательный температурный коэффициент проводимости ($\alpha < 0$) можно объяснить уменьшением времени релаксации τ или длины свободного пробега при увеличении температуры. Поэтому для пленок as-deposited удельное сопротивление пропорционально температуре: $1/\sigma(T) \sim T$. Пленки с минимальной концентрацией кислородных вакансий являются невырожденными полупроводниками. Для невырожденных полупроводников концентрация носителей n в зоне проводимости зависит от температуры и описывается выражением

$$n = N_C \exp \left[- (E_C - E_F) / kT \right], \quad (2)$$

где E_C – эффективное число состояний в зоне проводимости, и эта величина не зависит от температуры для невырожденных полупроводников.

Для пленок, прошедших отжиг на воздухе (то есть с минимальной концентрацией кислородных вакансий), наблюдается типичная для невырожденных полупроводников положительная температурная зависимость проводимости ($d\sigma/dT > 0$). В этом случае повышение проводимости с увеличением темпера-

туры обусловлено увеличением концентрации электронов в зоне проводимости. В невырожденных полупроводниках время релаксации τ не зависит от температуры.

Ионы Li в кристаллической решетке ZnO являются акцепторами, а кислородные вакансии – донорными центрами, т.е. пленки ZnO:Li являются компенсированными полупроводниками, а отжигом в атмосфере кислорода или в вакууме можно управлять степенью компенсации $K = N_A/N_D$ в широком пределе, вплоть до создания пленок с p -типом проводимости. Далее рассмотрим механизм транспорта носителей заряда в зависимости от концентрации кислородных вакансий. Для определения механизма транспорта носителей были построены экспериментальные графики зависимости проводимости от температуры в координатах $(T^{-1/m}, \log \sigma)$, где $m = 1, 2, 3, 4$. Полученные экспериментальные зависимости аппроксимируются прямой, если m подобрано правильно, и изогнутой линией в противном случае. Это означает, что температурную зависимость проводимости в определенном интервале температур можно описать выражением $\sigma \propto A \exp(-BT^{-1/m})$. На основе аппроксимаций делаются предположения о механизме транспорта носителей заряда [4]. На рис.2 приведены температурные зависимости проводимости пленок ZnO:Li, на которых наблюдаются линейные участки. На рис.2а (пленка as-deposited, обладает высокой проводимостью) наблюдается линейная зависимость проводимости от температуры в координатах $(T^{-1}, \log \sigma)$, т.е. $1/m = 1$, причем температурный коэффициент положителен ($d\sigma/dT > 0$). Полученные результаты могут быть аппроксимированы выражением $\sigma = \sigma_0 \exp(E_a/kT)$, где E_a – энергия термической активации носителей в зону проводимости. Активационный характер наблюдается при транспорте носителей заряда, возбужденных за край подвижности в нелокализованные состояния.

Температурные зависимости проводимости (рис.2b) пленок, отожженных на воздухе (320°C, 20 мин), могут быть аппроксимированы выражением $\sigma = \sigma_0 \exp(E_C - E_F/kT)$. Переход от зонной проводимости термически возбужденных носителей к прыжковой, с прыжками на ближайшие примесные центры, хорошо виден на рис.2b. Это излом между прямой в левой части графика и прямой аппроксимации, подходящей к ней справа, из области более низких температур. В зависимости от степени отжига энергия активации проводимости меняется в диапазоне $E_a = 0.03 - 0.06$ эВ. По мере увеличения концентрации кислорода (отжиг на воздухе 520°C; 30 мин.) проводимость при комнатной температуре уменьшается (рис.2с), а также изменяется механизм проводимости. Температурное изменение проводимости этих пленок было аппроксимировано выражением $\sigma = \sigma_0 \exp[-(T_M/kT)^{1/4}]$, где T_M и σ_0 – постоянные. Возможность аппроксимации экспериментальных результатов этой зависимостью означает прыжковую проводимость с переменной длиной прыжка. Для пленок, отожженных при 520°C, наблюдается переход от зонной проводимости термически возбужденных носителей к прыжковой проводимости с прыжками переменной длины (рис.2с) в области комнатных температур.

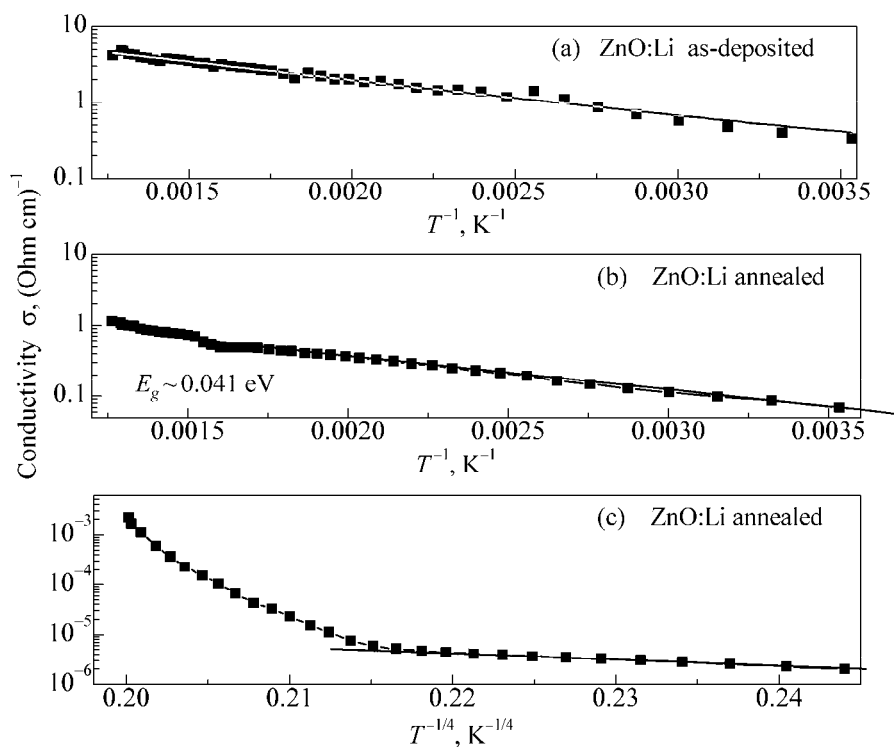


Рис.2. Температурные зависимости проводимости пленок ZnO:Li с разной концентрацией кислородных вакансий в соответствии с температурой отжига на воздухе: а) as-deposited, график представлен в осях (T^{-1} , $\log \sigma$); б) 320°C, график представлен в осях (T^{-1} , $\log \sigma$); в) 520°C, график представлен в осях ($T^{-1/4}$, $\log \sigma$).

Величина концентрации носителей заряда n в зоне проводимости обусловлена энергией Ферми E_F и для сильно вырожденного полупроводника описывается соотношением (1), а для невырожденного полупроводника – соотношением (2). На основе этих выражений был определен уровень Ферми для пленок ZnO:Ga и ZnO:Li (см. табл.1). Уровень Ферми для пленок, легированных литием, находится в запрещенной зоне и в результате отжига на воздухе меняется от -0.8 до -2.9 эВ. Это означает, что уменьшение концентрации кислородных вакансий приближает уровень Ферми к валентной зоне. Для легированных галлием пленок с высокой концентрацией кислородных вакансий уровень Ферми находится внутри одной или нескольких зон проводимости, т.е. в области разрешенных значений энергии. В результате отжига на воздухе уровень Ферми переходит в запрещенную зону, т.е. меняется от $+0.54$ до -2.9 эВ.

На рис.3 приведены зависимости проводимости от циклической частоты ($\omega = 2\pi f$) переменного электрического поля для пленок ZnO:Ga и ZnO:Li (кривая 1 – as-deposited, кривые 2 и 3 – после отжига на воздухе). Проводимость пленок ZnO:Ga до и после отжига практически не зависит от частоты. Поэтому эти зависимости были нами аппроксимированы формулой Друде–Лоренца

$\sigma(\omega) = \sigma_0 / (1 + (\omega\tau)^2)$, где τ – время релаксации носителей, $\sigma_0 = ne^2\tau/m_e^*$ – проводимость на постоянном токе. Спада проводимости в области высоких частот, согласно модели Друде–Лоренца, на этих зависимостях не наблюдается при условии $\omega \approx \tau^{-1}$ [6]. Подвижность носителей заряда для исследуемых пленок ZnO меняется от 5 до 80 см²/В с, на основе этих измерений можно определить время релаксации носителей с $\tau \sim 10^{-14}$ с. Это означает, что в исследуемом частотном диапазоне 1–10⁶ с⁻¹ спад проводимости не должен наблюдаться. Наблюдаемая частотная зависимость обусловлена дрейфовой проводимостью носителей заряда по делокализованным состояниям.

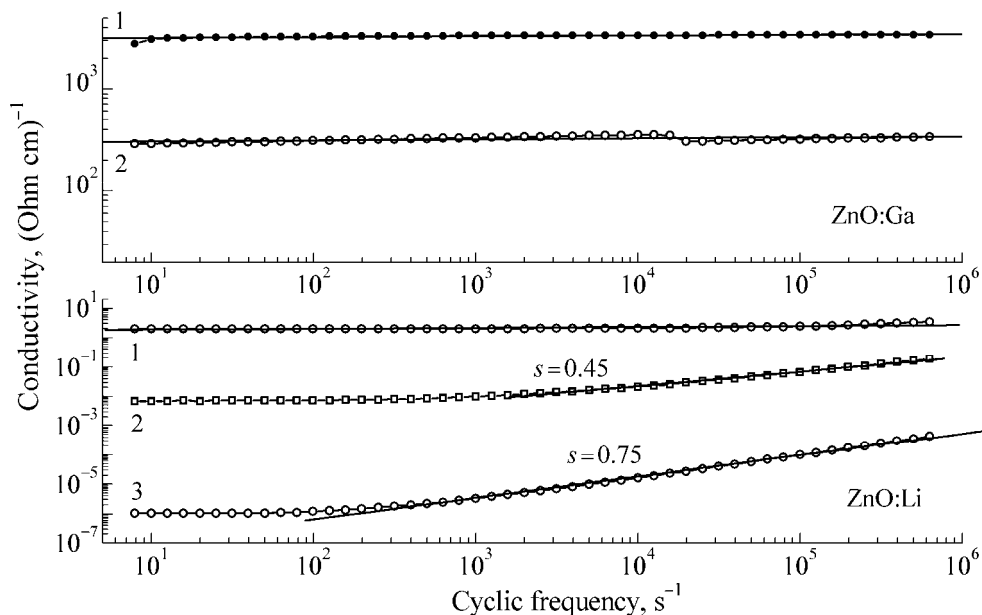


Рис.3 Частотные зависимости проводимости пленок ZnO:Li и ZnO:Ga: 1) as-deposited, 2) и 3) – после отжига на воздухе при 350°C и 520°C.

Для пленок с акцепторной примесью лития as-deposited наблюдалась зонная проводимость носителей заряда по делокализованным состояниям. Для пленок, прошедших отжиг (рис.3, кривые 2), эта зависимость имеет возрастающий нелинейный характер, и полученные экспериментальные результаты аппроксимируются зависимостью $\sigma(\omega) = \sigma_0 + A\omega^s$ с параметром $s = 0.45$ и 0.75 для пленок, прошедших отжиг при 350°C и 520°C, соответственно. Частотная зависимость проводимости пленок после отжига на воздухе имеет возрастающий линейный характер, что означает прыжковый механизм транспорта носителей заряда.

Измерение проводимости пленок ZnO с различной концентрацией кислородных вакансий показало, что изменение концентраций донорных центров приводит к фазовому переходу металл–изолятор. В результате отжига происходит уменьшение концентрации носителей и увеличение расстояния между до-

норами, перекрытие волновых функций локализованных донорных состояний начинает уменьшаться. Уменьшение перекрытия волновых функций приводит к распаду примесной зоны на делокализованные состояния и, как следствие, к переходу от зонной проводимости к прыжковой проводимости.

Фазовый переход металл–изолятор в пленках ZnO проявляется и в оптическом диапазоне. Изменение концентрации носителей заряда приводит к сдвигу Бурштейна–Мосса. Ширина запрещенной зоны E_g была определена в предположении прямозонных переходов между валентной зоной и зоной проводимости. Коэффициенты поглощения α в зависимости от энергии фотонов могут быть выражены как

$$(\alpha h\omega)^2 = A(h\omega - E_g), \quad (3)$$

где A – некая константа. Ширина запрещенной зоны получается экстраполяцией линейной части кривых $(\alpha h\omega)^2$ как функций фотонной энергии $h\omega$ падающего излучения до пересечения с осью энергии (при $\alpha = 0$). Зависимости $(\alpha h\omega)^2$ от энергии $h\omega$ для различных концентраций ионов в пленках ZnO показаны на рис.4. Коэффициенты поглощения α вблизи края поглощения следуют экспоненциальному закону, $\alpha(h\omega) = \alpha_0 \exp(h\omega/E_0)$, т.е. правилу Урбаха. Здесь α_0 – постоянная, а E_0 – эмпирический параметр, обычно слабо зависящий от температуры и описывающий ширину локализованных состояний в запрещенной зоне, но не их энергетические позиции. Величина E_0 рассматривается как параметр, который включает влияние всех возможных дефектов. Из наклона линейной части кривой зависимости коэффициента поглощения в полулогарифмическом масштабе как функции фотонной энергии $h\omega$ рассчитывается характеристика E_0 . При увеличении концентрации донорных центров, когда уровень Ферми входит в зону проводимости, состояния, лежащие ниже уровня Ферми, будут практически все заполнены. Переходы фотовозбужденных электронов из валентной зоны при поглощении фотонов ниже уровня Ферми будут невозможны, так как соответствующие состояния в зоне проводимости заняты электронами.

На рис.4 приведена зависимость края поглощения E_g от концентрации донорной (Ga) или акцепторной (Li) примесей. Приведена также зависимость эмпирического параметра E_0 , описывающего ширину локализованных состояний на дне зоны проводимости, согласно модели урбаховского края. Представлена зависимость величины $E_F - E_C$, т.е. энергии от уровня Ферми E_F до ближайшего края разрешенной зоны E_C , для пленок с донорной или акцепторной примесью.

Согласно этим измерениям, в пленках, легированных донорной примесью Ga, изменение концентрации дефектного комплекса, обусловленного кислородной вакансией – междоузельным атомом цинка, приводит к существенному сдвигу края поглощения E_g и величины $E_F - E_C$. Однако в пленках, легированных акцепторной примесью Li, изменение концентрации кислородных вакансий не приводит к изменению края поглощения E_g .

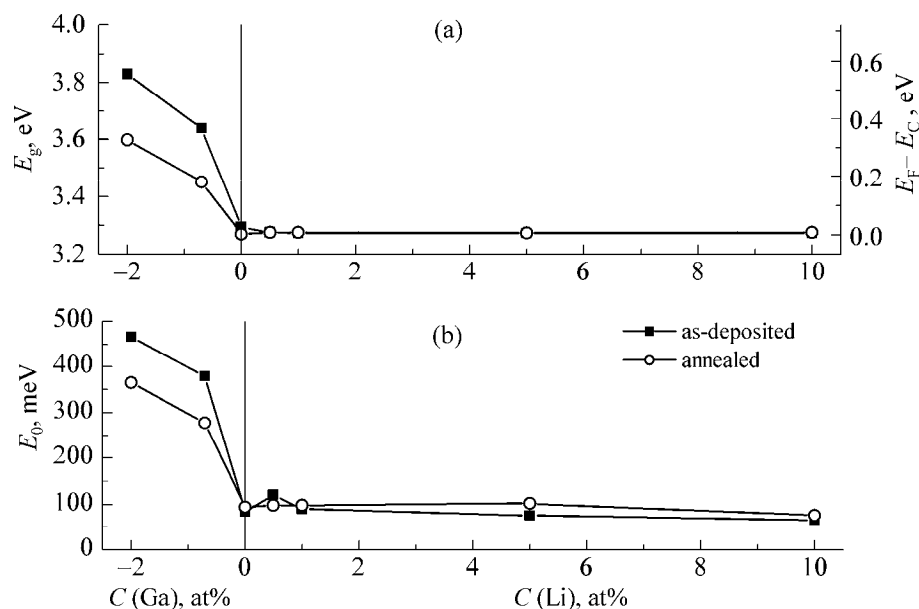


Рис.4. Зависимость края поглощения E_g и величины $E_F - E_C$ (a) и параметра E_0 (b) от концентрации донорной или акцепторной примеси для as-deposited и отожженных на воздухе пленок ZnO, легированных донорной и акцепторной примесью.

Исходя из полученных данных, можно предположить, что пленки ZnO с донорной примесью Ga являются вырожденными полупроводниками, и изменение проводимости в результате отжига обусловлено изменением уровня Ферми. Чистые и легированные акцепторной примесью лития пленки ZnO являются невырожденными полупроводниками, следовательно, фазовый переход металл–изолятор не приводит к изменению края поглощения E_g и эмпирического параметра E_0 (урбаховского края), которые обусловлены дефектами структуры и электрон-фононным взаимодействием.

4. Заключение

Отжиг пленок ZnO приводит к фазовому переходу металл–изолятор. Реальным управляющим параметром этого перехода является концентрация междоузельного атома цинка, который является донором. Пленки с высокой концентрацией междоузельного атома цинка имеют относительно высокую проводимость и металлический ход температурной зависимости проводимости, т.е. отрицательный температурный коэффициент проводимости ($d\sigma/dT < 0$). Отжиг на воздухе приводит к уменьшению проводимости и изменению температурной зависимости проводимости от металлической (отрицательной) на активационную, с положительным температурным коэффициентом проводимости ($d\sigma/dT > 0$). Отжиг пленок ZnO также приводит к изменению механизма транспорта носителей заряда. В пленках с высокой концентрацией междоузель-

ного атома цинка доминирует зонная проводимость. После отжига в пленках с низкой проводимостью наблюдается прыжковый механизм транспорта носителей. В результате отжига происходит переход в системе невзаимодействующих электронов, поэтому этот переход можно отнести к переходу Андерсона.

Работа выполнена в рамках государственного финансирования Республики Армения и гранта ANSEF № 2951.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Y.Liu, C.R.Gorla.** J. Electron. Mater., **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.Ф.Мотт.** Переходы металл–изолятор. М., Наука, 1979.
6. **В.Ф.Гантмахер.** Электроны в неупорядоченных средах. М., Физматлит, 2005.
7. **Р.О.Зайцев, Е.В.Кузьмин, С.Г.Овчинников.** УФН, **148**, 604 (1986).
8. **N.R.Aghamalyan, I.A.Gambaryan, E.Kh.Goulanian, R.K.Hovsepyan, R.B.Kostanyan, S.I.Petrosyan, E.S.Vardanyan, A.F.Zerrouk.** Semicond. Sci. Technol., **18**, 525 (2003).
9. **T.P.Rao, M.C. Santhosh Kumar.** J. Cryst. Proc. Technol., **2**, 72 (2012)
10. **K.Sakai, T.Kakeno, T.Ikari, S.Shirakata.** J. Appl. Phys., **99**, 043509 (2006)

ՄԵՏԱԴ–ՄԵԿՈՒՄԻԶ ԷԼԵԿՏՐՈՆԱՅԻՆ ՓՈԻԼԱՅԻՆ ԱՆՑՈՒՄՆԵՐԸ ԼԱՅՆ ԱՐԳԵԼՎԱԾ ԳՈՏԻՈՎ ZnO ԿԻՍԱՀԱՂՈՐԴԻԶՆԵՐՈՒՄ

Ն.Ռ. ԱՂԱՄԱԼՅԱՆ, Տ.Ա. ԱՍԼԱՆՅԱՆ, Է.Ս. ՎԱՐԴԱՆՅԱՆ, Ե.Ա. ԿԱԳԱԴԱՐՅԱՆ,
Ր.Կ. ՀՈՎՍԵՓՅԱՆ, Ս.Ի. ՊԵՏՐՈՍՅԱՆ, Ա.Ր. ՊՈԴՈՍՅԱՆ

Ուսումնասիրված են լայն արգելված գոտիով ZnO կիսահաղորդիչներում մետաղ–մեկուսիչ փուլային անցումները: Դիտարկված է թթվածնի ատոմի թափուրքով և միջհանգուցային ցինկի ատոմով պայմանավորված արատների համալիրի ազդեցությունները մետաղ–մեկուսիչ անցման վրա: Հետազոտված են այդ անցման առանձնահատկությունները դոնորային կամ ակցեպտորային խառնուկներով լեզիրված ZnO թաղանթներում և վերը նշված արատների համալիրի ազդեցությունը լիցքակիրների տեղափոխման մեխանիզմի վրա:

METAL–INSULATOR ELECTRONIC PHASE TRANSITIONS IN WIDE-GAP ZnO SEMICONDUCTORS

N.R. AGHAMALYAN, T.A. ASLANYAN, E.S. VARDANYAN, Y.A. KAFADARYAN,
R.K. HOVSEPYAN, S.I. PETROSYAN, A.R. POGHOSYAN

Metal–insulator electronic phase transitions in wide-gap ZnO semiconductors have been studied. The influence of defect complex caused by oxygen vacancy and interstitial zinc atom on the metal–insulator transition is considered. The peculiarities of this transition in ZnO films doped with donor or acceptor impurity and the influence of mentioned defect complex on the charge carrier transfer mechanism were investigated.

УДК 621.315

ПРИМЕСНЫЕ СОСТОЯНИЯ В СФЕРИЧЕСКОЙ КВАНТОВОЙ ТОЧКЕ С МОДИФИЦИРОВАННЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ ПЕШЛЯ–ТЕЛЛЕРА

О.Х. ТЕВОСЯН

Российско-Армянский (Славянский) Университет, Ереван

(Поступила в редакцию 25 мая 2012 г.)

Исследованы квантовые состояния и энергетические уровни электрона в сферической квантовой точке с модифицированным потенциалом Пешля–Теллера. Получены аналитические выражения для волновой функции и энергии частицы при отсутствии примесного центра. В рамках вариационного метода исследованы примесные состояния и численными методами получены зависимости энергии частицы от параметров сферической квантовой точки. Выявлена зависимость энергии связи электрона от полуширины и глубины потенциальной ямы.

1. Введение

Интерес к полупроводниковым квантовым точкам (КТ) в последнее время продолжает расти, что обусловлено новыми физическими свойствами этих нульмерных объектов, которые в основном являются следствием размерного квантования носителей заряда в них [1,2]. Много теоретических и экспериментальных работ в этой области посвящено рассмотрению эллипсоидальных, пирамидальных, цилиндрических и линзообразных КТ [3-7]. Во время роста КТ, в результате диффузии, формирующийся ограничивающий потенциал в большинстве случаев с большой точностью аппроксимируется параболическим потенциалом. В действительности, однако, параболический потенциал реализуется только для нижних энергетических уровней. Очевидно, что с ростом квантового числа ход ограничивающего потенциала расходится от параболического. Для более успешной и реалистичной аппроксимации формируемого ограничивающего потенциала было предложено использование модифицированного потенциала Пешля–Теллера (МППТ) [6,7]. Другим классом задач является теоретическое изучение оптических характеристик КТ, содержащих примесные центры. Наличие примесных центров в полупроводниковых КТ может существенным образом повлиять на их физические свойства [8-12].

В настоящей работе исследованы электронные и примесные состояния в сферической КТ с МППТ.

2. Электронные состояния

Рассмотрим движение электрона в сферической КТ с ограничивающим

МППТ. Потенциальная энергия электрона в декартовых координатах запишется в виде

$$U(X, Y, Z) = \sum_{i=1}^3 \left(\tilde{U}_i - \frac{\tilde{U}_i}{\cosh^2(Q_i/\tilde{\beta}_i)} \right), \quad (1)$$

где $\tilde{U}_i$ и $\tilde{\beta}_i$ – соответственно, глубина и полуширина потенциальной ямы, а $i=1, 2, 3$ и $Q_i = X, Y, Z$ [13]. Вид МППТ в зависимости от полуширины и глубины потенциальной ямы, приведен на рис.1а и б. Связь между радиусом сферической КТ и полушириной потенциальной ямы задается в виде $R = \gamma_i \tilde{\beta}_i$, где параметр γ_i определяется из эксперимента.

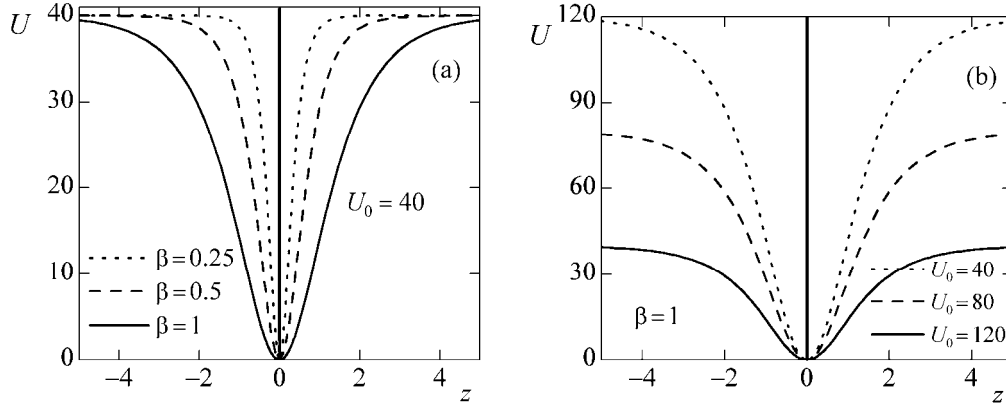


Рис.1. а) Модифицированный потенциал Пешля–Теллера для различных значений полуширины потенциальной ямы, б) для различных значений глубины потенциальной ямы.

Гамильтониан системы в безразмерных величинах можно представить в виде суммы гамильтонианов подсистем:

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^3 \hat{H}_i, \quad (2)$$

где

$$\hat{H}_i = -\partial^2/\partial q_i^2 - U_i/\cosh^2(q_i/\beta_i). \quad (3)$$

Здесь введены обозначения $\hat{H}_i = \hat{H}_i/E_R$, $q_i = Q_i/a_B$, $q_i = x, y, z$, $U_i = \tilde{U}_i/E_R$, $\beta_i = \tilde{\beta}_i/a_B$, $E_R = \hbar^2/2m_e^*a_B^2$ – эффективная энергия Ридберга, $a_B = \kappa\hbar^2/m_p^*e^2$ – эффективный боровский радиус электрона, κ – диэлектрическая проницаемость, m_e^* – эффективная масса электрона, e – заряд электрона.

Полную волновую функцию системы ищем в виде

$$\Phi_0(x, y, z) = \prod_{i=1}^3 \Psi_i(q_i). \quad (4)$$

Тогда задача сводится к нахождению электронных состояний подсистем по отдельности. После подстановки волновых функций подсистем в соответствующее уравнение Шредингера и введя новые обозначения $\xi_i = \tanh(r/\beta_i)$, $s_i = (1/2) \left[-1 + \sqrt{1 + 4\beta_i^2 U_i} \right]$, получаем следующие уравнения:

$$\frac{d}{d\xi_i} \left[(1 - \xi_i^2) \frac{d\Psi_i(\xi_i)}{d\xi_i} \right] + \left[s_i(s_i + 1) - \frac{\varepsilon_i}{1 - \xi_i^2} \right] \Psi_i(\xi_i) = 0, \quad (5)$$

где введено обозначение $\varepsilon_i = E_i/E_R$. Решение уравнения (5) ищем в виде $\Psi_i(\xi_i) = (1 - \xi_i^2)^{\varepsilon_i/2} \Omega(\xi_i)$ и тогда для $\Omega(\xi_i)$ получаем уравнение Куммера [14]:

$$\begin{aligned} & \frac{1 - \xi_i}{2} \left(1 - \frac{1 - \xi_i}{2} \right) \Omega''(\xi_i) + (\varepsilon_i + 1)(1 - 2s_i) \Omega'(\xi_i) - \\ & - (\varepsilon_i - s_i)(\varepsilon_i + s_i + 1) \Omega(\xi_i) = 0, \end{aligned} \quad (6)$$

решение которого задается гипергеометрической функцией Гаусса:

$$\Omega(\xi_i) = {}_2F_1 \left\{ \varepsilon_i - s_i, \varepsilon_i + s_i + 1, \varepsilon_i + 1, \frac{1 - \xi_i}{2} \right\}. \quad (7)$$

Окончательно, волновая функция системы примет следующий вид:

$$\Phi_0(x, y, z) = \prod_{i=1}^3 \left(1 - \tanh^2 \left(\frac{q_i}{\beta_i} \right) \right)^{\frac{\varepsilon_i}{2}} {}_2F_1 \left\{ \varepsilon_i - s_i, \varepsilon_i + s_i + 1, \varepsilon_i + 1, \frac{1 - \tanh(q_i/\beta_i)}{2} \right\}, \quad (8)$$

а энергетический спектр будет определяться выражением

$$\varepsilon_0 = \sum_{i=1}^3 \left(U_i - \frac{1}{4\beta_i^2} \left[-(1 + 2n_i) + \sqrt{1 + 4\beta_i^2 U_i} \right]^2 \right), \quad (9)$$

где n_i – квантовые числа, которые принимают значения $n_i = 0, 1, 2, \dots$

3. Примесные состояния и энергия связи

Рассмотрим теперь движение электрона в сферической КТ с МППТ при наличии примесного центра. В качестве упрощения будем считать, что примесь расположена в центре КТ ($q_i = 0$). Тогда потенциальная энергия электрона запишется в виде

$$\tilde{U}(X, Y, Z) = \sum_{i=1}^3 \left(\tilde{U}_i - \frac{\tilde{U}_i}{\cosh^2 \left(\frac{Q_i}{\tilde{\beta}_i} \right)} \right) - \frac{e^2}{\kappa \sqrt{\sum_{i=1}^3 Q_i^2}}. \quad (10)$$

Гамильтониан системы в безразмерных величинах для основного состояния запишется в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{2}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}. \quad (11)$$

Так как уравнение Шредингера с гамильтонианом (11) не имеет точного решения, то задачу о нахождении волновой функции и энергетического спектра электрона в основном состоянии в сферической КТ с МППТ решим вариационным методом [13]. Пробную волновую функцию ищем в виде

$$\Phi(x, y, z) = A(\lambda) \Phi_0(x, y, z) e^{-\lambda \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}, \quad (12)$$

где $A(\lambda)$ – нормировочная константа, λ – вариационный параметр, а функция $\Phi_0(x, y, z)$ является решением уравнения Шредингера без наличия примеси (см. формулу (8)). Нормировочный коэффициент $A(\lambda)$ зависит от вариационного параметра λ . Из условия нормировки волновой функции нормировочный коэффициент $A(\lambda)$ можно представить в следующем виде:

$$A(\lambda) = \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_0^2(x, y, z) e^{-2\lambda \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} dx dy dz \right)^{-1/2}. \quad (13)$$

Далее, следуя технике вариационного метода расчета для энергии частицы, запишем

$$\varepsilon(\lambda) = \int \Phi^*(x, y, z) \hat{H} \Phi(x, y, z) dx dy dz. \quad (14)$$

Энергия $\varepsilon(\lambda)$ определяется численными методами, так как входящие в уравнение (14) интегралы невозможно аналитически рассчитать. Из минимизации энергии $\varepsilon(\lambda)$ окончательно находим энергию электрона ε_{imp} в сферической КТ с МППТ с примесным центром. Определяя энергию связи, как разницу энергий частицы без примеси и с примесью, получим:

$$\varepsilon_{\text{bind}} = \varepsilon_0 - \varepsilon_{\text{imp}} = \sum_{i=1}^3 \left(U_i - \frac{1}{4\beta_i^2} \left[-1 + \sqrt{1 + 4\beta_i^2 U_i} \right]^2 \right) - \varepsilon_{\text{imp}}. \quad (15)$$

4. Обсуждение

Перейдем к обсуждению полученных результатов. На рис.2а и б приведены зависимости энергии электрона от полуширины и глубины потенциальной ямы. Отметим, что численные расчеты сделаны для сферической КТ из GaAs со следующими параметрами: $\mu_e = 0.067m_e$, $\kappa = 13.8$, $E_R = 5.275$ мэВ, $a_B = 104$ Å. Все нижеприведенные расчеты сделаны для случая, когда параметры сферической КТ по всем направлениям одинаковы ($\beta_1 = \beta_2 = \beta_3 \equiv \beta$ и $U_1 = U_2 = U_3 \equiv U_0$). Как видно из рис.2а, с уменьшением полуширины потенциальной ямы энергия электрона увеличивается, что является следствием увеличения вклада размерного квантования. Это означает, что область локализации электрона в сферической КТ уменьшается. Нужно отметить, что с уменьшением полуширины потенциальной ямы, увеличиваются также межуровневые расстоя-

ния энергии. Обратная картина наблюдается при изменении глубины потенциальной ямы: с уменьшением глубины потенциальной ямы энергия электрона уменьшается, а энергетические уровни сближаются. Это обусловлено тем, что уменьшается вклад размерного квантования в энергию электрона.

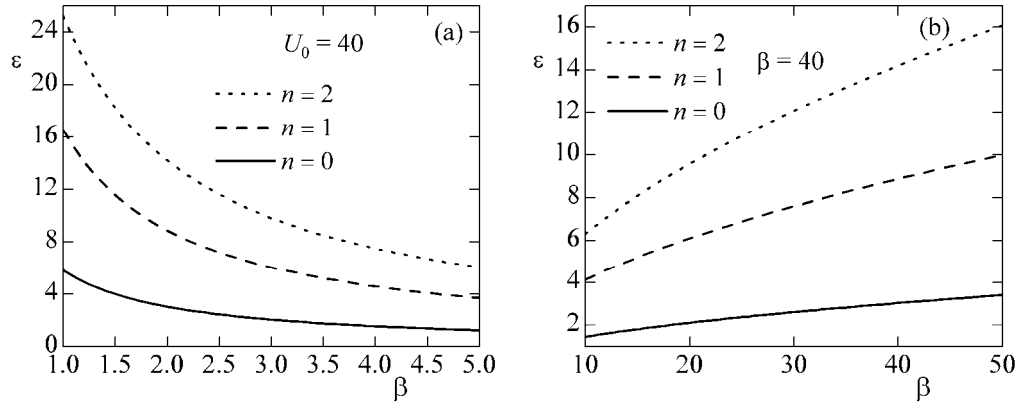


Рис.2. Зависимость энергии электрона в сферической квантовой точке от полуширины (а) и глубины (б) модифицированного потенциала Пешля–Теллера.

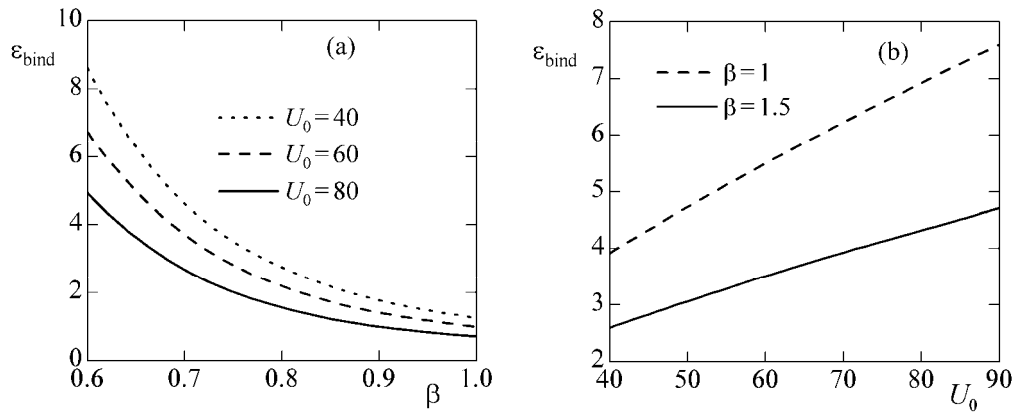


Рис.3. Зависимость энергии связи частицы в сферической квантовой точке от полуширины (а) и глубины (б) потенциальной ямы.

На рис.3а приведена зависимость энергии связи электрона в сферической КТ при наличии примеси от полуширины МППТ, при разных фиксированных значениях глубины потенциальной ямы. Как видно из рисунка, с уменьшением β_i энергия связи частицы возрастает, что является следствием увеличения эффекта размерного квантования. Отметим также, что кривые, соответствующие большим значениям глубины потенциальной ямы, расположены выше. Обратная картина наблюдается для зависимости энергии связи электрона от глубины потенциальной ямы: с уменьшением параметра U_i энергия связи убывает.

Эта зависимость приведена при различных фиксированных значениях полуширины потенциальной ямы на рис.3b. Здесь кривые, соответствующие большим значениям фиксированного параметра β_i , расположены ниже из-за уменьшения эффекта размерного квантования.

Отметим, что в сферической КТ с МППТ энергетические уровни существуют, когда реализуется условие $U_i \geq 1/\beta_i^2$.

В заключение автор выражает благодарность академику Э.М. Казаряну и к.ф.-м.н. Д.Б. Айрапетяну за полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. **P.Harrison**. Quantum wells, wires and dots. Theoretical and computational physics. New York, Wiley, 2005.
2. Self-Assembled InGaAs-GaAs Quantum Dots. **R.K.Willardson, E.R.Weber**, eds. San Diego, Academic Press, 1999.
3. **A.A.Gusev, O.Chuluunbaatar, S.L.Vinitsky, E.M.Kazaryan, H.A.Sarkisyan**. J. Phys.: Conf. Series, **248**, 012047 (2010).
4. **Д.Б.Айрапетян**. Изв. НАН Армении, Физика, **42**, 442 (2007).
5. **Е.М.Kazaryan, L.S.Petrosyan, H.A.Sarkisyan**. Int. J. Mod. Phys. B, **15**, 4103 (2001).
6. **Д.Б.Айрапетян, К.Г.Двоян, Э.М.Казарян, О.Х.Тевосян**. Труды международной конференции Роснано-2009, Москва, октябрь 6-8, 2009, с. 10.
7. **Д.Б.Айрапетян, К.Г.Двоян, Э.М.Казарян, А.А.Чанчапаян**. ДАН РА, **108**, 320 (2008).
8. **А.М.Казарян, Э.М.Казарян**. ФТП, **7**, 1383 (1977).
9. **G.Bastard**. Phys. Rev. B, **24**, 4714 (1981).
10. **L.E.Oliveira, R.Perez-Alvarez**. Phys. Rev. B, **40**, 10460 (1989).
11. **Е.М.Kazaryan, A.A.Kostanyan, H.A.Sarkisyan**. Physica E, **28**, 423 (2005).
12. **Е.М.Kazaryan, A.A.Kostanyan, H.A.Sarkisyan**. J. Phys.: Cond. Matt., **19**, 046212 (2007).
13. **Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц**. Квантовая механика. М., Наука, 1989.
14. Справочник по специальным функциям. Под ред. **М.Абрамовица, И.Стиган**. М., Наука, 1979.

IMPURITY STATES IN A SPHERICAL QUANTUM DOT WITH A MODIFIED PÖSCHEL–TELLER POTENTIAL

H.Kh. TEVOSYAN

Quantum states and energy levels of an electron in a spherical quantum dot with a modified Pöschel–Teller potential are studied. Analytical expressions for the wave function and energy of particle in the absence of impurity are obtained. Within the framework of variational method the impurity states are studied and by using numerical methods the dependences of the particle energy on the parameters of the spherical quantum dot are derived. Dependences of the electron binding energy on the half-width and depth of the potential wall are revealed.

УДК 621.372

АНАЛИТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ТОРОИДАЛЬНОГО РЕЗОНАТОРА ВЫСОКОЙ ДОБРОТНОСТИ В ТЕРАГЕРЦОВОЙ ОБЛАСТИ ЧАСТОТ

Т.А. АРУТЮНЯН, А.Ю. ВАРДАНЯН, А.А. АХУМЯН, Х.В. НЕРКАРАЯН

Ереванский государственный университет, Армения

(Поступила в редакцию 20 апреля 2012 г.)

Рассмотрен тороидальный резонатор, поперечное сечение которого представляет собой пересечение двух окружностей одинакового радиуса. Развита теоретическая модель позволяет получить аналитические выражения для распределения поля, резонансной частоты и добротности мод резонатора, с учетом диссипативных потерь на металлических стенках. Относительно большое значение добротности этих резонаторов открывает новые возможности их применения в различных областях – от фундаментальных проблем фотоники до проектирования устройств.

1. Введение

Применение плоскопараллельного волновода создало предпосылки для большого технологического прорыва в области создания терагерцовых (ТГц) устройств, где электромагнитный импульс распространяется с малыми потерями [1,2]. Здесь неискаженное распространение импульса достигается в результате возбуждения основной поперечной моды волновода, где практически отсутствует дисперсия групповой скорости и нет отсечки на низких частотах. Возможность распространения неискаженных ТГц импульсов в двумерной среде послужила основой для всевозможных приложений, в том числе для генерации импульсов [3,4], в спектроскопии [5,6], зондировании [7,8], воспроизведении ТГц изображения [9,10], обработке сигналов [11] и даже для сверхфокусировки [12]. В [13-15] неискаженное распространение импульса рассмотрено также в волноводах со слегка изогнутыми параллельными плоскостями.

Поскольку электромагнитные волны с частотой от 0.1 до 10 ТГц могут быть синхронизированы с коллективными модами колебаний сахаридов или белковых молекул, спектроскопия ТГц волн может быть применена в различных типах датчиков для обнаружения вредных веществ в крови человека, раковых клеток в коже, а также микробактерий в овощах [16-18].

Резонаторы с высокой добротностью обеспечивают возрастание электромагнитных полей определенной частоты, что важно в приложениях для выбора частоты [19], спектроскопии [20], нелинейной оптики [21], микролазерного резонатора [22] и регистрации параметров [23]. В области телекоммуникации

подобные волноводы служат для фильтрации и модуляции частоты [24].

Таким образом, на основе резонаторов с большой добротностью и преимуществами плоскопараллельного волновода могут быть созданы устройства с широким спектром применения. В настоящей статье мы аналитически исследуем особенности тороидального резонатора, обладающего такими свойствами.

2. Теоретическая основа

Структура тороидального резонатора показана на рис.1. Его поперечное сечение представляет собой пересечение двух окружностей с одинаковым радиусом R , R_0 – расстояние от центра координат до центра поперечного сечения тороида, d_0 – максимальное расстояние между металлическими стенками тороида.

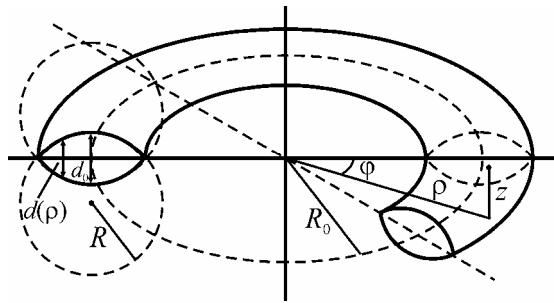


Рис.1. Схематическое изображение тороидального резонатора.

В таких резонаторах энергия волнового поля в основном сосредоточена в центральной части поперечного сечения сердцевины, которая заполнена диэлектриком с проницаемостью ϵ . В цилиндрической системе координат (ρ, ϕ, z) волновое уравнение для z -компоненты магнитного поля имеет следующий вид:

$$\frac{\partial^2 H_z}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial H_z}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 H_z}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2 H_z}{\partial z^2} + \epsilon \frac{\omega^2}{c^2} H_z = 0, \quad (1)$$

где ω – частота волны, c – скорость света в вакууме.

Задача решается в адиабатическом приближении. Полагаем, что радиусы R и R_0 , характеризующие тороид, значительно больше длины волны. Тогда z -компоненту магнитного поля можно представить в следующем виде [25]:

$$H_z = F(\rho) Z(z, \rho) e^{im\phi - i\omega t}, \quad \text{где } m = 0, 1, 2, \dots \quad (2)$$

В тороидальном резонаторе мы имеем дело с бегущей волной, которая возбуждается при условии $\lambda m = L$, где λ – длина волны, L – длина тороида. Здесь ρ выступает в качестве параметра в $Z(z, \rho)$ и пренебрегается его производными по ρ . Тогда уравнения для функций $Z(z, \rho)$ и $F(\rho)$ могут быть представлены в виде

$$\frac{d^2 Z}{dz^2} + \left(\varepsilon \frac{\omega^2}{c^2} - q^2(\rho) \right) Z = 0, \quad (3)$$

и

$$\frac{d^2 F}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{dF}{d\rho} - \frac{m^2}{\rho^2} F + q^2(\rho) F = 0. \quad (4)$$

В случае идеально проводящих стенок из (3) легко можно найти решения для $Z(z, \rho)$:

$$Z_n(z, \rho) = \begin{cases} \cos(\pi n z / d(\rho)), & n = 1, 3, 5, \dots \\ \sin(\pi n z / d(\rho)), & n = 2, 4, 6, \dots \end{cases} \quad (5)$$

Здесь

$$q^2(\rho) = -\pi^2 n^2 / d^2(\rho) + \varepsilon \omega^2 / c^2, \quad (6)$$

где $d(\rho)$ – расстояние между металлическими стенками тороида (рис.1). В пределе $d_0 \ll R$ и $d_0 \ll R_0$ получаем

$$d(\rho) = d_0 - (R_0 - \rho)^2 / R.$$

Тогда уравнение (4) можно представить в следующем виде:

$$\frac{d^2 F}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{dF}{d\rho} - \frac{m^2}{\rho^2} F + \varepsilon \frac{\omega^2}{c^2} F - \frac{\pi^2 n^2}{(d_0 - (R_0 - \rho)^2 / R)^2} F = 0. \quad (7)$$

Введем новую переменную [26]

$$\rho = R_0 e^{u/R_0}. \quad (8)$$

В результате из (7) получим

$$\frac{\partial^2 F}{\partial u^2} - \frac{m^2}{R_0^2} F + \left(\varepsilon \frac{\omega^2}{c^2} - \frac{\pi^2 n^2}{(d_0 - (R_0 - R_0 e^{u/R_0})^2 / R)^2} \right) e^{\frac{2u}{R_0}} F = 0. \quad (9)$$

В интересующем нас случае $|u| \ll R_0$ и $d_0 R \ll u^2$ получим

$$d^2 F / d\xi^2 + (\chi / \beta + \xi^2) F = 0, \quad (10)$$

где

$$\xi = \left(u + \frac{\alpha}{R_0 \beta^2} \right) \beta^{\frac{1}{2}}, \quad \alpha = \varepsilon \frac{\omega^2}{c^2} - \frac{\pi^2 n^2}{d_0^2}, \quad \beta^2 = \frac{2\pi^2 n^2}{d_0^3 R}, \quad \chi = \alpha - \frac{m^2}{R_0^2} - \frac{\alpha^2}{R_0^2 \beta^2}. \quad (11)$$

Решениями уравнения (10) являются полиномы Эрмита:

$$F(\xi) = e^{-(1/2)\xi^2} H_s(\xi), \quad (12)$$

где

$$\chi/\beta = 2s + 1 \quad (s = 0, 1, 2, \dots). \quad (13)$$

Тогда z-компонента магнитного поля, т.е. решение уравнения (1), имеет следующий вид:

$$H_{znm} = A e^{-(1/2)\xi^2} H_s(\xi) Z_n(z, \rho) e^{im\phi - i\omega t}. \quad (14)$$

Из формул (11) и (14) можно получить уравнение, определяющее резонансную частоту ω :

$$\begin{aligned} & \left(\varepsilon \frac{\omega^2}{c^2} - \frac{\pi^2 n^2}{d_0^2} \right)^2 - R_0^2 \frac{2\pi^2 n^2}{d_0^3 R} \left(\varepsilon \frac{\omega^2}{c^2} - \frac{\pi^2 n^2}{d_0^2} \right) + \\ & + \frac{m^2 2\pi^2 n^2}{d_0^3 R} + (2s + 1) \left(\frac{2\pi n}{d_0^3 R} \right)^{\frac{3}{2}} (\pi n)^{\frac{3}{2}} = 0. \end{aligned} \quad (15)$$

Добротность резонатора Q , обусловленная диссипативными потерями на металлических стенках тороида, можно найти из выражения $Q = \omega/\omega''$, где ω'' – мнимая часть резонансной частоты. Учитывая, что

$$\omega'' = \frac{c}{2} \xi' \oint |\mathbf{H}|^2 df / \int |\mathbf{H}|^2 dV, \quad (16)$$

где $\xi' = \sqrt{\omega/8\pi\sigma}$ – волновой импеданс, а σ – проводимость металлических стенок, получим

$$Q = \frac{\omega d_0}{4c\xi'} \left(1 + \pi^2 k^2 / \left(\frac{\omega^2}{c^2} - k^2 \right)^2 d_0^2 \right). \quad (17)$$

3. Результаты и обсуждение

Уравнение (15) позволяет определить частоту волны ω в зависимости от размеров тороида (R_0 , R и d_0) и от модовых чисел m , n и s . Дальнейшие расчеты производятся, считая, что $n = 1$, $s = 0$ и $\varepsilon = 1$.

На рис.2–4 представлены зависимости резонансной частоты волны ω от радиусов кривизны R , R_0 и d_0 для разных мод $m = 8, 9, 10$. Для характерных параметров тороида $R_0 = 4$ мм, $R = 2$ мм и $d_0 = 1$ мм резонансная частота находится в области $\omega \sim 10^{12}$ рад/с. Для тороидов больших размеров частота уменьшается. Например, при $R_0 = 8$ мм, $R = 4$ мм и $d_0 = 2$ мм имеем $\omega \sim 10^{11}$ рад/с, а при $R_0 = 16$ мм, $R = 8$ мм и $d_0 = 4$ мм имеем $\omega \sim 10^{10}$ рад/с. Таким образом, частота ω уменьшается с увеличением R , R_0 и d_0 (рис.2–4) и увеличивается с возрастанием модового числа m (рис.5).

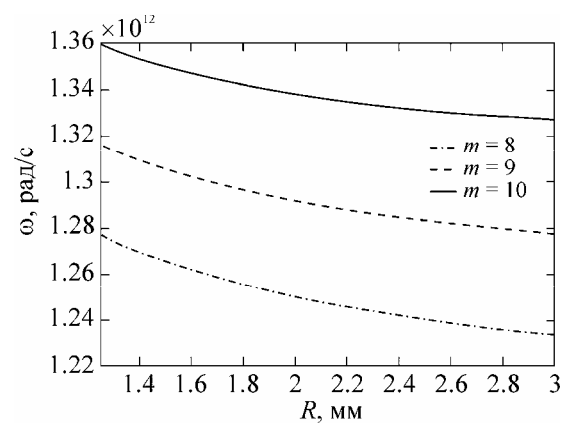


Рис.2. Зависимость волновой частоты от радиуса R при $\varepsilon=1$, $R_0=4$ мм, $d_0=1$ мм, $m=8, 9, 10$.

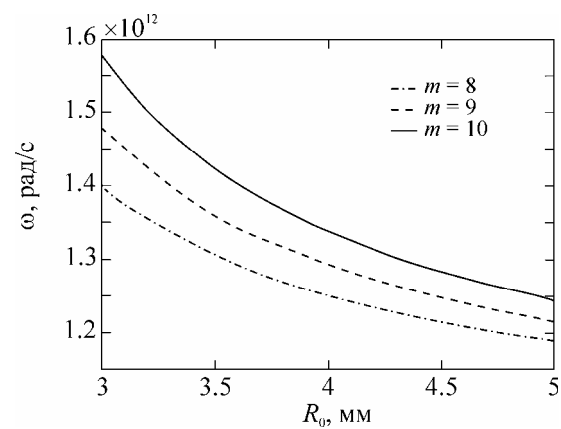


Рис.3. Зависимость волновой частоты от радиуса R_0 при $\varepsilon=1$, $R_0=2$ мм, $d_0=1$ мм, $m=8, 9, 10$.

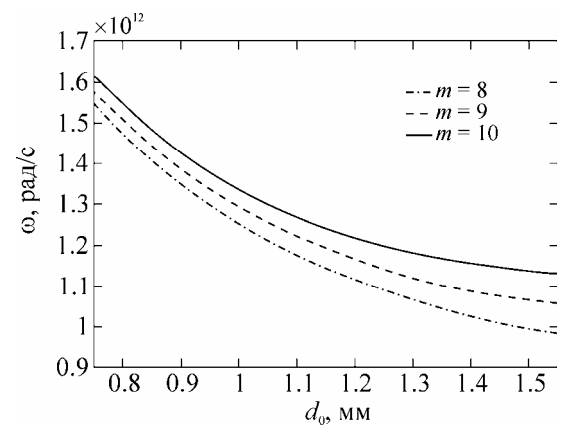


Рис.4. Зависимость волновой частоты от d_0 при $\varepsilon=1$, $R_0=4$ мм, $R=2$ мм, $m=8, 9, 10$.

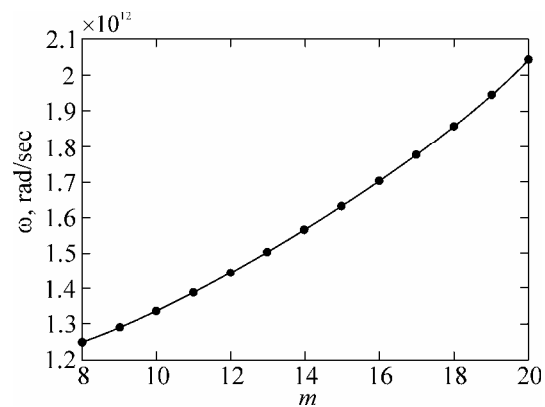


Рис.5. Зависимость волновой частоты от m при $\varepsilon = 1$, $R_0 = 4$ мм, $R = 2$ мм, $d_0 = 1$ мм.

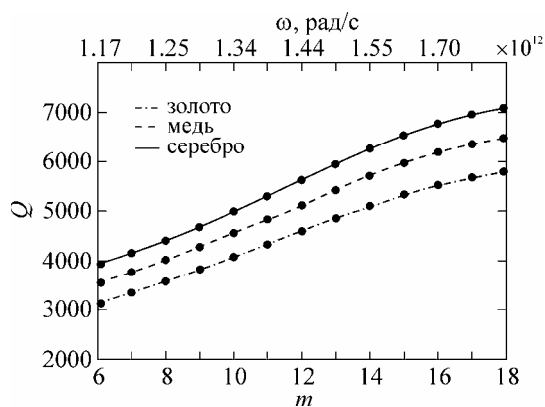


Рис.6. Зависимость добротности от m при $R_0 = 4$ мм, $R = 2$ мм, $d_0 = 1$ мм для трех типов металлических поверхностей – золота, меди и серебра.

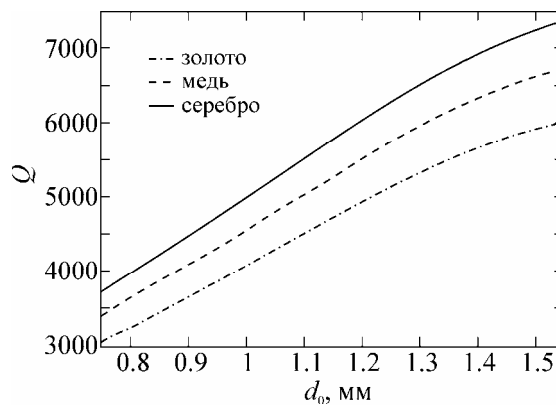


Рис.7. Зависимость добротности от d_0 при $R_0 = 4$ мм, $R = 2$ мм, $m = 10$ для трех типов металлических поверхностей – золота, меди и серебра.

На рис.6–9 представлены зависимости добротности резонатора Q от параметров m , d_0 , R и R_0 для трех типов металлических поверхностей – золота ($\sigma \approx 4 \times 10^{17}$ CGSE), меди ($\sigma \approx 5 \times 10^{17}$ CGSE) и серебра ($\sigma \approx 6 \times 10^{17}$ CGSE). Для тороидов с $R_0 = 4$ мм, $R = 2$ мм и $d_0 = 1$ мм получим, что начиная с $m = 8$ добротность имеет порядок $Q \sim 10^3$. Добротность возрастает с возрастанием номера моды (рис.6). Она также возрастает с возрастанием d_0 (рис.7) и R (рис.8), и уменьшается с возрастанием R_0 (рис.9). Как и следовало ожидать, добротность зависит от проводимости металлической поверхности стенок тороида, и наибольшее значение получается для серебра, у которого максимальная проводимость.

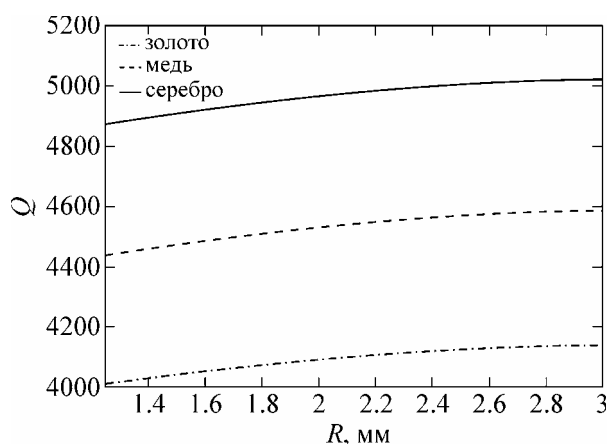


Рис.8. Зависимость добротности от R при $R_0 = 4$ мм, $d_0 = 1$ мм, $m = 10$ для трех типов металлических поверхностей – золота, меди и серебра.

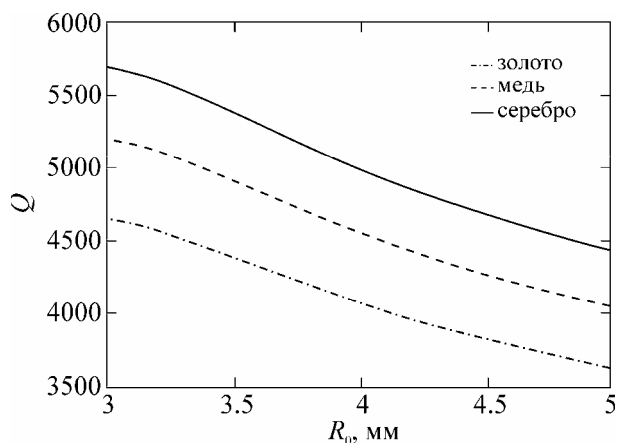


Рис.9. Зависимость добротности от R_0 при $R = 2$ мм, $d_0 = 1$ мм, $m = 10$ для трех типов металлических поверхностей – золота, меди и серебра.

4. Заключение

Рассмотрено формирование волноводных мод в тороидальной структуре. Использованная теоретическая модель позволяет получить аналитические выражения для распределения полей, резонансной частоты и добротности в большом диапазоне волнового спектра. Большое число параметров в задаче усложняет нахождение численными методами оптимальных условий для сохранения и локализации волновой энергии в резонаторе. Представленную теорию можно использовать для быстрой оценки характеристических параметров и проектирования необходимого тороидального резонатора. Относительно большое значение добротности этих резонаторов открывает новые возможности их применения в разных областях, от фундаментальных проблем фотоники до проектирования устройств.

ЛИТЕРАТУРА

1. **R.Mendis, D.Grischkowsky.** Opt. Lett., **26**, 846 (2001).
2. **R.Mendis, D.Grischkowsky.** IEEE Microw. Wirel. Compon. Lett., **11**, 444 (2001).
3. **H.Cao, R.A.Linke, A.Nahata.** Opt. Lett., **29**, 1751 (2004).
4. **S.Coleman, D.Grischkowsky.** Appl. Phys. Lett., **84**, 654 (2004).
5. **R.Mendis.** Electron. Lett., **42**, 19 (2006).
6. **J.S.Melinger, N.Laman, S.S.Harsha, D.Grischkowsky.** Appl. Phys. Lett., **89**, 252220 (2006).
7. **J.Zhang, D.Grischkowsky.** Opt. Lett., **19**, 1617 (2004).
8. **M.Nagel, M.Forst, H.Kurz.** J. Phys., Cond. Matter, **18**, S601 (2006).
9. **M.M.Awad, R.A.Cheville.** Appl. Phys. Lett., **86**, 221107 (2005).
10. **M.A.Musheinessh, C.J.Divin, J.A.Fessler, T.B.Norris.** Opt. Express, **17**, 13663 (2009).
11. **D.G.Cooke, P.U.Jepsen.** Opt. Express, **16**, 15123 (2008).
12. **H.Zhan, R.Mendis, D.M.Mittleman.** Opt. Express, **18**, 9643 (2010).
13. **Yu.Avetisyan, A.Hakhoumian, A.Makaryan, R.Martirosyan.** EOS Annual Meeting 2008, Terahertz-Science and Technology, Paris, France, p.ISBN 978-3-00-024 188-8 (2008).
14. **Yu.Avetisyan, A.Makaryan, K.Khachatryan, A.Hakhoumian.** Armenian. J. Phys., **2**, 122 (2009).
15. **Yu.Avetisyan, A.Hakhoumian, A.Makaryan, T.Poghosyan, G.Torosyan, R.Beigang, H.Minamide, H.Ito.** Tech. Dig. of CLEO'09, Baltimore, MD, USA, p.CThQ2 (2009).
16. **M.Yamaguchi, F.Miyamaru, K.Yamamoto, M.Tani, M.Hangyo.** Appl. Phys. Lett., **86**, 053903 (2005).
17. **B.M.Fischer, M.Walther, P.U.Jepsen.** Phys. Med. Biol., **47**, 3807 (2002).
18. **Y.Oyama, L.Zhen, T.Tanabe, M.Kagaya.** NDT E Int., **42**, 28 (2009).
19. **L.Collot, V.Lefèvre-Seguin, M.Brune, J.M.Raimond, S.Haroche.** Europhys. Lett., **23**, 327 (1993).
20. **S.Chiller, R.L.Byer.** Opt. Lett., **16**, 1138 (1991).
21. **A.T.Rosenberger.** Proc. SPIE, **3793**, 179 (1999).
22. **S.M.Spillane, T.J.Kippenberg, K.J.Vahala.** Nature, **415**, 621 (2002).
23. **V.S.Ilchenko, P.S.Volikov, V.L.Velichansky, F.Treussart, V.Lefèvre-Seguin, J.-M.Raimond, S.Haroche.** Opt. Commun., **145**, 86 (1998).
24. **P.Rabiei, W.H.Steier, C.Chang, L.R.Dalton.** J. Lightwave Technol., **20**, 1968 (2002).
25. **S.Bozhevolnyi, Kh.Nerkararyan.** Opt. Lett., **34**, 2039 (2009).
26. **H.Krammer.** Appl. Optics, **17**, 316 (1978).

ՄԵԾ ԲԱՐՈՐԱԿՈՒԹՅԱՄԲ ՏՈՐՈՒԴԱՅԻՆ ՌԵԶՈՆԱՏՈՐԻ
ԱՆԱԼԻՏԻԿ ՆԿԱՐԱԳՐՈՒԹՅՈՒՆԸ ՀԱՃԱԽՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ
ՏԵՐԱՀԵՐՑԱՅԻՆ ՏԻՐՈՒՅԹՈՒՄ

Տ.Ա. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ, Ա.ՅՈՒ. ՎԱՐԴԱՆՅԱՆ,
Ա.Ա. ՀԱԽՈՒՄՅԱՆ, Խ.Վ. ՆԵՐԿԱՐԱՐՅԱՆ

Դիտարկված է տորոիդային ռեզոնատոր, որի լայնական կտրվածքը միևնույն շառավիղով երկու շրջանագծերի հատույթ է: Շարադրված տեսությունը թույլ է տալիս ստանալ անալիտիկ արտահայտություններ դաշտերի բաշխվածության, ռեզոնանսային հաճախության և ռեզոնատորի մոդերի բարորակության համար՝ հաշվի առնելով մետաղական պատերում դիսիպատիվ կորուստները: Այդ ռեզոնատորների բարորակության հարաբերական մեծ արժեքը նրանց կիրառության նոր հնարավորություններ է բացում տարբեր բնագավառներում՝ սկսած ֆոտոնիկայի հիմնարար խնդիրներից մինչև սարքերի նախագծում:

ANALYTICAL DESCRIPTION OF A TOROIDAL
CAVITY WITH HIGH QUALITY FACTOR
IN THE TERAHERTZ REGION OF FREQUENCIES

T.A. HARUTYUNYAN, A.Yu. VARDANYAN,
A.A. HAKHUMYAN, KH.V. NERKARARYAN

We consider a toroidal cavity, cross-section of which represents an intersection of two circles with the same radius. Developed theoretical model allows us to obtain analytical expressions for the mode field distributions, resonant frequency, and quality factor of the cavity, with allowance for the dissipation losses in the metallic walls. A relatively high Q -value of these cavities opens up new possibilities for application in various fields ranging from fundamental photonics to device engineering.

УДК 541.14

МЕДНО-УГЛЕРОДНЫЕ НАНОКОМПОЗИТЫ, ПОЛУЧЕННЫЕ ТВЕРДОФАЗНЫМ ПИРОЛИЗОМ ФТАЛОЦИАНИНА МЕДИ

А.С. МАНУКЯН¹, А.А. МИРЗАХАНИЯН¹, Т.К. ХАЧАТРЯН¹,
Г.Р. БАДАЛЯН¹, К.Г. АБДУЛВАХИДОВ²,
Л.А. БУГАЕВ², Э.Г. ШАРОЯН¹

¹Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак, Армения

²Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

(Поступила в редакцию 15 июня 2012 г.)

Методом твердофазного пиролиза фталоцианина меди получены наночастицы меди в углеродной матрице. Элементный состав, структура и морфология нанокompозитов исследованы методами сканирующей электронной микроскопии, энергодисперсионного рентгеновского микроанализа и рентгеноструктурного анализа. В зависимости от температуры и времени пиролиза размеры наночастиц меди меняются от ~10 нм до ~400 нм. Структура углеродной матрицы также сильно зависит от условий пиролиза, что позволяет синтезировать нанокompозиты с заданными свойствами.

1. Введение

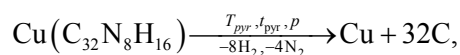
В последние годы металлоуглеродные (М/С) нанокompозиты вызывают большой интерес как с научной точки зрения, так и в связи с возможными применениями. В частности, они могут быть использованы в биомедицине, спинтронике, катализе, как сенсоры, поглотители энергии электромагнитного поля, в качестве армирующих материалов, магнитных красок, в суперконденсаторах и т.п. (см., например, работы [1-3]). Известно несколько методов получения металлоуглеродных нанокompозитов, например, дуговой разряд, лазерная абляция, гидротермальный метод, магнетронное напыление, химическое газозофазное осаждение и твердофазный пиролиз [4-6]. Последний метод характеризуется простотой и экономичностью: в частности, в нем не требуется прокачки газовых компонент.

Одними из подходящих материалов для твердофазного пиролиза являются металл-фталоцианины ($MPc \equiv MC_{32}N_8H_{16}$), поскольку они нетоксичны и одновременно содержат атомы металла и углерода (в соотношении 1:32), которые в результате пиролиза могут образовывать различные М/С нанокompозиты с контролируемыми свойствами [7-9]. Существенно, что углеродное окружение является биосовместимым, а также препятствует процессам окисления и агрегации наночастиц.

В настоящей работе нами показано, что твердофазный пиролиз фталоцианина меди является простым, одностадийным и эффективным методом для синтеза нанокompозитов Cu/C. Путем изменения условий пиролиза получены наночастицы меди различных размеров в углеродных матрицах с различной степенью графитации. Отметим, что ранее нанокompозиты Cu/C были получены в ряде работ (см., в частности, [10-12]), однако в них метод синтеза был сложным и менее эффективным.

2. Методика эксперимента

Для синтеза нанокompозитов Cu/C мы использовали предварительно очищенный двойной возгонкой поликристаллический порошок фталоцианина меди. Процесс твердофазного синтеза был аналогичен описанному в работах [7,8] и соответствовал следующей реакции:



где $T_{\text{пир}}$ – температура пиролиза (700–1000°C), $t_{\text{пир}}$ – время пиролиза (5–400 мин) и p – самогенерированное давление в реакционной камере. Пиролиз проводился в замкнутой ампуле из кварцевого стекла, с начальным давлением $p = 10^{-6}$ бар.

Элементный состав, морфология и размеры полученных нанокompозитов исследовались с помощью сканирующего электронного микроскопа (СЭМ) VEGA TS 5130MM (Tescan) с системой энергодисперсионного рентгеновского микроанализа INCA energy 300. Структура нанокompозитов изучалась с помощью рентгеновской установки ДРОН-4 (излучение Cu K_α).

3. Результаты и обсуждение

Полученные образцы представляли собой устойчивые на воздухе, черные порошки, состоящие из углеродной матрицы с диспергированными в ней наночастицами меди. Плотность образцов, измеренная флотационным методом, составляла ≈ 0.9 г/см³, что свидетельствует о значительной пористости нанокompозитов.

На рис.1 и 2 приведены СЭМ-изображения нанокompозитов, полученных при различных температурах пиролиза. Видно, что нанокompозиты состоят из углеродной матрицы с включенными в нее наночастицами меди. Форма наночастиц меди близка к сферической, а их размеры зависят от условий пиролиза, меняясь в пределах 10–400 нм. Другой особенностью нанокompозитов Cu/C является наличие графитированной оболочки вокруг наночастиц меди (рис.2), аналогично случаю нанокompозитов Ni/C [7-9]. Отметим, что в нанокompозитах наблюдаются также углеродные микросферы диаметром 1.5–4 мкм.

Результаты энергодисперсионного микроанализа подтверждают приведенные выше данные. Состав образцов достаточно однороден и они в основном содержат атомы углерода и меди (~3 ат%). При $T_{\text{пир}} < 900^\circ\text{C}$ в них есть также

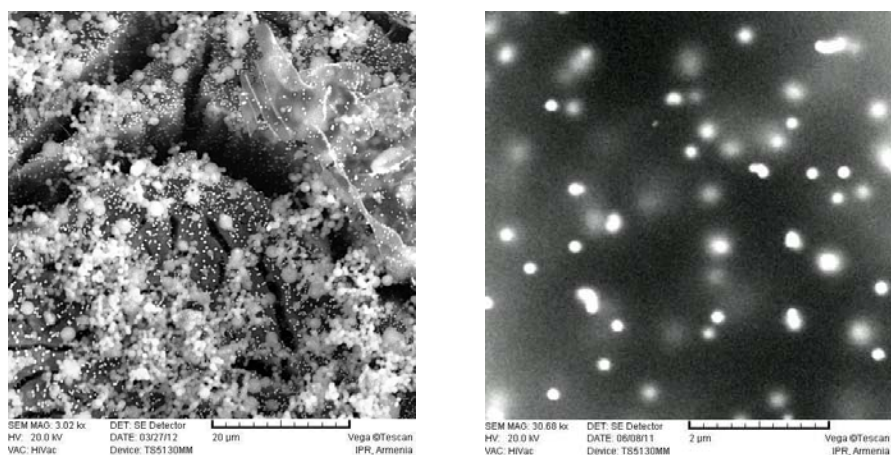


Рис.1. СЭМ-изображения нанокompозитов Cu/C, полученных при $T_{\text{пир}} = 700^{\circ}\text{C}$, $t_{\text{пир}} = 30$ мин.

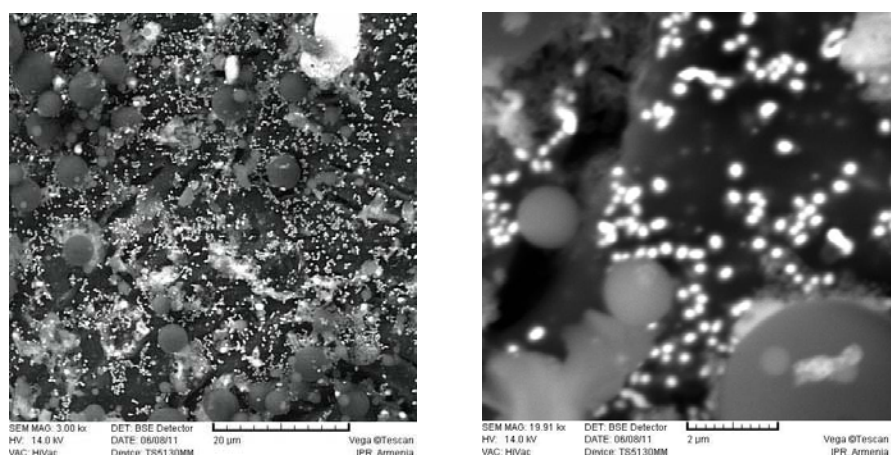


Рис.2. СЭМ-изображения нанокompозитов Cu/C, полученных при $T_{\text{пир}} = 900^{\circ}\text{C}$, $t_{\text{пир}} = 30$ мин.

небольшое количество азота (до 10 ат%), которое исчезает при более высоких температурах пиролиза.

Используя данные электронной микроскопии были построены распределения наночастиц меди по размерам (рис.3). Для каждого образца были учтены размеры 150–200 наночастиц. Как видно, распределения имеют логарифмически-нормальный вид, что характерно для процессов коалесценции. Отметим, что и в этом случае имеет место уменьшение среднего диаметра наночастиц (от ≈ 180 нм до ≈ 150 нм) при повышении температуры пиролиза, которое ранее наблюдалось для нанокompозитов Ni/C и было объяснено влиянием графитированных нанооболочек вокруг наночастиц [7]. Отметим, что при увеличении времени пиролиза до 400 мин средние размеры наночастиц меди увеличиваются на 40–50% по сравнению с данными на рис.3.

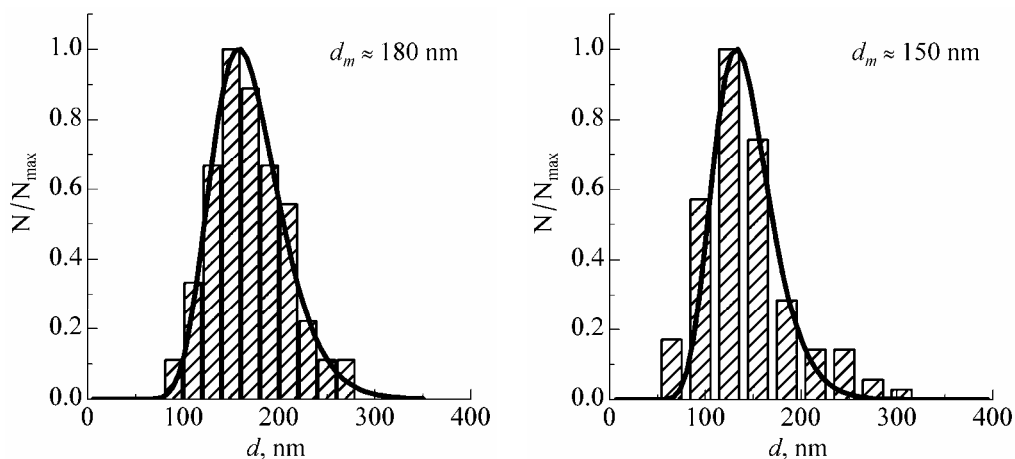


Рис.3. Распределения наночастиц меди по размерам для двух образцов: а) $T_{\text{пир}} = 700^{\circ}\text{C}$, $t_{\text{пир}} = 30$ мин, б) $T_{\text{пир}} = 900^{\circ}\text{C}$, $t_{\text{пир}} = 30$ мин.

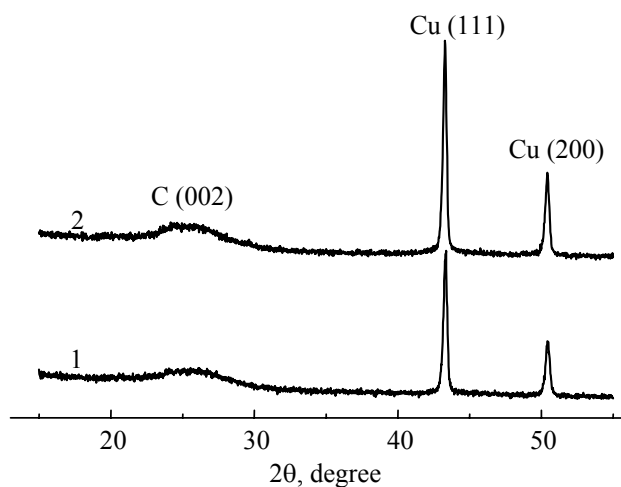


Рис.4. Рентгеновские спектры наночастиц меди в углеродных матрицах. Образцы получены при следующих условиях: 1) $T_{\text{пир}} = 700^{\circ}\text{C}$, $t_{\text{пир}} = 30$ мин, 2) $T_{\text{пир}} = 900^{\circ}\text{C}$, $t_{\text{пир}} = 30$ мин.

Рентгеновские спектры двух образцов представлены на рис.4. Видно, что спектр состоит из двух узких пиков при больших значениях 2θ и широкого пика при $2\theta \approx 26^{\circ}$. Сравнение с табличными данными [13] показывает, что узкие пики соответствуют нанокристаллам меди с гранецентрированной кубической решеткой, а широкий пик относится к графитированным углеродным капсулам и микросферам.

4. Заключение

Таким образом, нами показано, что путем твердофазного пиролиза фталоцианина меди можно получить нанокомпозиты Cu/C. Структура и свойства

наноккомпозитов существенно зависят от условий пиролиза, в частности, от температуры пиролиза. Наши исследования показывают, что с помощью данного метода можно получать также наносплавы меди с другим металлами [8]. Отметим также, что в работе [12] был рассмотрен сенсор температуры на основе наноккомпозита Cu/C.

Авторы выражают благодарность В. Мыхитаряну и Р. Хачатуряну за помощь при проведении работы.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта МИЦНТ №11710 (Дубна, ОИЯИ).

ЛИТЕРАТУРА

1. Нанонаука и нанотехнологии. М., изд. Магистр-пресс, 2011.
2. **А.И.Гусев**. Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии. М., Физматлит, 2009.
3. **E.Roduner**. Nanoscopic Materials: Size-Dependent Phenomena. Cambridge, UK, RSC Publishing, 2009.
4. Magnetic Nanoparticles, **S.Gubin**, ed. Weinheim, 2009.
5. Handbook of Nanostructured Materials and Nanotechnology, vol.1-5, **H.S.Nalwa**, ed. Boston, Academic Press, 2000.
6. Carbon Nanomaterials, **Y.Gogotsi**, ed. Boca Raton, London, New York, Taylor and Francis, 2006.
7. **А.С.Манукян, А.А.Мирзаханян, Г.Р.Бадалян, Г.О.Ширинян, Э.Г.Шароян**. Изв. НАН Армении, Физика, **45**, 202 (2010).
8. **A.S.Manukyan, A.A.Mirzakhanyan, T.K.Khachatryan, E.G.Sharoyan**, Proc. of the 8th Int. conf. Semiconductor Micro- and Nanoelectronics, July 1-3, 2011, Yerevan, Armenia, p.44.
9. **A.S.Manukyan, A.A.Mirzakhanyan, G.R.Badalyan, G.H.Shirinyan, A.G.Fedorenko, N.V.Lianguzov, Yu.I.Yuzyuk, L.A.Bugaev, E.G.Sharoyan**. J. Nanopart. Res., **14**, 982 (2012).
10. **A.K.Schaper, H.How, A.Greiner, et al.** Appl. Phys. A, **78**, 73 (2004).
11. **A.K.Schaper, F.Phillipp, H.How**. J. Mater. Research, **20**, 1844 (2005).
12. **E.K.Athanassiou, R.N.Grass, W.J.Stark**. Nanotechnology, **17**, 1668 (2006).
13. **Л.И.Миркин**. Справочник по рентгеноструктурному анализу поликристаллов. М., ГИФМЛ, 1961.

COPPER-CARBON NANOCOMPOSITES PREPARED BY SOLID-PHASE PYROLYSIS OF COPPER PHTHALOCYANINE

A.S. MANUKYAN, A.A. MIRZAKHANYAN, T.K. KHACHATRYAN, G.R. BADALYAN,
K.G. ABDULVAKHIDOV, L.A. BUGAEV, E.G. SHAROYAN

By using solid-phase pyrolysis of copper phthalocyanine we have prepared copper nanoparticles in carbon matrices. The elemental composition, structure and morphology of nanocomposites were investigated by scanning electron microscopy, energy dispersive X-ray microanalysis and X-ray diffraction. Depending on the temperature and time of pyrolysis the sizes of copper nanoparticles can be varied from 10 nm to 400 nm. The structure of carbon matrices also strongly depends on the pyrolysis conditions, which allows us to synthesize nanocomposites with given properties.

УДК 541.64

ИССЛЕДОВАНИЕ ПЛЕНОК ПОЛИДИФЕНИЛАМИНА, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ВАКУУМНОГО НАПЫЛЕНИЯ

Г.В. АБАГЯН¹, С.И. ПЕТРОСЯН¹, Т.С. КУРТИКЯН²

¹Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак

²Центр исследования строения молекул НАН Армении, Ереван

(Поступила в редакцию 10 апреля 2012 г.)

Методами FTIR и оптической спектроскопии, а также с помощью электронного сканирующего микроскопа исследованы пленки полидифениламина, полученные методом фракционного термического вакуумного напыления. Структура полученных пленок полидифениламина существенно зависит от температуры напыления. При температурах напыления $\leq 300^\circ\text{C}$ образуется однородная олигомерная пленка. При более высоких температурах напыления ($> 500^\circ\text{C}$) происходят сшивки олигомерных фрагментов, приводящие к появлению более сложных структурных образований. Это отражается на морфологии пленок, напыленных при разных температурах. Пленки обладают высокой прозрачностью в видимой и ближней ИК областях. Измерена также проводимость полученных пленок.

1. Введение

Проводящие полимеры являются одной из привлекательных, успешно прогрессирующих областей научных исследований. В качестве дешевого полупроводникового материала они находят широкое применение в электротехнике, электронике, оптике и других областях [1,2]. В ряду органических проводящих полимеров полианилин и его производные являются наиболее востребованными и перспективными материалами. С целью создания новых и улучшения физико-химических характеристик проводящих полимеров были предприняты усилия для получения модифицированных производных полианилина, путем включения заместителей в полимерную цепь [3]. Одним из таких полимеров является полидифениламин (поли(4-аминодифенил)) ПДФА, который обладает промежуточной структурой между полианилином и поли(*n*-фениленом). Проблемой для более широкого использования этого полимера являются невысокие механические свойства и нерастворимость в большинстве общеизвестных органических растворителей. Последнее ограничивает также возможность получения пленок.

С точки зрения технологичности, более широко используются полимерные пленки [4,5], однако в литературе число работ, посвященных исследованию пленок ПДФА, весьма ограничено: в основном, исследованы пленки, получен-

ные методом электрохимического синтеза полимера [6]. С целью частично восполнить этот пробел, мы исследовали пленки ПДФА, полученные методом вакуумного напыления, из синтезированного нами полимера с улучшенной растворимостью. В литературе описаны различные методы получения пленок [7,8], одним из которых является метод вакуумного напыления, впервые для полимеров осуществленный в работах [9,10]. Дальнейшее усовершенствование этот метод получил в работах [11,12]. Ранее нами [13] методом вакуумного напыления были получены и исследованы пленки полианилина. Было показано, что структура и свойства полученных пленок существенно зависят от режима напыления, молекулярной массы полимера и, в частности, от температуры испаряемого вещества.

В данной работе исследованы пленки полидифениламина, полученные из его эмеральдиновой соли (допант H_2SO_4) методом фракционного вакуумного напыления, с целью получения дополнительных данных относительно структуры и механизма образования пленок. Наряду с данными оптической спектроскопии (в УФ, видимой и ближней ИК областях спектра), исследованы FTIR спектры, а также микроструктура пленок. Эти данные сравниваются с соответствующими данными, полученными для пленок полианилина, а также с характеристиками синтезированного исходного полимера.

2. Методика эксперимента

Исходные образцы полидифениламина были получены методом окислительной полимеризации двумя способами. В одном случае – в смеси серная кислота (H_2SO_4)–этанол, в другом – фосфорная кислота (H_3PO_4)–этанол. Перед синтезом дифениламин марки ХЧ перегонялся под вакуумом, бисульфат аммония марки ХЧ использовался без дополнительной очистки. Синтез полидифениламина проводился при концентрации дифениламина $[\text{Ca}] = 0.2$ моль/л и бисульфата аммония $[\text{Cr}] = 0.1$ моль/л в растворах H_2SO_4 или H_3PO_4 согласно методике, приведенной в [14–16]. В случае синтеза в H_2SO_4 получался полимер с коэффициентом динамической вязкости $\eta = 0.17$, что соответствует молекулярной массе (ММ) полимера $\sim 5\text{--}6 \times 10^3$ г/моль, в случае синтеза в H_3PO_4 – $\eta = 0.24$ и, соответственно, ММ полимера составляла $\sim 12\text{--}15 \times 10^3$ г/моль.

Пленки полидифениламина получали методом вакуумного напыления. Напыление производилось в вакуумной установке ВУП-2К с начальным вакуумом 5×10^{-5} мм рт.ст. сублимацией порошка полидифениламина из закрытой вольфрамовой лодочки с отверстиями, при температурах испарителя, не достигающих до точки разрушения молекул полидифениламина. Контроль температуры испарителя проводился с помощью хромель-копелевой термопары, расположенной непосредственно на испарителе. Испарение проводилось в разных температурных диапазонах. Первая фракция напылялась при температурах испарителя $200\text{--}300^\circ\text{C}$ с предварительным прогревом лодочки с порошком до 170°C при закрытой заслонке в течение 10 мин для очистки порошка. Вторая фракция напылялась в интервале температур $300\text{--}400^\circ\text{C}$, третья – в интервале

400–530°C, четвертая – в интервале 530–580°C. Осаждение пленок производилось на холодные подложки из стекла К8, сапфира (для оптической спектроскопии в УФ и видимом диапазонах) и KBr (для FTIR-спектроскопии).

Пленки сразу после напыления были прозрачными с матовым оттенком. Толщины образующихся пленок измерялись с помощью профилометра Ambios XP-1. Микрофотографии пленок были получены с помощью электронного сканирующего микроскопа Vega-TS. Спектры FTIR регистрировались при помощи спектрометра фирмы Nexus<ThermoNicolet>, а спектры в ближнем ИК, видимом и УФ диапазонах – на спектрофотометрах SPECORD-M40 и СФ-8. Электропроводность синтезированных полимеров (таблетки) и полученных пленок определялась четырехконтактным методом.

3. Обсуждение результатов

Отличительной особенностью ПДФА в классе проводящих органических полимеров, также как и полианилина [13], является их исключительная стабильность на воздухе. Аналогичной устойчивостью обладают их пленки, полученные методом вакуумного напыления: FTIR-спектр (диапазон 4000–200 см⁻¹) пленок ПДФА, полученных напылением при 200–300°C, идентичен FTIR-спектру образца, пролежавшего на воздухе более двух лет. Образование пленок ПДФА методом вакуумного напыления происходит в определенном температурном диапазоне – 200–600°C. Данные по анализу FTIR-спектров полученных пленок указывают на то, что структура пленок в этом температурном интервале претерпевает существенные изменения. Причем структура образующихся пленок зависит как от температуры напыления, так и от молекулярного веса исходного полимера.

На рис.1 приведен FTIR-спектр исходного образца, синтезированного методом окислительной полимеризации с H₂SO₄, и спектры FTIR пленок, полученных при различных температурных режимах напыления: в частности, при 200–300°C (1-ая фракция, рис.1a) и при температуре 530–580°C (4-ая фракция, рис.1b). Спектры FTIR образцов, синтезированных в H₂SO₄ и H₃PO₄, почти идентичны, за исключением интенсивностей пиков 748 и 694 см⁻¹, характеризующих концевые фенильные группы [15,16]. В образце ПДФА, синтезированного в H₃PO₄ (спектр FTIR не приведен), обладающего большей молекулярной массой, по сравнению с ПДФА, синтезированным с H₂SO₄, интенсивность этих пиков очень мала. FTIR-спектры полученных пленок во многом совпадают со спектром FTIR олигомерной компоненты полимера, синтезированного в H₂SO₄ [15]. В отличие от FTIR-спектра исходного образца (рис.1d), линии в спектрах пленок разрешены лучше (рис.1a,b), очевидно, за счет отсутствия в спектре линий, соответствующих допанту, и окислительной компоненты полимера. Действительно, по данным [15], содержание хиноидиминных звеньев в структуре полимера не более 5%. Вместо широкой полосы в области 3400 см⁻¹ в спектре исходного полимера (рис.1d), соответствующей, очевидно, наложению различных валентных колебаний, таких как фениленаминовые N–H (3392 см⁻¹), хиноимин-

ные (3174 см^{-1}), антисимметричные (3520 см^{-1}) и симметричные (3430 см^{-1}) валентные N–H колебания концевых групп, во FTIR спектре пленок, полученных данным методом напыления при $200\text{--}300^\circ\text{C}$, четко проявляется интенсивная полоса 3388 см^{-1} , соответствующая валентным колебаниям N–H связей (рис.1a). Слабая полоса (1318 см^{-1}) в исходном спектре (рис.1d), соответствующая скелетным колебаниям C–N фенилениминовых структур, в спектре пленки (рис.1a) сильно возрастает (1319 см^{-1}). В спектре FTIR пленки, по сравнению со спектром исходного полимера, также наблюдается сильное увеличение интенсивностей пиков 747 и 694 см^{-1} , обусловленных концевыми фенильными группами. Полоса средней интенсивности 1363 см^{-1} в спектре исходного полимера, соответствующая ароматическим C=C валентным колебаниям, в спектре FTIR пленок отсутствует. FTIR-спектры образцов пленок, полученных при температурах напыления до 500°C (1-ая, 2-ая и 3-я фракции), почти идентичны, за исключением относительных интенсивностей отдельных линий. Во всех трех пленках, полученных напылением при $200\text{--}300^\circ\text{C}$ (1-ая фракция), $300\text{--}400^\circ\text{C}$ (2-ая фракция) и $400\text{--}530^\circ\text{C}$ (3-я фракция), наблюдаются узкие, интенсивные пики поглощения в области 3388 , 1595 , 1504 , 1319 , 747 и 694 см^{-1} , а также слабый триплет в области 3000 см^{-1} , соответствующий валентным C–H колебаниям предельных углеводородов. Две интенсивные полосы при 1595 и 1504 см^{-1} , характерные для C–C валентных колебаний в 44'-замещенных хиноидных и бензоидных кольцах, свидетельствуют о том, что ароматическая структура ПДФА в пленках, полученных методом вакуумного напыления, в основном сохраняется. FTIR-спектры пленок, полученных при температурах вакуумного напыления выше 500°C , трансформируются (рис.1b), что приводит к существенному уменьшению интенсивностей пиков 3388 , 1318 , 747 и 694 см^{-1} . Аналогичный процесс, при нагревании олигомерных образцов, наблюдался также в [6]. Существенное изменение интенсивностей полос поглощения 3388 , 1316 см^{-1} , а также полос при 747 и 694 см^{-1} (рис.1b), свидетельствует о том, что при температурах вакуумного напыления выше 500°C протекают процессы сшивки олигомерных структур, путем раскрытия N–H и C–H связей, которые приводят к образованию более сложных гетероатомных структур. В пользу данного предположения указывают также микрофотографии пленок, полученных при различных температурах испарителя (рис.2).

Однородная морфология поверхности пленки (рис.2a) при температурах напыления $200\text{--}300^\circ\text{C}$, очевидно, соответствует равномерному распределению сублимирующих низкомолекулярных фрагментов полимера. При более высоких температурах напыления ($400\text{--}530^\circ\text{C}$) одновременно с процессом сублимации протекают вторичные реакции низкомолекулярных сублимирующих фрагментов, приводящие к появлению более сложных структурных образований, что отражается, соответственно, в изменении морфологии поверхности пленки (рис.2b). Аналогичный процесс протекания вторичных реакций олигомерных фрагментов при высоких температурах напыления пленок методом вакуумного напыления, согласно [13], наблюдался также при получении пленок полианили-

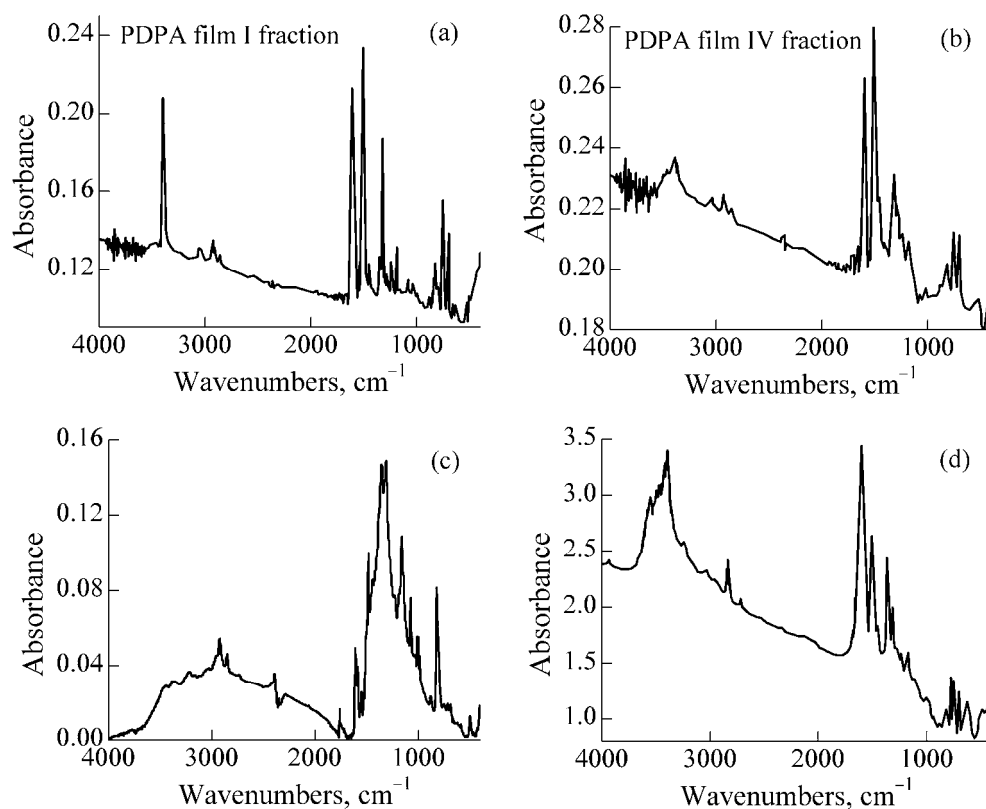


Рис.1. Спектры FTIR пленок полидифениламина: а) напыленных при 200–300°C, толщина $d = 205$ нм; б) при 530–580°C, толщина $d = 240$ нм; в) допирована HNO_3 (напыленная при 200–300°C), $d = 205$ нм; д) спектр FTIR исходного полимера (таблетка с KBr).

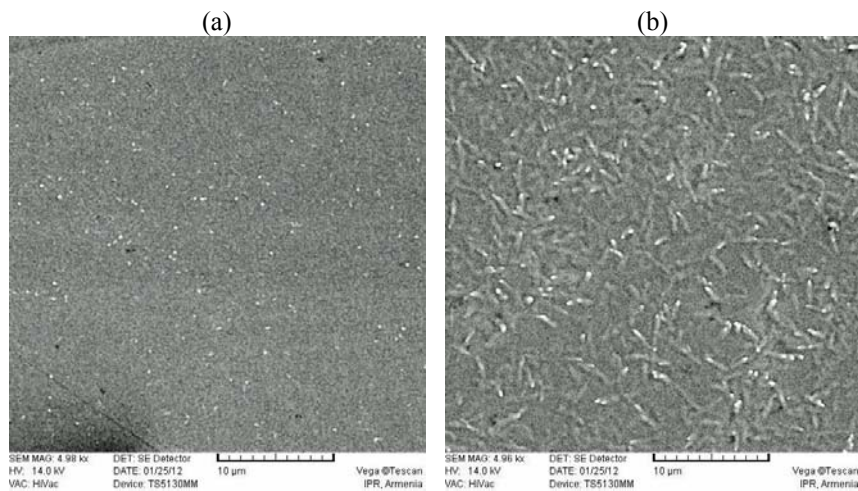


Рис.2. Микрофотографии пленок полидифениламина, полученных при температурах напыления 200–300°C (а) и 400–530°C (б).

на, однако этот процесс в случае полианилина начинается при более низких температурах напыления, уже после 300°C. Относительно высокая термическая стабильность ПДФА, согласно [17], объясняется наличием в структуре ПДФА двух сочлененных фенильных колец.

Электропроводность σ исходных полимеров, синтезированных с H_3PO_4 и с H_2SO_4 , равнялась 1.3×10^{-3} и 1.1×10^{-6} См см⁻¹, соответственно, которая, очевидно, определяется степенью допирования полимера (в образцах с H_2SO_4 она составляла не более 8–10%). Пленки, полученные методом вакуумного напыления, независимо от температуры напыления были бесцветными, с электропроводностью не более 10^{-9} См см⁻¹. Толщины пленок ПДФА, измеренные с помощью профилометра Ambios XP-1, были равны 205, 700, 535 и 240 нм для 1-ой, 2-ой, 3-ей и 4-ой фракций, соответственно.

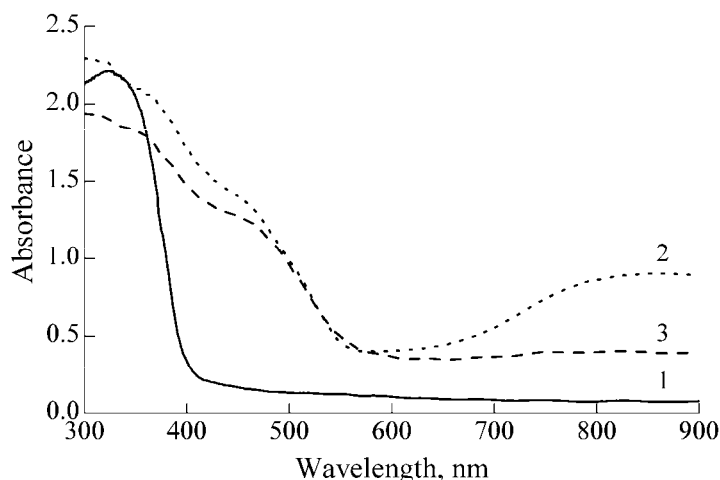


Рис.3. Оптические спектры поглощения пленок полидифениламина: 1) исходная, не допированная; 2) допированная, частично окисленная, $\sigma = 10^{-2}$ См см⁻¹; 3) полностью окисленная, $\sigma < 10^{-9}$ См см⁻¹ (пернигранилиновая). Толщина пленок $d = 535$ нм.

Исследование оптических спектров исходных пленок ПДФА, полученных при различных температурах напыления, показало, что все они обладают высоким пропусканием в видимой области и поглощением на 320 нм (рис.3а). Предложенный нами метод допирования в парах кислот позволяет визуально наблюдать за протеканием процесса допирования. Допирование исходных пленок в парах различных кислот (H_2SO_4 , HCl , HNO_3), независимо от типа допанта, протекает в результате двухступенчатого процесса окисления. В процессе первой окислительной стадии бесцветная пленка становится зеленой (на начальной стадии допирования) с поглощением на 320, 480 и широкой полосой около 850 нм (рис.3, кривая 2) и, соответственно, наблюдается увеличение проводимости до $\sigma = 10^{-2}$ См см⁻¹. На второй стадии окислительного процесса (при последующем хранении допированной пленки на воздухе в течение нескольких ча-

сов) зеленая окраска переходит в устойчивый темно-коричневый цвет с поглощением на 320 и 480 нм (рис.3, кривая 3), характерный для допированных полианилиновых пленок, полученных нами ранее [13]. Причем электропроводность пленки с устойчивым цветом становится близкой к проводимости исходной пленки. Изменение окраски от зеленой (в начальной стадии допирования) до устойчивого темно-коричневого цвета, очевидно, объясняется переходом олигомера из начального (зеленый), частично окисленного состояния (с $\sigma = 10^{-2}$ См см⁻¹), в полностью окисленное пернигранилиновое (темно-коричневое) состояние, которое наблюдали также в [16]. В спектре FTIR пленки, полученной напылением при 200–300°C и затем допированной HNO₃ (рис.1с), в отличие от исходной (рис.1а), наблюдается появление дополнительных линий в области 1410–1340 и 860–800 см⁻¹, обусловленных наличием допанта (HNO₃), что усложняет спектр и делает его трудно поддающимся однозначной расшифровке. Однако, отсутствие в спектре (рис.1с) интенсивного пика на 3388 см⁻¹ (N–H валентные колебания) и появление поглощения на 1363 см⁻¹ (C=C ароматические валентные колебания), отсутствующего в исходном спектре (рис.1а), а также значительное уменьшение интенсивности поглощения, соответствующее валентным колебаниям бензоидного кольца (1504 см⁻¹), свидетельствуют об образовании хинодииминных звеньев и, соответственно, пернигранилиновой структуры полимера. При восстановлении (выдержка пленки в парах NH₄OH) пленка становится бесцветной, с проводимостью, равной проводимости исходной пленки, причем процесс этот обратим.

4. Заключение

Таким образом, структура пленок полидифениламина, полученных методом вакуумного напыления, существенно зависит от температуры напыления, а также от ММ полимера. При низких температурах напыления ($\leq 300^\circ\text{C}$) образуется однородная олигомерная пленка. С увеличением температуры напыления имеют место вторичные реакции олигомерных фрагментов, которые, очевидно, приводят к образованию сшитых структур и гетероароматических фрагментов в основной цепи полимера. В отличие от пленок полианилина, вторичные реакции олигомерных фрагментов в пленках ПДФА инициируются при более высоких температурах ($> 500^\circ\text{C}$). Подобная термоустойчивость пленок ПДФА обусловлена, очевидно, присутствием в полимерном звене двух сочлененных ароматических колец, придающих большую устойчивость полимерной цепи, что делает его перспективным при создании термостойких композиционных материалов. Образующиеся пленки, независимо от температуры напыления, прозрачны, бесцветны со слегка матовым оттенком. Процесс окисления исходных пленок в парах различных кислот (H₂SO₄, HCl, HNO₃) протекает по двухступенчатому циклу, который на первой окислительной стадии приводит к появлению зеленой окраски, переходящей на второй стадии в устойчивый темно-коричневый цвет.

Наблюдаемая обратимая окислительно-восстановительная способность

пленок ПДФА может найти также применение в практических целях: в частности, при определении pH в оптических сенсорах, так как главной компонентой в оптических сенсорах являются pH-чувствительные полимерные пленки, в физиологических pH измерениях, при мониторинге морской воды, в индустриальных целях при химических измерениях с оптическими волокнами для контроля процесса [18] и многих других.

Авторы выражают благодарность профессору А.А. Матнишяну за любезно предоставленные образцы полимеров и Г.Р. Бадалян за предоставление микрофотографий пленок.

ЛИТЕРАТУРА

1. **B.Wessling**. Handbook of Conducting Polymers. **T.A.Skotheim, R.L.Elsenbaumer, J.R.Reynolds**, eds. New York, Dekker, 1998.
2. **Y.Saxena, B.D.Malhotra**. Curr. Appl. Phys., **3**, 293 (2003).
3. **J.Guay, M.Leclerc, L.H.Dao**. J. Electroanal. Chem., **31**, 251 (1988).
4. **E.M.Genies, A.Boyle, M.Lapkowski, C.Tsintavis**. Synth. Met., **78**, 139 (1990).
5. **G.Gustafsson, Y.Cao, G.M.Trescy, et al**. Nature, **357**, 477 (1992).
6. **H.de Santana, M.L.A.Temperini**. J. Braz. Chem. Soc., **7**, 485 (1996).
7. **W.S.Huang, B.D.Humphrey, A.G.MacDiamid**. J. Chem. Soc. Faraday Trans. I, **82**, 2385 (1986).
8. **Y.Gao, G.M.Treasy, P.Smith, A.J.Heeger**. Appl. Phys. Lett., **60**, 2711 (1992).
9. **A.Angelopolulos, G.E.Asturias, et al**. Mol. Cryst. Liq. Cryst., **160**, 151(1988).
10. **K.Uvdal, M.Logdlung, P.Dannetun, et al**. Synth. Met., **29**, E451 (1989).
11. **A.A.Nekrasov, V.F.Ivanov, O.L.Gribkova, A.V.Vannikov**. Synth. Met., **65**, 71 (1994).
12. **V.F.Ivanov, A.A.Nekrasov, et al**. Electrochimica Acta, **41**, 1811 (1996).
13. **Г.В.Абагян, С.И.Петросян**. Изв. НАН Армении, Физика, **44**, 298 (2009).
14. **А.А.Матнишян, Т.Л.Ахназарян**, ВМС, сер. А и Б, **49**, 1121 (2007).
15. **V.Chabukswar, A.Athawale**. Chem. and Chem. Technology, **2**, 257(2008).
16. **А.В.Орлов, С.Ж.Озкан, и др.** ВМС, сер. А, **48**, 1 (2006).
17. **С.Ж.Озкан, Г.П.Карпачева, и др.** ВМС, сер. Б, **49**, 365 (2007).
18. **Yu-Ting Tsai, Ten-Chin Wen, A Gopalan**. Sensor Actuator B, **96**, 646 (2003).

INVESTIGATION OF POLYDIPHENYLAMINE FILMS PREPARED BY VACUUM DEPOSITION METHOD

G.V. ABAGHYAN, S.I. PETROSYAN, T.S. KURTIKYAN

Polydiphenylamine films prepared by fractionating vacuum thermal deposition have been studied by FTIR, optical spectroscopy and scanning electron microscopy methods. The structure of produced films depends on both the deposition temperature and molecular weight of initial polymer. At low deposition temperatures ($\leq 300^\circ\text{C}$) the uniform oligomeric films were produced. In the case of high deposition temperatures, sewing of oligomeric fragments and formation of more complex structural forms take place, which acts on the morphology of films deposited at different temperatures. Films have a high transparency in the visible and near IR region of the spectrum. The conductivity of prepared films was measured as well.

ԲՈՎԱՆԴԱԿՈՒԹՅՈՒՆ

Վ.Մ. Մխիթարյան. Ընդհանրացված իմպուլսի ինվարիանտ ներկայացում.....	379
Կ.Մ. Շահաբասյան, Մ.Կ. Շահաբասյան. Գինզբուրգ–Լանդաուի ժամանակային հավասարումները պարամագնիսական խառնուկներով պտտվող գերհաղորդիչների համար.....	391
Է.Ա. Գազազյան, Ա.Դ. Գազազյան, Վ.Օ. Չալտիկյան. Ատոմների բախումը ար-տաքին մագնիսական և լազերային ճառագայթման դաշտերի ազդեցությամբ Ֆանո–Ֆեշբախի ռեզոնանսների ձևավորմամբ	395
Ա.Հ. Փնորգյան. Լույսի անցումը անորոշ դիէլեկտրական և մագնիսական թափանցելիություններով աջ ու ձախ պտտող խոլեստերինային հեղուկ բյուրեղների շերտերի դարսով: I. Անդրադարձման առանձնահատկությունները	407
Ն.Ռ. Աղամալյան, Տ.Ա. Ասլանյան, Է.Ս. Վարդանյան, Ե.Ա. Կաֆադարյան, Ռ.Կ. Հովսեփյան, Ս.Ի. Պետրոսյան, Ա.Ռ. Պողոսյան. Մետաղ–մեկուսիչ էլեկտրոնա-յին փուլային անցումները լայն արգելված գոտիով ZnO կիսահաղորդիչներում	417
Հ.Խ. Թևոսյան. Խառնուրդային վիճակները Պյոշլ–Թելլերի ձևավորված պոտենցիալով գնդային քվանտային կետում	427
Տ.Ա. Հարությունյան, Ա.Յու. Վարդանյան, Ա.Ա. Հախումյան, Խ.Վ. Ներկարարյան. Մեծ բարորակությամբ տորոիդային ռեզոնատորի անալիտիկ նկարագրությունը հաճախությունների տերահերցային տիրույթում	433
Ա.Ս. Մանուկյան, Ա.Ա. Միրզախանյան, Տ.Կ. Խաչատրյան, Գ.Ռ. Բադալյան, Կ.Գ. Աբդուլվահիդով, Լ.Ա. Բուգաև, Է.Գ. Շարոյան. Պղինձ–ածխածնային նանոկոմպոզիտներ՝ ստացված պղնձի ֆտալոցիանինի պինդ ֆազային պիրոլիզի մեթոդով	442
Հ.Ո. Աբաղյան, Ս.Ի. Պետրոսյան, Տ.Ս. Կուրտիկյան. Վակուումային նստեցման մեթոդով ստացված պոլիդիֆենիլամինի թաղանթների ուսումնասիրությունը	447

CONTENTS

V.M. Mekhitarian. The invariant representation of generalized momentum	379
K.M. Shahabasyan, M.K. Shahabasyan. Time-dependent Ginzburg–Landau equations for rotating superconductors with paramagnetic impurities	391
E.A. Gazazyan, A.D. Gazazyan, V.O. Chaltykyan. Collision of atoms under action of external magnetic and laser radiation fields with formation of Fano–Feshbach resonances	395
A.H. Gevorgyan. Light transmission through a stack of a right- and left-hand cholesteric liquid crystal layers with indefinite dielectric and magnetic permittivities. I. Reflection peculiarities	407
N.R. Aghamalyan, T.A. Aslanyan, E.S. Vardanyan, Y.A. Kafadaryan, R.K. Hovsepyan, S.I. Petrosyan, A.R. Poghosyan. Metal–insulator electronic phase transitions in wide-gap ZnO semiconductors	417
H.Kh. Tevosyan. Impurity states in a spherical quantum dot with a modified Pöschel–Teller potential	427
T.A. Harutyunyan, A.Yu. Vardanyan, A.A. Hakhumyan, Kh.V. Nerkararyan. Analytical description of a toroidal cavity with high quality factor in the terahertz region of frequencies	433
A.S. Manukyan, A.A. Mirzakhanyan, T.K. Khachatryan, G.R. Badalyan, K.G. Abdulvakhidov, L.A. Bugaev, E.G. Sharoyan. Copper–carbon nanocomposites prepared by solid-phase pyrolysis of copper phthalocyanine	442
G.V. Abaghyany, S.I. Petrosyan, T.S. Kurtikyan. Investigation of polydiphenylamine films prepared by vacuum deposition method	447

СОДЕРЖАНИЕ

В.М. Мыхитарян. Инвариантное представление обобщенного импульса.....	379
К.М. Шахабасян, М.К. Шахабасян. Временные уравнения Гинзбурга–Ландау для вращающихся сверхпроводников с парамагнитными примесями..	391
Э.А. Газазян, А.Д. Газазян, В.О. Чалтыкян. Столкновение атомов под действием внешнего магнитного поля и лазерного излучения с образованием резонансов Фано–Фешбаха.....	395
А.А. Геворгян. Распространение света через стопку из право- и левовращающих слоев холестерического жидкого кристалла с индефинитными диэлектрической и магнитной проницаемостями. I. Особенности отражения .	407
Н.Р. Агамалян, Т.А. Асланян, Э.С. Варданян, Е.А. Кафадарян, Р.К. Овсепян, С.И. Петросян, А.Р. Погосян. Электронные фазовые переходы металл–изолятор в широкозонных полупроводниках ZnO.....	417
О.Х. Тевосян. Примесные состояния в сферической квантовой точке с модифицированным потенциалом Пешля–Теллера.....	427
Т.А. Арутюнян, А.Ю. Варданян, А.А. Ахумян, Х.В. Неркарарян. Аналитическое описание тороидального резонатора высокой добротности в терагерцовой области частот	433
А.С. Манукян, А.А. Мирзаханян, Т.К. Хачатрян, Г.Р. Бадалян, К.Г. Абдулвахидов, Л.А. Бугаев, Э.Г. Шароян. Медно-углеродные нанокomпозиты, полученные твердофазным пиролизом фталоцианина меди	442
Г.В. Абагян, С.И. Петросян, Т.С. Куртикян. Исследование пленок полидифениламина, полученных методом вакуумного напыления.....	447

Заказ № 382

Тираж 150. Сдано в набор 10.08.2012.

Подписано к печати 24.08.2012. Печ. л. 5.

Бумага офсетная. Цена договорная.

Типография НАН РА.

Ереван, пр. Маршала Баграмяна, 24.