



ИЗВЕСТИЯ
НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК АРМЕНИИ

ՏԵՂԵԿԱԳԻՐ
ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԶԳԱՅԻՆ ԱԿԱԴԵՄԻԱՅԻ

PROCEEDINGS
OF NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF ARMENIA

АЖЧ 15

ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ՀԱՆՐԱՊԵՏՈՒԹՅԱՆ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԶԳԱՅԻՆ ԱՎԱԴԵՄԻԱ
НАЦИОНАЛЬНАЯ АКАДЕМИЯ НАУК РЕСПУБЛИКИ АРМЕНИЯ

ՏԵՂԵԿԱԳԻՐ ИЗВЕСТИЯ
ՖԻԶԻԿԱ ФИЗИКА

ՀԱՏՈՐ ТОМ

50

№ 1



ՀՀ ԳԱԱ "ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆ" ՀՐԱՏԱՐԱԿՉՈՒԹՅՈՒՆ

ИЗДАТЕЛЬСТВО "ГИТУТЮН" НАН РА

ԵՐԵՎԱՆ

ЕРЕВАН

2015

ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ԱՌԱՋԱԿԱՆ ԳԻՏԱԿԱՆ ԱԿԱԴՄԻԱ
ՖԻԶԻԿԱԿԱՆ ԳԻՏՈՒԹՅԱՆ ԻՆՏԵՐՆԱԿԱՆ ԳՐԱԿԱՆՈՒԹՅԱՆ ԿԵՆՏՐՈՆ

ՖԻԶԻԿԱԿԱՆ ԳԻՏՈՒԹՅԱՆ
ԻՆՏԵՐՆԱԿԱՆ ԳՐԱԿԱՆՈՒԹՅԱՆ ԿԵՆՏՐՈՆ

2020 թ. 10
50
171



© 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
Э. М. Казарян
А. О. Меликян
А. Р. Мкртчян
Д. Г. Саркисян
А. М. Сирунян
Ю. С. Чилингарян
А. А. Мирзаханиян, ответственный секретарь

ԽՄԲԱԳՐԱԿԱՆ ԿՈՒԵԳԻԱ

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

EDITORIAL BOARD

V. M. Aroutiounian, editor-in-chief
E. G. Sharoyan, associate editor
A. A. Hakhumyan
E. M. Kazaryan
A. O. Melikyan
A. R. Mkrтчyan
D. H. Sarkisyan
A. M. Sirunyan
Yu. S. Chilingaryan
A. A. Mjrзakhanyan, executive secretary

Адрес редакции: Республика Армения, 0019
Ереван, пр. Маршала Баграмяна, 24-г.

Խմբագրության հասցեն՝ Հայաստանի Հանրապետություն,
0019, Երևան, Մարշալ Բաղրամյան պող., 24-գ:

Editorial address: 24-g, Marshal Baghramyan Ave.,
Yerevan, 0019, Republic of Armenia.

УДК 621.384

О СООТНОШЕНИИ МЕЖДУ ОСНОВНОЙ И РАЗНОСТНОЙ ТРАЕКТОРИЯМИ ПУЧКА В ЛИНЕЙНЫХ УСКОРИТЕЛЯХ

А.А. САРГСЯН*, Г.А. АМАТУНИ, В.В. СААКЯН, В.М. ЦАКАНОВ

Институт синхротронных исследований КЕНДЛ, Ереван, Армения

*e-mail: asargsyan@ysu.am

(Поступила в редакцию 17 марта 2014 г.)

Рассмотрена связь между основной и разностной орбитами пучка в линейных ускорителях. Для траектории пучка получено новое интегральное уравнение и дано рекуррентное аналитическое решение, что позволяет найти центральную траекторию на основе информации о разностной траектории. Представлены результаты численного моделирования для ондуляторной секции Европейского рентгеновского ЛСЭ.

1. Введение

Прецизионная коррекция траектории электронного пучка в самоиндуцируемом лазере на свободных электронах (ЛСЭ) на основе линейного ускорителя или в будущем электрон-позитронном линейном коллайдере важна для предотвращения увеличения эмиттанса пучка и достижения проектных характеристик [1-5]. Среди различных источников возмущения траектории пучка в реальном ускорителе случайные смещения квадрупольных линз от оси имеют наиболее сильное воздействие, поскольку градиенты магнитного поля квадрупольных линз, как правило, изменяются линейно с увеличением энергии вдоль ускорителя. Одним из наиболее эффективных методов прецизионной коррекции траектории пучка является метод коррекции, который осуществляется на основе информации о траектории пучка при изменении энергии пучка или параметров ускорителя (градиентов квадрупольных линз, градиентов ускорения и т.д.) и разности траекторий, измеренных с помощью датчиков положения пучка (ДПП) до и после изменения параметров [6-9].

Целью настоящей работы было исследование взаимосвязи между оригинальной и разностной траекториями в линейных ускорителях при наличии случайных смещений квадрупольных линз, допусков на юстировку и конечной разрешимости ДПП. В первом разделе оценивается среднеквадратичное отклонение траектории пучка в линейных ускорителях, вызванное смещениями квадрупольных магнитов. Далее на основе уравнений движения для двух траекторий (соответствующих двум разным энергиям электронного пучка) выводится новое интегральное уравнение, которое однозначно связывает основную и разностную траектории. Новое уравнение учитывает эффекты корректирующих

дипольных магнитов, случайных смещений квадрупольных магнитов и конечной разрешимости ДПП. Получено рекуррентное аналитическое решение этого уравнения. Представлены результаты численного моделирования для ондуляторной секции Европейского рентгеновского ЛСЭ [4]. Используя полученную аналитическую формулу, оценено воздействие случайных ошибок счета ДПП на остаточную траекторию. Полученные результаты сравниваются с результатами численного моделирования.

В рассматриваемой модели ускорителя предполагается, что каждый квадрупольный магнит совмещен с дипольным корректором и ДПП. Исследование основано на линеаризованном уравнении движения и не включает эффекты ошибок ускоряющей системы, ошибок магнитного поля и связи между горизонтальными и вертикальными колебаниями.

2. Траектория пучка при смещении квадрупольных линз

Рассмотрим линейный ускоритель с постоянным градиентом ускорения и с системой фокусировки, состоящей из периодических симметричных ФОДО ячеек, где Ф и Д соответствуют фокусирующему и дефокусирующему квадрупольным линзам, а О – прямолинейному промежутку.

Предположим, что квадрупольные магниты имеют случайные смещения. Траектория пучка в линейном ускорителе со смещенными квадрупольными возмущается за счет дополнительного дипольного магнитного поля на оси ускорителя. Центральная траектория пучка при этом задается следующим уравнением движения [10]:

$$y'' + \frac{\gamma'}{\gamma} y' + K_i (y - y_{qi}) = 0, \quad (1)$$

где y_0 и y'_0 – начальные отклонение и наклон траектории пучка при входе в ускоритель ($z = 0$). В уравнении (1) производные взяты по отношению к продольной координате z вдоль ускорителя, $\gamma = \gamma_0 + \gamma'z$ есть энергия равновесной частицы в терминах Лоренц-фактора, γ_0 – начальная энергия, γ' – прирост энергии на единицу длины, K_i и y_{qi} – нормированная сила и случайное смещение i -ого квадрупольного магнита. Решение уравнения (1) задается суперпозицией свободных бетатронных колебаний и возмущенной траектории, вызванной смещениями квадрупольных магнитов [7]:

$$y(z) = y^{(c)}(z) + \sum_i L_q K_i y_{qi} M_{12}(z_i, z), \quad (2)$$

где $y^{(c)}(z)$ характеризует свободные бетатронные колебания пучка, L_q – длина квадрупольного магнита, z_i – координата i -ого квадрупольного магнита вдоль ускорителя, $M_{12}(z_i, z)$ – элемент матрицы перехода с z_i к z ($z_i < z$), который определяется формулой [10]

$$M_{12}(z_i, z) = \sqrt{\frac{\gamma(z_i)}{\gamma(z)}} \sqrt{\beta(z)\beta(z_i)} \sin[\varphi(z) - \varphi(z_i)], \quad (3)$$

где $\beta(z)$ и $\varphi(z)$ – соответственно бетатронная функция и набег фазы в позиции z . В формуле (2) суммирование производится по всем квадрупольям, расположенным до положения z .

3. Основная и разностная траектории

Рассмотрим две траектории, соответствующие проектной энергии $\gamma_1(z) = \gamma_{10} + \gamma'_1 z$ (основная траектория) и смещенной энергии $\gamma_2(z) = \gamma_{20} + \gamma'_2 z$ (смещенная траектория). Здесь γ_{10}, γ_{20} есть начальные энергии, γ'_1, γ'_2 – градиенты ускорения для двух режимов работы. Для простоты предполагается, что отношение $\alpha = \gamma_2 / \gamma_1$ является постоянным вдоль ускорителя, что подразумевает постоянное отношение градиентов ускорения $\alpha = \gamma'_2 / \gamma'_1$ и $\gamma'_1 / \gamma_1 = \gamma'_2 / \gamma_2$, $\gamma_{10} / \gamma_1 = \gamma_{20} / \gamma_2$. Квадрупольные магниты и ДПП имеют случайные смещения относительно оси линейного ускорителя со среднеквадратичными значениями σ_q и σ_b , соответственно. Также предположим, что ДПП имеют случайные ошибки счета r_k со среднеквадратичным значением σ_r .

Учитывая формулу (2), k -ый ДПП ($k = 2, 3, \dots, n$), расположенный в точке z_k , будет регистрировать следующие значения для траектории пучка [7]:

$$\begin{aligned} m_{1k} &= r_k(t_1) - b_k + y_1^{(c)}(z_k) + \sum_{i=1}^{k-1} \theta_{qi} M_{12}^{(1)}(z_i, z_k), \\ m_{2k} &= r_k(t_2) - b_k + y_2^{(c)}(z_k) + \sum_{i=1}^{k-1} \frac{\gamma_{1i}}{\gamma_{2i}} \theta_{qi} M_{12}^{(2)}(z_i, z_k), \end{aligned} \quad (4)$$

где m_{1k} соответствует энергии γ_1 , m_{2k} – энергии γ_2 , $\theta_{qi} = L_q K_i y_{qi}$ есть угол отклонения равновесной частицы в i -ом квадруполе, b_k – случайное отклонение k -ого ДПП, $r_k(t)$ – стохастическая случайная величина, дающая ошибку счета k -ого ДПП в момент измерения t , $M_{12}^{(1)}(z_i, z_k)$ и $M_{12}^{(2)}(z_i, z_k)$ – элементы матрицы перехода для двух разных энергий γ_1 и γ_2 , соответственно, $y_{1,2}^{(c)}$ – вклад бетатронных колебаний пучка, вызванных случайным начальным поперечным отклонением орбиты:

$$y_{1,2}^{(c)}(z) = a_{10,20} \sqrt{\frac{\gamma_{10,20}}{\gamma_{1,2}(z)}} \sqrt{\beta_{1,2}(z)} \cos[\varphi_{1,2}(z) - \vartheta_{10,20}], \quad (5)$$

где $a_{10,20}$ и $\vartheta_{10,20}$ – константы, определяемые начальным отклонением $y_{1,2}^{(c)}(0)$ и наклоном $y'_{1,2}(0)$ траектории пучка, $\beta_{1,2}(z)$ и $\varphi_{1,2}(z)$ – соответственно бетатронная функция и набег фазы, соответствующие энергии $\gamma_{1,2}(z)$.

Разностная траектория получается путем вычитания исходной основной траектории из смещенной:

$$\Delta m_k = \Delta r_k + \Delta y_k^{(c)} + \sum_{i=1}^{k-1} \theta_{iq} \left[\frac{\gamma_{1i}}{\gamma_{2i}} M_{12}^{(2)}(z_i, z_k) - M_{12}^{(1)}(z_i, z_k) \right], \quad (6)$$

где $\Delta r_k = r_k(t_2) - r_k(t_1)$ и $\Delta y_k^{(c)} = y_2^{(c)}(z_k) - y_1^{(c)}(z_k)$ есть вклады, вызванные ошиб-

ками счета датчиков положения пучка и начальным поперечным отклонением пучка, соответственно.

Как следует из формулы (6), разностная траектория пучка не зависит от смещений ДПП. При отсутствии ошибок счета ДПП и начального поперечного отклонения пучка система алгебраических уравнений (6) позволяет определить неизвестные случайные смещения квадрупольных магнитов, что является достаточным для коррекции центральной траектории с помощью дипольных корректоров. При этом траектория пучка совпала бы с осью ускорителя, а разностная траектория была бы равна нулю, т.е. траектория и дисперсия были бы идеально скорректированы. В реальном ускорителе, однако, из-за ошибок центральную траекторию и дисперсию можно скорректировать только с конечной точностью.

Отметим, что вклад начального поперечного отклонения орбиты $\Delta y_k^{(c)}$ в формуле (6) можно найти с помощью показаний двух ДПП, расположенных перед участком применения коррекции, измерив разницы $\Delta y^{(c)}(0)$ и $\Delta y'^{(c)}(0)$ начальных параметров траекторий пучка. В дальнейшем этот вклад не рассматривается, поскольку его можно измерить, и предполагается, что конечная разрешимость ДПП является единственным источником ошибок измерений разностной траектории.

4. Аналитическое соотношение

Рассмотрим уравнения движения для пучков с основной и смещенной энергиями. Напомним, что в рассматриваемой модели положения квадрупольных линз и соответствующих им дипольных корректоров вдоль ускорителя совпадают. Уравнения для двух траекторий $y_1(z)$ и $y_2(z)$ тогда будут иметь вид

$$\begin{aligned} y''_1 + \frac{\gamma'_1}{\gamma_1} y'_1 + K_1 y_1 &= \theta'_1, \\ y''_2 + \frac{\gamma'_2}{\gamma_2} y'_2 + K_2 y_2 &= \theta'_2, \end{aligned} \quad (7)$$

где K_1 и $K_2 = K_1 \gamma_1 / \gamma_2$ – нормированные фокусирующие силы квадрупольных линз, θ'_1 и $\theta'_2 = \theta'_1 \gamma_1 / \gamma_2$ – угловые отклонения орбит, вызванные квадрупольными магнитами и корректорами на единицу длины. Индексы 1 и 2 соответствуют режимам работы с энергиями γ_1 и γ_2 , соответственно. Отметим, что вторая траектория y_2 (что соответствует энергии γ_2) может быть получена также путем изменения только магнитных полей: $K_2 = K_1 / \alpha$, $\theta_2 = \theta_1 / \alpha$.

Из формулы (7) для траектории $y_2(z)$ получим

$$y_2(z) = \frac{1}{\alpha} y_1(z) + C(z), \quad (8)$$

где $C(z)$ является решением уравнения

$$C'' + \frac{\gamma_2'}{\gamma_2} C' + K_2 C = -d_2 K_2 y_1 \quad (9)$$

с $C(0) = 0$ и $d_2 = (\gamma_1 - \gamma_2)/\gamma_2$. Решение уравнения (9) дается формулой

$$C(z) = -d_2 \int_0^z K_2(z') y_1(z') M_{12}^{(2)}(z', z) dz' \quad (10)$$

Из уравнений (8)–(10) для разностной орбиты $\Delta y = y_2 - y_1$ получим

$$\Delta y(z) = d_2 \left[y_1(z) - \int_0^z K_2(z') y_1(z') M_{12}^{(2)}(z', z) dz' \right], \quad (11)$$

$$\Delta y(z) = d_1 \left[y_2(z) - \int_0^z K_1(z') y_2(z') M_{12}^{(1)}(z', z) dz' \right],$$

где $d_1 = (\gamma_1 - \gamma_2)/\gamma_1$ и

$$\int_0^z K_2(z') y_1(z') M_{12}^{(2)}(z', z) dz' = \int_0^z K_1(z') y_2(z') M_{12}^{(1)}(z', z) dz' \quad (12)$$

Как следует из формулы (11), траектория пучка $y_1(z)$ определяется интегральным эффектом смещения орбиты пучка в предыдущих квадрупольных линзах.

Используя (11) и (12), уравнение для $y_1(z)$ можно переписать в виде

$$y_1(z) = \frac{\Delta y(z)}{d_2} + \int_0^z K_1(z') [y_1(z') + \Delta y(z')] M_{12}^{(1)}(z', z) dz' \quad (13)$$

Уравнение (13) связывает траекторию пучка $y_1(z)$ с разностной траекторией $\Delta y(z)$ и имеет единственное решение, если $\Delta y(z)$ известно. Заменяя интеграл суммой по квадрупольным магнитам и используя приближение тонких линз, решение (13) можно записать в рекуррентной форме:

$$\begin{aligned} y_1(z_1) &= 0, & y_1(z_2) &= \frac{\Delta y(z_2)}{d_2}, \\ y_1(z_n) &= \frac{\Delta y(z_n)}{d_2} + \\ &+ \sum_{k=2}^{n-1} K_{1k} L_q(y_1(z_k) + \Delta y(z_k)) \sqrt{\frac{\gamma_{1k}}{\gamma_{1n}}} \sqrt{\beta_{1n} \beta_{1k}} \sin(n-k) \frac{\mu_1}{2}, \quad n \geq 3, \end{aligned} \quad (14)$$

где μ_1 – набег фазы за ФОДО период.

Используя уравнение (14), можно найти основную траекторию, если разностная траектория известна. Отметим, что уравнение (14) можно использовать и в случае, когда не применяется коррекция.

Отметим, что при получении формулы (14), где применяется переход от интеграла к сумме по квадрупольям, предполагается, что в приближении тонких

линз подынтегральное выражение в (13) на длине квадрупольных магнитов можно считать постоянным. Эта аппроксимация приводит к тому, что формулу (14) можно использовать, если число квадрупольных магнитов невелико.

5. Численные примеры

Результаты аналитического представления (14) были сравнены с результатами численного моделирования программой ELEGANT [11] для ондуляторной секции SASE1 Европейского рентгеновского ЛСЭ. Список параметров ондуляторной секции SASE1 представлен в табл.1 [4].

Табл.1. Список параметров ондуляторной секции SASE1 Европейского рентгеновского ЛСЭ.

Фокусирующая сила K_1 (м^{-2})	0.6386
Длина квадруполя L_q (м)	0.1
Число ФОДО периодов N	17
Длина ФОДО периода L_c (м)	12.2
Набег фазы за ФОДО период μ_1 (градус)	22.3
Среднеквадратичное смещение квадруполя σ_q (мкм)	100
Среднеквадратичная ошибка счета ДПП σ_r (мкм)	1.0

Были рассмотрены два случая – без применения коррекции и коррекция на основе минимизации разностной орбиты.

На рис.1а показана основная траектория, полученная программой ELEGANT (сплошная линия) и по формуле (14) (штриховая линия). Максимальное отклонение между ними равно примерно 0.2 мм. Приведенная орбита соответствует относительной разности энергий $d_1 = (\gamma_1 - \gamma_2) / \gamma_1 = 0.2$ при одной случайной выборке ошибок счета ДПП (одно измерение орбиты). Очевидно, что точность формулы (14) будет улучшена, если усреднить траекторию по многим измерениям (выборкам ошибок счета ДПП). Соответствующее сравнение для основной орбиты, усредненной по 100 измерениям, приведено на рис.1б. В этом случае значение максимального отклонения равно примерно 0.06 мм.

Теперь рассмотрим случай, когда коррекция основной траектории основана на минимизации разностной траектории.

С помощью корректоров разница траекторий Δm_k (см. формулу (6)) может быть минимизирована путем решения задачи наименьших квадратов для функционала [7]

$$\chi^2 = \sum_{k=1}^{n-1} \frac{[\Delta m_k + \Delta Y_k]^2}{2\sigma_r^2} \quad (15)$$

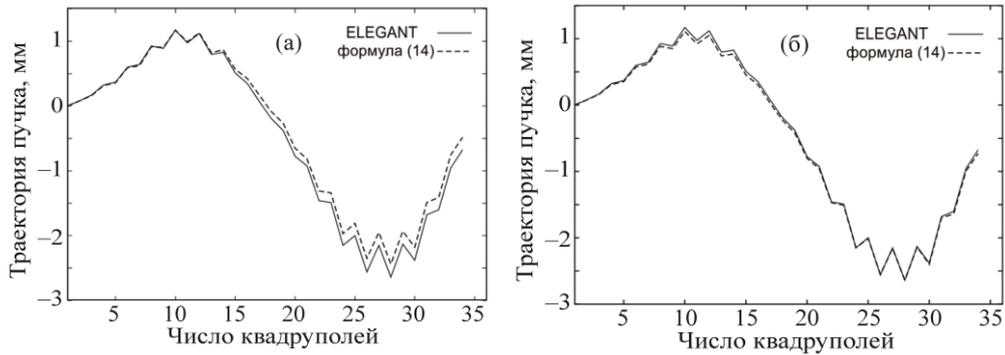


Рис.1. (а) Траектории пучка по программе ELEGANT и по формуле (14) для одной выборки ошибок счета ДПП; (б) траектория пучка по программе ELEGANT и по формуле (14), усредненная по 100 выборкам ошибок счета ДПП.

относительно углов отклонения траектории пучка корректорами. В (15) величина ΔY_k соответствует разностной орбите, вызванной только корректорами. Поскольку ошибки счета ДПП некоррелированы, то среднеквадратичный вклад ошибок счета ДПП в измерение разностной орбиты будет определяться как $\langle \Delta r^2 \rangle = 2\sigma_r^2$. Минимальная разностная траектория в квадрупольных магнитах тогда будет иметь вид

$$\Delta y(z_k) = -\Delta r_k, \quad (16)$$

т.е. разностная траектория будет скорректирована до уровня ошибок счета ДПП, поскольку ошибки алгоритма, обычно, на несколько порядков меньше по сравнению с ошибками счета ДПП.

На рис.2 представлены численные (сплошная линия) и аналитические

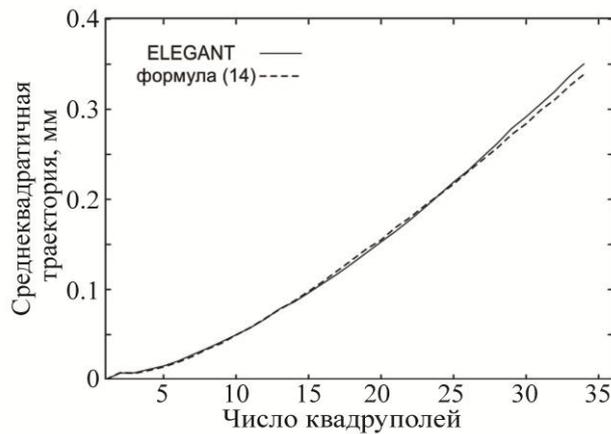


Рис.2. Среднеквадратичная остаточная орбита с учетом 100 случайных выборок ошибок счета ДПП. Сплошная линия соответствует численному моделированию; штриховая – аналитическому представлению.

(штриховая линия) результаты для среднеквадратичной остаточной орбиты пучка после минимизации разностной орбиты. Усреднение осуществлялось по 100 случайным выборкам ошибок счета ДПП. Коррекция разностной орбиты на основе решения задачи наименьших квадратов проводилась с помощью программы MATLAB с использованием метода разложения по сингулярным значениям [12].

Как видно из рис.1 и 2, получено хорошее соответствие между аналитической формулой (14) и результатами численного моделирования.

6. Аналитическое представление остаточной траектории в случае минимизации разностной траектории

Теперь, используя формулу (13) для случая малого набег фазы за ФОДО период ($\mu \ll 1$), оценим влияние ошибок счета ДПП на остаточную траекторию после минимизации разностной траектории.

Так как в рассматриваемом случае разностная траектория корректируется до уровня ошибок счета ДПП, уравнение (13) для скорректированной основной траектории $y_1(z)$ можно переписать в виде

$$y_1(z) = \frac{r(z)}{d_2} + \int_0^z K_2(z') y_1(z') M_{12}^{(2)}(z', z) dz', \quad (17)$$

где $r(z) = \Delta y(z)$ есть гладкая кривая, которая в квадрупольных магнитах равна $r(z_k) = -\Delta r_k$. Для малого набег фазы за ФОДО период ($\mu \ll 1$) и числа ФОДО периодов $N \leq 2\pi/\mu$ можно получить приближенное решение уравнения (17) путем замены $M_{12}^{(2)}(z', z) \approx z - z'$. Уравнение (17) при этом преобразуется в интегральное уравнение Вольтерры второго рода [13]

$$u_1(z) - \int_0^z (z - z') K_2(z') u_1(z') dz' = R(z), \quad (18)$$

где

$$u_1(z) = y_1(z) \sqrt{\gamma_2(z)}, \quad R(z) = d_2^{-1} r(z) \sqrt{\gamma_2(z)}. \quad (19)$$

Решение уравнения (18) в нашем приближении есть [13]

$$u_1(z) = R(z) + \int_0^z (z - z') K_2(z') R(z') dz'. \quad (20)$$

Таким образом, для скорректированной основной траектории имеем

$$y_1(z) = d_2^{-1} \left[r(z) + \int_0^z (z - z') \sqrt{\frac{\gamma_2(z')}{\gamma_2(z)}} K_2(z') r(z') dz' \right]. \quad (21)$$

Для оценки остаточного искажения траектории, вызванного ошибками счета ДПП $r(z_k) = -\Delta r_k$, интеграл в (21) может быть аппроксимирован суммой

по квадруполям. Так как в случае $\alpha = \text{const}$ имеем $\gamma_{2j}/\gamma_{2n} = \gamma_{1j}/\gamma_{1n}$, то для скорректированной траектории в n -ом квадруполе получим

$$y_1(z_n) = -d_2^{-1} \left[\Delta r_n + \sum_{j=1}^n K_{2j} L_q D(n-j) \sqrt{\frac{\gamma_{1j}}{\gamma_{1n}}} \Delta r_j \right]. \quad (22)$$

Первым слагаемым в формуле (22) можно пренебречь по сравнению с доминирующим вторым слагаемым. Учитывая, что $\langle \Delta r_i \Delta r_j \rangle = 0$ для $i \neq j$ и $d_1 K_2 = d_2 K_1$, $K_1 L_q D \approx \mu_1$, среднеквадратичная траектория после коррекции представится в виде

$$\begin{aligned} y_{1rms}^2(z_n) &\approx 2d_1^{-2} \sigma_r^2 \mu_1^2 \sum_{j=1}^n (n-j)^2 \frac{\gamma_{1j}}{\gamma_{1n}} = \\ &= \frac{2}{d_1^2} \sigma_r^2 \mu_1^2 \left[\frac{n^3}{12} \left(1 + 3 \frac{\gamma_{10}}{\gamma_{1n}} \right) - \frac{n^2}{2} \frac{\gamma_{10}}{\gamma_{1n}} - \frac{n}{12} \left(1 - 3 \frac{\gamma_{10}}{\gamma_{1n}} \right) \right]. \end{aligned} \quad (23)$$

Для участка ускорителя без ускорения ($\gamma_{1n} = \gamma_{10}$) формула (23) преобразуется к виду

$$y_{1rms}^2(z_n) = \frac{\sigma_r^2 \mu_1^2}{d_1^2} \left[\frac{2n^3}{3} - n^2 + \frac{n}{3} \right]. \quad (24)$$

На рис.3 показана скорректированная среднеквадратичная траектория пучка вдоль ондуляторной линии SASE1 (табл.1). Видно, что для рассмотренного случая результаты численного моделирования (сплошная линия) находятся в согласии с аналитическим представлением (24) (штриховая линия).

Формулы (23) и (24) показывают, что коррекция только разностной ор-

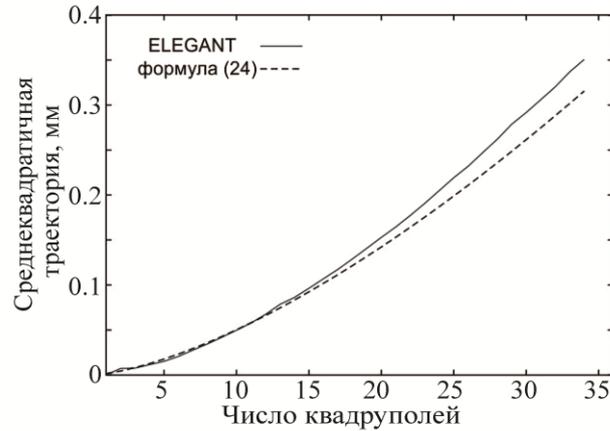


Рис.3. Среднеквадратичная остаточная траектория при рассмотрении 100 случайных выборок ошибок счета ДПП. Сплошная линия соответствует численному моделированию; штриховая — аналитическому представлению.

биты в описанной форме минимизирует дисперсию, но приводит к увеличению среднеквадратичной орбиты вдоль ускорителя.

7. Заключение

В работе исследовано соотношение между основной и разностной траекториями в линейных ускорителях и получено новое интегральное уравнение, которое связывает основную и разностную траектории. Получено рекуррентное решение, которое позволяет определить траекторию пучка, когда разностная траектория известна. Проведен сравнительный анализ между полученной формулой и результатами численного моделирования с помощью программы ELEGANT для ондуляторной секции SASE1 Европейского рентгеновского лазера на свободных электронах.

Для малого набег фазы за ФОДО период получено приближенное аналитическое выражение для остаточной среднеквадратичной траектории в случае минимизации разностной траектории. Представленное исследование может быть использовано для улучшения эффективности существующих алгоритмов и разработки новых методов прецизионной коррекции орбиты в современных ускорителях.

Исследование выполнено при финансовой поддержке ГКН МОН РА в рамках научного проекта № SCS 13YR-1C0007.

ЛИТЕРАТУРА

1. **K. Kubo et al.** Beam Dynamics Challenges for the ILC, ICFA Beam Dyn. Newsletter, **44** (2007).
2. **K. Kubo.** Phys. Rev. ST Accel. Beams, **14**, 014401 (2011).
3. **Г. Амагунни.** Изв. НАН Армении, Физика, **40**, 416 (2005).
4. **R. Brinkmann, W. Decking et al.** The European X-Ray Free-Electron Laser (XFEL) Technical design report, DESY 2006-097 (2007).
5. **F. Zimmermann et al.** Linac Coherent Light Source (LCLS) Design Study Report, SLAC-R-521 (1998).
6. **P. Tenenbaum, T. Raubenheimer.** Phys. Rev. ST Accel. Beams, **3**, 052801 (2000).
7. **T. Raubenheimer, R. Ruth.** NIM (A), **302**, 191 (1991).
8. **D. Schulte, T. Raubenheimer.** The Ballistic Alignment Method, Proc. 1999 Particle Accelerator Confer., New York, 1999, pp. 3441-3443.
9. **T. Raubenheimer, P. Tenenbaum.** Brief Review of Linear Collider Beam-Based Alignment for Linacs, LCC-0129, SLAC-TN-03-071 (2004).
10. **H. Wiedemann.** Particle Accelerator Physics – I. Basic Principles and Linear Beam Dynamics, Springer, 1999.
11. **M. Borland.** Elegant: A Flexible SDDS-compliant Code for Accelerator Simulation, APS LS-287 (2000).
12. **G. Strang.** Linear Algebra and its Applications, Harcourt, Orland, 1988.
13. **A. Polyinin, A. Manzhurov.** Handbook of Integral Equations. Boca Raton, CRC Press, 1998.

ՓՆՁԻ ՀԻՄՆԱԿԱՆ ԵՎ ՏԱՐԲԵՐՈՒԹՅՈՒՆ ՀԵՏԱԳԾԵՐԻ ՄԻՋԵՎ
ԿԱՂԸ ԳԾԱՅԻՆ ԱՐԱԳԱՑՈՒՑՆԵՐՈՒՄ

Ա.Ա. ՍԱՐԳՍՅԱՆ, Գ.Ա. ԱՄԱՏՈՒՆԻ, Վ.Վ. ՍԱՀԱԿՅԱՆ, Վ.Մ. ՑԱԿԱՆՈՎ

Հետազոտված է գծային արագացուցիչներում փնջի հիմնական և տարբերություն հետազոծերի միջև կապը: Փնջի հետազոծի համար ստացված է նոր ինտեգրալ հավասարում: Այդ նոր հավասարման համար գտնված է ռեկուրենտ անալիտիկ լուծում, որը թույլ է տալիս գտնել հիմնական հետազոծը, եթե հայտնի է տարբերություն հետազոծը: Ներկայացված են Եվրոպական ռենտգենյան ԱԷԼ պրոյեկտի օնդոլյատորային սեկցիայի համար կատարված թվային հաշվարկների արդյունքները:

ON THE RELATIONSHIP BETWEEN BEAM ORIGINAL
AND DIFFERENCE ORBITS IN LINEAR ACCELERATORS

A.A. SARGSYAN, G.A. AMATUNI, V.V. SAHAKYAN, V.M. TSAKANOV

A relationship between beam original and difference orbits in linear accelerators is considered. A new integral equation for the beam orbit is derived and a recurrent analytical solution is given, which allows evaluating the original trajectory when the information about the difference orbit is known. Numerical results for the undulator section of the European XFEL project are presented.

УДК 621.384

РАДИАЦИОННОЕ СЖАТИЕ ЭМИТТАНСА ЭЛЕКТРОННОГО ПУЧКА В НАКОПИТЕЛЬНОМ КОЛЬЦЕ “КЕНДЛ” С ПОМОЩЬЮ ВИГЛЕР-МАГНИТОВ

Т.Л. ВАРДАНЯН

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения
Институт синхротронных исследований “КЕНДЛ”, Ереван, Армения

e-mail: tvardanyan@asls.candle.am

(Поступила в редакцию 18 июня 2014 г.)

Исследована возможность уменьшения эмиттанса пучка в накопительном кольце проекта источника синхротронного излучения «КЕНДЛ» с помощью виглер-магнитов, установленных в свободных прямолинейных участках магнитной структуры ускорителя. С помощью трека частиц в ускорителе рассчитана динамическая апертура нелинейных колебаний, вызванных виглерами, и предложена оптимальная конфигурация для существенного сжатия горизонтального эмиттанса пучка.

1. Введение

Достижение малых эмиттансов электронного пучка в современных накопителях электронов является одной из важных проблем для достижения высокой яркости синхротронного излучения [1,2]. Как известно [3], равновесный эмиттанс пучка в накопителях электронов определяется балансом радиационного затухания и квантовых флуктуаций поперечных колебаний частиц и определяется в основном магнитно-оптической структурой ускорителя. Без возмущения основной магнито-оптической системы ускорителя дополнительное радиационное затухание в систему можно ввести с помощью специальных виглер-магнитов, устанавливаемых в свободных промежутках кольца [4,5]. Хотя такие магниты усиливают нелинейные эффекты в системе и приводят в общем случае к сужению динамической апертуры поперечных колебаний, при определенных условиях возможно значительное сжатие поперечного эмиттанса пучка с сохранением динамической апертуры кольца в допустимых пределах.

В настоящей работе исследована возможность применения виглер-магнитов для сжатия электронного пучка в накопительном кольце проекта источника синхротронного излучения “КЕНДЛ” [6]. Получены параметры виглер-магнита, при котором достижимо максимальное сжатие электронного пучка. Исследована динамическая апертура поперечных колебаний с помощью трека частиц в накопительном кольце.

2. Радиационное сжатие и квантовая раскачка колебаний с учетом виглер-магнитов

Как известно, горизонтальный эмиттанс пучка ε в накопителях электронов задается эффектами радиационного затухания $(d\varepsilon/dt)_R$ и квантовых флуктуаций $(d\varepsilon/dt)_Q$ поперечных колебаний частиц [3,7]:

$$\left(\frac{d\varepsilon}{dt}\right)_R = -2\varepsilon C_R J_x E^3 I_2, \quad \left(\frac{d\varepsilon}{dt}\right)_Q = c C_Q E^5 I_5, \quad (1)$$

где C_R , C_Q есть константы, приведенные в [7], E – равновесная энергия частиц, ρ – радиус закругления в поворотных магнитах, c – скорость света, J_x – декремент затухания горизонтальных колебаний, I_2, I_5 – синхротронные интегралы, определяемые как $I_2 = \langle 1/\rho^2 \rangle$ и $I_5 = \langle H/\rho^3 \rangle$, а усреднение $\langle f \rangle$ осуществляется по всем поворотным магнитам. Функция H определяется как

$$H = \beta\eta^2 + 2\alpha\eta\eta' + \gamma\eta'^2, \quad (2)$$

где η – функция дисперсии, β – бетатронная функция и (α, β, γ) – параметры Твиса. Равновесный эмиттанс пучка достигается при балансе вышеприведенных эффектов, т.е. $(d\varepsilon/dt)_R + (d\varepsilon/dt)_Q = 0$, и задается выражением

$$\varepsilon = C_q \frac{\gamma^2 I_5}{J_x I_2}, \quad (3)$$

где $C_q = 2.94 \times 10^{-13}$ м и γ – Лоренц-фактор электронов. При введении дополнительных виглер-магнитов в магнитную систему ускорителя формула (3) преобразуется к виду

$$\varepsilon_w = C_q \frac{\gamma^2 I_5 + I_{5w}}{J_x I_2 + I_{2w}}, \quad (4)$$

где I_{2w}, I_{5w} есть синхротронные интегралы вдоль виглер-магнитов. Нетрудно видеть, что эффективное уменьшение эмиттанса пучка возможно при условиях $I_{5w} \ll I_5$ и $I_{2w} \gg I_2$, которые накладывают определенные требования на параметры виглера и участок орбиты его установки. Физически эти условия соответствуют усилению радиационного затухания за счет I_{2w} при незначительном увеличении эффекта квантовой раскачки (I_{5w}).

Естественным следствием формулы (4) для оптимального уменьшения эмиттанса является установка виглер-магнитов в прямолинейных бездисперсионных участках кольца с $\eta = 0$. Однако, виглер-магниты являются источниками дополнительной дисперсии, что необходимо учесть при расчете квантовых флуктуаций при излучении частиц в этих магнитах. Предполагая синусоидальное магнитное поле в виглере, $B(z) = B_w \cos k_p z$, и учитывая, что в бездис-

персионных участках обычно $\alpha = 0$, $\beta = \beta_0 = \text{const}$ и $\beta_0 \gg 2\pi/k_p$, нетрудно получить выражения для интегралов I_{2w} и I_{5w} :

$$I_{2w} = \pi N_w \frac{\theta_w}{\rho_w}, \quad I_{5w} \approx \frac{1}{2} N_w \beta_0 \frac{\theta_w^3}{\rho_w^2}, \quad (5)$$

где $\theta_w = 1/(k_p \rho_w)$ – угол поворота траектории за один полюс виглер-магнита, N_w – число периодов виглер-магнита. Анализ формул (4) и (5) показывает, что для эффективного уменьшения эмиттанса следует использовать длинные виглер-магниты с сравнительно слабым полем и малым периодом $\lambda_p = 2\pi/k_p$. В предельном случае для большого числа периодов виглера ($N_w \rightarrow \infty$) формула (3) преобразуется к виду

$$\varepsilon_w \approx \frac{1}{2} C_q \frac{\gamma^2}{J_x} \beta_0 \frac{\theta_w}{\rho_w}.$$

Для исследования сжатия эмиттанса в реальном накопительном кольце с помощью дампинг виглеров необходимо проводить численное моделирование с учетом воздействия виглер-магнитов на динамическую апертуру ускорителя.

3. Моделирование эффектов виглер-магнитов в накопительном кольце

“КЕНДЛ” – это проект источника синхротронного излучения на энергию 3 ГэВ, магнитная структура накопительного кольца которого состоит из 16 двухповоротных бездисперсионных ячеек периодичности с длиной длинного свободного промежутка в 4.8 м [6]. Проектный эмиттанс пучка 8.4 нм рад в накопительном кольце ускорителя достигается введением дополнительной дисперсии в 0.2 м в длинных свободных промежутках. В системе с нулевой дисперсией горизонтальный эмиттанс пучка составляет 16 нм рад. Влияние виглер-магнитов на эмиттанс пучка и динамическую апертуру исследованы как

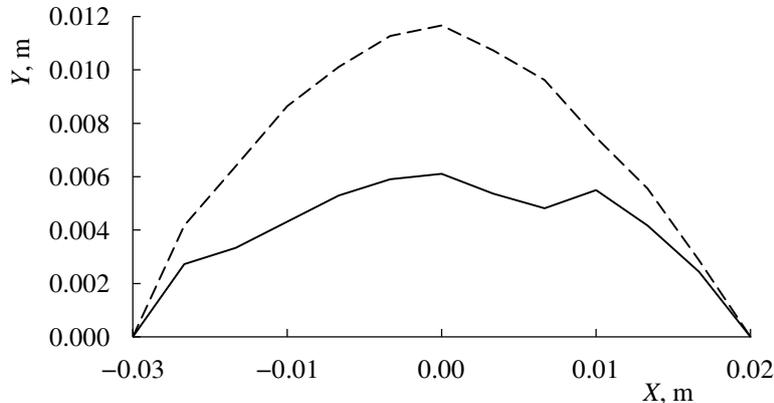


Рис.1. Динамическая апертура проектного виглера CANDLE, пунктирная линия соответствует случаю нулевой дисперсии.

для проектного виглера длиной 2.2 м, полем 3 Т и числом периодов 10 для генерации синхротронного излучения, так и для различных конфигураций дампинг виглеров (рис.1). Расчеты проводились с помощью программы трека частиц в ускорителях “ELEGANT” [8].

Проектный виглер предназначен для генерации интенсивного синхротронного излучения в жесткой области рентгеновского излучения. Расчеты показывают, что его наличие приводит к уменьшению эмиттанса пучка на 10% для бездисперсионного варианта магнитной системы и к увеличению эмиттанса на 5% для дисперсионного варианта магнитной системы ускорителя.

Для целевого сжатия эмиттанса рассмотрено влияние трех виглеров с полями в 2.5 и 3 Т и общей длиной 12 метров на эмиттанс и динамическую апертуру пучка. Для этих виглеров число периодов меняется от 20 до 200, что соответствует длине периода от 20 до 2 см. Результаты исследований приведены в табл.1. Как и предполагалось, наилучший эффект получается при малых периодах виглера, хотя при заданной длине виглер-магнитов их влияние на уменьшение эмиттанса незначительно. На рис.2 приведены динамические апертуры поперечных колебаний при различных режимах работы ускорителя.

Табл.1. Влияние виглеров на эмиттанс пучка в зависимости от периодов.

Число периодов	Виглер 2.5 Т	Виглер 3 Т
	Эмиттанс, нм рад	Эмиттанс, нм рад
20	11.81	10.75
50	11.75	10.54
80	11.74	10.53
200	11.72	10.52
Без виглера	16	16

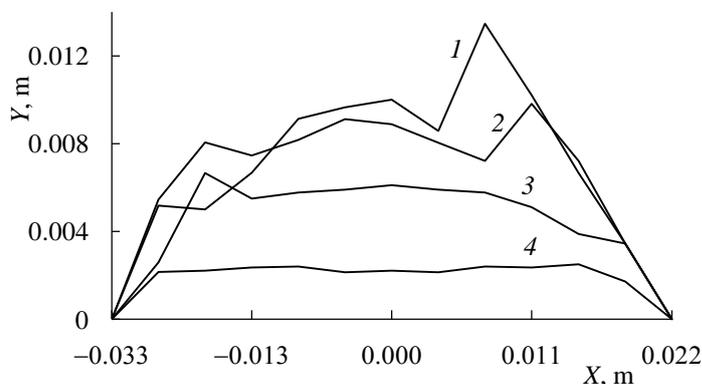


Рис.2. Динамическая апертура для 20 (1), 50 (2), 80 (3), 200 (4) периодов при мощности виглера 2.5 Т.

Как видно, при числе периодов виглер-магнита порядка 80 (длина периода 5 см) наблюдается резкое уменьшение динамической апертуры вертикальных колебаний. Поэтому наиболее оптимальным вариантом является виглер с полем 2.5 Т и длиной периода 8 см (50 периодов). При этом проектный эмиттанс уменьшается приблизительно в 1.4 раза.

Исследовано также поведение эмиттанса в зависимости от магнитного поля виглера. На рис.3 приведена зависимость эмиттанса пучка от поля виглер-магнита. Длина периода виглера составляет 15 см. Как видно из рисунка, при поле виглера в 5.7 Т достигается минимальный горизонтальный эмиттанс пучка, равный 7.4 нм рад, что приблизительно в два раза меньше проектного значения (16 нм рад) для бездисперсионной магнитной системы. Реализация такой схемы предполагает использование сверхпроводящих виглер-магнитов. Кроме того, необходимо иметь в виду существенное уменьшение вертикальной динамической апертуры ускорителя, что потребует дополнительных октупольных линз в кольце.

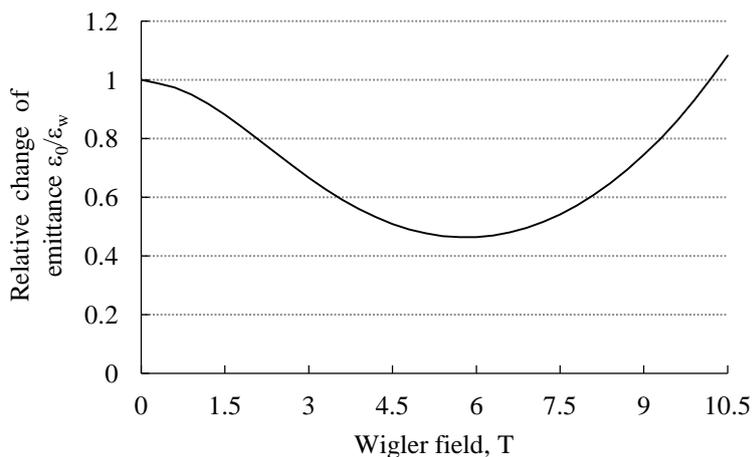


Рис.3. Зависимость относительного изменения эмиттанса от мощности виглера от 0.3 до 10 Т для периода 15 см. Минимальный эмиттанс 7.42 нм рад при 5.7 Т.

4. Заключение

Исследована возможность уменьшения горизонтального эмиттанса электронного пучка в накопительном кольце проекта “КЕНДЛ” с помощью демпфирующих виглер-магнитов. С помощью трека частиц в ускорителе исследована динамическая апертура поперечных колебаний для различных конфигураций виглер-магнитов. Анализ полученных результатов показывает, что уменьшение эмиттанса в 1.5 раза с сохранением достаточной апертуры поперечных колебаний достижимо с использованием виглер-магнитов с полем в 2.5 Т.

ЛИТЕРАТУРА

1. **H. Wiedemann.** Synchrotron Radiation. Springer, Berlin, 2003.
2. **V. Tsakanov, H. Wiedemann** (eds). Brilliant Light in Life and Material Sciences, Springer, Netherlands, 2007.
3. **M. Sands.** The Physics of Electron Storage Rings. SLAC-121, Stanford, USA, 1971.
4. **M. Borland, L. Emery.** Proc. Particle Accel. Conf. 2007, Albuquerque, USA, p.1124, 2007.
5. **M. Tischer et al.** Damping Wigglers at the Petra 3 Light Source. Proc. 11 European Particle Accel. Conf., Genoa, Italy, p. 2317, 2008.
6. **V. Tsakanov et al.** Rev. Sci. Instrum., **73**, 1411 (2002).
7. **H. Wiedemann.** Particle Accelerator Physics. Springer, Berlin, 2007.
8. **M. Borland.** Phys. Rev. STAB, **4**, 070701 (2001).

ՎԻԳԼԵՐ ՄԱԳՆԻՍԼԵՐԻ ՄԻՋՈՑՈՎ ՓՆՋԻ ԷՄԻՏԱՆՍԻ ՄԱՐՄԱՆ ԷՖԵԿՏԸ
«ՔԵՆԴԼ»-ԿՈՒՏԱԿԻՉ ՕՂԱԿՈՒՄ

Տ.Լ. ՎԱՐԴԱՆՅԱՆ

Առաջարկվող աշխատությունում հետազոտվել է «ՔԵՆԴԼ» սինքրոտրոնային լույսի աղբյուրի պրոեկտի կուտակիչ օղակում փնջի էմիտանսի փոքրացման հնարավորությունը մագնիսական համակարգի ուղիղ, ազատ հատվածներում վիզլեր մագնիսների օգտագործման միջոցով: Արագացուցչում մասնիկների վիրտուալ թողարկման միջոցով հաշվվել է վիզլեր մագնիսների առաջացրած ոչ գծային տատանումների դինամիկ ապերտուրան և արաջարկվել հորիզոնական էմիտանսի զգալի փոքրացման օպտիմալ կոնֆիգուրացիա:

DAMPING VIGGLER EFFECT IN CANDLE STORAGE RING

T.L. VARDANYAN

In this paper discussed the possible improvements in emittance of “CANDLE” synchrotron light facility project storage ring that could result from the use of damping wigglers in drift spaces of accelerator magnetic structure. With particle track dynamic aperture of non linear oscillations caused by wiggler magnets is calculated. The optimal configuration for significant compression of the horizontal beam emittance is proposed.

УДК 537.533

СКОЛЬЗЯЩЕЕ ПАДЕНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ В ЭКСПЕРИМЕНТАХ ПО ОПТИЧЕСКОМУ ПЕРЕХОДНОМУ ИЗЛУЧЕНИЮ

Р.А. БАГИЯН

Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак

e-mail: raffi@ipr.sci.am

(Поступила в редакцию 27 июня 2014 г.)

Известные выражения для интенсивностей переходного излучения, включающие черенковское излучение в прозрачной среде, модифицированы с учетом границы раздела двух сред. Аномалии, наблюдаемые в экспериментах по оптическому переходному излучению в случае скользящего падения электронов на мишень, поддаются наглядной интерпретации: отношение интенсивностей излучения при скользящем падении электронов и переходного излучения при нормальном влете составляет не менее двух порядков. Впервые объяснен эксперимент, который до сих пор не был объяснен.

1. Введение

В экспериментах [1-3] по оптическому переходному излучению обнаружено, что при скользящем падении электронов с энергией 30 кэВ на поверхность серебряной мишени при углах падения, близких к 90° , абсолютный выход излучения превышает интенсивность излучения при нормальном влете (см.рис.1). Углы отсчитываются от нормали к поверхности раздела. Для углов влета 87.5° и 89° высота пика оказалась на порядок выше интенсивности излучения при нормальном падении. Пик излучения наблюдается при $\lambda = 3500 \text{ \AA}$, что не совпадает с максимумом прозрачности серебра (3250 \AA). Авторы делают вывод, что они наблюдали излучение, которое является результатом возбуждения электроном поверхностных плазменных волн.

Основной результат работ [1-3] сводится к следующему: во-первых, экспериментально обнаружено излучение, которое по интенсивности на 1–2 порядка превосходит переходное и тормозное излучения; во-вторых, интенсивность в пике наблюдаемого излучения в зависимости от угла скольжения α ведет себя как $\sim \tan^{-1} \alpha$ [1], и в третьих, положение максимума в спектре излучения не совпадает с полосой прозрачности вещества и довольно точно соответствует положению максимума интенсивности поверхностных волн.

Детальное экспериментальное исследование излучения при прохождении нерелятивистских электронов через металлические мишени проведено в [4]. Авторы этой работы обращают внимание на влияние шероховатостей поверхности металла и показывают, что они приводят к повышению интенсивности

наблюдаемого излучения. Проведено изучение этого явления путем сравнения излучения от мишеней с тщательно отполированными и с шероховатыми поверхностями. Для объяснения повышенной интенсивности привлекался эффект Смита–Парсела. Переходному излучению на шероховатых поверхностях раздела сред также посвящены теоретические работы [5,6]. В [7] сделана попытка объяснить большую интенсивность излучения применением теории излучения нерегулярно движущегося электрона.

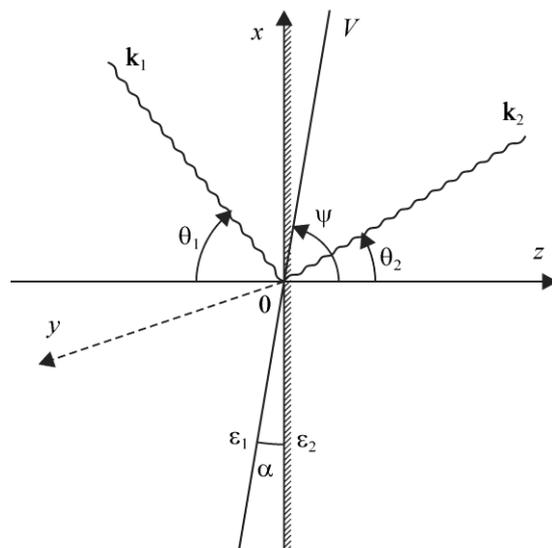


Рис.1. Прямоугольная система координат xuz . Плоскость $z = 0$ есть плоскость раздела двух сред. Ψ – угол падения частицы, отсчитываемый от оси z , $v(v_x, v_z)$ – скорость частицы, α – угол скольжения.

Одним из свойств переходного излучения, имеющим существенное значение в экспериментальных исследованиях, является характерная поляризация этого излучения (на эксперименте можно установить плоскость и степень поляризации). Из обычной теории следует, что переходное излучение должно быть полностью поляризовано, причем, электрический вектор должен лежать в плоскости, проходящей через траекторию частицы и направление излучения. Если переходное излучение вызвано электронами, то в качестве примеси всегда присутствуют тормозное излучение, люминесценция, не исключена и возможность излучения неизвестной природы. Это избыточное (неполяризованное) излучение изучено значительно хуже, чем переходное. Отделение его от переходного излучения, обычно, основано на том, что оно не поляризовано [8].

Исследованию свойств излучения, возникающего в оптической области спектра при облучении поверхности металлов заряженными частицами, посвящено большое число экспериментов, обзор которых содержится в [9-12].

Целью настоящей работы было объяснение эксперимента [1]. Воспользуемся выражением для полной энергии излучения при наклонном прохожде-

нии заряженной частицей плоской границы раздела двух сред в интервале частот $d\omega$ и в интервале телесного угла $d\Omega$ (сумма параллельной и перпендикулярной поляризации) в следующем виде [13,14]:

$$dI_{1,2} = \frac{e^2\omega^2 T}{2\pi c} \delta(\omega - \mathbf{k}_{1,2} \mathbf{v}) \times \left[\left| \frac{\cos\theta_{1,2} - \beta_z \sqrt{\epsilon_{1,2}}}{\epsilon_{1,2}^{1/4} \sin\theta_{1,2}} \right|^2 R_{1,2}^{\parallel} + \left| \frac{\beta_x \epsilon_{1,2}^{1/4} \cos\theta_y}{\sin\theta_{1,2}} \right|^2 R_{1,2}^{\perp} \right] d\omega d\Omega. \quad (1)$$

Здесь $R_{1,2}^{\parallel}$ и $R_{1,2}^{\perp}$ – коэффициенты Френеля [15], $\cos\theta_x = \sin\theta_{1,2}\cos\varphi$, $\cos\theta_y = \sin\theta_{1,2}\sin\varphi$, $\cos\theta_z = \cos\theta_{1,2}$ – направляющие косинусы излученного кванта $|\mathbf{k}_{1,2}| = 2\pi/\lambda = (\omega/c)\sqrt{\epsilon_{1,2}}$, θ – угол излучения, ω – частота, λ – длина волны, φ – азимутальный угол, отсчитываемый в плоскости xy от положительного направления оси x . Отсчет углов показан на рисунке. В приведенных выражениях верхние знаки и первые индексы соответствуют энергии излучения назад (в первой среде ϵ_1), нижние знаки и вторые индексы соответствуют энергии излучения вперед (во второй среде ϵ_2), β – отношение скорости электрона к скорости света в вакууме, T – полное время пролета электрона и e – его заряд. Выражение (1) представляет интенсивность неполяризованного излучения, испущенного за время T в прозрачной среде под произвольным углом падения электрона.

Для фиксированной длины волны в прозрачной среде с определенным показателем преломления излучение остронаправленное и соответствует излучению Вавилова–Черенкова. При отсутствии черенковского условия в обеих средах единственным источником излучения является переход электрона между средами, т.е. имеет место чисто переходное излучение.

Степень поляризации излучения определяется следующим образом:

$$\left| \frac{dI_{1,2}^{\parallel} - dI_{1,2}^{\perp}}{dI_{1,2}^{\parallel} + dI_{1,2}^{\perp}} \right|. \quad (2)$$

Для безграничной среды с $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon$ получаем энергию излучения Вавилова–Черенкова за все время пролета частицы

$$dI = dI^{\text{V-Ch}} T, \quad (3)$$

где

$$dI^{\text{V-Ch}} = \frac{e^2\beta^2}{2\pi c} \sqrt{\epsilon} \omega^2 \delta(\omega - kv \cos\theta) \sin^2\theta d\omega d\Omega \quad (4)$$

– энергия излучения Вавилова–Черенкова в единицу времени. Интегрируя (4) по телесному углу, получаем формулу Тамма–Франка [16]

$$dI^{\text{T-F}} = \frac{e^2\beta}{c} \left(1 - \frac{1}{\beta^2\epsilon} \right) \omega d\omega. \quad (5)$$

При нормальном падении электрона на мишень скорость частицы направлена по оси z ($\psi = 0$, $\beta = \beta_z$), перпендикулярная компонента поляризации отсутствует и мы имеем полностью поляризованное излучение:

$$dI^{T-F}(\psi = 0) = \frac{e^2\beta_z}{c} \left(1 - \frac{1}{\beta_z^2 \epsilon_{1,2}} \right) \omega d\omega. \quad (6)$$

В случае скользящего падения электрона на мишень частица фактически движется вдоль оси x ($\psi = \pi/2$, $\beta = \beta_x$), длительное время взаимодействует с мишенью и

$$dI^{T-F} \left(\psi = \frac{\pi}{2} \right) = \frac{e^2\beta_x}{c} \left(1 - \frac{1}{\beta_x^2 \epsilon_{1,2}} \right) \omega d\omega. \quad (7)$$

Отношение интенсивностей (7) и (6), т.е. отношение излучения при скользящем и нормальном падении электронов на мишень или отношение черенковского излучения к переходному равно

$$\frac{dI^{T-\Phi} I(\psi = \pi/2)}{dI^{T-\Phi} I(\psi = 0)} = \tan \psi. \quad (8)$$

Это отношение в зависимости от угла скольжения $(\pi/2 - \psi) = \alpha$ ведет себя как $\tan^{-1} \alpha$ и составляет не менее двух порядков [12]. Таким образом, нами объяснен эксперимент [1], который до сих пор не был интерпретирован.

В последнее время публикуются работы, связанные с метаматериалами. В работе [17] анализируется излучение заряженных частиц, пересекающих границу между обычной средой и метаматериалом. Если рассматривать в ней вместо нормального падения заряженных частиц скользящее падение, т.е. применить результаты наших исследований, то можно не менее чем на два порядка усилить результаты.

ЛИТЕРАТУРА

1. **H. Boersch, P. Dobberstein, D. Fritsche, et al.** Zh. Phys., **187**, 97 (1965).
2. **P. von Blanckenhagen, H. Boersch, D. Fritsche, et al.** Phys. Lett., **11**, 296 (1964).
3. **L.C. Gram, E.T. Arakawa.** Phys. Rev., **153**, 455 (1967).
4. **Ф.Р. Арутюнян, А.Х. Мхитарян, Р.А. Оганесян и др.** ЖЭТФ, **71**, 1788 (1979).
5. **R.A. Baghiyan.** Phys. Rev. E, **64**, 026610 (2001).
6. **R.A. Baghiyan.** Phys. Rev. E, **69**, 026609 (2004).
7. **Л.А. Геворгян, Н.А. Корхмазян.** Труды международного симпозиума по переходному излучению частиц высоких энергий. Ереван, изд. ЕрФИ, 1977, с. 434.
8. **I.M. Frank.** Acta Physica Polonica, **A38**, 655 (1970).
9. **В.Л. Гинзбург, В.Н. Цытович.** Переходное излучение и переходное рассеяние. М., Наука, 1984.
10. **М.Л. Тер-Микаелян.** Влияние среды на электромагнитные процессы при высоких энергиях. Ереван, изд. АН Арм. ССР, 1969.
11. **В.Е. Пафомов.** Труды ФИАН СССР, **44**, 28 (1969).

12. **Г.М. Гарибян, Ян Ши.** Рентгеновское переходное излучение. Ереван, изд. АН Арм. ССР, 1983.
13. **Р.А. Багиян.** Изв. ВУЗов, Радиофизика, **40**, 1126 (1997).
14. **Р.А. Багиян.** Изв. НАН Армении, Физика, **46**, 397 (2011).
15. **Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц.** Электродинамика сплошных сред. М., Наука, 1982.
16. **И.Е. Тамм, И.М. Франк.** ДАН СССР, **14**, 107 (1937).
17. **S. Galyamin, A.V. Tyukthin, A. Kanareykin, et al.** Phys. Rev. Lett., **103**, 94802 (2009).

ԷԼԵԿՏՐՈՆՆԵՐԻ ՍԱՀՈՒՆ ԱՆԿՈՒՄԸ ՕՊՏԻԿԱԿԱՆ
ԱՆՑՈՒՄԱՅԻՆ ՃԱՌԱԳԱՅԹՄԱՆ ԷՔՍՊԵՐԻՄԵՆՏՆԵՐՈՒՄ

Ր.Ա. ԲԱԴԻՅԱՆ

Բացատրված են փորձարարական արդյունքները, որոնք մինչ այժմ չեն բացատրվել: Ստացված է անալիտիկ լուծում՝ թիրախի վրա էլեկտրոնների սահուն անկյան տակ անկման դեպքում և ուղղահայաց անկման դեպքում: Այդ ինտենսիվությունը առնվազն երկու կարգով բարձր է քան օպտիկական անցումային ճառագայթման ինտենսիվությունը ուղղահայաց անկման դեպքում:

GRAZING INCIDENCE OF ELECTRONS
IN EXPERIMENTS ON OPTICAL TRANSITION RADIATION

R.A. BAGHIYAN

It is shown that the known expression for transition radiation intensity includes the Cherenkov radiation in transparent medium, modified by existence of interface of two media. Anomalies observed in the experiments with optical transition radiation in the case of grazing incidence of electrons entering the target are considered. The ratio of intensities of Cherenkov to transition radiation is by at least two orders of magnitude higher. For the first time it is explaining the experiment which has not been explained so far.

УДК 539.1

ДВУХКАНАЛЬНОЕ РАССЕЙАНИЕ И ИЗЛУЧЕНИЕ ЭЛЕКТРОНА В КВАНТОВОЙ КВАЗИОДНОМЕРНОЙ ЯМЕ

Д.М. СЕДРАКЯН, А.Х. БАГДАСАРЯН, Л.Р. СЕДРАКЯН*

Ереванский государственный университет, Армения

*e-mail: lyovsed@yahoo.com

(Поступила в редакцию 6 июня 2014 г.)

Показано, что электронные токи в гетероструктурах могут стать источником излучения фотонов в дальней инфракрасной области частот. Рассмотрено двухканальное рассеяние электрона на δ -образном потенциале (точечный дефект) и показано, что рассеяние происходит, в основном, по второму каналу с одинаковыми амплитудами прохождения и отражения. Показано, что при взаимодействии рассеивающихся электронов с внешней линейно-поляризованной электромагнитной волной происходит переход электрона со второго канала на первый канал с излучением фотонов. Найдена вероятность излучения фотона в единицу времени для двух частных случаев распространения внешней волны. Оценена область частот излучения и показано, что электрон, движущийся в гетероструктуре, излучает фотон с частотой $\sim 10^{13}$ Гц.

1. Введение

Исследования по физике низкоразмерных полупроводниковых структур, таких как, сверхрешетки, квантовые проволоки, квантовые ямы и точки, открыли новые области фундаментальных наук. Физические свойства этих структур изучены как экспериментально, так и теоретически [1-5]. Квантовая локализация носителей заряда в этих структурах приводит к образованию дискретных уровней энергии, увеличению плотности состояний на определенных уровнях энергии и радикальному изменению оптических спектров поглощения и излучения. Изучение рассеяния и излучения элементарных частиц в таких средах представляет интерес, так как, во-первых, в связи со все возрастающими возможностями нанотехнологии по созданию низкоразмерных структур экспериментальное осуществление данных систем является наиболее разработанным как в плане контроля размеров системы, так и по возможности вариаций структурных и композиционных характеристик, во-вторых, теоретическое исследование физических особенностей рассеяния и излучения на одномерных и квазиодномерных системах является более легкой задачей, чем их исследование в системах, характеристики которых изменяются в двух или трех направлениях.

Вместе с тем, уже много лет интенсивно рассматриваются одномерные модели, которые не утратили своей актуальности. Любой аналитический подход, который выходит за рамки одномерного рассмотрения, расширяет класс задач, приближая их к реальным физическим задачам [6-8]. В частности, квази-

одномерное рассмотрение задачи рассеяния и излучения заряженной частицы может быть одним из таких обобщений [9-11]. Как было показано в работах [12,13], квазиодномерное рассеяние на заданном потенциале, зависящем также от поперечных координат, приводит к многоканальному рассеянию. Математически это означает, что амплитуды рассеяния t_n и r_n зависят от новых дискретных индексов m , которые описывают квантовое движение частицы в поперечной к направлению рассеяния плоскости. Физический смысл индексов m зависит от вида движения частицы в поперечной плоскости.

Целью настоящей работы является исследование коэффициентов прохождения и отражения электронов в удлиненной квантовой яме при рассеянии на точечных примесях и дефектах наноструктуры, а также влияние конфинмента низкоразмерной системы на излучение электрона. Найдены амплитуды двухканального рассеяния квантовой частицы на точечном дефекте, имеющем вид δ -образного потенциала. Исследовано поведение коэффициентов прохождения и отражения электронов на точечном дефекте в зависимости от скорости частиц как на первом, так и на втором канале рассеяния. Рассматривается излучение электрона в открытой в одном направлении квантовой яме, исследован спектр возможного излучения в зависимости от дрейфовой скорости падающей на потенциал частицы, найдены вероятности излучения фотонов. Основные физические результаты, полученные в этой статье, рассматриваются с точки зрения возможного расширения области исследования. Отметим, что в данной работе мы предполагаем квазиодномерность движения электрона, так как заданием двух бесконечных потенциалов ограничивается движение частицы в поперечной плоскости, что в рамках квантовой механики приводит к двумерному движению частицы.

2. Двухканальное рассеяние на точечном дефекте в виде δ -образного потенциала

Для теоретического описания одноэлектронных состояний рассмотрим движение частицы в двумерном пространстве. Предположим, что ее движение в направлении y ограничено бесконечными потенциалами, занимающими поверхности $y=0$ и $y=a$. Движение в направлении x не ограничено. Частицы рассеиваются в поле потенциала $U(x, y)$. Уравнение Шредингера для такого движения имеет вид

$$\frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{\partial^2 \Psi(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi(x, y)}{\partial y^2} \right) + (E - U(x, y)) \Psi(x, y) = 0. \quad (1)$$

Введем обозначения

$$\frac{2M}{\hbar^2} E = \chi^2, \quad \frac{2M}{\hbar^2} U(x, y) = V(x, y). \quad (2)$$

Тогда уравнение (1) запишется в виде

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\Psi(x, y) + (\chi^2 - V(x, y))\Psi(x, y) = 0. \quad (3)$$

Решение уравнения (3) с граничными условиями $V(x, 0) = V(x, a) = \infty$ можно искать в виде [11]

$$\Psi(x, y) = \sum_n \Psi_n(x) \Phi_n(y), \quad (4)$$

где $\Phi_n(y)$ есть решение уравнения

$$\frac{d^2 \Phi_n(y)}{dy^2} + \chi_n^2 \Phi_n(y) = 0, \quad n = 1, 2, \dots, \infty \quad (5)$$

с граничными условиями $\Phi_n(0) = \Phi_n(a) = 0$. Решения уравнений (5) имеют вид

$$\Phi_n(y) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n}{a} y, \quad n = 1, 2, \dots, \infty, \quad (6)$$

и они ортонормированы:

$$\int_0^a \Phi_m^*(y) \Phi_n(y) dy = \delta_{mn}. \quad (7)$$

Подставляя решение (4) в уравнение (3), получим систему уравнений для определения функций $\Psi_n(x)$:

$$\frac{d^2 \Psi_n(x)}{dx^2} + k_n^2 \Psi_n(x) - \sum_m V_{m,n} \Psi_m(x) = 0, \quad n = 1, 2, \dots, \infty, \quad (8)$$

где

$$k_m^2 = \chi^2 - \chi_m^2, \quad \chi_m = \frac{\pi}{a} m, \quad m = 1, 2, \dots, \infty, \quad (9)$$

$$V_{m,n}(x) = \int_0^a \Phi_m^*(y) V(x, y) \Phi_n(y) dy.$$

Фактически, задача рассеяния частицы в направлении x сводится к решению одномерной бесконечной системы (8) с заданной потенциальной матрицей $V_{mn}(x)$, члены которой определяются формулой (9) [11]. Как видно из решений (4), (6) и системы уравнений (8), частица в направлении y совершает колебательное движение с дискретной энергией, равной $E_n = \hbar^2 \chi_n^2 / (2M)$, а в направлении x она рассеивается на заданных потенциалах $V_{mn}(x)$. Квантовый характер движения частицы по направлению y может привести к возбуждению ее поперечного движения на уровень $n > 1$, если энергия возбуждения больше $\Delta E_n = \pi^2 \hbar^2 (n^2 - 1) / (2Ma^2)$. Так как рассеяние частицы упругое и если начальная энергия частицы достаточно велика, чтобы обеспечить реализацию возбужде-

ния поперечного движения, то рассеяние можно рассматривать как многоканальное. В задаче многоканального рассеяния в рассмотрение вводятся амплитуды прохождения t_n и отражения r_n , которые зависят от индекса n , определяющего номер канала L .

Рассмотрим рассеяние частицы на потенциалах

$$U(x, y) = U_0 \delta(x) \delta(y - y_0)$$

или (10)

$$V(x, y) = L_0 \delta(x) \delta(y - y_0),$$

где $L_0 = (2M/\hbar^2)U_0$. Предположим, что начальная энергия продольного движения частицы достаточна для возбуждения квантового состояния с $n=2$, но недостаточна для возбуждения состояния с $n=3$, тогда рассеяние будет двухканальным [12,13]. Предположим также, что движение частицы по направлению y до встречи с потенциалом описывается волновой функцией $\Phi_1(y)$, а продольное движение – импульсом \mathbf{p}_1 или $\mathbf{k}_1 = \mathbf{p}_1/\hbar$. Согласно (4), (8) и (9), отличными от нуля будут только $\Psi_1(x)$ и $\Psi_2(x)$, которые удовлетворяют уравнениям

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \Psi_1(x)}{dx^2} + k_1^2 \Psi_1(x) - V_{11}(x) \Psi_1(x) - V_{12}(x) \Psi_2(x) &= 0, \\ \frac{d^2 \Psi_2(x)}{dx^2} + k_2^2 \Psi_2(x) - V_{22}(x) \Psi_2(x) - V_{21}(x) \Psi_1(x) &= 0, \end{aligned} \quad (11)$$

где

$$\begin{aligned} V_{11} &= \frac{2}{a} P_0 \sin^2 \left(\frac{\pi y_0}{a} \right) \delta(x) = b_{11} \delta(x), \\ V_{22}(x) &= \frac{2}{a} P_0 \sin^2 \left(\frac{2\pi y_0}{a} \right) \delta(x) = b_{22} \delta(x), \\ V_{12}(x) = V_{21}(x) &= \frac{2}{a} P_0 \sin \frac{\pi y_0}{a} \sin \frac{2\pi y_0}{a} \delta(x) = b_{12} \delta(x). \end{aligned} \quad (12)$$

Решение системы уравнений (11) будем искать в виде

$$\Psi_1(x) = \begin{cases} e^{ik_1 x} + r_1 e^{-ik_1 x}, & x < 0, \\ t_1 e^{ik_1 x}, & x > 0, \end{cases} \quad \Psi_2(x) = \begin{cases} r_2 e^{-ik_2 x}, & x < 0, \\ t_2 e^{ik_2 x}, & x > 0. \end{cases} \quad (13)$$

Амплитуды t_1 , r_1 , t_2 и r_2 находятся из сшивания волновой функции и ее первой производной в точке $x=0$:

$$\begin{aligned} \Psi_1(-0) &= \Psi_1(+0), & \Psi_2(-0) &= \Psi_2(+0), \\ \Psi_1'|_{-0} &= b_{11} \Psi_1(0) + b_{12} \Psi_2(0), & \Psi_2'|_{-0} &= b_{22} \Psi_2(0) + b_{21} \Psi_1(0), \end{aligned} \quad (14)$$

где Ψ_1' и Ψ_2' – первые производные функций $\Psi_1(x)$, $\Psi_2(x)$ по x . Функции

Ψ_1 и Ψ_2 и их производные Ψ'_1 и Ψ'_2 в уравнениях (14) берут в точке $x=0$, подходя к ней слева (-0) и справа ($+0$). Подставляя решение (13) в уравнение (14), для амплитуд прохождения и отражения получим следующую систему уравнений:

$$\begin{cases} 1 + r_1 = t_1, \\ r_2 = t_2, \\ ik_1 t_1 - ik_1 + ik_1 r_1 = b_{11} t_1 + b_{12} t_2, \\ ik_2 t_2 + ik_2 r_2 = b_{21} t_1 + b_{22} t_2. \end{cases} \quad (15)$$

Решая систему уравнений (15), получим следующие выражения для t_1 , r_1 , и t_2 , r_2 :

$$t_1 = \frac{2ik_1}{2ik_1 - b_{11} - \frac{b_{12}^2}{2ik_2} - b_{22}}, \quad r_1 = \frac{b_{11} + \frac{b_{12}^2}{2ik_2 - b_{22}}}{2ik_1 - b_{11} - \frac{b_{12}^2}{2ik_2 - b_{22}}}, \quad (16)$$

$$t_2 = r_2 = \frac{b_{12}}{2ik_2 - b_{22}} t_1.$$

Как видно из уравнений (16), при $b_{12} = 0$ получим $t_2 = r_2 = 0$, а для амплитуд t_1 и r_1 получаются известные формулы для коэффициентов прохождения и отражения от потенциала вида $V_{11} = b_{11} \delta(x)$ для одномерного рассеяния. Из выражений (12) видно, что при $y_0 = a/2$, то есть, когда рассеивающий потенциал находится в центре ямы, $b_{12} = 0$ и, следовательно, перехода с первого канала на второй не будет и частица будет рассеиваться только в первом канале.

Вычислим плотности токов вероятностей движущихся к барьеру частиц $\Psi_0 = e^{ik_1 x}$ из

$$j_0 = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi'_0 \Psi_0^* - \Psi_0'^* \Psi_0) = \frac{\hbar k_1}{m} = v_0, \quad (17)$$

где v_0 – скорость падающей частицы. Для отраженных частиц $\Psi_1(x) = r_1 e^{-ik_1 x}$ и $\Psi_2(x) = r_2 e^{-ik_2 x}$ плотности токов вероятностей имеют вид

$$j_{21} = -v_0 |r_1|^2, \quad j_{22} = -\frac{\hbar k_2}{m} |r_2|^2 = -v_1 |r_2|^2, \quad (18)$$

где v_0 и v_1 – соответственно скорости отраженных в первом и во втором каналах частиц. Наконец, для прошедших через барьер частиц $\Psi_1(x) = t_1 e^{ik_1 x}$, $\Psi_2(x) = t_2 e^{ik_2 x}$ имеем

$$j_{11} = v_0 |t_1|^2, \quad j_{12} = v_1 |t_2|^2. \quad (19)$$

Вероятность отражения частицы от барьера равна отношению отраженного и

падающего потоков и называется коэффициентом отражения R . Отношение прошедшего потока к падающему есть вероятность прохождения частицы через барьер и называется коэффициентом прохождения T . Для коэффициентов отражения R и прохождения T получим

$$\begin{aligned} R_1 &= \frac{j_{r_1}}{j_0} = |r_1|^2 = \frac{4k_2^2 b_{12}^2}{16k_1^2 k_2^2 + 4(k_1 b_{22} + k_2 b_{11})^2}, \\ T_1 &= \frac{j_{t_1}}{j_0} = |t_1|^2 = \frac{16k_1^2 k_2^2 + 4k_1^2 b_{22}^2}{16k_1^2 k_2^2 + 4(k_1 b_{22} + k_2 b_{11})^2}, \\ T_2 = R_2 &= \frac{j_{t_2}}{j_0} = \frac{k_2}{k_1} |t_2|^2 = \frac{4k_1 k_2 b_{11} b_{22}}{16k_1^2 k_2^2 + 4(k_1 b_{22} + k_2 b_{11})^2}. \end{aligned} \quad (20)$$

При выводе выражений (20) использовано соотношение $b_{12}^2 = b_{11} b_{22}$, которое следует непосредственно из (12). Сумма выражений (20) равна единице согласно закону сохранения числа частиц.

Наконец, определим относительную плотность частиц на втором канале рассеяния. Она важна, так как при взаимодействии частиц с внешним электромагнитным полем они могут стать источниками электромагнитного излучения. Относительная плотность зависит от продольного импульса k_2 и, как увидим ниже, важно определить эту плотность при малых k_2 . Условие $k_2 \rightarrow 0$ можно принять, так как

$$k_2^2 = k_1^2 - 3\left(\frac{\pi}{a}\right)^2,$$

и при $k_1^2 \rightarrow 3(\pi/a)^2$ мы имеем $k_2 \rightarrow 0$. Найдем относительную плотность n_2/n частиц на втором канале рассеяния, здесь n_2 – плотность частиц на втором канале и n – полная плотность частиц. Легко заметить, что $n_2 \sim 2|t_2|^2$, тогда как $n \sim (2|t_2|^2 + |r_1|^2 + |t_1|^2)$. Используя формулы (20), для относительной плотности частиц на втором канале рассеяния имеем

$$\frac{n_2}{n} = \frac{1}{1+B}, \quad (21)$$

где

$$B = \frac{b_{22}^2 + 4k_2^2 \left(1 + \left(\frac{b_{11}}{2k_1}\right)^2\right)}{2b_{11} b_{22}}.$$

При $k_2 \neq 0$ величина B стремится к бесконечности, когда δ – потенциал помещен на краях $y_0 = 0$ и $y_0 = a$ и в середине $y_0 = a/2$ ямы (в этих точках $b_{22} \rightarrow 0$).

Тогда, согласно формуле (21), n_2/n стремится к нулю и рассеяние реализуется только по первому каналу.

Согласно (21), максимальное значение n_2/n соответствует минимальному значению B_{\min} . Легко показать, что это значение B достигается, когда y_0 находится вблизи центра ямы ($y_0 = a/2$). Для этого рассмотрим B как функцию от y_0 и найдем ее минимум. Тогда минимальное значение B_{\min} соответствует точке y_0 , где выполняется условие

$$b_{22}^2 = 4k_2^2 \left(1 + \left(\frac{b_{11}}{2k_1} \right)^2 \right) \quad \text{и} \quad B_{\min} = \frac{b_{22}}{b_{11}}.$$

Отсюда следует, что B_{\min} может стремиться к нулю и $n_2 \rightarrow n$, если k_2 и b_{22} одновременно стремятся к нулю, выполняя вышеуказанное условие. Так как $B_{\min} \sim \cos^2(\pi y_0/a)$, то $B_{\min} \rightarrow 0$, когда потенциал находится около центра ямы $y_0 \rightarrow a/2$. Заметим, что максимум функции n_2/n достигается в точке y_0 , которая тем ближе к центру ямы, чем меньше параметр B . После достижения максимума функция n_2/n быстро уменьшается, стремясь к нулю.

3. Излучение электрона в квазиодномерной квантовой яме

Теперь рассмотрим излучение электрона, который движется в поле линейно-поляризованной электромагнитной волны. Электрон в таких условиях может излучать фотон, при этом переходя из более высокого уровня энергии поперечного квантованного состояния в низкий уровень. Вычислим вероятность такого перехода. Возмущенное волновое уравнение напомним в виде

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (\hat{H}_0 + \hat{W}) \Psi, \quad (22)$$

где поле возмущения

$$\hat{W}(r, t) = -\frac{e}{c} \mathbf{A}(r, t) \hat{\mathbf{p}}, \quad \mathbf{A} = \mathbf{A} e^{i\mathbf{k}r - i\omega t}, \quad (23)$$

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla.$$

Следовательно,

$$\hat{W}(x, y, t) = \hat{\mathbf{A}} e^{-i\omega t} + \hat{\mathbf{A}}^+ e^{i\omega t}, \quad (24)$$

где $\hat{\mathbf{A}}$ определяется заданной электромагнитной волной возмущения. Решение возмущенного уравнения (22) будем искать в виде

$$\Psi = \Psi_E(x, y) e^{-\frac{i}{\hbar} Et} + \Delta \Psi(x, y, t), \quad (25)$$

где

$$\hat{H}_0 \Psi_E = E \Psi_E \quad \text{и} \quad \Delta \Psi = \int C_{\bar{E}}(t) \Psi_{\bar{E}} e^{-\frac{i}{\hbar} \bar{E} t} d\bar{E}.$$

Подставляя решение (25) в уравнение (22), для $C_{\bar{E}}(t)$ получим

$$i\hbar \int \frac{\partial C_{\bar{E}}(t)}{\partial t} \Psi_{\bar{E}} e^{-\frac{i}{\hbar} \bar{E} t} d\bar{E} = \hat{W} \Psi_E e^{-\frac{i}{\hbar} E t}. \quad (26)$$

Умножая обе стороны равенства (26) на $\Psi_{E'}^*$ и интегрируя в плоскости (x, y) , получим

$$i\hbar \int \frac{\partial C_{\bar{E}}}{\partial t} \Psi_{E'}^* \Psi_{\bar{E}} e^{-\frac{i}{\hbar} \bar{E} t} dx dy d\bar{E} = \int \Psi_{E'}^* \hat{W} \Psi_E e^{-\frac{i}{\hbar} E t} dx dy. \quad (27)$$

Здесь $\int \Psi_{E'}^* \Psi_{\bar{E}} dx dy = \delta(E' - \bar{E})$ и, следовательно,

$$i\hbar \frac{\partial C_{E'}(t)}{\partial t} = W_{E'E}(t), \quad (28)$$

где

$$\begin{aligned} W_{E'E}(t) &= \int \Psi_{E'}^* \hat{W} \Psi_E e^{-\frac{i}{\hbar}(E-E')t} dx dy = \\ &= \int \Psi_{E'}^* \hat{A} \Psi_E dx dy e^{\frac{i}{\hbar}(E'-E-\hbar\omega)t} + \int \Psi_{E'}^* \hat{A}^+ \Psi_E dx dy e^{\frac{i}{\hbar}(E'-E+\hbar\omega)t} = \\ &= A_{EE'}^* e^{\frac{i}{\hbar}(E'-E-\hbar\omega)t} + A_{EE'}^* e^{\frac{i}{\hbar}(E'-E+\hbar\omega)t}. \end{aligned} \quad (29)$$

Окончательно, для коэффициента $C_{E'}(t)$ получается следующее выражение:

$$C_{E'}(t) = -\frac{A_{E'E}^* e^{\frac{i}{\hbar}(E'-E-\hbar\omega)t}}{E'-E-\hbar\omega} - \frac{A_{E'E}^* e^{\frac{i}{\hbar}(E'-E+\hbar\omega)t}}{E'-E+\hbar\omega}.$$

Вероятность того, что в момент t частица будет находиться в состоянии с энергией E' , равна квадрату модуля последнего выражения. Первое слагаемое обусловлено поглощением фотона, а второе – излучением. После несложных преобразований из (29) для вероятности излучения фотона в единицу времени получается следующее выражение:

$$|C_{E'}|^2 = \frac{2\pi}{\hbar} |A_{E'E}^*|^2 \delta(E'-E+\hbar\omega). \quad (30)$$

Рассмотрим излучение электрона, когда в начальном состоянии электрон совершает колебательное движение на втором канале и поступательно движется в направлении x . После излучения фотона электрон не может оставаться на втором канале и в силу законов сохранения энергии и импульса перейдет на первый канал, изменяя импульс поступательного движения.

Ниже мы рассмотрим два случая взаимодействия электрона с электромагнитным полем, приводящих к излучению фотона.

4. Случай параллельного распространения

Рассмотрим случай, когда электромагнитная волна распространяется в направлении движения электрона x и поляризована в направлении y . Тогда вектор \mathbf{A} и оператор \hat{p} примут вид

$$\mathbf{A} = A_y e^{ikx - i\omega t} + \text{к.с.}, \quad \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}. \quad (31)$$

При таком выборе внешнего электромагнитного возмущения $\hat{A} = \frac{ie\hbar}{c} A_y e^{ikx} \frac{\partial}{\partial y}$ и, следовательно,

$$A_{E'E}^* = \frac{ie\hbar}{c} A_y \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_0^a dy \Psi_{1E'}^* e^{-ikx} \frac{\partial}{\partial y} \Psi_{2E} = -\frac{16\pi i e \hbar}{3c} A_y B, \quad (32)$$

где

$$B = r_2 \int_{-\infty}^0 e^{-ik_2 x - ikx} \Psi_{1E'}^* dx + t_2 \int_0^{\infty} e^{ik_2 x - ikx} \Psi_{1E'}^* dx.$$

Теперь мы должны выбрать функцию $\Psi_{1E'}$, которая описывает состояние электрона после излучения фотона. После излучения электрон может находиться в двух возможных состояниях. Сначала рассмотрим случай, когда электрон после излучения движется в положительном направлении оси x . Для этого случая $\Psi_{1E'} = e^{ik_1' x}$ и

$$\begin{aligned} B &= r_2 \int_{-\infty}^0 e^{-ik_2 x - ikx - ik_1' x} dx + t_2 \int_0^{\infty} e^{ik_2 x - ikx - ik_1' x} dx = \\ &= \pi r_2 \delta(k_2 + k_1' + k) + \pi t_2 \delta(k_2 - k_1' - k). \end{aligned} \quad (33)$$

Так как $k_2 + k_1' + k > 0$, то реализуется только второе слагаемое формулы (33). В этом случае электрон после излучения продолжает движение в положительном направлении оси x , а законы сохранения энергии и импульса принимают вид

$$E_2 - E_1 = \hbar\omega, \quad k_2 - k_1' = k. \quad (34)$$

Подставляя в уравнение (34) выражения для энергии электрона

$$E_2 = \frac{\hbar^2}{2m} k_2^2 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{4\pi^2}{a^2}, \quad E_1 = \frac{\hbar^2}{2m} k_1'^2 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{a^2},$$

и разрешая систему уравнений (34), для величин $\hbar k_2$ и $\hbar k_1'$ получим следующие выражения:

$$\hbar k_2 = mc - \frac{3\hbar\pi^2}{2ka^2} + \frac{\hbar k}{2}, \quad \hbar k_1' = mc - \frac{3\hbar\pi^2}{2ka^2} - \frac{\hbar k}{2}. \quad (35)$$

Для излучения фотона необходимо, чтобы $\frac{3\hbar\pi^2}{2ka^2} - \frac{\hbar k}{2} > 0$, откуда получаем, что такая возможность реализуется, когда длина волны излучаемого фотона удовлетворяет условию $\lambda > 2a/\sqrt{3}$ ($a \sim 10^{-6}$ см). Из (35) видно, что фотоны с максимальной энергией 2×10^{-10} эрг (с почти рентгеновской частотой излучения $\omega \sim 2 \times 10^{17}$ Гц) могут излучать только ультрарелятивистские частицы. Фотоны видимого света ($\omega \sim 3 \times 10^{15}$ Гц) излучают электроны, движущиеся со скоростью $v \sim 0.8c$, где c – скорость света. В квантовых гетероструктурах электрон не может двигаться с релятивистскими скоростями и, следовательно, не может излучать фотон видимого света. Максимальная дрейфовая скорость, которая достигается в настоящее время в гетероструктурах, $\sim 10^8$ см/сек при разности потенциалов ~ 20 кВ/см, а в некоторых квантовых структурах даже при 4 кВ/см. При таких скоростях электрон может излучать с длиной волны $\sim 10^{-2}$ см, то есть в инфракрасной области излучения. Действительно, чтобы уменьшить частоту излучаемого фотона, согласно (35), нужно уменьшить k'_1 . Наименьшая частота излучения получится при условии

$$k'_1 = mc - \frac{3\hbar\pi^2}{2ka^2} - \frac{\hbar k}{2} = 0,$$

откуда следует, что $k_2 = k$. В этом случае электрон останавливается и передает свой импульс фотону. Это реализуется для таких частот, когда первый член первого уравнения (35) порядка второго члена того же уравнения, т.е.

$$mc \sim \frac{3\hbar\pi^2}{2ka^2}.$$

Отсюда получаем $\omega = kc \approx 3 \times 10^{13}$ Гц, т.е. дальний инфракрасный диапазон.

Перейдем к рассмотрению второго случая, когда электрон после излучения меняет направление своего движения, т.е. движется в отрицательном направлении оси x . Как увидим ниже, излучаемый в этом случае фотон, имеет частоту, лежащую в инфракрасной области излучения. В рассматриваемом случае функция $\Psi_{1E'} = e^{-ik'_1 x}$ и, следовательно,

$$\begin{aligned} B &= r_2 \int_{-\infty}^0 e^{-ik_2 x - ikx - ik'_1 x} dx + t_2 \int_0^{\infty} e^{ik_2 x + ik'_1 x - ikx} dx = \\ &= \pi r_2 \delta(k_2 - k'_1 + k) + \pi t_2 \delta(k_2 + k'_1 - k). \end{aligned} \quad (36)$$

Так как $k_2 - k'_1 + k > 0$, то и в этом случае реализуется второй интеграл решения (36). Излучающая частица сначала движется в положительном направлении оси x , после излучения меняет свое направление и движется в отрицательном направлении оси x . Законы сохранения энергии и импульса в этом случае примут вид

$$E_2 - E_1 = \frac{\hbar^2}{2m}(k_2^2 - k_1'^2) + \frac{3\hbar^2\pi^2}{2ma^2} = \hbar\omega, \quad (37)$$

$$k_2 + k_1' = k.$$

Отсюда видно, что наименьшее значение ω получается при $k_2 = k_1'$, что даст величину

$$\omega = \frac{3}{2} \left(\frac{\hbar}{m} \right) \frac{\pi^2}{a^2},$$

которая реализуется при $k_2 = \omega c/2$. Легко оценить, что при $a \sim 10^{-6}$ см минимальная частота излучения $\sim 10^{13}$ Гц, тогда как дрейфовые скорости $v_2 \leq 160$ см/сек, т.е. небольшие.

Таким образом, электроны после рассеяния на δ -образном потенциале переходят на второй канал и, следовательно, взаимодействуя с внешним электромагнитным полем, могут переходить на первый канал, излучая фотоны. Оценки частоты излучения дают довольно широкий диапазон 10^{13} Гц $\leq \omega \leq 10^{17}$ Гц, однако, излучение электрона в гетероструктурах, в основном, лежит в дальней инфракрасной области.

5. Случай перпендикулярного распространения

Рассмотрим случай, когда линейно-поляризованная электромагнитная волна распространяется в перпендикулярном к движению частицы направлении и поляризована вдоль x . Тогда вектор \mathbf{A} и оператор $\hat{\mathbf{p}}$ примут вид

$$\mathbf{A} = A_x e^{iky - i\omega t} + \text{к.с.}, \quad \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \quad (38)$$

При таком выборе внешнего электромагнитного возмущения оператор \hat{A} имеет вид $\hat{A} = \frac{ie\hbar}{c} A_x e^{iky} \frac{\partial}{\partial x}$, а величина $A_{E'E}^*$ определится из выражения

$$A_{E'E}^* = \int \Psi_{E'}^* \hat{A}^+ \Psi_E dx dy = -\frac{ie\hbar}{c} A_x \int \Psi_{E'}^* e^{-iky} \frac{\partial}{\partial x} \Psi_E dx dy. \quad (39)$$

Подставляя в интеграл (39) выражения для функций $\Psi_{E'}$ и Ψ_E , окончательно получим

$$A_{E'E}^* = \frac{2ie\hbar}{ca} A_x B_1 B_2, \quad (40)$$

где

$$B_1 = \int_0^a \sin\left(\frac{\pi}{a}y\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a}y\right) e^{-iky} dy, \quad B_2 = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{1E'}^*(x) \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{2E}(x) dx.$$

Решение интеграла B_1 имеет следующий вид:

$$B_1 = \frac{1}{4i} \left[\frac{e^{-i(3\pi/a+k)a} - 1}{3\pi/a+k} - \frac{e^{i(3\pi/a-k)a} - 1}{3\pi/a-k} - \frac{e^{-i(\pi/a+k)a} - 1}{\pi/a+k} + \frac{e^{i(\pi/a-k)a} - 1}{\pi/a-k} \right]. \quad (41)$$

Теперь рассмотрим интеграл B_2 . Предположим, что электрон после излучения движется в положительном направлении оси x . Тогда интеграл B_2 имеет вид

$$\begin{aligned} B_2 &= r_2 \int_{-\infty}^0 e^{-ik_1 x} \frac{\partial}{\partial x} e^{-ik_2 x} dx + t_2 \int_{-\infty}^0 e^{-ik_1 x} \frac{\partial}{\partial x} e^{ik_2 x} dx = \\ &= i\pi k_2 t_2 [\delta(k_2 + k_1) + \delta(k_2 - k_1)]. \end{aligned} \quad (42)$$

Здесь мы учли, что при рассеянии электрона на δ -образном потенциале $t_2 = r_2$. Отметим, что, если электрон после излучения движется в отрицательном направлении оси x , то для B_2 снова получается выражение (42).

Так как $k_2 + k_1 > 0$, то из решения (42) реализуется только второе слабое, и законы сохранения энергии и импульса примут вид

$$E_2 - E_1 = \frac{\hbar^2}{2m} (k_2^2 - k_1^2) + \frac{3\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} = \hbar\omega, \quad k_2 = k_1. \quad (43)$$

Из (43) получаем частоту излучаемого фотона

$$\omega = \frac{3}{2} \left(\frac{\hbar}{m} \right) \frac{\pi^2}{a^2}, \quad k = \frac{\omega}{c}. \quad (44)$$

Отсюда легко оценить частоту излучения. Если выбрать $a \sim 10^{-6}$ см, тогда получим $\omega = 10^{13}$ Гц и $k = \omega/c = 3 \times 10^2$ см $^{-1}$, т.е. частота излучения находится в дальней инфракрасной области. Знание величины k дает возможность оценить интеграл B_1 . Как видно из выражения (41), для малых значений параметра ka/π B_1 пропорционально этому параметру. В рассматриваемом нами случае $ka/\pi \sim 10^{-4}$ и, следовательно, в первом ненулевом приближении $B_1 = \frac{8i}{9} \frac{ka^2}{\pi^2}$.

Зная B_1 , можно написать окончательный вид для величины $A_{E'E}^*$:

$$A_{E'E}^* = -\frac{16i}{9} A_x \left(\frac{ka}{\pi} \right) k_2 \delta(k_2 - k_1). \quad (45)$$

Отметим, что области низкочастотного излучения для обоих рассмотренных нами случаев совпадают.

6. Заключение

Показано, что энергию дрейфового движения электрона при его квази-одномерном рассеянии можно превратить в энергию излучения фотона. Для этого сначала электрон рассеивается на δ -образном потенциале (точечный дефект), а потом, взаимодействуя с внешней электромагнитной волной, излучает фотон.

Рассмотрено двухканальное рассеяние электрона на δ -образном потенциале и показано, что с большой вероятностью электрон рассеивается, находясь на втором канале и имея одинаковые амплитуды прохождения и отражения. Так как энергия поперечного движения рассеянных электронов на втором канале больше, чем на первом канале, то из-за взаимодействия с внешней электромагнитной волной электрон со второго канала переходит на первый канал, излучая фотон. Рассмотрены два случая для внешней линейно-поляризованной электромагнитной волны: первый, когда она распространяется параллельно, и второй, когда она распространяется перпендикулярно движению электрона. Найдены вероятности излучения фотонов в единицу времени для обоих случаев рассеяния. Оценены области частот излучения и показано, что для электронов, движущихся в гетероструктурах, эти частоты лежат в инфракрасной области.

ЛИТЕРАТУРА

1. **B.L. Altshuler, A.G. Aronov, D.E. Khmel'nitskii, A.I. Larkin.** Quantum Theory of Solids, ed. by I.M. Lifshits, Advances in Science and Technology in the USSR, Mir Publishers, Moscow, 1982, pp.130-237.
2. **H. Fukuyama, S. Hikami.** Anderson Localization. Springer, 1982.
3. **S. Datta.** Transport in Mesoscopic Systems. Cambridge University Press, 1996.
4. **Y. Imry.** Introduction to Mesoscopic Physics. Oxford University Press, 1997.
5. **I. Dittrich, P.H. Angi, et al.** Quantum Transport and Dissipation. Wiley-VCH, 1998.
6. **M. Diitiker.** Phys. Rev. B, **40**, 7906 (1990).
7. **H.A. Fenig, B.I. Halperin.** Phys Rev. B, **36**, 7969 (1987).
8. **Y.B. Levinson, M.I. Lubin, E.Y. Sukhorukov.** Phys. Rev. B, **45**, 1196 (1992).
9. **М.Б. Левинсон, М.И. Любин, Е.В. Сухоруков.** Письма в ЖЭТФ, **54**, 405 (1991).
10. **Л.Р. Седракян.** Доклады НАН Армении, **109**, 214 (2009).
11. **Д.М. Седракян, Э.М. Казарян, Л.Р. Седракян.** Изв. НАН Армении, Физика, **44**, 395 (2009).
12. **Д.М. Седракян, Э.М. Казарян, Л.Р. Седракян.** Изв. НАН Армении, Физика, **45**, 173 (2010).
13. **Д.М. Седракян, Л.Р. Седракян.** Доклады НАН Армении, **110**, 171 (2010).

TWO-CHANNEL SCATTERING AND EMISSION OF ELECTRON IN A QUASI-ONE-DIMENSIONAL QUANTUM HOLE

D.M. SEDRAKIAN, A.KH. BAGDASARYAN, L.R. SEDRAKYAN

We show that electron currents in heterostructures can be a source of photon emission in the far infrared. Two-channel electron scattering on δ -potential (point defect) is considered, and it is shown that the scattering takes place mainly on the second channel having the same amplitudes of transmission and reflection. It is shown that the interaction of scattering electrons with an external electromagnetic wave occurs a transition of electron from the second channel to the first channel with the photons emission. The probability of photon emission during a unit of time for two special cases of the external wave propagation is found. Range of emission frequencies is estimated, and it is shown that the electron moving in a heterostructure emits a photon with a frequency about 10^{13} Hz.

УДК 548.0

ПОГЛОЩЕНИЕ И ЭМИССИЯ КОНЕЧНОГО СЛОЯ ХИРАЛЬНОГО ФОТОННОГО КРИСТАЛЛА

А.А. ГЕВОРГЯН

Ереванский государственный университет, Армения

e-mail: agevorgyan@ysu.am

(Поступила в редакцию 7 июня 2014 г.)

Исследованы особенности поглощения и эмиссии конечного слоя холестерического жидкого кристалла. Изучено влияние параметров, характеризующих поглощение и усиление, толщины слоя и локальной диэлектрической анизотропии на поглощение и эмиссию. В частности, показано, что при увеличении параметра x' , характеризующего усиление, эмиссия увеличивается, однако, в плоскости (λ, x') существуют дискретные точки, где эмиссия максимальна (λ – длина волны падающего света). Эти точки определяют критические значения усиления, при которых имеет место низкопороговая лазерная генерация. Полученные результаты могут быть использованы при проектировании сильнопоглощающих систем

1. Введение

Управление поглощением и эмиссией света при помощи искусственных или самоорганизующихся нанофотонных структур (фотонные кристаллы, метаматериалы, и т.д.) является активной областью исследования в связи с его возможным применением в лазерах и светодиодах [1-7], однофотонной генерации для квантовой информации [8-11], в сборе и аккумуляции солнечной световой энергии [12-15] и т.д. Поглощение и эмиссия являются одним из первых испытанных методов управления электромагнитным полем в среде. Фотонные кристаллы (ФК) и метаматериалы обладают интересными особенностями поглощения и эмиссии. В частности, в фотонной запрещенной зоне (ФЗЗ) имеет место эффект подавления поглощения (эмиссии). Вне ФЗЗ вблизи ее границ, при анизотропном поглощении (усилении) имеет место эффект аномально сильного (аномально слабого) поглощения (эмиссии), а в метаматериалах с большой оптической анизотропией с несколькими периодами можно обеспечить столько поглощения (эмиссия), сколько с обычными ФК слоями с намного большим числом периодов. Особенно интересными свойствами обладают хиральные ФК. Особенности поглощения и эмиссии в хиральных ФК исследованы в работах [16-28]. Поглощение и эмиссия в хиральных ФК имеют также поляризационные особенности.

Для увеличения поглощения необходимо получить большую аккумуляцию света в среде. Одним из механизмов получения большой аккумуляции

является многократное отражение, в том числе дифракционное, от границ системы или от неоднородностей среды. В работах [14,29,30] открыт новый механизм аккумуляции света в системе, а именно, диодный механизм аккумуляции: если направления большего пропускания двух оптических диодов направлены друг к другу ($\rightarrow \leftarrow$), интенсивность I на поверхности сшивки этих слоев получается больше, чем в случае, когда эти направления направлены друг от друга ($\leftarrow \rightarrow$). Это, в свою очередь, означает существование нового механизма аккумуляции света, обусловленного невязимыми свойствами элементов системы. В этих работах предложено использование аккумуляции световой энергии, в частности, при помощи изотропного поглощающего слоя, помещенного между двумя оптическими диодами или между диодом и зеркалом. В работе [31] на конкретных примерах продемонстрирован этот механизм увеличения поглощения. В [32] предложен метод увеличения аккумуляции света в системе (и, следовательно, увеличения поглощения) посредством добавления слоя уменьшающего отражения.

Изготовление новых оптических устройств может существенно усовершенствоваться при использовании более передовых оптических структур. А для того, чтобы создать новые оптические конфигурации, необходимо понимание процессов поглощения и эмиссии в простейших системах, а также современные численные средства проектирования.

В данной работе представлена по возможности полная картина особенностей поглощения и эмиссии для конечного слоя хирального ФК – холестерического жидкого кристалла (ХЖК) и исследовано влияние толщины, диэлектрической анизотропии и параметров, характеризующих поглощение и усиление, на поглощение и эмиссию света.

2. Метод анализа

Для исследования особенностей поглощения (эмиссии) мы будем использовать точные аналитические выражения для коэффициентов отражения и пропускания для конечного слоя ХЖК, полученные в работах [33-35]. Мы исследуем особенности поглощения (эмиссии) для собственной поляризации (СП). СП – это две поляризации падающего света, которые не изменяются при прохождении через систему. В случае минимального влияния диэлектрических границ, т.е. при $\varepsilon_s = \varepsilon_m$, где ε_s – диэлектрическая проницаемость среды, окружающей с обеих сторон слой ХЖК, $\varepsilon_m = (\varepsilon_1 + \varepsilon_2)/2$, а ε_1 и ε_2 – главные значения локального тензора диэлектрической проницаемости слоя ХЖК, и малой диэлектрической анизотропии, СП совпадают с ортогональными круговыми поляризациями.

3. Результаты и обсуждение

Вычисления были выполнены для слоя ХЖК с параметрами $n_0 = \varepsilon_1^{1/2} = 1.4639$ и $n_e = \varepsilon_2^{1/2} = 1.5133$. Это параметры ХЖК состава холестерил-

нонаноат : холестерил-хлорид : холестерил-ацетат = 20:15:6, обладающего при комнатной температуре (24°C) шагом спирали в оптическом диапазоне ($p = 420$ нм). Спираль ХЖК правая, так что падающий на бездефектный слой ХЖК свет с правой круговой поляризацией обладает ФЗЗ, а свет с левой круговой поляризацией – нет. Кроме того, мы будем рассматривать случай минимального влияния диэлектрических границ, т.е. когда $n_s = \varepsilon_m^{1/2}$, где n_s – коэффициент преломления среды, ограничивающей слой ХЖК с обеих сторон.

Пусть слой ХЖК обогащен молекулами красителя. При наличии волны накачки эта система является усиливающей, т.е. рассматривается планарный резонатор с активным элементом. Наличие молекул красителя в системе приводит к изменению локальных коэффициентов преломления системы. В этом случае эффективные мнимые части эффективных локальных коэффициентов преломления ХЖК ($n''_{1,2}$) являются отрицательными величинами ($n_{1,2} = n'_{1,2} + in''_{1,2}$). Если при наличии поглощения (в этом случае мнимые части $n''_{1,2}$ локальных коэффициентов преломления ХЖК положительны) величина $A = 1 - (R + T)$, характеризующая поглощенную системой световую энергию (R и T – энергетические коэффициенты отражения и пропускания, соответственно), меньше единицы и положительна, то в усиливающей среде A является отрицательной величиной, и поэтому эмиссия системы будет характеризоваться величиной $|A|$.

Далее мы будем характеризовать степень упорядоченности дипольных моментов переходов гость-молекул посредством параметра порядка S_d . Он определяется посредством среднего значения от $\cos\vartheta$: $S_d = 1.5\langle \cos\vartheta \rangle - 0.5$, где ϑ – угол между локальным направлением оптической оси ХЖК и дипольным моментом перехода гость-молекул. Максимальное возможное значение параметра порядка $S_d = 1$ соответствует случаю идеальной ориентации моментов дипольных переходов, параллельных локальному направлению оптической оси. Значение $S_d = 0$ соответствует изотропному ориентационному распределению, а минимальное значение $S_d = -0.5$ соответствует изотропному распределению моментов дипольных переходов в плоскости, перпендикулярной локальной оптической оси. В приближении линейной оптики полученные соотношения описывают как режим усиления, так и режим генерации.

На рис.1 представлены эволюции спектров поглощения A (a,c,e) и эмиссии $\ln(|A|)$ (b,d,f) при увеличении параметров, характеризующих поглощение (параметр $x = \ln(2\text{Im}\varepsilon_m)$) и усиление (параметр $x' = \ln(-2\text{Im}\varepsilon_m)$). Рис.1a и b соответствуют случаю изотропных поглощения и усиления, рис.1c и d – случаю, когда поглощение и усиление обусловлены введением мнимой части только у диэлектрической проницаемости, параллельной локальному директору ($y \varepsilon_1$) и рис.1e и f – случаю, когда поглощение и усиление обусловлены введением мнимой части только у диэлектрической проницаемости, перпендикулярной локальному директору ($y \varepsilon_2$). При анизотропных поглощении $x = \ln(2\text{Im}\varepsilon_m)$ и усилении $x' = \ln(-2\text{Im}\varepsilon_m)$. Такое наглядное представление поглощения и эмиссии позволяет обнаружить ряд новых особенностей.

Известно, что при взаимодействии электромагнитной волны со средой с

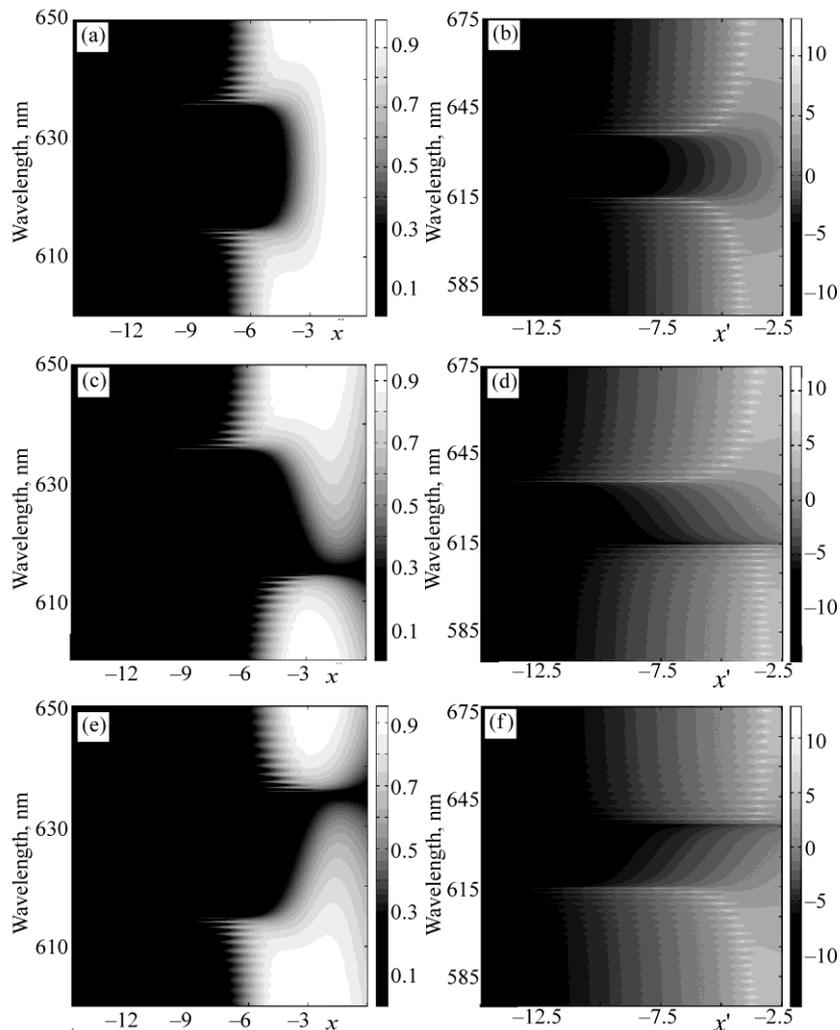


Рис.1. Эволюция спектров поглощения A (a,c,e) и эмиссии $\ln(|A|)$ (b,d,f) при увеличении параметров, характеризующих поглощение (параметр $x = \ln(\text{Im}\epsilon_m)$) и усиление (параметр $x' = \ln(-\text{Im}\epsilon_m)$): (a,b) – изотропное поглощение и усиление, (c,d,e,f) – анизотропное поглощение и усиление. При анизотропном поглощении $x = \ln(2\text{Im}\epsilon_m)$ и усилении $x' = \ln(-2\text{Im}\epsilon_m)$, $d = 150p$.

неоднородностями, последние приводят к модуляции суммарной волны, возникающей в среде. В соответствии с наличием различных форм модуляции волны должны существовать различные механизмы аномалии поглощения и эмиссии. В ХЖК при наличии локальной анизотропии поглощения имеет место эффект Бормана, заключающийся в аномально слабом (или сильном) поглощении излучения в условиях дифракционного рассеяния. В отличие от случая рентгеновских лучей в кристаллах в ХЖК эффект Бормана реализуется за счет поляризационных свойств собственных волн. Если частота света находится в ФЗЗ, то направление суммарного поля в слое оказывается определенным для задан-

ной координаты z вдоль оси спирали при падении на слой ХЖК света с дифрагирующей круговой поляризацией. Более того, с изменением z это направление поворачивается вокруг него, но так, что угол между директором и этим направлением в каждой точке остается неизменным. Если частота света изменяется, то угол между директором и суммарным полем также изменяется. Причем, на коротковолновой границе ФЗЗ суммарное поле оказывается ориентированным вдоль направления, соответствующего меньшему главному значению локального тензора диэлектрической проницаемости $\hat{\epsilon}$. На длинноволновой границе ФЗЗ поле направлено перпендикулярно направлению меньшего главного значения. Введение поглощения (для определенности будем считать его слабым) существенно не повлияет на поляризационные характеристики собственных волн. Поэтому описанная выше структура полей сохраняется и при наличии поглощения. Отсюда ясно, что если осцилляторы поглощения в молекулах ХЖК направлены вдоль длинной оси молекул (вдоль направления директора или главной оси, соответствующей ϵ_1), то минимальное поглощение будет наблюдаться на длинноволновой границе ФЗЗ. Если же осцилляторы поглощения направлены перпендикулярно директору, то минимальное поглощение будет проявляться на коротковолновой границе ФЗЗ.

Однако, это не единственный механизм аномально слабого (или сильного) поглощения излучения в этих средах. Подавленное поглощение и аномально сильное поглощение наблюдаются и при локальной изотропии поглощения [24,28]. Для более полного понимания физической картины возникновения аномалии поглощения при локальной изотропии поглощения снова обратимся к картине полей в среде. Как уже отмечено, при падении света с дифрагирующей круговой поляризацией в среде возникает стоячая волна, причем, характер изменения амплитуды этой волны в зависимости от z существенно отличается внутри ФЗЗ и вне ФЗЗ. Внутри ФЗЗ амплитуда стоящей волны экспоненциально уменьшается с увеличением z и уже при $z \sim 20 \div 30\sigma$ она практически равна нулю, т.е. происходит дифракционное отражение. Поглощение мало влияет на структуру поля в среде, и поскольку поглощение излучения происходит в сравнительно малой области среды, оно получается аномально слабым. Вне ФЗЗ амплитуда суммарной волны осциллирует с изменением z и возникают биения. На минимумах дифракционного отражения с границами слоя $z = 0$ и $z = d$ минимумы биений совпадают, а на максимумах дифракционного отражения с границей $z = 0$ совпадают максимумы биений и с границей $z = d$ совпадают минимумы биений (d – толщина ХЖК). На первом минимуме дифракционного отражения возникает только один гребень со значительной высотой. При этом амплитуда суммарной волны в среде в центре слоя намного больше амплитуды падающей волны.

Из-за многократных отражений на структуре среды и на границах слоя происходит накопление энергии излучения в центре слоя и плотность световой энергии здесь намного больше, чем вне слоя. Вот почему наличие даже малого поглощения (малого $\text{Im}\epsilon_m$) приводит к аномально сильному затуханию. На втором минимуме дифракционного отражения возникают уже два гребня бие-

ний сравнительно меньшей высоты, поэтому на этой длине волны аномально сильное поглощение выражено более слабо. На третьем минимуме дифракционного отражения возникают три гребня меньшей высоты и т.д. На первом максимуме дифракционного отражения гребень первого биения совпадает с границей $z = 0$, а минимум второго биения совпадает с границей $z = d$. Однако, высота гребня на максимуме дифракционного отражения намного меньше, чем на соответствующем минимуме. Наличие поглощения практически не влияет на высоту первого гребня и уменьшает высоту второго гребня. Поскольку в этом случае плотность световой энергии в среде мала и, кроме того, сильное поглощение излучения происходит в сравнительно малой области среды, поглощение излучения получается аномально слабым. С увеличением номера максимума увеличивается число гребней, поэтому аномально слабое поглощение выражается все более слабо. Таким образом, вне ФЗЗ при локальной изотропии поглощения аномалии поглощения и излучения обусловлены тем, что в среде возникает стоячая волна с узлами на границах слоя (в этом случае наблюдается аномально сильное поглощение) или с пучностью на первой границе и с узлом на второй границе (в этом случае наблюдается аномально слабое поглощение).

Хорошо известно, что для конечного слоя ХЖК коэффициент отражения равен единице в ФЗЗ и уменьшается, осциллируя вне ФЗЗ. Эти осцилляции наблюдаются экспериментально и являются следствием дифракции света в ограниченном объеме и не связаны с отражением от диэлектрических границ. Наличие диэлектрических границ, т.е. n_s отличается от $n_m = \varepsilon_m^{1/2}$, приводит к дополнительной модуляции этих осцилляций вне ФЗЗ.

Таким образом, при изотропном поглощении, как и при отсутствии поглощения, в ХЖК действуют два механизма дифракции при взаимодействии света с конечным слоем ХЖК. Один обусловлен дифракцией света на периодической структуре ХЖК и проявляется возникновением ФЗЗ, другой обусловлен дифракцией света в ограниченном объеме и проявляется возникновением дифракционных осцилляций вне ФЗЗ подобно маятниковым биениям, хорошо известным в теории дифракции рентгеновского излучения. Следует, однако, четко отличать эти осцилляции от интерференционных осцилляций, возникающих из-за диэлектрических границ и наблюдающихся также при прохождении света через слой изотропной среды. Они имеют разные периоды как по частоте, так и по толщине. Дифракционные осцилляции наблюдаются также при минимальном влиянии диэлектрических границ, т.е. при $n_m = n_s$. Минимумы дифракционных отражений приближенно определяются из условия

$$Kd = m\lambda, \quad m = 0, 1, 2, \dots, \quad (1)$$

где

$$K = \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} + a^2} \pm \sqrt{\left(\frac{\omega^2}{c^2} \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{2}\right)^2 + 4a^2 \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_m}, \quad a = \frac{2\pi}{p}.$$

Как видно из рис.1, в ФЗЗ ($m = 0$) имеет место подавление поглощения (эмиссии). Вне ФЗЗ на минимумах дифракционного отражения имеет место сильное поглощение (эмиссия), а на максимумах отражения – слабое поглощение (эмиссия). При анизотропном поглощении (усилении) вне ФЗЗ вблизи ее границ имеют место эффекты аномально сильного и аномально слабого поглощения (эмиссии). При анизотропном поглощении происходит полное подавление поглощения вблизи одной из границ ФЗЗ: вблизи коротковолновой границы, если поглощение обусловлено наличием мнимой части у ε_2 , и вблизи длинноволновой границы, если поглощение обусловлено наличием мнимой части у ε_1 при $\varepsilon_1' > \varepsilon_2'$. При дальнейшем увеличении параметра x область полного поглощения расширяется. Указанные особенности обусловлены наличием нового механизма дифракции и дифракционного подавления поглощения. При наличии локально анизотропного поглощения появляется новый механизм дифракции, обусловленный периодическим изменением поглощения в пространстве.

Интересная картина наблюдается при усилении. При увеличении параметра x' эмиссия увеличивается, однако, в плоскости (λ, x') существуют дискретные точки, где эмиссия максимальна. Она принимает максимальные значения на модах, определяемых условием (1), причем, с увеличением номера моды m увеличивается значение параметра x' , при котором эмиссия становится максимальной. Как известно, при слабом поглощении (излучении) и при малом d/mk коэффициенты отражения R и пропускания T на этих частотах, определяемых выражением (1), имеют вид [24]

$$R = \frac{(b^3 \gamma)^2}{((\pi m)^2 + b^3 \gamma)^2}, \quad T = \frac{(\pi m)^4}{((\pi m)^2 + b^3 \gamma)^2}, \quad (2)$$

где $b = \pi \delta d / p$, $\gamma = \text{Im} \varepsilon_m / \text{Re} \varepsilon_m$, $\delta = (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) / (\varepsilon_1 + \varepsilon_2)$, $m=1,2,3,\dots$. В случае усиления γ является отрицательной величиной и, следовательно, при условии

$$\gamma = -\frac{(m\pi)^2}{b^3} = -\frac{(m\pi)^2}{(\pi \delta d / p)^3} \quad (3)$$

коэффициенты отражения и пропускания расходятся. Как показано в [37,38], при малых значениях $|\gamma|$ частота лазерной генерации определяется из условия (1), и решения уравнения, являющиеся условием существования ненулевых решений для амплитуд отраженной и прошедшей волны при нулевой амплитуде падающей волны совпадают с решениями $(\pi m)^2 + a^3 \gamma = 0$. Соответствующие пороговые значения γ определяются из условия (3). Как показано в работах [37,38] и видно из (3), минимальное пороговое значение $|\gamma|$ соответствует моде с $m = 1$, т.е. наиболее близкой к ФЗЗ лазерной моде, и с увеличением m увеличивается пороговое значение γ . Отметим, что рассматриваемая задача о прохождении излучения через планарный резонатор с активным элементом с постоянным коэффициентом усиления не является адекватной реальному процессу.

Коэффициент усиления по мере нарастания интенсивности распространяющейся в среде волны падает. Это связано с особенностями создания инверсного состояния – при очень большой энергии, накапливаемой в активном элементе лазера, скорость вынужденных переходов начинает превосходить скорость накачки. При этом резко падает разность заселенностей возбужденного и основного состояний, что приводит к падению коэффициента усиления и, следовательно, к насыщению по интенсивности. Поскольку процесс взаимодействия излучения с усиливающей средой перестает быть как линейным, так и стационарным, линейное приближение к рассматриваемой задаче не может быть применено. Однако, представленные результаты дают много информации об

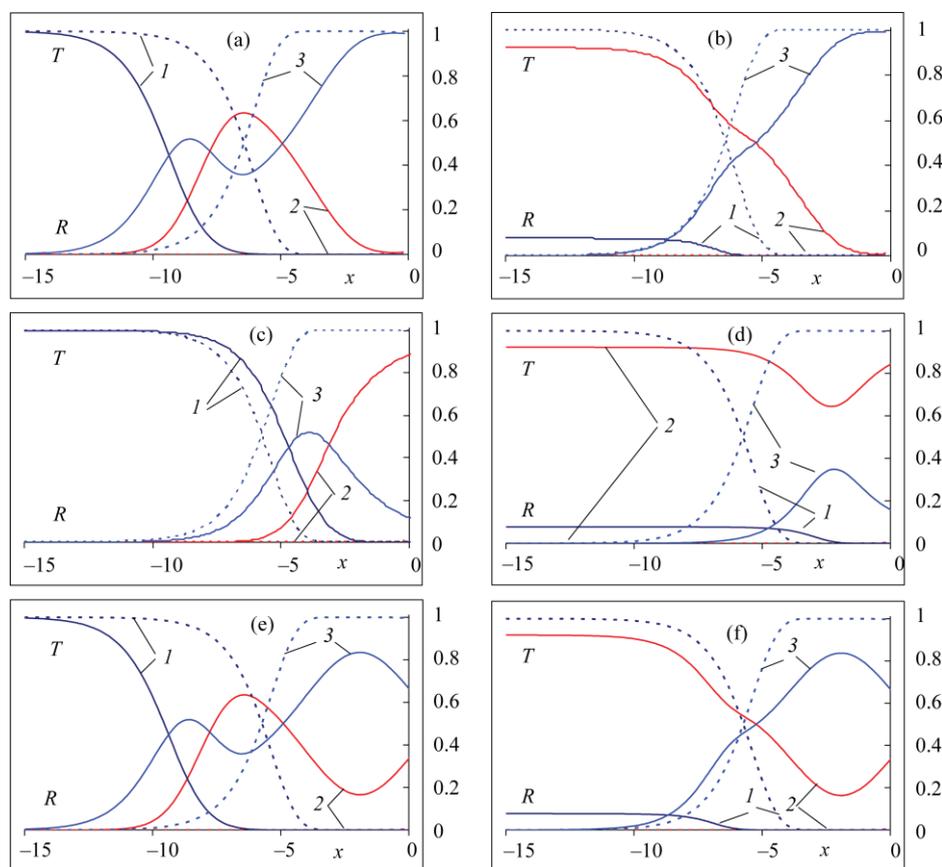


Рис.2. Зависимости пропускания T (кривая 1), отражения R (кривая 2) и поглощения A (кривая 3) от параметра x на первом минимуме (a,c,e) и на первом максимуме (b,d,f) дифракционного отражения. Падающий на слой свет имеет поляризацию, совпадающую с дифрагирующей (сплошные кривые) и недифрагирующей (штриховые кривые) СП: (a,b) – изотропное поглощение и усиление, (c,d,e,f) – анизотропное поглощение и усиление. При анизотропном поглощении $x = \ln(2\text{Im}\epsilon_m)$ и усиления $x' = \ln(-2\text{Im}\epsilon_m)$, $d = 150\rho$.

особенностях излучения и лазерной генерации в ХЖК, в частности, по пикам эмиссии на модах (1) можно определить пороговые значения коэффициента усиления.

Как было показано в работе [36], аналогичные закономерности наблюдаются и для фотонной плотности состояний для слоя ХЖК. Там же показано, что в плоскости (λ, x') на точках, где фотонная плотность состояний максимальна, происходит максимальная аккумуляция световой энергии.

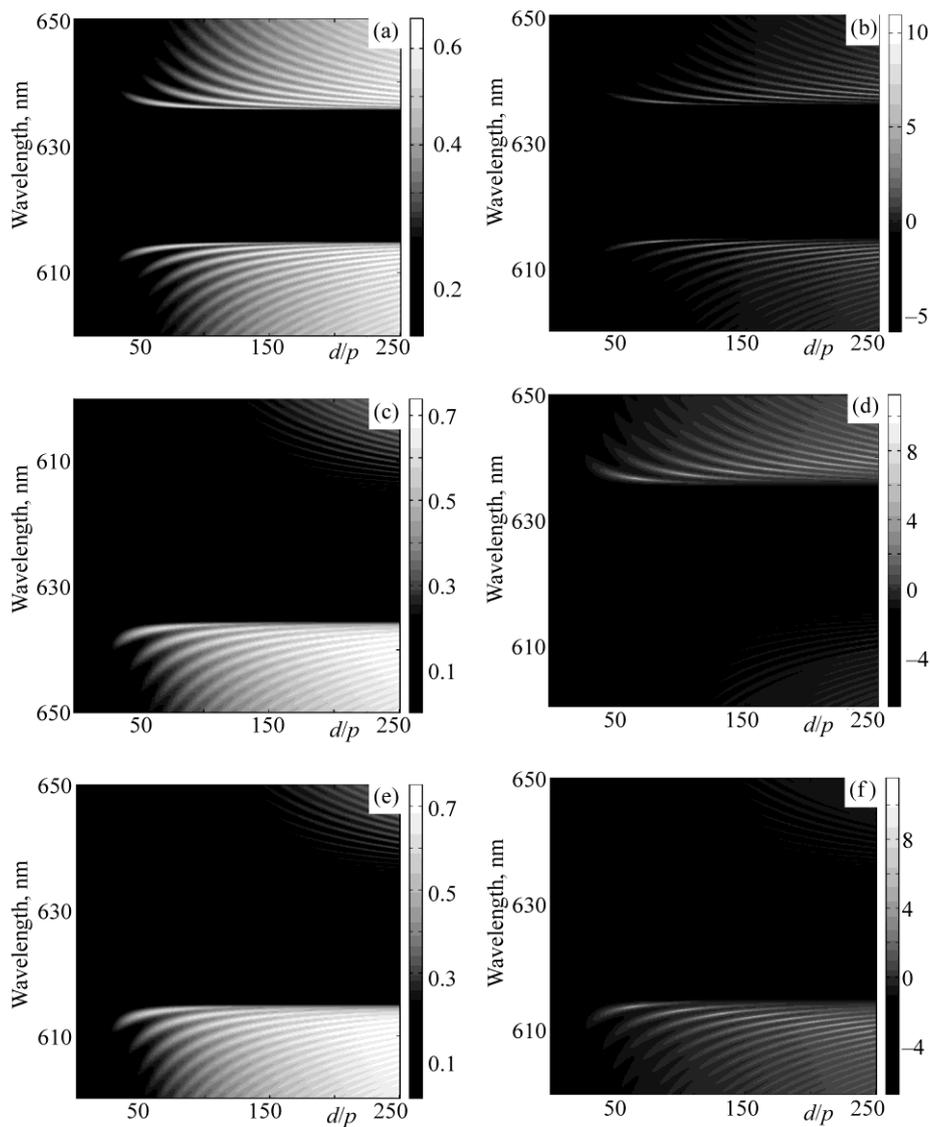


Рис.3. Эволюция спектров поглощения A (a,c,e) и эмиссии $\ln(|A|)$ (b,d,f) при увеличении толщины слоя ХЖК (параметра d/p): (a) $\varepsilon_1'' = \varepsilon_2'' = 0.001$, (b) $\varepsilon_1'' = \varepsilon_2'' = -0.001$, (c) $\varepsilon_1'' = 0$, $\varepsilon_2'' = 0.002$, (d) $\varepsilon_1'' = 0$, $\varepsilon_2'' = -0.002$, (e) $\varepsilon_1'' = 0.002$, $\varepsilon_2'' = 0$, (f) $\varepsilon_1'' = -0.002$, $\varepsilon_2'' = 0$.

На рис.2 представлены зависимости пропускания T (кривая 1), отражения R (кривая 2) и поглощения A (кривая 3) от параметра x на первом минимуме (a,c,e) и на первом максимуме (b,d,f) дифракционного отражения. Падающий на слой свет имеет поляризацию, совпадающую с дифрагирующей (сплошные кривые) и недифрагирующей (штриховые кривые) СП. Представленные графики демонстрируют резкую зависимость отражения, пропускания и поглощения от изменения x в области малых значений. Вдали от ФЗЗ изменения соответствующих величин при изменении x в области малых значений совершенно незначительны. Отметим резкую избирательность по частоте эффектов аномалии поглощения вблизи ФЗЗ [24]. Сильные изменения поглощения в основном обусловлены изменением отражения от x , так как пропускание резко уменьшается до нуля с увеличением x . При этом соответствующая частота минимумов отражения превращается в частоту максимумов, и наоборот.

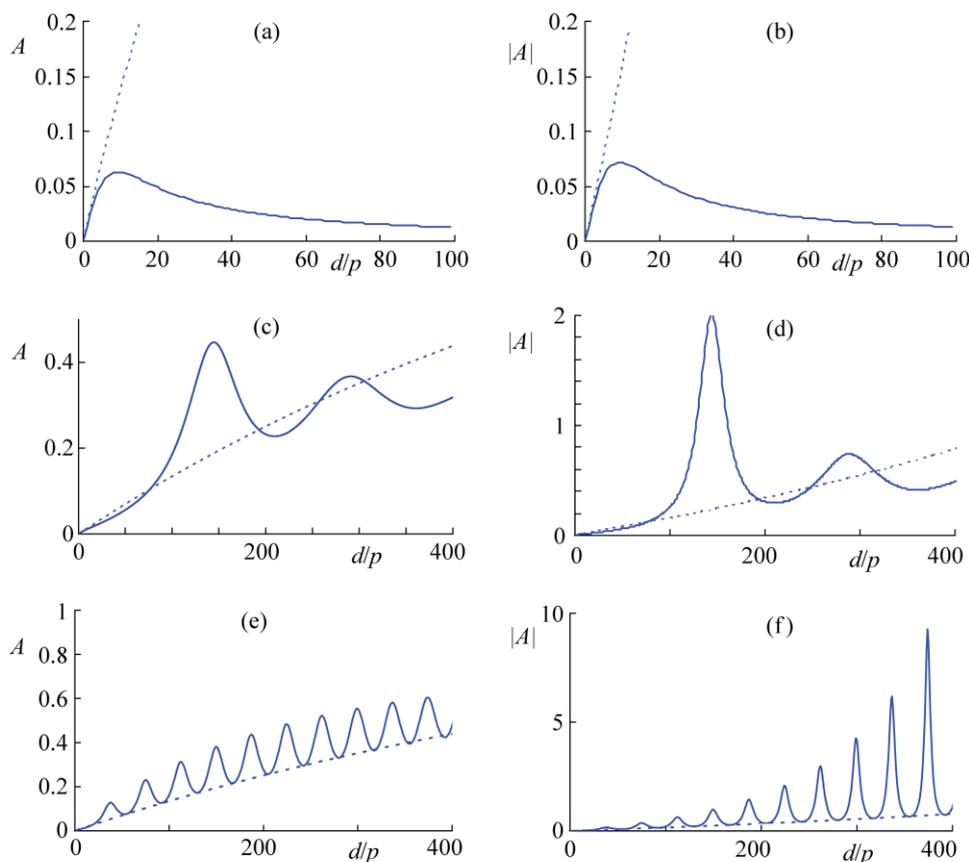


Рис.4. Зависимость поглощения A и эмиссии $|A|$ от толщины слоя ХЖК (параметра d/p): (a,b) $\lambda = 615$ нм, (c,d) $\lambda = 614.638$ нм), (e,f) $\lambda = 612$ нм. Падающий на слой свет имеет поляризацию, совпадающую с дифрагирующей (сплошные кривые) и недифрагирующей (штриховые кривые) СП: (a) $\varepsilon_1'' = 0.001$, $\varepsilon_2'' = 0$ (b) $\varepsilon_1'' = -0.001$, $\varepsilon_2'' = 0$, (c,e) $\varepsilon_1'' = \varepsilon_2'' = 0.0005$, (d,f) $\varepsilon_1'' = \varepsilon_2'' = -0.0005$.

Мы также исследовали влияние толщины слоя на поглощение и эмиссию. На рис.3 представлены эволюции спектров поглощения A (a,c,e) и эмиссии $\ln(|A|)$ (b,d,f) при увеличении толщины слоя ХЖК. Рис.1a и b соответствуют случаю изотропного поглощения и усиления, рис.1c и d – случаю, когда поглощение и усиление обусловлены введением мнимой части только у диэлектрической проницаемости, параллельной локальному директору ($\gamma \varepsilon_1$) и рис.1e и f – случаю, когда поглощение и усиление обусловлены введением мнимой части только у диэлектрической проницаемости, перпендикулярной локальному директору ($\gamma \varepsilon_2$).

На рис.4 представлены зависимости поглощения A и эмиссии $|A|$ от толщины слоя ХЖК (параметр d/p) на длине волны $\lambda = 615$ нм внутри ФЗЗ (a,b), вне ФЗЗ в непосредственной близости к ней на длине волны $\lambda = 614.6$ нм (c,d), а также вдали от ФЗЗ на длине волны $\lambda = 612$ нм (e,f). Падающий на слой свет имеет поляризацию, совпадающую с дифрагирующей (сплошные кривые) и недифрагирующей (штриховые кривые) СП. Рис.4a и b соответствуют случаям анизотропного поглощения и усиления, а остальные – изотропным.

Внутри ФЗЗ при анизотропном поглощении (усилении) величина A ($|A|$) для света с дифрагирующей СП сначала быстро увеличивается, а затем уменьшается (см. [33]), тогда как для света с недифрагирующей СП обе они монотонно увеличиваются. Вне ФЗЗ при изотропном поглощении (усилении) величина A ($|A|$) осциллирует, причем, на длинах волн, близких к ФЗЗ, значение A ($|A|$) на первом максимуме больше, чем на остальных, тогда как при удалении от ФЗЗ имеем обратную картину. Отметим также, что если при наличии поглощения значения величины A на максимуме и минимуме отличаются друг от друга сравнительно мало, то при усилении эти отличия значительны. Это выражается также в том, что в плоскости $(\lambda, d/p)$ вблизи ФЗЗ появляются темные дискретные точки, где имеет место сильная эмиссия на модах, определяемых уравнением (1) (см. рис.3).

Перейдем к результатам исследования влияния локальной анизотропии преломления на поглощение и эмиссию. На рис.5 представлены спектры поглощения (a) и эмиссии (b) при различных значениях $\Delta = (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)/2$.

Как видно из рисунка, при слабой локальной анизотропии значение величины A ($|A|$) на первом коротковолновом минимуме дифракционного отражения больше, чем на соответствующем длинноволновом минимуме. По мере увеличения анизотропии значение величины A ($|A|$) на минимумах дифракционного отражения увеличивается. Однако, начиная с некоторого значения анизотропии преломления, величина A ($|A|$) на первых минимумах дифракционного отражения начинает уменьшаться, причем, это критическое значение Δ для коротковолновых минимумов дифракционного отражения меньше, чем для длинноволновых. Вследствие этого, начиная с некоторого значения Δ , значение величины A ($|A|$) на первом коротковолновом минимуме дифракционного отражения становится меньше, чем на соответствующем длинноволновом минимуме. При дальнейшем увеличении Δ значение величины A ($|A|$) на втором мини-

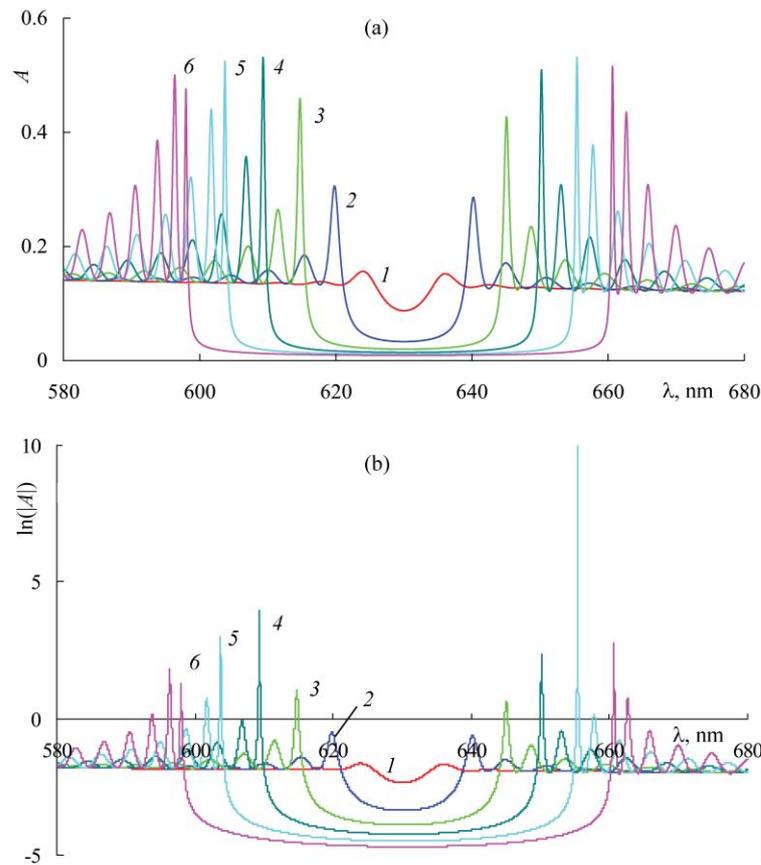


Рис.5. Спектры поглощения (а) и эмиссии (b) при различных значениях $\Delta = (\epsilon_1 - \epsilon_2)/2$, $d = 150\rho$. При наличии поглощения $\epsilon''_1 = \epsilon''_2 = 0.001$, а при наличии усиления $\epsilon''_1 = \epsilon''_2 = -0.001$. (Кривая 1) $\Delta = 0.004$, (кривая 2) $\Delta = 0.008$, (кривая 3) $\Delta = 0.012$, (кривая 4) $\Delta = 0.016$, (кривая 5) $\Delta = 0.02$, (кривая 6) $\Delta = 0.024$.

муме дифракционного отражения становится больше, чем на первом. По мере увеличения Δ увеличивается номер минимума дифракционного отражения, на котором наблюдается максимальное поглощение (эмиссия).

4. Заключение

Мы исследовали особенности поглощения и эмиссии для конечного слоя ХЖК при минимальном влиянии диэлектрических границ. Полученные результаты имеют общий характер и могут иметь место также для хиральных ФК других типов, а также для хиральных ФК на основе метаматериалов. Мы изучали особенности влияния различных механизмов дифракции в хиральных ФК на поглощение и эмиссию. Мы показали, в частности, что ответ на вопрос о том, на коротковолновом или длинноволновом минимуме дифракционного отражения наблюдается максимальное поглощение (эмиссия), зависит также от ло-

кальной анизотропии преломления среды.

Выражаю благодарность Армянскому национальному фонду науки и образования за частичную финансовую поддержку (ANSEF грант Opt-3517).

ЛИТЕРАТУРА

1. E. Yablonovich. Phys. Rev. Lett., **58**, 2059 (1987).
2. O. Painter, R.K. Lee, et al. Science, **284**, 1819 (1999).
3. M. Meier, A. Mekis, et al. Appl. Phys. Lett., **74**, 7 (1999).
4. H. Altug, D. Englund, J. Vuckovic. Nature Physics, **2**, 484 (2006).
5. P. Lodahi, A.F. van Driel, et al. Nature (London), **430**, 654 (2004).
6. R.V. Nair, A.K. Tiwari, S. Mujumdar, B.N. Jagatap. Phys. Rev. A, **85**, 023844 (2012).
7. M. Bobrovsky, T.F. Krauss, et al. Appl. Phys. Lett., **75**, 1036 (1999).
8. C. Santori, D. Fattal, et al. Nature (London), **419**, 594 (2002).
9. J. Kim, O. Benson, H. Kan, Y. Yamamoto. Nature (London), **397**, 500 (1999).
10. P. Michler, A. Kiraz, et al. Science, **290**, 2282 (2000).
11. A. Kuhn, M. Henric, G. Rempe. Phys.Rev.Lett., **89**, 067901 (2002).
12. M. Gratzel. Nature (London), **414**, 338 (2001).
13. L. Zeng, P. Bermel, Y. Yi, et al. Appl. Phys. Lett., **93**, 221105 (2008).
14. А.Н. Gevorgyan, А. Kocharian, G.A. Vardanyan. Opt. Commun., **259**, 455 (2006).
15. А.Н. Gevorgyan, M.Z. Harutyunyan. Phys. Rev. E, **76**, 031701 (2007).
16. R. Nityananda, U.D. Kini, S. Chandrasekhar, et al. Proc. Intern. Liquid Cryst. Conf. Pramana Suppl., Bangalore, **1**, 325 (1975).
17. S. Chandrasekhar, G.S. Ranganath, K.A. Suresh. Proc. Intern. Liquid Cryst. Conf. Pramana Suppl., Bangalore, **1**, 341 (1975).
18. В.А. Беляков, В.Е. Дмитриенко. ФТТ, **18**, 2880 (1976).
19. R. Dreher, G. Meier, A. Saure. Mol. Cryst. Liquid Cryst., **13**, 17 (1971).
20. Е.А. Suresh. Mol. Cryst. Liquid Cryst., **35**, 267 (1976).
21. С.Н. Аронишидзе, В.Е. Дмитриенко и др. Письма в ЖЭТФ, **32**, 19 (1980).
22. S. Endo, T. Kuribara, T. Akahane. Jpn. J. Appl. Phys., **22**, L499 (1983).
23. R. Barbet-Massin, P.-J. Pieranski. Phys. Lett., **45**, 799 (1984).
24. В.А. Беляков, А.А. Геворгян, О.С. Ерицян, Н.В. Шипов. ЖТФ, **57**, 1418 (1987).
25. H. Takazoe, G. Ouchi, et al. Jpn. J. Appl. Phys., **22**, 1080 (1983).
26. S. Yuvaraj, K.A. Suresh. JOSA, **A11**, 740 (1994).
27. А.А. Геворгян. Опт. и спектр., **87**, 132 (1999).
28. А.Н. Gevorgyan. Mol. Cryst. Liquid Cryst., **378**, 129 (2002).
29. А.А. Геворгян. ЖТФ, **75**, 96 (2005).
30. А.А. Геворгян. ЖТФ, **76**, 96 (2006).
31. E. Kallos, V. Yannopoulos, D.J. Photinos. Opt. Mat. Express, **2**, 1449 (2012).
32. I.V. Timofeev, V.G. Arkhipkin, et al. Opt. Mat. Express, **3**, 496 (2013).
33. Г.А. Варданын, А.А. Геворгян. Кристаллография, **42**, 723 (1997).
34. А.А. Геворгян. Опт. и спектр., **89**, 685 (2000).
35. А.А. Геворгян. Опт. и спектр., **92**, 237 (2002).
36. А.Н. Gevorgyan, К.В. Oganesyanyan, et al. Laser Phys. Lett., **10**, 125802 (2013).
37. V.A. Belyakov. Ferroelectrics, **344**, 163 (2006).
38. А.А. Геворгян. Опт. спектр., **108**, 92 (2010).

ՔԻՐԱԼ ՖՈՏՈՆԱՅԻՆ ԲՅՈՒՐԵՂԻ ՎԵՐՋԱՎՈՐ ՀԱՍՏՈՒԹՅԱՄԲ
ՇԵՐՏԻ ԿԼԱՆՈՒՄԸ ԵՎ ԷՄԻՍԻԱՆ

Ա.Հ. ԳԵՎՈՐԳՅԱՆ

Ուսումնասիրված են վերջավոր հաստությամբ խոլեստերինային հեղուկ բյուրեղի շերտի կլանման և էմիսիայի առանձնահատկությունները: Հետազոտված են կլանումը և ուժեղացումը բնութագրող պարամետրերի, ինչպես նաև շերտի հաստության և լոկալ դիէլեկտրային անիզոտրոպիայի ազդեցությունը կլանման և էմիսիայի վրա: Մասնավորապես ցույց է տրված, որ ուժեղացումը բնութագրող x' պարամետրի մեծացումը բերում է էմիսիայի մեծացմանը, սակայն (λ , x') հարթության մեջ կան կետեր, որտեղ էմիսիան ընդունում է առավելագույն արժեքներ (λ -ն ընկնող լույսի ալիքի երկարությունն է): Այդ կետերը որոշում են ուժեղացման գործակցի այն արժեքները, որոնց դեպքում տեղի ունի լազերային գեներացիա:

ABSORPTION AND EMISSION OF A FINITE LAYER
OF CHIRAL PHOTONIC CRYSTAL

A.H. GEVORGYAN

Peculiarities of absorption and emission of a finite layer of cholesteric liquid crystal are investigated. The influence of changes of parameters characterizing absorption and amplification, and also layer thickness and local dielectric anisotropy on absorption and emission are studied. In particular, it is shown that at increase of the parameter x' characterizing amplification emission increase too, but in plane (λ , x') there are discrete points where emission have maximum values (λ is the wavelength of incident light). These points define critical values of amplification at which laser generation takes place.

УДК 535.14

ДИНАМИКА КОРРЕЛЯЦИИ ФЛУКТУАЦИЙ КВАДРАТУРНЫХ АМПЛИТУД И КОРРЕЛЯЦИИ ФЛУКТУАЦИЙ ЧИСЛА ФОТОНОВ МОД ПОЛЯ В ПРОЦЕССЕ ВНУТРИРЕЗОНАТОРНОЙ ГЕНЕРАЦИИ ТРЕТЬЕЙ ГАРМОНИКИ

С.Т. ГЕВОРГЯН^{1*}, М.С. ГЕВОРГЯН^{1,2}

¹Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак, Армения

²Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия

* e-mail: saribek@ipr.sci.am, saribek.gevorgyan@gmail.com

(Поступила в редакцию 10 сентября 2014 г.)

Для процесса внутрирезонаторной генерации третьей гармоники исследована динамика корреляционной функции квантовых флуктуаций квадратурных амплитуд, а также динамика корреляционной функции квантовых флуктуаций числа фотонов фундаментальной моды и моды третьей гармоники. Показано, что в случае эволюции системы из начальных вакуумных состояний обеих мод в область больших времен взаимодействия обе корреляционные функции стремятся к стационарному значению. Показано, что эти корреляции сильно зависят от коэффициента нелинейной связи между модами. В случае малых коэффициентов связи корреляция флуктуаций квадратурных амплитуд и эволюции числа фотонов мала. При увеличении коэффициента связи обе корреляции растут (состояния подсистем начинают перепутываться по соответствующим переменным). При дальнейшем росте коэффициента связи корреляция флуктуаций квадратурных амплитуд стремится к исчезновению (перепутанность состояний подсистем по квадратурным амплитудам исчезает), а корреляция флуктуаций числа фотонов не исчезает (подсистемы остаются перепутанными по переменным числа фотонов).

1. Введение

Квантовая динамика процесса внутрирезонаторной генерации третьей гармоники очень мало исследована. В работе [1] в положительном Р-представлении получены уравнения Ланжевена для стохастических амплитуд мод поля для процесса генерации третьей гармоники. В полуклассическом представлении найдена точка бифуркации системы и показано, что выше этой точки полуклассические значения числа фотонов взаимодействующих мод переходят в режим автоколебания. Далее в работе [2] выше точки бифуркации системы в положительном Р-представлении исследованы функции распределения фаз фундаментальной моды и моды третьей гармоники. Показано, что функции распределения имеют двухкомпонентную структуру. Исследованы также функции совместного распределения числа фотонов и фаз взаимодейст-

вующих мод. Показано, что при переходе системы из устойчивой области в неустойчивую картина фазового согласования мод резко меняется. В неустойчивой области взаимодействия функция совместного распределения фаз вместо пика в точке, определяющей классическое согласование фаз, имеет яму, которая показывает, что в этой области взаимодействия вероятность реализации классического согласования фаз равна нулю. В работе [3] выше точки бифуркации оптической системы в положительном Р-представлении исследованы функции распределения числа фотонов фундаментальной моды и моды третьей гармоники, а также совместное распределение числа фотонов этих мод. Показано, что при переходе системы из устойчивой области в неустойчивую вышеуказанные функции из однокомпонентной структуры переходят в двухкомпонентную. В работе [4] с помощью метода “Монте Карло волновая функция” [5] исследована динамика функции Вигнера, квантовой энтропии и числа фотонов взаимодействующих мод при развитии системы из начальных вакуумных состояний фундаментальной моды и моды третьей гармоники. Показано, что функции Вигнера мод стационарного состояния системы сильно зависят от коэффициента нелинейной связи между модами и амплитуды возмущения фундаментальной моды извне. В работе [6] для процесса внутривибраторной генерации третьей гармоники в области неустойчивого поведения системы в случае развития взаимодействующих мод из начальных когерентных состояний исследована квантовая динамика состояния поля. Показано, что в этом случае функции Вигнера состояний мод и средние значения квадратурных амплитуд полей могут иметь осцилляции, которые исчезают при переходе системы в устойчивую область.

В настоящей работе методом “Монте Карло волновая функция” исследуется корреляция квантовых флуктуаций квадратурных амплитуд, а также корреляция квантовых флуктуаций числа фотонов фундаментальной моды и моды третьей гармоники в случае развития из начальных вакуумных состояний обеих мод системы. Исследована зависимость этих величин от коэффициента нелинейной связи между модами.

2. Нелинейная система, основные уравнения и алгоритмы вычисления

Мы рассматриваем модель генерации третьей гармоники внутри двухмодового резонатора. Нелинейная среда помещена внутрь резонатора, который настроен на частоты фундаментальной моды ω_1 и моды третьей гармоники с частотой ω_2 , где $\omega_2 = 3\omega_1$. Фундаментальная мода резонансно возмущается внешним классическим полем. Уравнение матрицы плотности этой оптической системы можно представить в следующем виде:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = (i\hbar)^{-1} [H_{sys}, \rho] + L(\rho), \quad (1)$$

где

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = (i\hbar)^{-1} [H_{\text{sys}}, \rho] + L(\rho), \quad (2)$$

$$L(\rho) = \sum_{i=1}^2 \frac{\gamma_i}{2} (2a_i \rho a_i^\dagger - \rho a_i^\dagger a_i - a_i^\dagger a_i \rho). \quad (3)$$

Здесь a_i и a_i^\dagger ($i=1,2$) – операторы уничтожения и рождения фотонов фундаментальной моды и моды третьей гармоники, соответственно, χ – коэффициент связи между модами, пропорциональный нелинейной восприимчивости $\chi^{(3)}$ среды, E – классическая амплитуда возмущающего поля на частоте ω_1 , γ_i ($i=1,2$) – коэффициенты затухания взаимодействующих мод через зеркала резонатора. В выражении (2) фаза возмущающего поля для простоты опущена.

Исследуем динамику нормированной корреляционной функции флуктуаций квадратурных амплитуд фундаментальной моды и моды третьей гармоники

$$g_x(t) = \frac{\langle ((x_1(t) - \langle x_1(t) \rangle) + (x_2(t) - \langle x_2(t) \rangle))^2 \rangle}{(\langle x_1(t)^2 \rangle - \langle x_1(t) \rangle^2) + (\langle x_2(t)^2 \rangle - \langle x_2(t) \rangle^2)}. \quad (4)$$

Здесь $x_i = (a_i + a_i^\dagger) / 2$, ($i=1,2$) квадратурные амплитуды фундаментальной моды и моды третьей гармоники, соответственно. Формулу (4) можно представить в следующем виде

$$g_x(t) = 1 + \frac{2\langle x_1(t)x_2(t) \rangle - \langle x_1(t) \rangle \langle x_2(t) \rangle}{\langle x_1(t)^2 \rangle - \langle x_1(t) \rangle^2 + \langle x_2(t)^2 \rangle - \langle x_2(t) \rangle^2}. \quad (5)$$

При отсутствии корреляции между флуктуациями квадратурных амплитуд взаимодействующих мод значение корреляционной функции (5) стремится к единице.

Исследуем динамику нормированной корреляционной функции флуктуаций числа фотонов фундаментальной моды и моды третьей гармоники

$$g_n(t) = \frac{\langle ((n_1(t) - \langle n_1(t) \rangle) + (n_2(t) - \langle n_2(t) \rangle))^2 \rangle}{(\langle n_1^2(t) \rangle - \langle n_1(t) \rangle^2) + (\langle n_2^2(t) \rangle - \langle n_2(t) \rangle^2)}. \quad (6)$$

Здесь $n_i = a_i^\dagger a_i$, ($i=1,2$) – операторы числа фотонов фундаментальной моды и моды третьей гармоники, соответственно. Формулу (6) можно представить в следующем виде

$$g_n(t) = 1 + \frac{2\langle n_1(t)n_2(t) \rangle - \langle n_1(t) \rangle \langle n_2(t) \rangle}{\langle n_1^2(t) \rangle - \langle n_1(t) \rangle^2 + \langle n_2^2(t) \rangle - \langle n_2(t) \rangle^2}. \quad (7)$$

При отсутствии корреляции между флуктуациями числа фотонов взаимодействующих мод значение корреляционной функции (7) стремится к единице.

Уравнение (1) для матрицы плотности оптической системы решаем чис-

ленным методом “Монте-Карло, волновая функция” [5]. В этом методе матрица плотности системы представляется как математическое ожидание матриц плотности квантовых траекторий. Каждая из этих матриц траекторий представляет чистое состояние и его можно найти с помощью некоторого алгоритма вычисления

$$\rho(t) = M \left\{ |\varphi^{(\alpha)}(t)\rangle \langle \varphi^{(\alpha)}(t)| \right\} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{(\alpha)} |\varphi^{(\alpha)}(t)\rangle \langle \varphi^{(\alpha)}(t)|. \quad (8)$$

Здесь (α) представляет номер траекторий, а N – число независимых квантовых траекторий. Алгоритм этого метода для вычисления одной квантовой траектории для процесса внутрирезонаторной генерации третьей гармоники приведен в работе [4].

Динамику системы исследуем для одинакового значения коэффициентов затухания мод в резонаторе ($\gamma_1 = \gamma_2 = \gamma$) в безразмерном времени $\tau = \gamma t$ и в безразмерных параметрах системы $\varepsilon = E / \gamma$, $k = \chi / \gamma$. Все вычисления выполнены в случае эволюции системы из начального вакуумного состояния фундаментальной моды и моды третьей гармоники.

3. Динамика корреляционных функций

В начале рассмотрим динамику корреляции флуктуаций квадратурных амплитуд, а также динамику корреляции флуктуаций числа фотонов фундаментальной моды и моды третьей гармоники в случае малого коэффициента нелинейной связи между взаимодействующими модами ($k = 0.01$). На рис.1 пред-

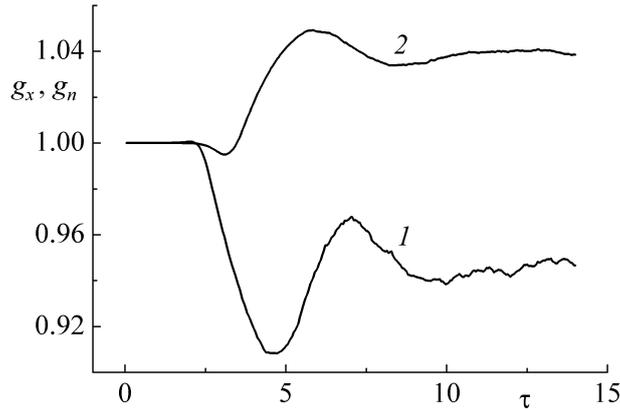


Рис.1. Динамика корреляционной функции флуктуаций квадратурных амплитуд взаимодействующих мод (кривая 1) в случае слабой связи между модами $k = 0.01$ и для значения возмущения фундаментальной моды $\varepsilon = 3$. Кривая 2 представляет динамику корреляции флуктуаций числа фотонов этих мод для тех же значений параметров системы. Каждая из функций вычислена с помощью 5000 квантовых траекторий оптической системы.

ставлена динамика этих функций для значения параметра $\varepsilon = 3$. Кривая 1 представляет динамику корреляционной функции флуктуаций квадратурных амплитуд фундаментальной моды и моды третьей гармоники. Кривая 2 представляет динамику корреляционной функции флуктуаций числа фотонов этих мод. В области больших времен взаимодействия обе функции очень близки к единице, что свидетельствует об отсутствии перепутанности между состояниями фундаментальной моды и моды третьей гармоники как по переменным квадратурной амплитуды, так и по переменным числа фотонов для этого случая.

На рис.2 представлена динамика корреляционной функции флуктуаций квадратурных амплитуд (кривая 1) и динамика корреляционной функции флуктуаций числа фотонов (кривая 2) взаимодействующих мод для того же значения возмущения фундаментальной моды, что и в предыдущем случае $\varepsilon = 3$, но при достаточно большом коэффициенте связи между модами $k = 0.5$. В этом случае корреляционные функции флуктуаций квадратурных амплитуд и флуктуаций числа фотонов в стационарной области много меньше единицы. Это показывает, что состояние фундаментальной моды и моды третьей гармоники стали перепутанными как по переменным квадратурной амплитуды, так и по переменным числа фотонов.

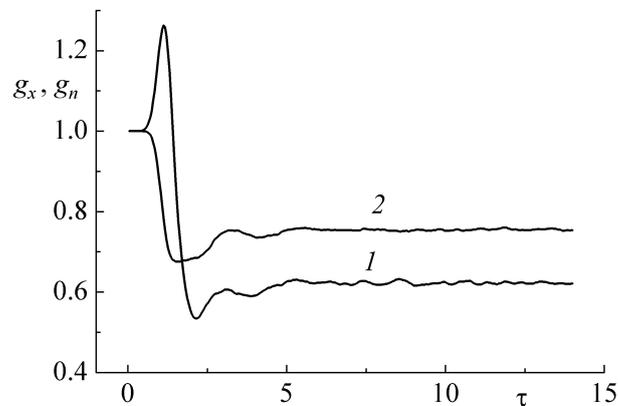


Рис.2. Динамика корреляционной функции флуктуаций квадратурных амплитуд (кривая 1) для значений параметров системы $k = 0.5$ и $\varepsilon = 3$. Кривая 2 представляет динамику корреляции флуктуаций числа фотонов этих мод для тех же значений параметров системы. Каждая из функций вычислена с помощью 5000 квантовых траекторий оптической системы.

Дальнейшее увеличение коэффициента связи между модами приводит не к уменьшению корреляционной функции квадратурных амплитуд, а, наоборот, к ее увеличению и стремлению к единице значения этой функции. Это указывает на уменьшение корреляции флуктуаций и уменьшение перепутанности состояний взаимодействующих мод по переменным квадратурной амплитуды. В

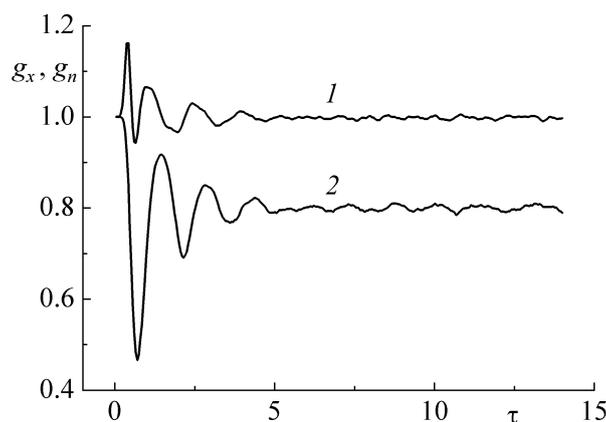


Рис.3. Динамика корреляционной функции флуктуаций квадратурных амплитуд взаимодействующих мод (кривая 1) в случае сильной связи между модами $k = 7.5$ и для значения возмущения $\varepsilon = 3$. Кривая 2 представляет динамику корреляции флуктуаций числа фотонов этих мод для тех же значений параметров системы. Каждая из функций вычислена с помощью 2000 квантовых траекторий оптической системы.

области больших значений коэффициента нелинейной связи между модами, в отличие от корреляционной функции флуктуаций квадратурных амплитуд, корреляционная функция флуктуаций числа фотонов взаимодействующих мод не стремится к единице, а остается достаточно отличной от единицы. Это указывает на то, что в этой области взаимодействия взаимодействующие моды остаются перепутанными по переменным числа фотонов. На рис.3 представлена динамика корреляционной функции флуктуаций квадратурных амплитуд (кривая 1) и динамика корреляционной функции флуктуаций числа фотонов (кривая 2) взаимодействующих мод для того же значения возмущения фундаментальной моды, что и в предыдущих случаях $\varepsilon = 3$, но в случае очень большого коэффициента нелинейной связи между модами $k = 7.5$. Представленные на рис.3 кривые корреляционных функций хорошо демонстрируют вышеуказанное явление.

ЛИТЕРАТУРА

1. S.T. Gevorkyan, G.Yu. Kryuchkyan, K.V. Kheruntsyan. Opt. Commun, **134**, 440 (1997).
2. S.T. Gevorkyan. Phys. Rev. A, **58**, 4862 (1998).
3. С.Т. Геворкян, М.С. Геворкян. Оптика и спектроскопия, **107**, 128 (2009).
4. С.Т. Геворкян, М.С. Геворкян. Оптика и спектроскопия, **112**, 502. (2012).
5. K. Molmer, Y. Gastin, J. Dalibard. JOSA B, **10**, 1447 (1992).
6. С.Т. Геворкян, М.С. Геворкян. Оптика и спектроскопия, **113**, 576 (2012).

ԴԱՇՏԻ ՄՈՂԵՐԻ ՔԱՌԱԿՈՒՄԱՅԻՆ ԱՄՊԼԻՏՈՒԴՆԵՐԻ ՖԼՈՒԿՏՈՒԱՑԻԱՆԵՐԻ
ԵՎ ՖՈՏՈՆՆԵՐԻ ԹՎԵՐԻ ՖԼՈՒԿՏՈՒԱՑԻԱՆԵՐԻ ԿՈՐԵԼՅԱՑԻԱՆԵՐԻ
ԴԻՆԱՄԻԿԱՆ ՆԵՐՈՒԶՈՆԱՏՈՐԱՑԻՆ ԵՐՐՈՐԴ ՀԱՐՄՈՆԻԿԻ
ԳԵՆԵՐԱՑԻԱՑԻ ԵՐԵՎՈՒՅԹՈՒՄ

Ս.Թ. ԳԵՎՈՐԳՅԱՆ, Մ.Ս. ԳԵՎՈՐԳՅԱՆ

Երրորդ հարմոնիկի ներոեզոնատորային երևույթի համար հետազոտված են ֆունդամենտալ մոդի և երրորդ հարմոնիկի մոդի քառակուսային ամպլիտուդների քվանտային ֆլուկտուացիաների, ինչպես նաև ֆոտոնների թվերի ֆլուկտուացիաների կորելյացիոն ֆունկցիաները: Ցույց է տրված, որ համակարգի երկու մոդերի՝ վակուումային սկզբնական վիճակից զարգացման դեպքում փոխազդեցության մեծ ժամանակների տիրույթում երկու կորելյացիոն ֆունկցիաներն էլ ձգտում են ստացիոնար արժեքի: Ցույց է տրված, որ այդ կորելյացիաները խիստ կախված են մոդերի ոչ գծային կապի գործակցից: Փոքր կապի գործակցիցների պարագայում քառակուսային ամպլիտուդների ֆլուկտուացիաների, ինչպես նաև ֆոտոնների թվերի ֆլուկտուացիաների կորելյացիաները փոքր են: Կապի գործակցի աճի դեպքում երկու կորելյացիաներն էլ աճում են (ենթահամակարգերի վիճակները սկսում են խճճվել համապատասխան փոփոխականներով): Կապի գործակցի հետագա աճի դեպքում քառակուսային ամպլիտուդների ֆլուկտուացիաների կորելյացիան վերանում է (ենթահամակարգերի վիճակների խճճվածությունը քառակուսային ամպլիտուդով վերանում է), իսկ ֆոտոնների թվերի ֆլուկտուացիաների կորելյացիան չի վերանում (ենթահամակարգերը մնում են ֆոտոնների թվերի փոփոխականներով խճճված):

DYNAMICS OF CORRELATION OF QUADRATURE AMPLITUDES
FLUCTUATIONS AND OF CORRELATION OF PHOTON NUMBER
FLUCTUATIONS OF FIELD MODES IN INTRACAVITY
THIRD-HARMONIC GENERATION PROCESS

S.T. GEVORGYAN, M.S. GEVORGYAN

For the process of intracavity third-harmonic generation, the dynamics of the correlation function of quantum fluctuations of the quadrature amplitudes, as well as the dynamics of correlation function of quantum fluctuations of the number of photons of the fundamental mode and the mode of the third harmonic are studied. It is shown that in the case of evolution of the system from initial vacuum states of both modes, both correlation functions converges to stationary values. It is shown that these correlations highly depend on the coefficient of nonlinear coupling between the modes. In the case of small coupling coefficients the correlation of fluctuations of the quadrature amplitudes as well as the correlation of fluctuations of the number of photons are weak. With the growth of the coupling coefficient both correlations increase (states of the subsystems become more entangled by the corresponding variables). With the further increase of the coupling coefficient correlation of fluctuations of the quadrature amplitudes tends to disappear (the entanglement of subsystem states related to the quadrature amplitudes disappears), and the correlation of fluctuations of the number of photons does not disappear (subsystems remain entangled over the photon-number variable).

УДК 535.14

ТРЕХФОТОННЫЕ СОСТОЯНИЯ В ФАЗОВОМ ПРОСТРАНСТВЕ

Т.В. ГЕВОРГЯН

Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак

e-mail: t_gevorgyan@ysu.am

(Поступила в редакцию 24 августа 2013 г.)

Рассмотрена каскадная параметрическая конверсия фотонов вниз в оптическом резонаторе в импульсном режиме для генерации трехфотонных состояний. Исследованы распределения числа фотонов и функции Вигнера для моды субгармоники в квантовом приближении. Показана трехфотонная структура моды субгармоники и ее трехфазная локализация в фазовом пространстве.

1. Введение

Одним из актуальных направлений квантовой оптики является приготовление и исследование перепутанных многофотонных состояний [1,2]. К настоящему времени двухфотонные перепутанные состояния хорошо изучены, а также разработаны схемы для эффективной генерации пары фотонов, включая параметрическое расщепление фотонов [3-5] и четырехволновое смешение [6,7]. Рождение фотонных пар можно реализовать и на атомных переходах, в частности, на двухуровневых атомах в бихроматическом поле [8-11], а также в процессе резонансной флуоресценции на холодном ионе в ловушке [12]. Что касается получения трехфотонных состояний, то к настоящему времени предложены различные схемы для их генерации: в нелинейном кристалле с восприимчивостью третьего порядка [13,14], в каскадных спонтанных процессах второго порядка [15], включая структурированные нелинейные материалы [16] и каскадные процессы в оптическом резонаторе [17-19], в четырехволновом смешении [20] и в тройном Комpton-эффекте на свободном электроне [21]. Недавно генерация триплета фотонов была реализована с помощью двух фотонных пар в каскадной схеме конверсии вниз в двух последовательных нелинейных кристаллах [22]. Четырехфотонные состояния в основном получены путем комбинирования двух фотонных пар (см. напр., [1,23]).

Настоящая работа является продолжением работ [16,17]. В ней рассмотрена генерация трехфотонных состояний в процессе каскадной параметрической конверсии вниз (КПКВ) в присутствии резонатора в импульсном режиме. Трехфотонные состояния на частоте $\omega_1 \cong \omega/3$ возникают в каскадных процессах расщепления фотона на пару фотонов $\omega \leftrightarrow \omega_1 + \omega_2$, и далее $\omega_2 \leftrightarrow \omega_1 + \omega_1$.

Эта схема может содержать два нелинейных кристалла с нелинейностями второго порядка или один кристалл, в котором одновременно выполняются два условия квазифазового синхронизма [16]. Цель работы состоит в исследовании моды субгармоники $\omega_1 \cong \omega/3$ в импульсном режиме генерации, в котором проявляется трехфотонная структура моды резонатора. Эти вопросы рассматриваются в рамках метода матрицы плотности для мод резонатора на основе вычисления распределения числа фотонов и функции Вигнера для моды субгармоники.

2. Каскадная параметрическая конверсия вниз

Рассмотрим каскадную схему получения трехфотонных состояний в присутствии оптического резонатора под действием последовательности лазерных импульсов с гауссовскими амплитудами. Эта система включает две моды поля излучения на частотах $\omega_1 = \omega/3$ и $\omega_2 = 2\omega/3$, которые возникают под действием поля лазера на частоте ω в двухмодовом резонаторе вследствие последовательности двух параметрических процессов преобразования: $\omega \leftrightarrow \omega_1 + \omega_2$ и $\omega_2 \leftrightarrow \omega_1 + \omega_1$. Моды субгармоник имеют одинаковые поляризации и распространяются в одинаковом направлении. Эффективный гамильтониан взаимодействия имеет следующий вид:

$$H_0 = i\hbar\chi(Ea_1^+ a_2^+ - E^* a_1 a_2) + i\hbar k(a_1^{+2} a_2 - a_1^2 a_2^+), \quad (1)$$

где

$$E(t, z) = E_L f(t) e^{-i(\omega t - k_L z)}, \quad f(t) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-i(t-t_0 - n\tau)^2/T^2},$$

T – длительность импульсов и τ – временной интервал между импульсами. Здесь χ и k являются эффективными постоянными взаимодействия для процессов $\omega \leftrightarrow \omega_1 + \omega_2$ и $\omega_2 \leftrightarrow \omega_1 + \omega_1$, соответственно, и пропорциональны восприимчивостям $\chi^{(2)}$, a_1 и a_2 – есть операторы уничтожения мод субгармоник ω_1 и ω_2 , соответственно, E_L – амплитуда поля накачки на частоте ω . Рассматривается I-тип фазового синхронизма, когда фотоны имеют одинаковые поляризации.

Для каскадной параметрической генерации предлагается следующая схема оптического параметрического генератора (ОПГ), в которой используется круговой резонатор. В этой схеме вход и выход резонатора осуществляются на одном из зеркал резонатора, и только фундаментальная мода возмущается внешним к резонатору лазерным полем. Амплитуды мод в резонаторе α_1 и α_2 связаны с амплитудами поля вне резонатора известными соотношениями. Так, амплитуда внешнего поля $\langle \alpha^{\text{in}} \rangle$ вне резонатора связана с амплитудой фундаментальной моды в резонаторе следующим образом: $\langle \alpha^{\text{in}} \rangle = E/\sqrt{2\gamma}$. Тогда число фотонов в единицу времени на входе в резонатор равно $n^{\text{in}} = |E|^2/2\gamma$, где γ есть коэффициент затухания моды. Амплитуды мод субгармоник, которые генерируются из вакуумных состояний, связаны с амплитудами полей на выхо-

де из резонатора следующим образом: $\alpha_i^{\text{out}} = \sqrt{2\gamma_i} \alpha_i$ ($i = 1, 2$). При этом число фотонов в единицу времени на выходе связано с числом фотонов в резонаторе следующим образом: $n_i^{\text{out}} = 2\gamma \langle n \rangle$.

Такая система является диссипативной из-за потерь на зеркалах резонатора и квантовых флуктуаций. По этой причине проблема решается в рамках численного моделирования уравнения для матрицы плотности, которая в этой работе записывается в форме метода квантовых траекторий (метода диффузии квантового состояния [24]) как среднее по квантовому ансамблю в следующей форме:

$$\rho(t) = M(|\psi_\xi\rangle\langle\psi_\xi|) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{\xi} |\psi_\xi(t)\rangle\langle\psi_\xi(t)|. \quad (2)$$

Здесь $|\psi_\xi(t)\rangle$ – стохастические состояния, удовлетворяющие уравнению

$$|d\psi_\xi\rangle = -\frac{i}{\hbar} H |\psi_\xi\rangle dt - \frac{1}{2} (L^\dagger L - 2\langle L^\dagger \rangle L + \langle L \rangle \langle L^\dagger \rangle) |\psi_\xi\rangle dt + (L - \langle L \rangle) |\psi_\xi\rangle d\xi, \quad (3)$$

где M обозначает усреднение по стохастическим переменным, $L = \sqrt{\gamma} a$ – оператор Линблада, ξ и $d\xi$ – стохастические переменные винеровского процесса с нормированным независимым белым шумом, которые удовлетворяют фундаментальным соотношениям $M(d\xi) = 0$, $M(d\xi, d\xi) = 0$, $M(d\xi, d\xi^*) = dt$. Приложения этого метода для численного исследования открытых квантово-оптических систем приведены, в частности, в работах [25-38].

Детальный анализ этого процесса трехфотонного излучения в случае монохроматического поля накачки $f(t) = 1$ представлен в работе [16]. Приведем некоторые результаты для рассмотренной выше схемы ОПГ в импульсном режиме и в полуклассическом приближении.

Характерной особенностью этой каскадной схемы является сравнительно низкое значение порога генерации, который, как показано в работе [39], равен

$$E_L \geq \overline{E_{th}} = \frac{\tau}{T\sqrt{\pi}} E_{th} = \frac{\tau}{T\sqrt{\pi}} \frac{2}{3\chi} \sqrt{2\gamma_1\gamma_2}, \quad (4)$$

где $E_{th} = 2\sqrt{2\gamma_1\gamma_2}/(3\chi)$ – порог для КПКВ с непрерывной накачкой. Далее мы считаем, что коэффициенты затухания мод равны, т.е. $\gamma_2 = \gamma_1 = \gamma$. Другой особенностью этой системы является то, что выше порога генерации каждая из мод субгармоник на частотах $\omega_1 \cong \omega/3$ и $\omega_2 \cong 2\omega/3$ имеет три состояния с одинаковыми числами фотонов и с разными фазами, соответственно: $\phi_1 = \Phi/3$, $\Phi/3 + 2\pi/3$, $\Phi/3 + 4\pi/3$ для моды (1) и $\phi_2 = 2\Phi/3$, $2\Phi/3 - 2\pi/3$, $2\Phi/3 + 4\pi/3$ для моды (2), где Φ – фаза поля накачки.

В настоящей работе мы приводим результаты для каскадной схемы под действием периодической последовательности лазерных гауссовских импульсов, ограничиваясь вычислениями распределения числа фотонов в моде и функ-

ции Вигнера для моды субгармоники ω_1 . Наша цель состоит в исследовании трехфотонной структуры и эффектов квантовой интерференции моды субгармоники, которые, как известно, проявляются как отрицательные области функции Вигнера в фазовом пространстве. Отметим, что вопросы контролирования квантовой динамики посредством взаимодействия системы с периодической последовательностью лазерных гауссовских импульсов были недавно рассмотрены для схем оптического параметрического генератора и диссипативного ангармонического осциллятора в работах [36, 38]. Рассмотренная каскадная схема может быть реализована также в тонких нелинейных световодах [40] или в полупроводниковых резонаторах, содержащих нелинейные наноструктуры [41].

3. Функция Вигнера для “трехфотонной” моды

Перейдем к исследованию функции Вигнера и распределения числа фотонов для моды ω_1 , используя уравнения для оператора плотности (2) и (3). Распределение фотонов для моды вычисляется как диагональный элемент $P_1(n) = \langle n | \rho_1(t) | n \rangle$, где $\rho_1 = S p_2(\rho)$ является матрицей плотности моды (1), которая получается из полной матрицы плотности путем усреднения по переменным второй моды. Вычисление функции Вигнера проводится по известной формуле

$$W(x, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \exp\left(-\frac{i}{\hbar} p\xi\right) \left\langle x + \frac{1}{2}\xi \left| \hat{\rho} \right| x - \frac{1}{2}\xi \right\rangle, \quad (5)$$

где $x = (a + a^+)/\sqrt{2}$ и $y = p = (a - a^+)/\sqrt{2i}$ – соответственно безразмерные координата и импульс моды. Необходимо отметить, что для данной схемы КПКВ в вычислениях учитываются гауссовские временные огибающие амплитуд лазерного поля, поэтому функция Вигнера и распределение числа фотонов являются нестационарными. Ниже рассматривается режим коротких гауссовских импульсов, для которых длительности импульсов являются намного меньше, чем обратные величины коэффициентов затухания мод. С другой стороны, мы предполагаем, что постоянные взаимодействия мод χ и k намного превышают коэффициенты затухания мод.

Результаты вычислений распределения числа фотонов и функций Вигнера моды $\omega_1 \cong \omega/3$ приведены на рис.1 для двух временных интервалов, которые сравнимы или превосходят длительности гауссовских импульсов накачки, однако являются меньше характерных временных интервалов процессов затухания. Рассмотрен случай двух последовательных импульсов с длительностью $T\gamma = 10^{-3}$, разделенных интервалом $\tau\gamma = 6 \times 10^{-3}$, здесь γ – коэффициент затухания мод. Результаты для распределения числа фотонов и функций Вигнера приведены для двух временных интервалов: $t = t_0 + 6.2 \times 10^{-3} \gamma^{-1}$ (рис.1а, б, в), что соответствует максимальному числу фотонов в первом импульсе, и $t = t_0 + 6.2 \times 10^{-2} \gamma^{-1}$ (рис.1г, д, е), что соответствует максимальному числу фотонов во втором импульсе. Распределения числа фотонов приведены на рис.1а, г.

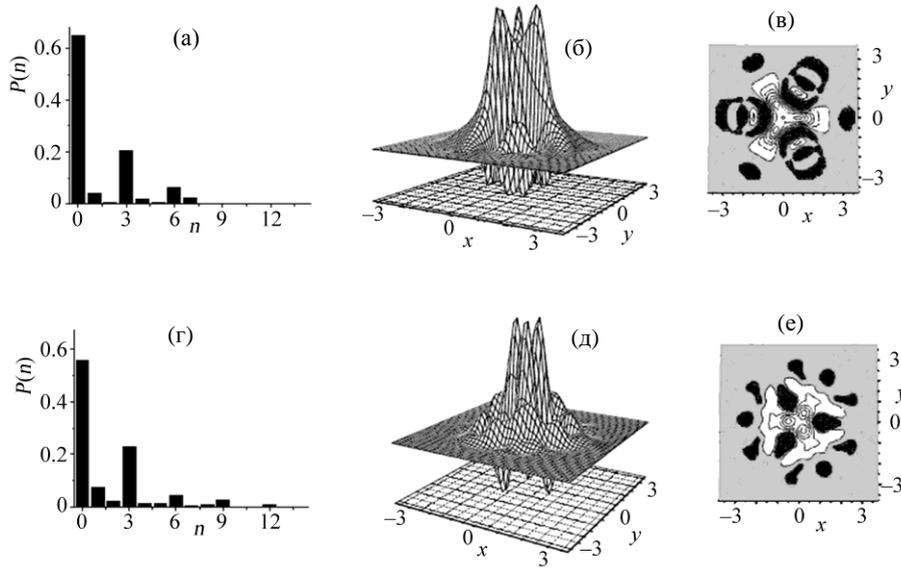


Рис.1. Распределение числа фотонов (а,г), функции Вигнера (б,д) и их контурные сечения (в,е) для моды $\omega_1 \cong \omega/3$ и различных временных интервалов $t = t_0 + 6.2 \times 10^{-3} \gamma^{-1}$ (а,б,в) и $t = t_0 + 6.2 \times 10^{-2} \gamma^{-1}$ (г,д,е). Другие параметры равны: $\chi_1/\gamma_1 = 200$, $\chi_2/\gamma_1 = 100$, $\gamma_2 = \gamma_1 = \gamma$, $T\gamma = 1 \times 10^{-3}$ и $\tau\gamma = 6 \times 10^{-3}$.

Легко заметить, что распределения числа фотонов указывают на трехфотонную структуру моды ω_1 , т.е. максимальные вероятностные значения числа фотонов отделены тремя фотонами.

Функции Вигнера в фазовом пространстве приведены на рис.1б, д, а соответствующие контурные сечения функций Вигнера на рис.1в, е. Можно заметить, что функции Вигнера в фазовом пространстве и контурные сечения описывают три фазовые компоненты моды, соответствующие трем состояниям моды субгармоники (1) с приведенными выше фазами $\phi_1 = \Phi/3, \Phi/3 + 2\pi/3, \Phi/3 + 4\pi/3$. Функция Вигнера имеет область отрицательных значений и проявляет характерную интерференционную картину в фазовом пространстве, которая, как известно, является проявлением квантовых эффектов. Области квантовой интерференции как отрицательные значения в фазовом пространстве отмечены на контурных сечениях функций Вигнера на фазовой плоскости черным цветом. Следует отметить, что эффекты интерференции имеют место только в рассматриваемом импульсном режиме для коротких интервалов времени и исчезают в стационарном режиме генерации согласно результатам, полученным в [16]. В этом режиме функция Вигнера для мод субгармоник положительна во всей области фазового пространства.

Автор выражает благодарность Г.Ю. Крючкяну за обсуждения и Государственному комитету науки Республика Армения за финансовую поддержку в рамках проекта No.13-1C031.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Jian-Wei Pan, Zeng-Bing Chen, Chao-Yang Lu, H. Weinfurter, A. Zeilinger, Marek Żukowski.** *Rev. Mod. Phys.*, **84**, 777 (2012).
2. **F. Dell'Anno, S. De Siena, F. Illuminati.** *Phys. Reports*, **428**, 53 (2006).
3. **D.N. Klyshko.** *JETP*, **77**, 222 (1993).
4. **G. Di Giuseppe, M. Atature, M.D. Shaw, A.V. Sergienko, B.E.A. Saleh, M.C. Teich.** *Phys. Rev. A*, **66**, 013801 (2002).
5. **A.B. U'Ren, R.K. Erdmann, M. de la Cruz-Gutierrez, I.A. Walmsley.** *Phys. Rev. Lett.*, **97**, 223602 (2006).
6. **O. Alibert, J. Fulconis, G.K.L. Wong, S.G. Murdoch, W.J. Wadsworth, J.G. Rarity.** *New J. Phys.*, **8**, 67 (2006).
7. **Q. Lin, F. Yaman, G.P. Agrawal.** *Optics Lett.*, **31**, 1, 2006.
8. **M. Jakob, G.Yu. Kryuchkyan.** *Phys. Rev. A*, **58**, 767 (1998).
9. **G.Yu. Kryuchkyan, M. Jakob, A.S. Sargsian.** *Phys. Rev. A*, **57**, 2091 (1998).
10. **M. Jakob, G.Yu. Kryuchkyan.** *Phys. Rev. A*, **57**, 1355 (1998).
11. **M. Jakob, G.Yu. Kryuchkyan.** *Phys. Rev. A*, **61**, 053823 (2000).
12. **M. Jakob, G. Yu. Kryuchkyan.** *Phys. Rev. A*, **59**, 2111 (1999).
13. **T. Felbinger, S. Schiller, J. Mlynek.** *Phys. Rev. Lett.*, **80**, 492 (1998).
14. **J. Douady, B. Boulanger.** *Opt. Lett.*, **29**, 2794 (2004).
15. **T.E. Keller, M.H. Rubin, Y. Shih, L.A. Wu.** *Phys. Rev. A*, **57**, 2076 (1998).
16. **D.A. Antonosyan, T.V. Gevorgyan, G.Yu. Kryuchkyan.** *Phys. Rev. A*, **83**, 043807 (2011).
17. **G.Yu. Kryuchkyan, N.T. Muradyan.** *Phys. Lett. A*, **286**, 113 (2001).
18. **G.Yu. Kryuchkyan, L.A. Manukyan, N.T. Muradyan.** *Opt. Com.*, **190**, 245 (2001).
19. **K.V. Kheruntsyan, G.Yu. Kryuchkyan, N.T. Mouradyan, K.G. Petrossian.** *Phys. Rev. A*, **57**, 535 (1998).
20. **J. Wen, E. Oh, S. Du.** *JOSA B*, **27**, Issue 6, A11 (2010).
21. **E. Lötstedt, U.D. Jentschura.** *Phys. Rev. Lett*, **108**, 233201 (2012).
22. **H. Haubel, D.R. Hamel, A. Fedrizzi, S. Ramelow, K.J. Resch, T. Jennewein.** *Nature Photonics Lett.*, **466**, 601 (2010).
23. **M. Eibl, S. Gaertner, M. Bourennane, C. Kurtsiefer, M. Zukowski, H. Weinfurter.** *Phys. Rev. Lett.*, **90**, 200403 (2003).
24. **N. Gisin, I.C. Percival.** *J. Phys. A*, **25**, 5677 (1992); **I.C. Percival.** *Quantum State Diffusion*, Cambridge, Cambridge University Press, 2000.
25. **R. Schack, T.A. Brunn.** *Comp. Phys. Commun.*, **102**, 210, (1997).
26. **S.M. Tan.** *J. Opt. B*, **1**, 424, (1999).
27. **S.T. Gevorgyan, G.Yu. Kryuchkyan, N.T. Muradyan.** *Phys. Rev. A*, **61**, 043805 (2000).
28. **H.H. Adamyany, S.B. Manvelyan, G.Yu. Kryuchkyan.** *Phys. Rev. A*, **63**, 022102 (2001).
29. **H.H. Adamyany, S.B. Manvelyan, G.Yu. Kryuchkyan.** *Phys. Rev. E*, **64**, 046219 (2001).
30. **G.Yu. Kryuchkyan, S.B. Manvelyan.** *Phys. Rev. Lett.*, **88**, 094101 (2002).
31. **G.Yu. Kryuchkyan, S.B. Manvelyan.** *Phys. Rev. A*, **68**, 013823 (2003).
32. **G.Yu. Kryuchkyan, L. A. Manukyan.** *Phys. Rev. A*, **69**, 013813 (2004).
33. **H.H. Adamyany, N.H. Adamyany, S.B. Manvelyan, G.Yu. Kryuchkyan.** *Phys. Rev. A*, **73**, 033810 (2006).
34. **H.H. Adamyany, G.Yu. Kryuchkyan.** *Phys. Rev. A*, **74**, 023810 (2006).
35. **A. Vukics, H. Ritsch.** *European Phys. J. D*, **44**, 585 (2007).
36. **N.H. Adamyany, H.H. Adamyany, G.Yu. Kryuchkyan.** *Phys. Rev. A*, **77**, 023820 (2008).

37. **T.V. Gevorgyan, A.R. Shahinyan, G.Yu. Kryuchkyan.** Phys. Rev. A, **79**, 053828 (2009).
38. **T.V. Gevorgyan, A.R. Shahinyan, G.Yu. Kryuchkyan.** Phys. Rev. A, **85**, 053802 (2012).
39. **T.V. Gevorgyan, G.Yu. Kryuchkyan.** Proc. SPIE, **8414**, 84140A-1 (2012).
40. **M. Corona, K. Garay-Palmett, A.B. U'Ren.** Phys. Rev. A, **84**, 033823 (2011).
41. **J. C. López-Carreño, H. Vinck-Posada.** Phys. Scripta, **T160**, 014027 (2014).

ԵՌԱՖՈՏՈՆ ՎԻՃԱԿՆԵՐԸ ՓՈԻԼԱՅԻՆ ՏԱՐԱԾՈՒԹՅՈՒՆՈՒՄ
Տ.Վ. ԳԵՎՈՐԳՅԱՆ

Դիտարկված է կասկադային պարամետրական ներքև կոնվերսիան օպտիկական ռեզոնատորում՝ իմպուլսային ռեժիմում եռաֆոտոն վիճակների գեներացման համար: Հետազոտված են ֆոտոնային թվի բաշխվածության և սուբհարմոնիկ մոդի Վիգների ֆունկցիաները քվանտային մոտեցմամբ: Ցույց է տրված սուբհարմոնիկ մոդի եռաֆոտոն կառուցվածքը և նրա եռափուլ լոկալիզացումը փուլային տարածությունում:

THREE-PHOTON STATES IN PHASE SPACE
T.V. GEVORGYAN

Intracavity cascaded parametric down-conversion in a pulsed regime is considered for production of three-photon states. In this way, photon number distributions as well as the Wigner functions are investigated in quantum approach. The three-photon structure of subharmonic mode and its three-phase localization in phase-space are shown.

УДК 535.343.1

ВЛИЯНИЕ ПЛЕНЕНИЯ ИЗЛУЧЕНИЯ НА ХАРАКТЕРИСТИКИ ИК ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ КРИСТАЛЛА YAG:Er^{3+}

В.Г. БАБАДЖАНЫАН, Р.Б. КОСТАНЫАН, П.Г. МУЖИКЯН*

Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак, Армения

*e-mail: pmuzhikyan@gmail.com

(Поступила в редакцию 23 июля 2014 г.)

Приведены результаты спектральных и кинетических исследований параметров люминесценции в области длин волн вблизи 1500 нм в кристалле YAG:Er^{3+} при лазерном возбуждении на длине волны 970 нм. Выявлено существенное влияние эффекта пленения излучения на кинетику затухания люминесценции на переходе ${}^4I_{13/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$ ионов Er^{3+} . С применением техники диафрагм с отверстиями малых диаметров, устанавливаемых непосредственно перед образцами, исследованы зависимости времени затухания регистрируемой люминесценции от доли плененного излучения. В качестве времени жизни первого возбужденного уровня ${}^4I_{13/2}$ ионов Er^{3+} в данном кристалле принято значение времени распада люминесценции с него при регистрации диафрагмой с диаметром отверстия 100 мкм. При тех же условиях зарегистрирован спектр люминесценции исследуемого материала, представляющий интерес для получения генерации в области длин волн вблизи 1500 нм, широко востребованной в системах оптической связи.

1. Введение

Эффект пленения излучения обусловлен безызлучательными и радиационными процессами переноса энергии возбуждения. Безызлучательные процессы переноса энергии возбуждения носят локальный характер и эффективны при малых расстояниях между взаимодействующими примесными ионами в кристаллах (порядка нескольких нанометров), т.е. имеют место при довольно высоких концентрациях активирующих примесей и зависят от плотности мощности оптического возбуждения. Процессы радиационного пленения излучения (РПИ) обусловлены многократными актами поглощения и последующего переизлучения атомами или ионами среды фотонов с одной и той же частотой [1-4]. В различных средах РПИ исследуется на протяжении длительного времени ввиду его существенного (а, в определенных случаях, и доминирующего) влияния на измеряемые величины таких спектроскопических характеристик материалов, как времена жизни энергетических уровней, вероятности спонтанных и вынужденных переходов, коэффициенты ветвлений люминесценции, квантовые выходы излучения и т.п. [1-13]. Эффект РПИ может привести к увеличению длительности люминесценции соответствующего перехода относительно времени жизни возбужденного уровня и к спектральному перераспределению интенсив-

ности люминесценции.

Определяющим фактором проявления РПИ при регистрации люминесценции исследуемого образца является отношение вкладов в регистрируемые сигналы от областей, непосредственно возбуждаемых излучением накачки и возбуждаемых посредством радиационного переноса излучения. Таким образом, одной из основных характеристик РПИ служит среднее число актов поглощения–переизлучения фотона $\gamma(L)$ в ходе его миграции внутри исследуемой среды на расстояние L , пропорционально которому и увеличивается эффективная длительность люминесценции на соответствующем переходе. В литературе имеется много работ, посвященных исследованиям процессов увеличения времени распада люминесценции в различных активированных материалах, а также по моделированию и разработке методов подавления вклада РПИ в кинетику люминесцентных сигналов. Известно, что эффект РПИ особенно существенен при исследовании переходов в активированных материалах, для которых имеет место существенное перекрытие спектров излучения и поглощения. Такая ситуация часто имеет место при определении параметров излучения примесных трехвалентных редкоземельных ионов (R_3^{3+}) в различных матрицах, где соответствующие переходы происходят между возбужденным и основным энергетическими состояниями примеси в данном кристалле. Поэтому в литературе особенно много работ, посвященных исследованиям эффекта РПИ для различных твердых тел, активированных ионами Er^{3+} и Yb^{3+} , для определения параметров и условий их работы в качестве активной среды лазеров, работающих по трехуровневой или квазитрехуровневой схеме генерации [4-14].

Одной из наиболее широко используемых активных сред лазеров для систем волоконно-оптической связи в ближней ИК области длин волн является иттрий-алюминиевый гранат с примесью ионов Er^{3+} ($YAG:Er^{3+}$), исследованиям которого посвящено много публикаций [15-19]. Однако, насколько нам известно, данные по изучению РПИ в монокристалле $YAG:Er^{3+}$ отсутствуют, за исключением работы [7]. Полученные в настоящей работе результаты представляются особенно ценными при определении лазерных возможностей кристаллов $YAG:Er^{3+}$ и выявлении оптимальных условий их работы.

Целью настоящей работы является выяснение степени влияния эффекта РПИ на длительность люминесценции с возбужденного уровня $^4I_{13/2}$ иона Er^{3+} в кристалле $YAG:Er^{3+}$, на спектральную форму полосы люминесценции, соответствующей переходу между первым возбужденным и основным мультиплетами (переход $^4I_{13/2} \rightarrow ^4I_{15/2}$) ионов Er^{3+} , и определение значения времени жизни уровня $^4I_{13/2}$ с учетом процессов РПИ. Спектральные и кинетические характеристики люминесценции исследовались в области длин волн вблизи 1500 нм (переход $^4I_{13/2} \rightarrow ^4I_{15/2}$) при возбуждении непрерывным и импульсным излучениями лазера на длине волны 970 нм.

В работе применялась известная техника малых диафрагм, устанавливаемых перед исследуемыми образцами. Как свидетельствуют результаты многочисленных исследований, применение этого подхода позволяет в регист-

рируемых сигналах выделять вклады люминесценции из непосредственно возбужденных объемов образцов, существенно подавляя вклады от областей, возбуждаемых посредством радиационного переноса излучения из-за многократных актов перепоглощения и переизлучения фотонов той же частоты [4,5,8,11-14].

Так как в наших исследованиях из однородной апертуры возбуждающего пучка (диаметром ~3 мм) диафрагмами различных диаметров вырезаются малые части лазерного пучка, то плотность мощности возбуждения в кристалле остается неизменной, поэтому влиянием безызлучательных процессов переноса на изменения люминесцентных параметров кристалла в зависимости от диаметра диафрагмы можно пренебречь.

2. Экспериментальная техника

Исследования проводились на полированных плоскопараллельных пластинах кристалла YAG:Er³⁺ с размерами 10x8x2 мм³. Содержание ионов Er³⁺ в исследуемых образцах, определенное с помощью микроанализатора INCA Energy 300, составляло около 5 ат%.

Спектры поглощения кристалла в ИК области длин волн от 900 до 1700 нм регистрировались на спектрофотометрах Specord M-40 и СФ-256 при комнатной температуре. Люминесцентные исследования проводились на экспериментальной установке, схема которой приведена на рис.1. Для оптического возбуждения образцов использовались непрерывное или импульсное излучения GaAs диодного лазера (3). Блоки питания (1) и (2), соответствующие непрерывному и импульсному излучениям лазерного диода, обеспечивали следующие выходные параметры лазера: длина волны генерации 970 нм, длительность импульсов от ~500 мкс до ~2000 мкс с частотой повторения 9 Гц (управлялась с помощью генератора импульсов (16) марки Г5-63), выходная мощность в непрерывном режиме до 1 Вт. Возбуждающее излучение посредством фокусирующей линзы (4) направлялось на исследуемые образцы (7). Тонкая стеклянная делительная пластина (5) отводила часть возбуждения на приемник (6), который при спектральных измерениях служил для контроля интенсивности накачки, а при кинетических исследованиях выдавал запускающий импульс на вход четырехканального запоминающего цифрового осциллографа RIGOL DS1204B (14). Возбуждение фокусировалось на переднюю грань исследуемого образца, с которой излучение люминесценции через соответствующее отверстие диафрагмы (8) посредством коллимирующей линзы (9) собиралось на входную щель дифракционного монохроматора МДР-3 (11). Диафрагма представляла собой тонкую (~200 мкм) зачерненную алюминиевую пластину, на которой посредством лазерного сверления создан последовательный ряд круглых отверстий с диаметрами 10, 20, 50, 100, 200, 350, 500, 800 и 1000 мкм.

К облучаемой стороне образца плотно прилегал диафрагма, через соот-

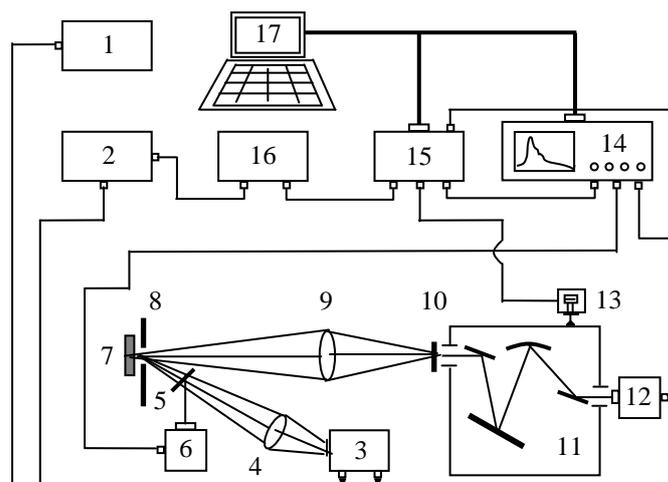


Рис.1. Схема экспериментальной установки.

ветствующее отверстие которой осуществлялись как лазерное возбуждение, так и регистрация излучения, т.е. люминесцентный сигнал брался через отверстие диафрагмы с передней стороны возбуждаемого образца. Перед входной щелью монохроматора устанавливался широкополосный фильтр из тонкой (~200 мкм) кремниевой пластины (10). Этот фильтр позволял отсекал мощное излучение возбуждающего лазера на входе монохроматора, а также подавлять всевозможные наложения на регистрируемые сигналы от высших порядков дифракций видимой люминесценции исследуемых кристаллов.

Изучение кинетики люминесценции проводилось на длине волны 1530 нм, соответствующей пику полосы люминесценции на переходе ${}^4I_{13/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$ ионов Er^{3+} в кристаллах YAG:Er^{3+} . Высокоскоростной InGaAs фотодиод (12), установленный у выходной щели монохроматора, служил для регистрации кинетики люминесценции. Электрический сигнал с него подавался на второй вход осциллографа (14) и после оцифровки передавался на персональный компьютер (17) для последующей математической обработки соответствующими программными пакетами Origin-8 и Mathematica-8.

Для регистрации спектра люминесценции использовалась специальная карта сбора данных марки NI DAQ 6229 (15). Управление всем комплексом осуществлялось посредством специального программного продукта, составленного нами на языке виртуальных приборов LabView-8. Персональный компьютер (17) через аналоговые и цифровые входы-выходы DAQ карты проводил контроль этих процессов, а также запись спектров люминесценции в нужном диапазоне длин волн, задавая посредством шагового двигателя (13) необходимые параметры сканирования (шаг, скорость, число повторных измерений в данной точке и т.п.). Все измерения проводились при комнатной температуре.

3. Результаты и обсуждение

На рис.2 приведены нормированные спектры поглощения (пунктирная линия) и люминесценции (сплошная линия) кристалла на переходе ${}^4I_{13/2} \leftrightarrow {}^4I_{15/2}$ ионов Er^{3+} при возбуждении непрерывным лазером с длиной волны 970 нм. Видно, что в спектральной области от 1450 до 1550 нм имеет место существенное перекрытие этих спектров, что должно сопровождаться наличием эффекта РПИ в этой области длин волн. Приведенный на рис.2 спектр люминесценции соответствует регистрации с помощью диафрагмы с диаметром отверстия 100 мкм.

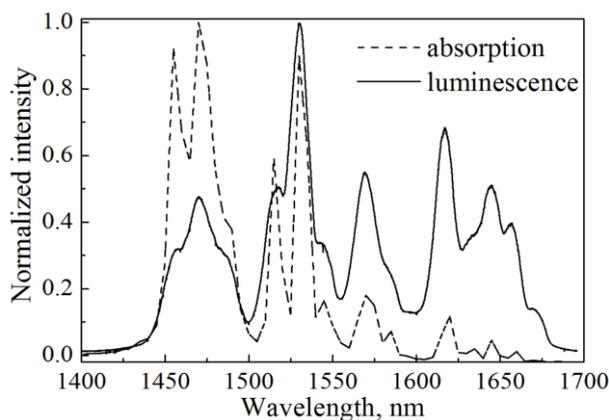


Рис.2. Нормированные спектры поглощения (пунктирная кривая) и люминесценции (сплошная кривая) исследуемого кристалла при комнатной температуре на переходе ${}^4I_{13/2} \leftrightarrow {}^4I_{15/2}$ иона Er^{3+} .

Из теоретических моделей, описывающих эффект РПИ в примесных кристаллах, следует [4,5,8-14], что увеличение времени распада излучения с возбужденного уровня примесного иона зависит от соотношения доли люминесценции из областей исследуемого образца, возбуждаемых непосредственно лазерным излучением (область В, рис.3) и возбуждаемых посредством радиационного переноса излучения (область С, рис.3).

Часть излучения f , которая подвергается пленению внутри образца, можно определить с помощью формулы [14]

$$f = \frac{1}{\eta} \left(1 - \frac{\tau}{\tau^*} \right), \quad (1)$$

где τ и τ^* – время жизни уровня и измеренная длительность люминесценции перехода, соответственно, η – квантовый выход излучения с этого уровня.

Результаты кинетических измерений затухания люминесценции исследуемого образца вблизи длины волны 1530 нм при возбуждении 500 мкс импульсами на длине волны 970 нм, а также рассчитанные с помощью формулы (1) значения части РПИ в образце в зависимости от диаметра отверстия диа-

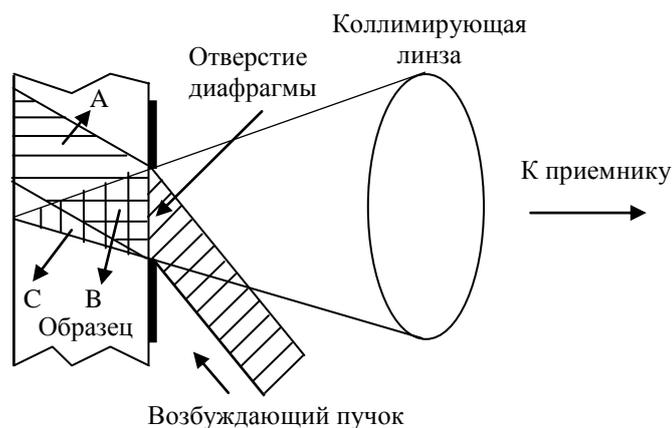


Рис.3. Упрощенная схема возбуждения и регистрации исследуемого образца. А – область образца, непосредственно возбуждаемая лазером; В – регистрируемая область, непосредственно облучаемая лазером; С – регистрируемая область, возбуждаемая посредством радиационного переноса возбуждения лазера.

фрагмы приведены в табл.1. В этих расчетах для квантового выхода излучения η с уровня ${}^4I_{13/2}$ в нашем образце взято значение 0.95 [17]. Из таблицы ясно видно проявление эффекта РПИ, приводящее к увеличению времени затухания люминесценции с возбужденного мультиплета ${}^4I_{13/2}$ примерно на 16%.

Табл.1. Время затухания люминесценции кристалла YAG:Er^{3+} на длине волны 1530 нм и значения части РПИ в зависимости от диаметра отверстия диафрагмы.

Диаметр отверстия диафрагмы, мкм	Измеренное время жизни τ^* , мкс	Плененная часть излучения f , %
100	4950	~0
200	5350	~8
350	5530	~11
500	5750	~15
800	5790	~15
1000	5830	~16

Отметим, что хотя в нашем распоряжении были диафрагмы с диаметрами отверстий меньшими, чем 100 мкм (10, 20 и 50 мкм), однако регистрируемые сигналы были чрезвычайно слабыми и не поддавались последующей обработке. В литературе [12-14] в качестве времени жизни возбужденного мультиплета принято брать значение, получаемое при линейной экстраполяции зависимости времени затухания люминесценции от диаметра диафрагмы, т.е. предельное

значение при нулевой диафрагме. В нашем случае такая процедура дает значение ~ 5120 мкс, которое с хорошей точностью ($\sim 4\%$) совпадает со значением, измеренным с диафрагмой 100 мкм и составляющим 4950 мкс (табл.1). Кроме того, мы полагаем, что приведенный на рис.2 спектр люминесценции, зарегистрированный с той же диафрагмой, подвержен минимальному влиянию РПИ.

4. Заключение

Определено время жизни верхнего лазерного уровня ${}^4I_{13/2}$ ионов Er^{3+} и оценены части излучения, подверженные эффекту РПИ при различных условиях. С той же диафрагмой, обеспечивающей измерение времени жизни уровня ${}^4I_{13/2}$, зарегистрирован спектр люминесценции на переходе ${}^4I_{13/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$ ионов Er^{3+} в монокристаллах иттрий-алюминиевого граната. Показано, что даже при таких умеренных концентрациях примесных ионов в исследуемых материалах, как в наших образцах, влияние эффекта РПИ на выходные параметры излучения весьма существенное, и игнорирование эффекта может привести к ошибкам при оценке перспективности исследуемого материала для различных приложений.

Авторы выражают благодарность проф. А.Г. Петросяну за предоставленные кристаллы. Исследование выполнено при финансовой поддержке ГКН МОН РА в рамках научного проекта № SCS 13-1C269.

ЛИТЕРАТУРА

1. Л.М. Биберман. ЖЭТФ, **17**, 416 (1947).
2. Т. Holstein. Phys. Rev., **72**, 1212 (1947).
3. Т. Holstein. Phys. Rev., **83**, 1159 (1951).
4. A. Li, Z. Zheng, Q. Lu, et al. Opt. Lett., **36**, 1056 (2011).
5. S. Guy. Phys. Rev. B, **73**, 144101 (2006).
6. D.S. Sumida, T. Fan. Opt. Lett., **19**, 1343 (1994).
7. M. Eichhorn. Appl. Phys. B, **96**, 369 (2009).
8. P.R. Ehrmann, J.H. Campbell. J. Am. Ceram. Soc., **85**, 1061 (2002).
9. G. Toci. Appl. Phys. B, **106**, 63 (2012).
10. G. Toci, D. Alderighi, A. Pirri, M. Vannini. Appl. Phys. B, **106**, 73 (2012).
11. D. Zhang, E.Y.B. Pun. J. Appl. Phys., **94**, 1339 (2003).
12. H. Kühn, S.T. Fredrich-Thornton, C. Kränkel, et al. Opt. Lett., **32**, 1908 (2007).
13. A. Stoita, S. Guy, B. Jacquier. Appl. Phys. B, **87**, 445 (2007).
14. A. Stoita, T. Vautey, B. Jacquier, S. Guy. J. Lumin., **130**, 1119 (2010).
15. G.W. Burdick, J.B. Gruber, K.L. Nash, et al. Spectroscopy Lett., **43**, 406 (2012).
16. М.А. Андриасян, Н.В. Варданян, Р.Б. Костанян, Квантовая электроника, **3**, 604, (1982).
17. Т.И. Мурина, Лазер на кристаллах иттрий-эрбий-алюминиевого граната. Труды ФИАН, **19**, 4 (1989).
18. M. Eichhorn, S.T. Fredrich-Thornton, et al. Appl. Phys. B, **91**, 249 (2008).
19. P.H. Muzhikyan, V.G. Babajanyan, R.B. Kostanyan, A.G. Petrosyan. Proc. SPIE. **8621**, 86210A-1 (2013).

ՃԱՌԱԳԱՅԹՄԱՆ ԳԵՐՄԱՆ ԵՐԵՎՈՒՅԹԻ ԱԶԴԵՑՈՒԹՅՈՒՆԸ
YAG:Er³⁺ ԲՅՈՒՐԵՂԻ ԻՆՖՐԱԿԱՐՄԻՐ ԼՅՈՒՄԻՆԵՍՑԵՆՑԻԱՅԻ
ԲՆՈՒԹԱԳՐԵՐԻ ՎՐԱ

Վ.Գ. ԲԱԲԱՋԱՆՅԱՆ, Ռ.Բ. ԿՈՍՏԱՆՅԱՆ, Պ.Հ. ՄՈՒԺԻԿՅԱՆ

Ներկայացված են 1500 նմ ալիքի երկարության տիրույթի մոտակայքում լյումինեսցենտային ճառագայթման պարամետրերի սպեկտրալ և կինետիկ հետազոտությունների արդյունքները YAG:Er³⁺ բյուրեղում 970 նմ ալիքի երկարությամբ զրգման դեպքում: Բացահայտված է ճառագայթման գերման երևույթի էական ազդեցությունը Er³⁺ իոնների ${}^4I_{13/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$ անցմանը համապատասխանող լյումինեսցենտային ազդանշանի մարման կինետիկայի վրա: Հետազոտվող նմուշների առջև անմիջականորեն տեղադրվող փոքր տրամագծի անցքերով դիաֆրագմաների կիրառմամբ հետազոտվել են գրանցված լյումինեսցենտային ազդանշանների մարման ժամանակների կախումները գերված ճառագայթման մասնաբաժնից: Տվյալ մատրիցում որպես Er³⁺ իոնի առաջին զրգոված մակարդակի ${}^4I_{13/2}$ կյանքի տևողություն ընդունվել է այդ մակարդակից լյումինեսցենցիայի մարման ժամանակի արժեքը ամենափոքր՝ 100 մկմ անցքով, դիաֆրագմայով գրանցման դեպքում: Միևնույն պայմաններում գրանցվել է հետազոտվող նյութի լյումինեսցենցիայի սպեկտրը, որը հետաքրքրություն է ներկայացնում օպտիկական կապի համակարգերում լայնորեն պահանջված 1500 նմ գեներացիայի ստացման տեսանկյունից:

INFLUENCE OF RADIATION TRAPPING ON THE CHARACTERISTICS
OF IR LUMINESCENCE OF YAG:Er³⁺ CRYSTAL

V.G. BABAJANYAN, R.B. KOSTANYAN, P.H. MUZHIKYAN

The results of spectral and kinetic studies of luminescent radiation parameters at wavelengths near 1500 nm in a YAG:Er³⁺ crystal under laser excitation at 970 nm are presented. A significant influence of radiation trapping effect on the decay kinetics of luminescent signal on the ${}^4I_{13/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$ transition of Er³⁺ ions is revealed. With use of the method of diaphragms with small diameter holes mounted directly in front of the samples, dependences of decay times of recorded luminescent signals on the portion of the trapped radiation were studied. As a lifetime of the first excited level ${}^4I_{13/2}$ of Er³⁺ ions in this crystal, the time of luminescence decay from the same level was taken registered with a minimum diaphragm of 100 μm . Under the same conditions the luminescence spectrum of the material under study is recorded which is of interest for 1500 nm generation widely used in optical communications systems.

УДК 532.738

УПРАВЛЕНИЕ ИЗЛУЧЕНИЕМ В СРЕДНЕМ ИК ДИАПАЗОНЕ ДЛИН ВОЛН С ПОМОЩЬЮ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ ФАЗОВОЙ РЕШЕТКИ

Д.Л. ОГАНЕСЯН¹, А.Л. МАРГАРЯН^{1*}, Н.Г. АКОПЯН¹, В.М. АРУТЮНЯН¹,
В.В. БЕЛЯЕВ², А.С. СОЛОМАТИН²

¹Ереванский государственный университет, Армения

²Московский государственный областной университет, Россия

*e-mail: marhakob@ysu.am

(Поступила в редакцию 7 июля 2014 г.)

Разработана конечно-разностная численная (FDTD) модель жидкокристаллической дифракционной фазовой решетки и показана возможность использования данной решетки для пространственно-временного управления излучением в среднем ИК диапазоне длин волн.

1. Введение

Средний инфракрасный (ИК) диапазон длин волн ($\lambda = 2.5-70$ мкм) весьма привлекателен с точки зрения применения в фундаментальных спектроскопических исследованиях, в биофизике и фармацевтике [1,2]. Для работы в данном диапазоне необходимо иметь как недорогие и компактные источники излучения и детекторы, так и пассивные компоненты, в качестве которых можно использовать устройства на основе жидких кристаллов (ЖК). Сегодня активно рассматривается применение жидкокристаллической дифракционной решетки в области терагерцового излучения [3-5]. Однако применение такого элемента в области среднего ИК диапазона мало исследовано. В частности, в [6-12] описаны различные магнито- и электроуправляемые перестраиваемые терагерцовые устройства на основе нематических жидких кристаллов (НЖК), такие как фазовращатели, фильтры и переключатели. В [13] представлена магнитоуправляемая дифракционная решетка для управления терагерцовым излучением посредством изменения эффективного показателя преломления НЖК. В [14] предложена и продемонстрирована возможность управления терагерцовым излучением с помощью электрически управляемой фазовой решетки. Она представляет собой периодическую структуру из двух материалов с разными показателями преломления (плавленого кварца и НЖК). Такая структура весьма привлекательна также для применения в среднем ИК диапазоне.

В данной работе предложена теоретическая и численная модель жидкокристаллической фазовой решетки для управления излучением в среднем ИК диапазоне.

2. Теоретическая модель

Рассмотрим электрически управляемую фазовую решетку (ЭУФР), состоящую из структурированных слоев НЖК с разными значениями коэффициента преломления (рис.1). Она представляет собой ЖК ячейку толщиной d с двумя стеклянными подложками, покрытыми прозрачным проводящим ИТО (оксид индия–олова) пленками. При этом на одну из подложек нанесен сплошной слой ИТО, а на второй – этот слой структурирован в виде параллельных электрически соединенных электродов. Расстояние между параллельными электродами и их толщины равны L . При приложении напряжения между подложками происходит периодическая ориентация молекул НЖК.

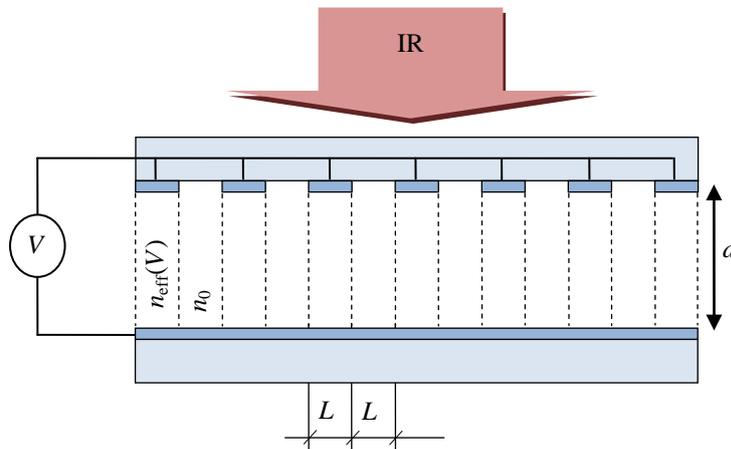


Рис.1. Схематическое изображение поперечного сечения ЖК фазовой решетки.

С учетом вязкости НЖК при фиксированном значении управляющего напряжения V пространственную периодическую ориентацию молекул вдоль подложек можно аппроксимировать синусоидальной функцией (рис.2).

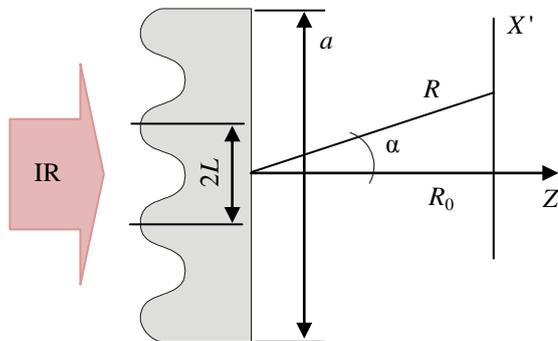


Рис.2. Распространение ИК излучения через фазовую решетку.

Разность фаз ϕ ИК излучения с длиной волны λ_{IR} , прошедшего через слой с различными значениями показателей преломления $n_{\text{eff}}(V)$ и n_0 , можно представить в виде $[n_{\text{eff}}(V) - n_0]d/\lambda_{\text{IR}}$. При нулевом значении управляющего напряжения V на выходе ЭУФР дифракция не наблюдается. При увеличении напряжения в связи с индуцированием ориентирования молекул ЖК наблюдается пространственная периодическая модуляция показателя преломления. Очевидно, что глубина модуляции при фиксированных значениях толщины структуры d и длины волны λ_{IR} определяется электрооптически наведенным двулучепреломлением НЖК. Иначе говоря, структура со слоем нематического жидкого кристалла с периодически изменяющимся показателем преломления может рассматриваться как синусоидальная фазовая решетка (рис.2).

Плоская волна ИК излучения, пройдя через НЖК (рис.2), приобретает фазовый набег, величина которого управляется напряжением V ,

$$\phi(x, V) = \frac{\pi d}{\lambda_{\text{IR}}} \left[n_{\text{eff}}(V) - n_0 - (n_{\text{eff}}(V) - n_0) \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \right], \quad (1)$$

где $2L$ – период решетки. Как показано в [15], в данном случае дифрагированное поле в дальней зоне определяется как

$$E(\alpha) = \sum_{q=-\infty}^{\infty} J_q \left(\frac{\pi d}{\lambda_{\text{IR}}} (n_{\text{eff}}(V) - n_0) \right) \frac{\sin \left[(\pi a / \lambda_{\text{IR}}) (\sin(\alpha) - q \lambda_{\text{IR}} / 2L) \right]}{(\pi a / \lambda_{\text{IR}}) (\sin(\alpha) - q \lambda_{\text{IR}} / 2L)}, \quad (2)$$

где $J_q(n_{\text{eff}}(V) - n_0)$ – функция Бесселя порядка q , α – угол дифракции. Согласно уравнению (2), энергия волны, прошедшей через фазовую решетку, перераспределяется между компонентой нулевого порядка с $q=0$ и группой компонент высших дифракционных порядков. Направление максимума дифракции порядка q определяется из соотношения

$$\sin(\alpha_q) = \frac{q\lambda}{2L}, \quad q = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (3)$$

а интенсивность пропорциональна квадрату значения функции Бесселя $I_q^\infty J_q^2(n_{\text{eff}}(V) - n_0)$.

Согласно [15], при $\pi d(n_{\text{eff}}(V) - n_0)/\lambda = 2$, что соответствует корню функции Бесселя J_0 , максимум нулевого порядка исчезает. Следовательно, при фиксированных значениях электрооптически наведенного двулучепреломления и толщины решетки длину волны ИК излучения необходимо выбрать таким образом, чтобы глубина модуляции стала равной двум. В частности, когда $\lambda_{\text{IR}} = 60$ мкм, а период решетки $2L = 180$ мкм, величина электрооптически наведенного двулучепреломления, соответствующая условию отсутствия нулевого порядка дифракции, будет $n_{\text{eff}}(V) - n_0 = 0.2111$.

При дифракционных расчетах ЖК ячеек можно также использовать программу Echedeer для оптически анизотропных сред с микрорельефом

(обычные программы работают либо с изотропными средами с механическим рельефом, либо с рельефом показателя преломления в плоских ячейках) [16,17].

Нами было проведено численное моделирование процесса электрооптической переориентации молекул нематического жидкого кристалла под воздействием внешнего управляющего напряжения [18]. Также получены зависимости электрооптически наведенного двулучепреломления от внешнего управляющего напряжения методом прямых [18] для НЖК марки 6СНВТ толщиной 200 мкм и со следующими параметрами: $\varepsilon_{\parallel} = 12$, $\varepsilon_{\perp} = 4$, $K_{11} = 8.57 \text{ нН}$, $K_{33} = 3.7 \text{ нН}$, $\gamma = 13.3 \text{ кг/мс}$.

Ориентация молекул НЖК описывается углом $\theta(z)$, как показано на рис.3.

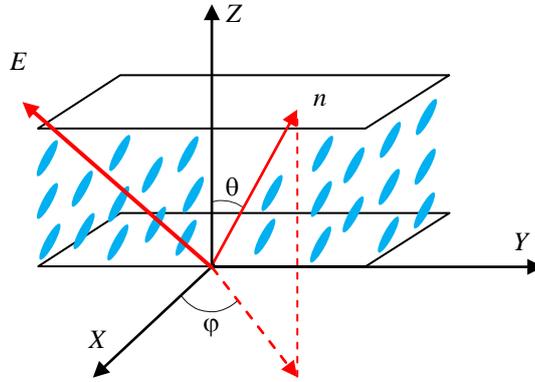


Рис.3. Геометрия взаимодействия директора НЖК с управляющим электрическим полем.

Эффективный показатель преломления n_{eff} можно представить как

$$n_{\text{eff}}(\theta(z)) = \frac{\sqrt{\varepsilon_{\parallel} \varepsilon_{\perp}}}{\sqrt{\varepsilon_{\perp} \cos^2(\theta(z)) + \varepsilon_{\parallel} \sin^2(\theta(z))}}. \quad (4)$$

Если центру слоя НЖК соответствует координата $z = 0$, эффективный показатель преломления для НЖК с толщиной d определяется как

$$n_{\text{eff}} = \frac{1}{d} \int_{-d/2}^{d/2} n_{\text{eff}}(\theta(z)) dz. \quad (5)$$

На рис.4 представлена зависимость наведенного двулучепреломления от управляющего напряжения.

Для расчета оптических характеристик ЖК решеток с произвольным распределением ориентации ЖК между подложками можно использовать метод и программу расчета разности фазовой задержки слоя ЖК для необыкновенного и обыкновенного лучей $\Delta\Phi$ в зависимости от угла наклона ЖК на поверхности θ для ЖК ячеек с однородной и неоднородной ориентацией директора при симметричных и асимметричных граничных условиях [19,20].

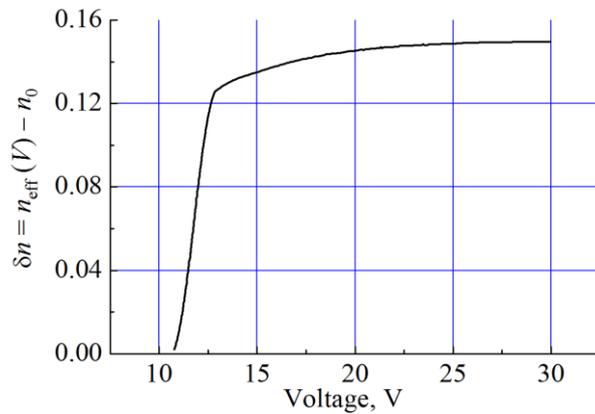


Рис.4. Зависимость электрооптически наведенного двулучепреломления от внешнего управляющего напряжения для НЖК марки 6СНВТ толщиной 200 мкм.

3. Конечно-разностная численная модель

Рассмотрим систему уравнений Максвелла, описывающих взаимодействие ИК излучения с НЖК фазовой решеткой,

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial D_x}{\partial t} &= \left(\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} \right), & \frac{\partial H_x}{\partial t} &= -\frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} \right), \\
 \frac{\partial D_y}{\partial t} &= \left(\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} \right), & \frac{\partial H_y}{\partial t} &= -\frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} \right), \\
 \frac{\partial D_z}{\partial t} &= \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right), & \frac{\partial H_z}{\partial t} &= -\frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right),
 \end{aligned} \quad (6)$$

где $D_x, D_y, D_z, E_x, E_y, E_z, H_x, H_y, H_z$ – компоненты вектора электрической индукции, электрического и магнитного полей, соответственно, μ – магнитная проницаемость среды, которая в данном случае принимается равной 1. Для вышеописанной недиспергирующей среды вектор электрического поля определяется через вектор электрической индукции в виде $\mathbf{E} = \tilde{\boldsymbol{\epsilon}}^{-1} \mathbf{D}$, где $\tilde{\boldsymbol{\epsilon}}$ – диэлектрический тензор периодической анизотропной среды:

$$\boldsymbol{\epsilon}(\theta(x)) = \begin{pmatrix} \epsilon_{\perp} + (\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}) \cos^2(\theta(x)) & 0 & (\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}) \cos(\theta(x)) \sin(\theta(x)) \\ 0 & \epsilon_{\perp} & 0 \\ (\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}) \cos(\theta(x)) \sin(\theta(x)) & 0 & \epsilon_{\perp} + (\epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}) \sin^2(\theta(x)) \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Здесь $\epsilon_{\perp}, \epsilon_{\parallel}$ – диэлектрические постоянные для необыкновенной и обыкновенной волн, соответственно, $\theta(x) = \pi x/L$. Ориентация молекул НЖК в лабораторной системе координат показана на рис.3 (азимутальный угол $\varphi = 0$). В соответствии с (8), вектор электрического поля определяется через электрическую индукцию как

$$E_x = \tilde{\epsilon}_{xx}^{-1} D_x + \tilde{\epsilon}_{xz}^{-1} D_z, \quad E_y = \tilde{\epsilon}_{yy}^{-1} D_y, \quad E_z = \tilde{\epsilon}_{xz}^{-1} D_x + \tilde{\epsilon}_{zz}^{-1} D_z, \quad (9)$$

где $\tilde{\epsilon}_{xx}^{-1} = \epsilon_{zz} / (\epsilon_{xx}\epsilon_{zz} - \epsilon_{xz}^2)$, $\tilde{\epsilon}_{xz}^{-1} = -\epsilon_{xz} / (\epsilon_{xx}\epsilon_{zz} - \epsilon_{xz}^2)$, $\tilde{\epsilon}_{yy}^{-1} = \epsilon_{yy}^{-1}$, $\tilde{\epsilon}_{zz}^{-1} = \epsilon_{xx} / (\epsilon_{xx}\epsilon_{zz} - \epsilon_{xz}^2)$ – компоненты обратного диэлектрического тензора.

При расчете дифрагированного поля методом конечных разностей во временной области перейдем от непрерывного пространства (x, y, z, t) к дискретному $(i\Delta x, j\Delta y, k\Delta z, \Delta t)$, где i, j, k, n – целочисленные постоянные [21]. В ходе расчета сначала определяются компоненты электрической индукции согласно (6) по нижеприведенной разностной схеме:

$$\begin{aligned} D_x^{n+1/2} \left(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right) &= D_x^{n-1/2} \left(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right) + \\ &+ \frac{\Delta t}{\Delta y} \left[H_z^n \left(i, j + 1, k + \frac{1}{2} \right) - H_z^n \left(i, j, k + \frac{1}{2} \right) \right] - \\ &- \frac{\Delta t}{\Delta z} \left[H_y^n \left(i, j + \frac{1}{2}, k + 1 \right) - H_y^n \left(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2} \right) \right] - \\ &- \frac{\Delta t \sigma}{2} \left[E_x^{n+1/2} (i, j, k) - E_x^{n-1/2} (i, j, k) \right], \\ D_y^{n+1/2} \left(i - \frac{1}{2}, j + 1, k + \frac{1}{2} \right) &= D_y^{n-1/2} \left(i - \frac{1}{2}, j + 1, k + \frac{1}{2} \right) + \\ &+ \frac{\Delta t}{\Delta z} \left[H_x^n \left(i - \frac{1}{2}, j + 1, k + 1 \right) - H_x^n \left(i - \frac{1}{2}, j + 1, k \right) \right] - \\ &- \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[H_z^n \left(i, j + 1, k + \frac{1}{2} \right) - H_z^n \left(i - 1, j + 1, k + \frac{1}{2} \right) \right] - \\ &- \frac{\Delta t \sigma}{2} \left[E_y^{n+1/2} (i, j, k) - E_y^{n-1/2} (i, j, k) \right], \\ D_z^{n+1/2} \left(i - \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k + 1 \right) &= D_z^{n-1/2} \left(i - \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k + 1 \right) + \\ &+ \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[H_y^n \left(i, j + \frac{1}{2}, k + 1 \right) - H_y^n \left(i - 1, j + \frac{1}{2}, k + 1 \right) \right] - \\ &- \frac{\Delta t}{\Delta y} \left[H_x^n \left(i - \frac{1}{2}, j + 1, k + 1 \right) - H_x^n \left(i - \frac{1}{2}, j, k + 1 \right) \right] - \\ &- \frac{\Delta t \sigma}{2} \left[E_z^{n+1/2} (i, j, k) - E_z^{n-1/2} (i, j, k) \right], \end{aligned} \quad (10)$$

где $\Delta x = \Delta y = \Delta z = \lambda_0 / 50$ – шаг пространственной дискретизации, $\Delta t = \Delta z / 2c$ – шаг временной дискретизации, c – скорость света в вакууме и λ_0 – длина волны ИК излучения, которая выбирается равной 60 мкм. С учетом обратной диэлектрической проницаемости рассматриваемой структуры

$$\begin{aligned}
\tilde{\varepsilon}_{xx}^{-1} &= [\varepsilon_{\perp} + (\varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp}) \sin^2(\theta)] / \varepsilon_{\perp} \varepsilon_{\parallel}, \\
\tilde{\varepsilon}_{xz}^{-1} &= \tilde{\varepsilon}_{zx}^{-1} = [-(\varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp}) \cos(\theta) \sin(\theta)] / \varepsilon_{\perp} \varepsilon_{\parallel}, \\
\tilde{\varepsilon}_{zz}^{-1} &= [\varepsilon_{\perp} + (\varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp}) \cos^2(\theta)] / \varepsilon_{\perp} \varepsilon_{\parallel}, \quad \tilde{\varepsilon}_{yy}^{-1} = 1/\varepsilon_{\perp}
\end{aligned} \tag{11}$$

электрическое поле определяется как

$$\begin{aligned}
E_x^n(i, j, k) &= \tilde{\varepsilon}_{xx}^{-1}(i, j, k) D_x^n(i, j, k) + \tilde{\varepsilon}_{xz}^{-1}(i, j, k) D_z^n(i, j, k), \\
E_y^n(i, j, k) &= \tilde{\varepsilon}_{yy}^{-1}(i, j, k) D_y^n(i, j, k), \\
E_z^n(i, j, k) &= \tilde{\varepsilon}_{xz}^{-1}(i, j, k) D_x^n(i, j, k) + \tilde{\varepsilon}_{zz}^{-1}(i, j, k) D_z^n(i, j, k).
\end{aligned} \tag{12}$$

Далее по нижепредставленной численной схеме определяются компоненты магнитного поля:

$$\begin{aligned}
H_x^{n+1}\left(i - \frac{1}{2}, j + 1, k + 1\right) &= H_x^n\left(i - \frac{1}{2}, j + 1, k + 1\right) + \\
&+ \frac{\Delta t}{\Delta z} \left[E_y^{n+1/2}\left(i - \frac{1}{2}, j + 1, k + \frac{3}{2}\right) - E_y^{n+1/2}\left(i - \frac{1}{2}, j + 1, k + \frac{1}{2}\right) \right] - \\
&- \frac{\Delta t}{\Delta y} \left[E_z^{n+1/2}\left(i - \frac{1}{2}, j + \frac{3}{2}, k + 1\right) - E_z^{n+1/2}\left(i - \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k + 1\right) \right], \\
H_y^{n+1}\left(i, j + \frac{1}{2}, k + 1\right) &= H_y^n\left(i, j + \frac{1}{2}, k + 1\right) + \\
&+ \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[E_z^{n+1/2}\left(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k + 1\right) - E_z^{n+1/2}\left(i - \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}, k + 1\right) \right] - \\
&- \frac{\Delta t}{\Delta z} \left[E_x^{n+1/2}\left(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{3}{2}\right) - E_x^{n+1/2}\left(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2}\right) \right], \\
H_z^{n+1}\left(i, j + 1, k + \frac{1}{2}\right) &= H_z^n\left(i, j + 1, k + \frac{1}{2}\right) + \\
&+ \frac{\Delta t}{\Delta y} \left[E_x^{n+1/2}\left(i, j + \frac{3}{2}, k + \frac{1}{2}\right) - E_x^{n+1/2}\left(i, j + \frac{1}{2}, k + \frac{1}{2}\right) \right] - \\
&- \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[E_y^{n+1/2}\left(i + \frac{1}{2}, j + 1, k + \frac{1}{2}\right) - E_y^{n+1/2}\left(i - \frac{1}{2}, j + 1, k + \frac{1}{2}\right) \right].
\end{aligned} \tag{13}$$

В численном эксперименте рассматривается НЖК марки 6СНВТ с показателями преломления необыкновенной и обыкновенной волн $n_e=1.67$ и $n_o=1.52$, соответственно, [22] толщина решетки выбирается равной $d = \lambda_0/2\delta n = 200$ мкм, где величина электрооптически наведенного двулучепреломления $\delta n = 0.15$ соответствует управляющему напряжению 25 В, а период решетки принимается равным $L = 180$ мкм.

Рассчитано двумерное пространственное распределение компоненты дифрагированного поля E_x на выходе из решетки (рис.5, белые линии – границы решетки) при воздействии линейно-поляризованного ИК излучения $(E_{x0}, 0, 0)$. Согласно рисунку, дифрагированное поле, формирующееся на выходе из решетки, распределяется между дифракционными порядками ± 1 и 0.

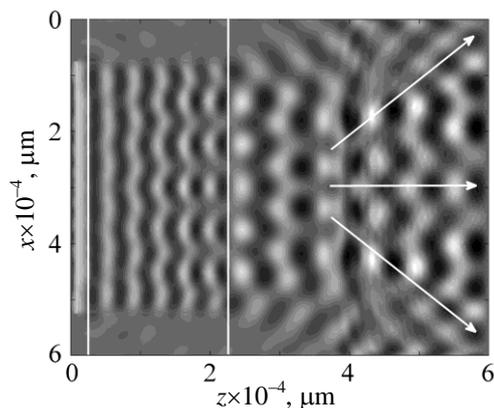


Рис.5. Двумерное пространственное распределение компоненты E_x дифрагированного поля.

При восстановлении дифрагированного поля в дальней зоне (зона Фраунгофера) в качестве начального условия использовано распределение поля непосредственно на выходе из решетки (объектное поле). Для сравнения на рис.6 приведены одномерные распределения дифрагированного поля в дальней зоне, полученные как аналитическим путем, так и численным интегрированием. Как видно из рисунка, аналитически и численно полученные распределения практически совпадают. Описанная численная FDTD схема позволяет рассчи-

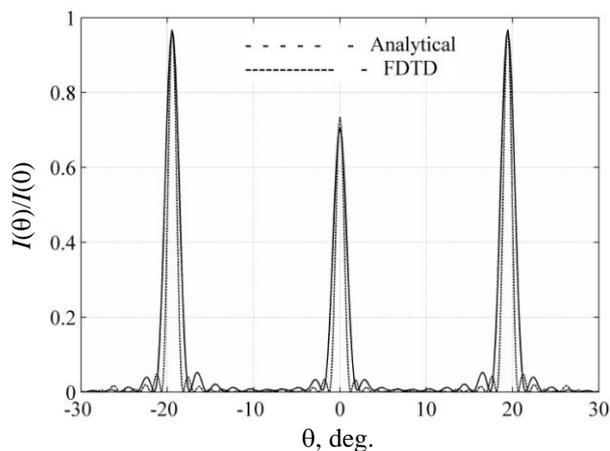


Рис.6. Одномерное распределение дифрагированного поля в дальней зоне, полученное аналитически и численно.

тать диффракционную эффективность с учетом искажения периодичности профиля решетки.

Рассматриваемый тип НЖК в средней ИК области обладает существенным поглощением [22] и, в частности, при длине волны 60 мкм оно составляет $\beta = 100 \text{ см}^{-1}$. Поэтому на практике необходимо учитывать также и влияние поглощения на диффракционную эффективность. Диффракционная эффективность нулевого, первого и второго порядков в зависимости от потерь $\beta = 4\pi \text{Im}(\delta n) / \lambda_{\text{IR}}$, где $\text{Im}(\delta n)$ – мнимая составляющая двулучепреломления, представлена на рис.7. Диффракционная эффективность при этом определяется как

$$\gamma_i = \left(I_i / \sum_{k=0}^N I_k \right) 100\%, \quad (14)$$

где I_i – интенсивность дифрагированного поля в i -м порядке.

Как видно из рис.7, когда управляющее напряжение меньше порогового ($\delta n = 0$) и потерь нет, на выходе из решетки наблюдается только нулевой порядок. При превышении порогового напряжения, когда наведенное двулучепреломление становится равным $\delta n = 0.15$, на выходе из решетки появляется также

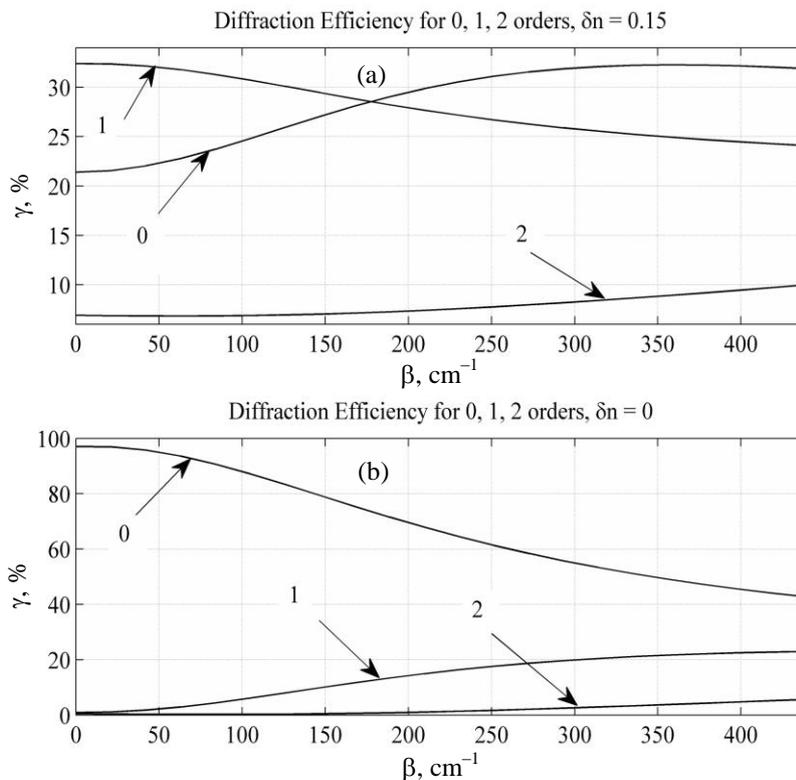


Рис.7. Зависимость диффракционной эффективности нулевого, первого и второго порядков от потерь.

дифрагированное поле в первом порядке с эффективностью 32% и эффективность нулевого порядка уменьшается до 22%. Таким образом, для конкретного НЖК можно исключить недифрагированное поле (нулевой порядок дифракции) путем выбора соответствующего значения управляющего напряжения. Для рассматриваемого типа НЖК максимальное значение наведенного двулучепреломления меньше 0.2122, при котором интенсивность нулевого порядка становится равной нулю на длине волны 60 мкм (рис.4). Из рис.7 видно, что с увеличением потерь при ненулевом двулучепреломлении наблюдается также перераспределение энергии между дифракционными порядками.

4. Заключение

Предложен новый тип жидкокристаллической дифракционной фазовой решетки для ИК диапазона длин волн. Приведена конечно-разностная численная модель рассматриваемой структуры и показана возможность ее использования в качестве мультиплексера в среднем ИК диапазоне. Предложенная структура может быть также использована для изучения частотной зависимости мнимой части диэлектрической проницаемости НЖК в ИК диапазоне.

Работа выполнена в рамках проекта МНТЦ А-1951.

ЛИТЕРАТУРА

1. **X.C. Zhang, J. Xu.** Introduction to THz Wave Photonics. Springer, New York-Dordrecht-Heidelberg-London, 2010.
2. Terahertz Spectroscopy, Principles and Applications. Edited by Susan L. Dexheimer. Taylor & Francis Group, 2008.
3. **F. Garet, J.L. Coutaz, M. Narzarov, E. Bonnet, O. Parriaux, G. Racine.** THz time-domain spectroscopy study of grating couplers and segmented grating filters, in Dig. Joint Int. Conf. Infrared Millimeter Waves and Terahertz Electron., 181-182 (2004).
4. **R. Kersting, G. Strasser, K. Unterrainer.** Electron. Lett., **36**, 1156 (2000).
5. **J. Chen, P.J. Bos, H. Vithanna, D.L. Johnson.** Appl. Phys. Lett., **67**, 2588 (1995).
6. **C.Y. Chen, C.F. Hsieh, Y.F. Lin, R.P. Pan, C.L. Pan.** Opt. Express, **12**, 2625 (2004).
7. **H.Y. Wu, C.F. Hsieh, T.T. Tang, R.P. Pan, C.L. Pan.** IEEE Photon. Technol. Lett., **18**, 1488 (2006).
8. **C.Y. Chen, C.F. Hsieh, Y.F. Lin, C.L. Pan, R.P. Pan.** Appl. Phys. Lett., **88**, 101107 (2006).
9. **I.C. Ho, C.L. Pan, C.F. Hsieh, R.P. Pan.** Opt. Lett., **33**, 1401 (2008).
10. **C.F. Hsieh, Y.C. Lai, R.P. Pan, C.L. Pan.** Opt. Lett., **33**, 1174 (2008).
11. **Z. Ghattan, T. Hasek, R. Wilk, M. Shahabadi, M. Koch.** Opt. Commun., **281**, 4623 (2008).
12. **S. Jewell, E. Hendry, T. Isaac, J. Sambles.** New J. Phys., **10**, 033012 (2008).
13. **C.J. Lin, Y.T. Li, C.F. Hsieh, R.P. Pan, C.L. Pan.** Opt. Express, **16**, 2995 (2008).
14. **Chia-Jen Lin, Chuan-Hsien Lin, Yu-Tai Li, Ru-Pin Pan, Ci-Ling Pan.** IEEE Photonics Technology Letters, **21**, 730 (2009).
15. **J.W. Goodman.** Introduction to Fourier Optics. McGraw-Hill, 1988.
16. **V. Tsoy, V. Belyaev, V. Misnik, D. Litovchenko, A. Tarasishin.** Opt. Commun., **246**,

- 57 (2005).
17. **V.V. Belyaev, V.I. Tsoy, E.M. Kushnir, A.V. Klyckov, A.Y. Kalashnikov.** J. SID, **13**, 305 (2005).
 18. **В.К. Абрамян, Н.Г. Акопян, В.М. Арутюнян, А.Л. Маргарян, Д.Л. Оганесян.** Известия НАН Армении, Физика, **45**, 429 (2010).
 19. **V. Belyaev, A. Solomatin, D. Chausov.** Optics Express, **21**, 4244 (2013).
 20. **V. Belyaev, A. Solomatin, D. Chausov.** Applied Optics, **52**, 3012 (2013).
 21. **W.E. Schiesser, G.W. Griffiths.** A Compendium of Partial Differential Equation Models. method of lines analysis with matlab. Cambridge University Press, 2009.
 22. **N. Vieweg, Ch. Jansen, M.K. Shakfa, M. Scheller, N. Krumbholz, R. Wilk, M. Mikulics, M. Koch.** Opt. Express, **18**, 6097 (2010).

**ՃԱՌԱԳԱՅԹՄԱՆ ԿԱՌԱՎԱՐՈՒՄԸ ԱԼԻՔԻ ԵՐԿԱՐՈՒԹՅԱՆ ՄԻՋԻՆ
ԻՎ ՏԻՐՈՒՅԹՈՒՄ ՀԵՂՈՒԿ ԲՅՈՒՐԵՂԱՅԻՆ
ՓՈՒԼԱՅԻՆ ՑԱՆՑԻ ՄԻՋՈՑՈՎ**

Դ.Լ. ՀՈՎՀԱՆՆԻՍՅԱՆ, Հ.Լ. ՄԱՐԳԱՐՅԱՆ, Ն.Հ. ՀԱԿՈԲՅԱՆ,
Վ.Մ. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ, Վ.Վ. ԲԵԼՅԱԵՎ, Ա.Ս. ՍՈԼՈՄԱՏԻՆ

Մշակված է հեղուկ բյուրեղային դիֆրակցիոն փուլային ցանցի վերջավոր տարբերության վրա հիմնված թվային մոդելը (FDTD) և ցույց է տրված տվյալ ցնացի օգտագործման հնարավորությունը ալիքի երկարության միջին ինֆրակարմիր տիրույթում ճառագայթի տարածական-ժամանակային կառավարման համար:

**RADIATION CONTROL IN THE MID IR WAVELENGTH RANGE
USING THE LIQUID CRYSTAL PHASE GRATING**

D.L. HOVHANNISYAN, H.L. MARGARYAN, N.H. HAKOBYAN,
V.M. AROUTIOUNIAN, V.V. BELYAEV, A.S. SOLOMATIN

The finite difference time domain (FDTD) numerical model of liquid crystal diffraction phase grating is developed and the possibility of using this grating for spatial-time control of radiation in the mid-infrared wavelength range is shown.

УДК 535.215.9

ПРОВОДИМОСТЬ ГРАНУЛИРОВАННЫХ СТРУКТУР НА ОСНОВЕ ШИРОКОЗОННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ ZnO

Р.К. ОВСЕПЯН*, А.Р. ПОГОСЯН, Э.Е. ЭЛБАКЯН

Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак, Армения

*e-mail: ruben@ipr.sci.am

(Поступила в редакцию 23 июля 2014 г.)

Проведены экспериментальные исследования гранулированных структур – случайно расположенных мелких областей, гранул или кристаллитов, имеющих различную проводимость и находящихся в прямом контакте, на основе пленок ZnO. Рассмотрено влияние донорного комплекса, состоящего из кислородной вакансии и междоузельного атома цинка, донорной примеси Ga, а также акцепторной примеси Li на структурную проводимость пленок. Исследованы особенности проводимости в слаболегированных широкозонных полупроводниках с водородоподобными примесями. Рассмотрено влияние размера гранул и структуры кристаллитов на кинетику проводимости. Разработана новая методика определения плотности тока в зависимости от координат для тонких проводящих пленок. Полученные экспериментальные результаты интерпретированы на основе теории перколяции.

1. Введение

Гранулированные полупроводниковые структуры, состоящие из частиц нанометрового размера, могут служить основой для создания приборов нанoeлектроники [1], новых типов твердотельных фотокатализаторов [2], компонент для прозрачной электроники и прозрачных дисплеев [3]. Электрические свойства таких структур в значительной мере зависят от размеров проводящих наночастиц и от плотности (объемной или поверхностной) их упаковки. Если средняя плотность частиц мала, то статическая проводимость такой среды будет весьма низкой. В другом предельном случае при большой плотности, когда значительное число частиц соприкасается друг с другом [4], в структуре могут образовываться достаточно протяженные проводящие кластеры [5], и проводимость такой структуры будет иметь сложный характер, обусловленный проводимостью полупроводника и переходного слоя между наночастицами. Наибольший интерес представляют структуры с промежуточной плотностью, такие, в которых среднее расстояние между частицами порядка их размера, т.е. порядка нескольких нанометров. В этом случае проводимость среды обусловлена туннелированием электронов через зазоры между частицами.

Вероятность туннелирования зависит от размеров гранул, высоты, ширины и формы туннельных барьеров, температуры среды [6]. Проводимость

полупроводниковых гранулированных структур в туннельном режиме существенно зависит от таких факторов структурного и энергетического беспорядка, как разброс размеров частиц, корреляции их взаимного расположения, наличие случайного потенциала на частицах [6]. Перечисленные параметры могут варьироваться в зависимости от технологии их получения, что усложняет задачу описания проводимости таких сред.

В настоящей работе объектом исследования служили гранулированные структуры оксида цинка (ZnO), полученные методом электронно-лучевого вакуумного напыления на подложках сапфира [7]. Пленки ZnO относятся к широкозонным полупроводникам. Важным достоинством этих пленок является возможность управления их свойствами и типом проводимости введением донорной или акцепторной примеси [7-9]. Так, примесь Ga в пленках ZnO действует как донор, увеличивая проводимость без ухудшения оптической прозрачности [7,10], в то время как примесь Li значительно увеличивает удельное сопротивление [11,12].

Гранулированным будем называть материал, состоящий из случайно расположенных мелких областей (гранул или кластеров) с существенно различной проводимостью. Случайный потенциал в таком материале обязательно имеет характерные длины, значительно большие межатомных расстояний, вплоть до макроскопических [13,14]. В настоящей работе интерес представляли начальные стадии формирования пленок, во время которых в центрах конденсации происходят процессы формирования, роста и слияния зародышей. До тех пор, пока такие зародыши еще не сливаются друг с другом, пленка не является сплошной, а состоит из отдельных наночастиц. В процессе напыления зародыши увеличиваются в размерах и, сливаясь, образуют сначала перколяционную структуру с множеством непрерывных токовых каналов в плоскости пленки. Число токовых путей и проводимость пленки определяются в первую очередь степенью заполнения второго слоя. Попавшие на подложку атомы, обладающие тепловой энергией и движущиеся вдоль поверхности, сначала собираются в маленькие, случайно разбросанные капельки, образуя отдельные локализованные кластеры, (назовем это пленкой в состоянии 1). При дальнейшем напылении капельки растут и, соприкасаясь, сливаются в капли большего диаметра, происходит увеличение размера кластера (пленка в состоянии 2). Затем области приобретают форму габитуса кристалла и получаются пленки, имеющие сквозное просачивание с неоднородной проводимостью (пленка в состоянии 3).

По-видимому, при увеличении площади контакта капель с подложкой в их центре возникают участки с сильным сцеплением. При слиянии таких укрупненных капель эти участки играют роль центров пиннинга для перемещающейся массы вещества, понижая симметрию образующихся областей. Наконец, на последней стадии образуются сплошные пленки, когда относительная площадь зазоров между областями мала и делокализованные электроны могут туннелировать через зазоры (пленка в состоянии 4). Увеличение толщины

пленки приводит к повышению проводимости из-за роста количества токовых каналов, а затем происходит слияние в сплошную пленку с однородной проводимостью.

В данной работе изучались особенности проводимости гранулированных пленок ZnO:Ga и ZnO:Li. Предложен принципиально новый метод измерения локальной плотности тока в пленках при перколяционной проводимости.

2. Эксперимент

Легированные литием и галлием пленки ZnO были получены методом электронно-лучевого вакуумного напыления на сапфировых подложках с ориентацией (0001), что обеспечивает получение ориентированных пленок с осью [0001] перпендикулярно плоскости подложки [15]. Этот метод напыления приводит к созданию пленок с дефицитом кислорода, поэтому они дополнительно отжигались на воздухе для насыщения кислородом. Такой отжиг приводит к уменьшению кислородных вакансий и, как следствие, к уменьшению донорных центров. В результате были получены гранулированные пленки оксида цинка, содержащие как донорные, так и акцепторные центры.

В качестве омических контактов использовались алюминиевые электроды, полученные методом вакуумного термического напыления. Для исключения фотохимических процессов на поверхности пленки покрывали защитным слоем MgF_2 . Измерения фото- и темновой проводимости осуществлялись с использованием планарной структуры Al/ZnO:Li/Al или Al/ZnO:Ga/Al.

Для локальных измерений плотности тока была разработана установка, блок-схема которой представлена на рис.1. Через планарную структуру Al/ZnO:Ga/Al или Al/ZnO:Li/Al пропускали электрический ток с частотой 175 Гц. Величина локального тока измерялась с использованием магнитных головок типа MIG от жестких дисков ST-251, которые работали в режиме трансформатора тока. Если токовый канал находится в положении 1 (рис.1б), сигнал на выходе трансформатора отсутствует. Если же токовый канал расположен в положении 2, т.е. в зоне воздушного зазора магнитной головки, то токовый сигнал на выходе трансформатора пропорционален величине локального тока в области воздушного зазора. Регистрация сигнала от магнитной головки осуществлялась с помощью синхронного нановольтметра.

Сканирование образца проводилось параллельно или перпендикулярно линии тока (на рисунке указано стрелками А и В), механическое перемещение головки осуществлялось с использованием привода Z612 фирмы THORLABS. Управление экспериментом проводилось с помощью DAQ-системы фирмы National Instruments. Было разработано математическое обеспечение и созданы виртуальные инструменты для измерения характеристик пленок.

Для проверки предложенной схемы измерений были изготовлены тестовые проводящие структуры в виде одномерных и двумерных решеток на подложке из стекла. Проводники из серебра наносились термическим способом с

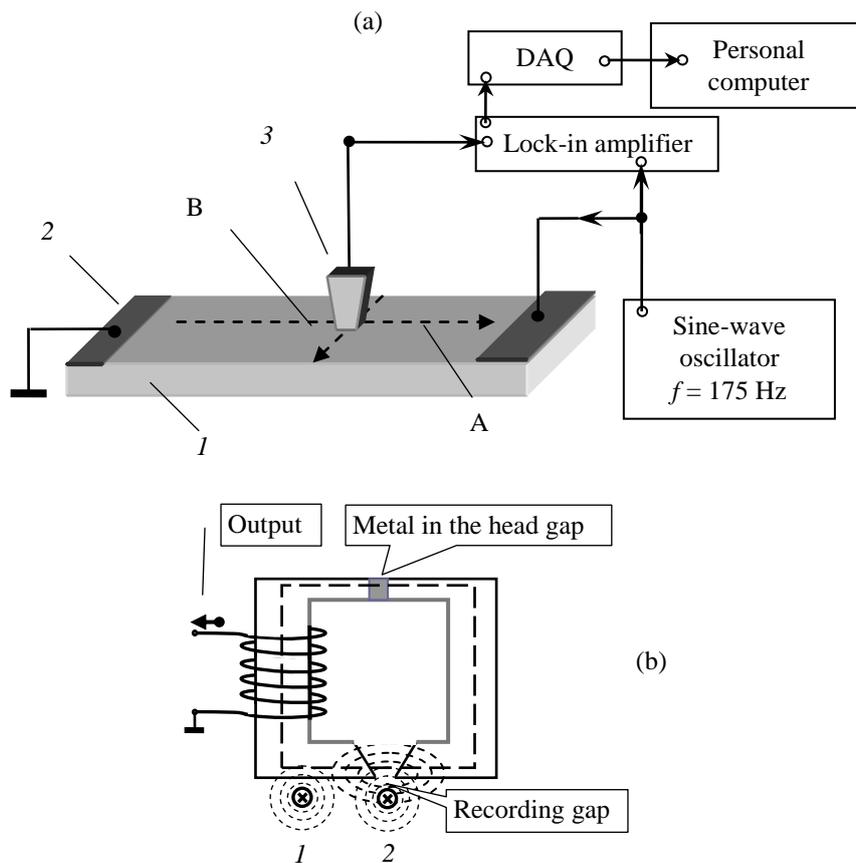


Рис.1. (а) Блок-схема установки для локальных измерений плотности тока. 1 – планарная структура A/ZnO:Ga/Al или Al/ZnO:Li/Al, 2 – металлические электроды, 3 – магнитная головка типа MIG, работающая в режиме (b) трансформатора тока.

использованием трафаретов, толщина слоя составляла ~ 200 нм, а ширина и расстояние между ними – 31 мкм. Тем самым были изготовлены одномерные проводящие сетки с шагом 62 мкм или пространственной частотой 16.1 лин/мм. На рис.2 представлены результаты тестирования, из которых видно, что токи регистрируются в каждом проводнике, а на Фурье-образе токового сигнала виден пик на пространственной частоте $\Lambda = 15.92$ лин/мм. Для вычисления Фурье-образа использовался алгоритм быстрого преобразования Фурье (FFT).

Для изучения морфологии пленок ZnO, кристаллического качества и размеров кристаллитов применяли сканирующий электронный микроскоп Vega 5130MM и рентгеновский дифрактометр ДРОН (излучение CuK α с $\lambda = 0.1542$ нм). Средний размер кристаллитов в пленках определялся по ширине профиля дифракционного пика по формуле Шеррера. Было обнаружено, что размер гранул увеличивается от 20 нм до 80 нм при увеличении толщины пленки от 100 до 800 нм.

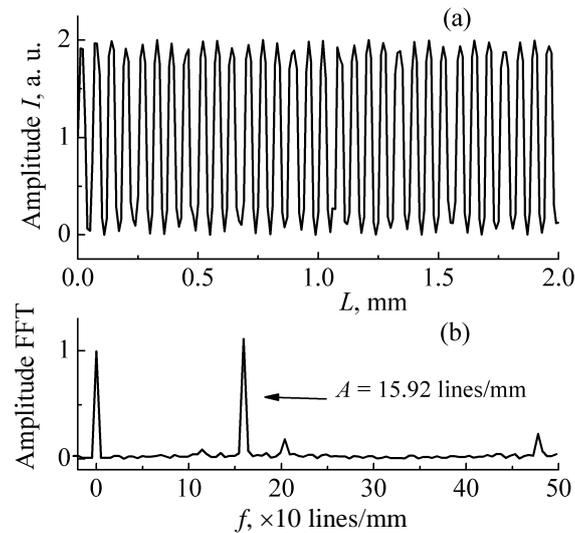


Рис.2. (а) Зависимость тока от пространственной координаты и (b) Фурье-образ пространственного распределения тока при сканировании тестовой структуры.

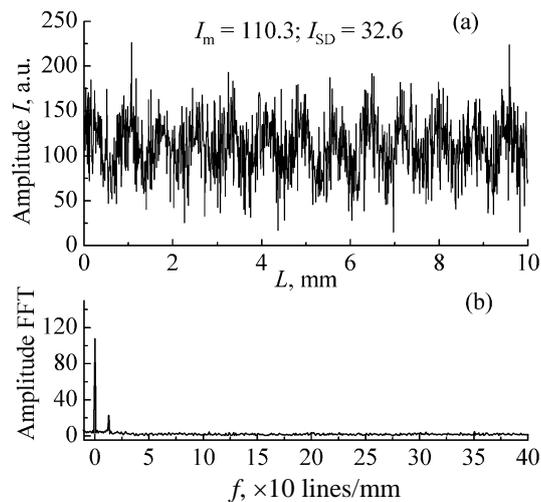


Рис.3. (а) Зависимость тока от пространственной координаты для пленок ZnO:Ga с толщиной 126 нм в состоянии 3 (начало процесса просачивания) при сканировании перпендикулярно к линии тока. (b) Фурье образ пространственного распределения тока.

3. Результаты и обсуждение

На рис.3а представлена зависимость величины тока от пространственной координаты при сканировании перпендикулярно линии тока для пленок ZnO:Ga в состоянии 3 (начало процесса просачивания). На рис.3б приведен Фурье-образ пространственной зависимости тока. Как видно из рисунков, величина тока имеет большие пространственные флуктуации (на рисунке указаны средняя величина

тока I_m и стандартное среднеквадратичное отклонение I_{SD}). На Фурье-образе выделяется пик, соответствующий пространственной частоте 12.7 лин/мм. Это означает, что перколяционные гранулы (кластеры проводимости) имеют в этом направлении характерный размер 78.7 мкм.

На рис.4а представлена зависимость величины тока от пространственной координаты при параллельном сканировании вдоль линии тока для тех же пленок, а на рис.4б приведен соответствующий Фурье-образ пространственной зависимости тока. Как видно из рисунков, величина тока имеет пространственные флуктуации такого же порядка, что и при измерении перпендикулярно линиям тока (на рисунке также указаны средняя величина I_m и стандартное среднеквадратичное отклонение I_{SD}). На Фурье-образе выделяется пик, обусловленный пространственной частотой 55 лин/мм, что соответствует 18.1 мкм. Эти измерения показывают, что перколяционные гранулы проводимости в пленках ZnO:Ga в состоянии 3 имеют характерный размер 78×18.1 мкм².

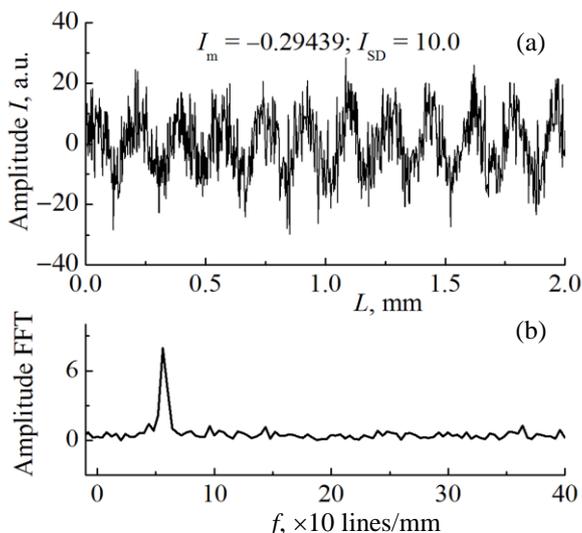


Рис.4. (а) Зависимость тока от пространственной координаты для пленок ZnO:Ga в состоянии 3 (начало процесса просачивания) при сканировании параллельно к линиям тока. (б) Фурье-образ пространственного распределения тока.

На рис.5 приведены такие же зависимости для пленок ZnO:Ga, но в состоянии 4 при сканировании перпендикулярно к линиям тока. Видно, что величина пространственных флуктуаций уменьшается, изменяется также Фурье-образ пространственной зависимости тока – появляются два характерных размера. На Фурье-образе выделяются два пика: А = 120 лин/мм и В = 335 лин/мм. При сканировании вдоль линии тока наблюдается один характерный размер В = 335 лин/мм. Один из характерных размеров 335лин/мм, который соответствует размеру гранул 2.98 мкм, наблюдается и в изображениях, полученных с помощью сканирующего электронного микроскопа.

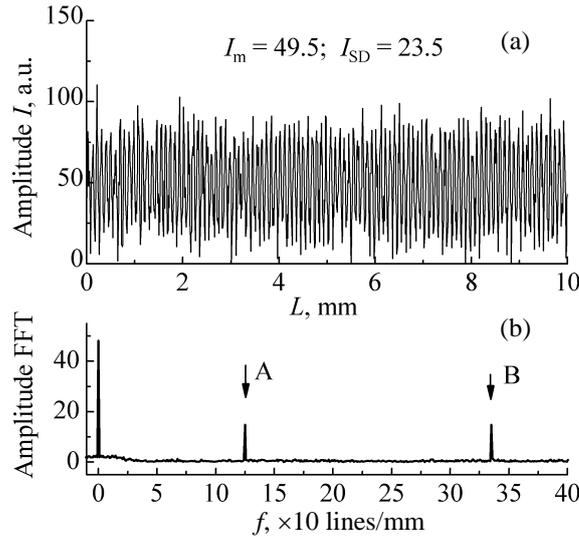


Рис.5. (а) Зависимость тока от пространственной координаты для пленок ZnO:Ga с толщиной 320 нм в состоянии 4 при сканировании перпендикулярно к линиям тока. (б) Фурье-образ пространственного распределения плотности тока.

На рис.6 представлены такие же зависимости для пленок ZnO:Ga в состоянии 4, но, по сравнению с пленкой на рис.5, толщина пленки здесь существенно больше (800 нм). Видно, что величина пространственных флуктуаций продолжает уменьшаться, изменяются также соответствующие размеры пространственной частоты: $A = 94$ лин/мм и $B = 140$ лин/мм.

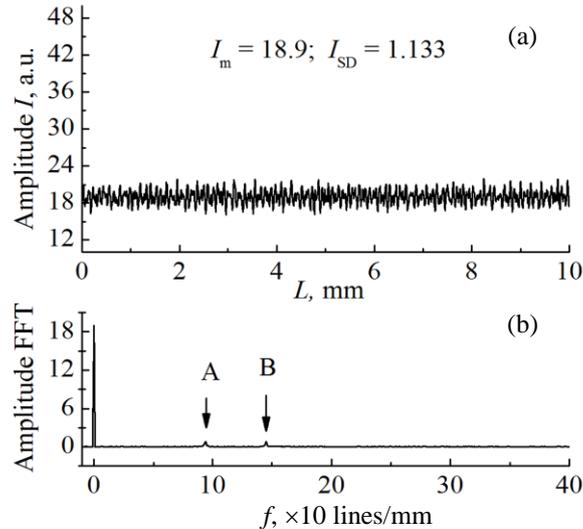


Рис.6. (а) Зависимость тока от пространственной координаты для пленок ZnO:Ga в состоянии 4 с толщиной 800 нм при сканировании перпендикулярно к линиям тока. (б) Фурье образ пространственного распределения плотности тока.

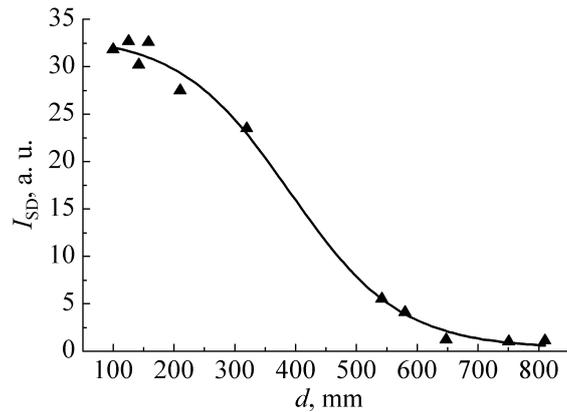


Рис.7. Зависимость среднеквадратичного отклонения пространственных флуктуаций тока от толщины пленок ZnO:Ga.

В области перколяционной проводимости наблюдается зависимость величины пространственных флуктуаций от толщины плёнки. На рис.7 представлена зависимость среднеквадратичного отклонения (I_{SD}) пространственных флуктуаций от толщины пленки. Как видно из рисунка, величина пространственных флуктуаций резко уменьшается в области толщин 300–500 нм.

Микрофотографии пленок, полученные с помощью сканирующего электронного микроскопа, были использованы для определения размеров формирующих пленку наночастиц. В качестве размера выбирался диаметр окружности, в которую вписывалось изображение частицы. На основании полученных данных строились гистограммы статистического распределения частиц по размерам и зависимость концентрации гранул от размера. Полученные зависимости аппроксимировались функцией Гаусса. На рис.8 представлены гистограммы распределения гранул по размерам в пленках ZnO:Ga, построенные по

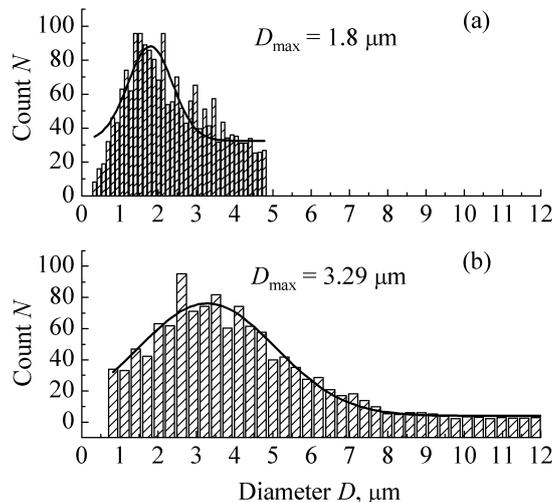


Рис.8. Распределение гранул по размерам для пленок ZnO:Ga с толщинами: (a) 120 нм и (b) 550 нм.

результатам статистического анализа изображений электронного микроскопа для пленок толщинами 120 нм (а) и 550 нм (b). С увеличением толщины плёнки видно небольшое смещение максимума распределения. Как отмечалось выше, при исследовании пространственных флуктуаций тока наблюдается характерная пространственная частота 335 лин/мм, соответствующая размеру гранул 3 мкм. Из гистограмм видно, что в пленке с толщиной 550 нм наблюдается высокая концентрация гранул такого размера.

Проводились также исследования гранулированных пленок ZnO с акцепторной примесью лития. В таких пленках присутствуют как акцепторные, так и донорные центры, обусловленные междоузельными ионами цинка и кислородными вакансиями. На рис.9а приведена зависимость тока от пространственной координаты при сканировании перпендикулярно к линиям тока для пленок ZnO:Li в состоянии 3 (начало процесса просачивания). На рис.9б приведен Фурье-образ пространственной зависимости тока. Как видно из рисунка, плотность тока имеет достаточно большие пространственные флуктуации, а Фурье-образ не имеет выделенных пиков. Это означает, что для пленок ZnO:Li перколяционные кластеры не имеют характерного размера. Необходимо отметить, что эти пленки обладают гораздо большим сопротивлением, чем беспримесные и с примесью Ga.

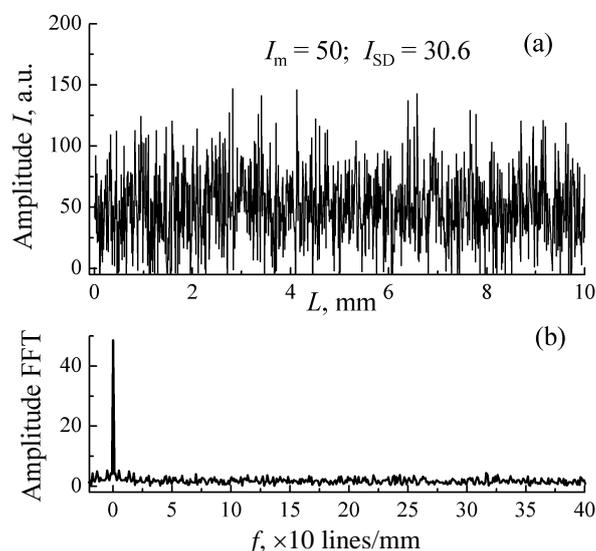


Рис.9. (а) Зависимость тока от пространственной координаты для пленок ZnO:Li в состоянии 3. (b) Фурье-образ пространственного распределения тока.

При освещении этой пленки УФ излучением с энергией фотонов 3.2 эВ наряду с темновым током появляется и фототок. Учитывая, что суммарный фототок намного превышает темновой ток, мы предполагаем, что в этом случае пространственное распределение обусловлено именно фототоком.

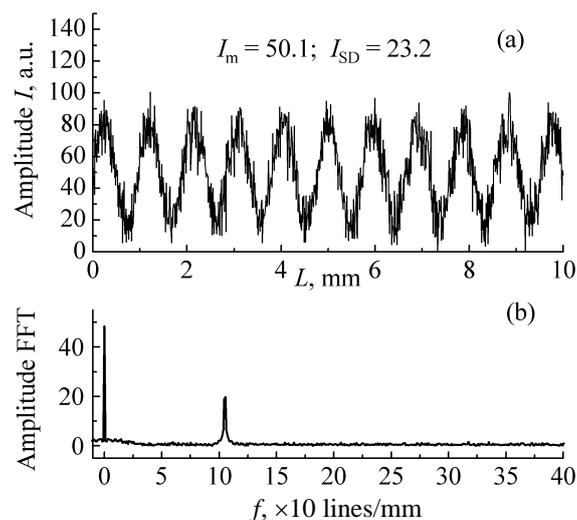


Рис.10. (а) Зависимость фототока от пространственной координаты для пленок ZnO:Li в состоянии 3. (б) Фурье образ пространственно-го распределения фототока.

На рис.10 приведены зависимости фототока для пленок ZnO:Li в состоянии 3. Видно, что при освещении появляются кластеры с характерным размером. Если для темнового тока перколяционный кластер не имеет характерного размера, то при освещении и доминировании фототока на той же пленке наблюдается появление периодической структуры, и на Фурье-образе выделяется пик, обусловленный новой пространственной частотой 127 лин/мм. Это означает, что перколяционные кластеры фототока имеют характерный размер 7.8 мкм.

4. Заключение

В настоящей работе предложен и экспериментально реализован принципиально новый метод измерения локальной плотности тока, который позволяет диагностировать одномерную электропроводимость в тонких пленках и определять размер кластера проводимости в гранулированных пленках. Проведенные измерения размера гранул с использованием сканирующего электронного микроскопа показали, что размеры гранул пленок ZnO:Ga и размер кластера проводимости не коррелируют по величине. Темновая и фотопроводимости одних и тех же пленок ZnO:Li имеют разную структуру кластера проводимости: если для темновых токов перколяционные кластеры не имеют характерного размера, то для фототока перколяционные кластеры имеют характерный размер 10–100 мкм.

Работа выполнена в рамках государственного финансирования Республики Армения и гранта ANSEF № 3635.

ЛИТЕРАТУРА

1. **A. Mnyusiwalla, A.S. Daar, P.A. Singer.** Nanotechnology, **14**, R9 (2003).
2. **R.H. Chen, K.K. Likharev.** Appl. Phys. Lett., **72**, 61 (1998).
3. **K. Deppert, L. Samuelson.** Appl. Phys. Lett., **68**, 1409 (1996).
4. **Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос.** Электронные свойства легированных полупроводников. М., Наука, 1979.
5. **B. Abeles, P. Sheng, M.D. Coutts, Y. Arie.** Adv. Phys., **24**, 407 (1975).
6. **E. Guevas, M. Ortuno, J. Ruiz.** Phys. Rev. Lett., **71**, 1871 (1993).
7. **N.R. Aghamalyan, R.K. Hovsepyan, A.R. Poghosyan, B. von Roedern, E.S. Vardanyan.** J. Optoelect. Advan. Materials, **9**, 1418 (2007).
8. **Y. Liu, C.R. Gorla.** J. Electronic Materials, **29**, 69 (2000).
9. **W. Yang, R.D. Vispute.** Appl. Phys. Lett., **78**, 2787 (2001).
10. **Н.Р. Агамалян, Т.А. Асланян, Э.С. Варданян, Е.А. Кафадарян, Р.К. Овсепян, С.И. Петросян, А.Р. Погосян.** Изв. НАН Армении, Физика, **47**, 417 (2012).
11. **S.A. Studenikin, M. Cocivera.** J. Appl. Phys., **91**, 5060 (2002).
12. **N.R. Aghamalyan, R.K. Hovsepyan, A.R. Poghosyan, V.G. Lazaryan.** Proc. SPIE, **5560**, 235 (2004).
13. **R.H. Chen, K.K. Likharev.** Appl. Phys. Lett., **72**, 61 (1998).
14. **В.Ф. Гантмахер.** Электроны в неупорядоченных средах. М., Физматлит, 2005.

ZnO ԼԱՅՆԳՈՏԻՎՈՒՄ ԿԻՍԱՀԱՂՈՐԴԻՉՆԵՐԻ ՎՐԱ ՀԻՄՆՎԱԾ
ԳՐԱՆՈՒԼԱՑՎԱԾ ԿԱՌՈՒՑՎԱԾՔՆԵՐԻ ՀԱՂՈՐԴԱԿԱՆՈՒԹՅՈՒՆԸ

Ռ.Կ. ՀՈՎՍԵՓՅԱՆ, Ա.Ր. ՊՈՂՈՍՅԱՆ, Է.Ե. ԷԼԲԱԿՅԱՆ

Կատարված են փորձարարական հետազոտություններ ZnO կիսահաղորդիչների վրա հիմնված գրանուլացված կառուցվածքների: Հետազոտվել են ակցեպտորային կամ դոնորային կոմպլեքսների և խարնուրդների (Li կամ Ga) ազդեցությունը կրիստալիտների կառուցվածքային հաղորդականության վրա: Հետազոտված է նաև գրանուլաների չափսերի և կրիստալիտների կառուցվածքի ազդեցությունը հաղորդականության կինետիկայի վրա: Մշակված է նոր մեթոդ որոշելու համար հոսանքի կախվածությունը կոորդինատներից բարակ թաղանթներում: Փորձարարական արդյունքները բացատրվում են պերկոլյացիոն տեսության հիման վրա:

CONDUCTIVITY OF THE GRANULAR STRUCTURES BASED ON WIDE-BAND ZnO SEMICONDUCTORS

R.K. HOVSEPYAN, A.R. POGHOSYAN, E.Y. ELBAKYAN

The experimental investigations of granular structures based on ZnO thin films have been carried out. The influence of acceptor or donor complex, caused by oxygen vacancy and interstitial zinc atom, and impurities (Li or Ga) on the crystallite structure conductivity has been investigated. The effect of granule size and crystallite structure on conductivity kinetics was studied. The new method for determination of current density depending on coordinates in thin conducting film was developed. The experimental results are interpreted on the basis of percolation theory.

УДК 621.38

ТРЕХСЛОЙНЫЕ АНТИОТРАЖАЮЩИЕ АЛМАЗОПОДОБНЫЕ УГЛЕРОДНЫЕ ПЛЕНКИ НА СТЕКЛЕ

Ж.Р. ПАНОСЯН^{1*}, А.Ж. ХАЧАТРЯН¹, Д.Б. АЙРАПЕТЯН^{1,2},
С.С. ВОСКАНЯН¹, Е.В. ЕНГИБАРЯН¹

¹Государственный инженерный университет Армении, Ереван

²Российско-Армянский (Славянский) государственный университет, Ереван

*e-mail: zpanosyan@yahoo.com

(Поступила в редакцию 12 февраля 2014 г.)

Методом химического газофазного плазменного осаждения выращены трехслойные алмазоподобные углеродные пленки на стекле путем разложения толуола и молекулярного азота. Методом обобщенной трансфер-матрицы теоретически рассчитаны оптимальные параметры трехслойных структур, для которых величина отражения в интервале длин волн 400–750 нм принимает минимальные значения. Выявлена зависимость показателя преломления полученных пленок от мощности плазмы и концентрации азота в газовой смеси.

1. Введение

Алмазоподобные углеродные пленки (АУП) с содержанием различных углеродных наноструктур, таких как нанокластеры, фуллерены, нанотрубки, нанонити и т.д., вызывают повышенный интерес, так как уникальные физико-химические свойства этих пленок позволяют использовать их в качестве многофункциональных покрытий [1-3]. Существуют различные методы получения АУП, наиболее распространенными из которых являются вакуумные и химические методы нанесения покрытий [4-7].

В зависимости от условий выращивания пленок соотношение относительного фазового содержания атомов углерода (sp^3 и sp^2 гибридизации) в структуре пленок меняется в широких пределах [2,4]. Это обстоятельство, в свою очередь, определяет механические, электрические и оптические свойства получаемых покрытий [4,8]. Соотношение фаз sp^3 и sp^2 в АУП исследуется с помощью ИК спектроскопии и рамановского рассеяния [6,9-14].

Одним из многочисленных применений АУП является выращивание этих пленок на поверхностях различных подложек и на солнечных преобразователях в качестве просветляющих покрытий [15-18]. Эти покрытия используются в тех приборах, где нужно уменьшить отражение от поверхности, таким образом увеличивая пропускные способности системы. Применение двухслойных просветляющих и защитных покрытий позволяет почти полностью устранить отражение света от поверхности для определенных длин волн [17]. Трехслойные просветляющие покрытия с различными показателями преломления дают

возможность получить равномерно низкое отражение в широком спектральном интервале, например, во всем видимом диапазоне [19]. Покрытия из АУП также защищают подложки от механических воздействий.

Целью данной работы было теоретическое моделирование и технологическая разработка трехмерных структур из АУП, дающих возможность получить просветление в видимой области спектра.

2. Экспериментальная часть

Для выращивания АУП на подложке из стекла марки М4 был использован метод химического газофазного плазменного осаждения [20,21]. Во время выращивания пленок используется смесь углеводородного соединения C_7H_8 (толуол) и молекулярного азота. Модернизированная технология позволяет получать пленки с толщиной от 40 до 120 нм.

Одним из известных методов изменения проводимости (сопротивления) АУП является внедрение различных примесей, в частности, атомов металлов, азота, бора и т.д. Однако на практике внедрение атомов азота в матрицу АУП, где преобладают связи sp^3 , маловероятно. И наоборот, если в матрице преобладают атомы углерода с sp^2 связями, то вероятность внедрения атомов азота в структуру АУП возрастает. Наличие азота во время синтеза пленок способствует образованию в строении АУП кластеров, в которых преобладают атомы углерода с sp^2 гибридизацией. При этом надо отметить, что азот выступает в качестве донора и способствует росту проводимости пленок. Однако, с увеличением количества sp^2 связей в матрице АУП его оптические характеристики меняются, в частности, пропускание в оптическом диапазоне уменьшается. Поэтому во время роста АУП, с помощью технологических параметров нужно найти оптимальное соотношение sp^3 и sp^2 связей, при котором пропускные характеристики пленок существенно не меняются.

Для получения АУП с наперед заданными физическими свойствами был разработан плазменный метод осаждения с легированием атомами азота. Выращивание таких пленок происходит с использованием источника постоянного тока, который установлен на модернизированной вакуумной технологической установке марки УВН-71П-3. В применяемом ионном источнике используются скрещенные электрические и магнитные поля. В установке рабочий ток достигает значений $I = 20\text{--}80$ мА при ускоряющих напряжениях $U = 1.5\text{--}4$ кВ, а постоянное магнитное поле имеет значение $H = 0.3\text{--}0.5$ Т. Источник со скрещенными электрическим и магнитным полями позволяет получать расходящийся ионный пучок с диаметром 80 мм на выходе, плотностью ионного тока $J < 0.8$ мА/см² и в области кинетических энергий $E = 20\text{--}400$ эВ.

Осаждение тонких АУП происходило при давлении 10^{-4} Па. Для обеспечения равномерности покрытия подложка вращалась в зоне плазменного потока с определенной скоростью. Толщина покрытий в зависимости от режима осаждения варьировалась в пределах $d = 80\text{--}160$ нм. Толщины выращиваемых покрытий измерялись как эллипсометром марки LEF752, так и с помощью интер-

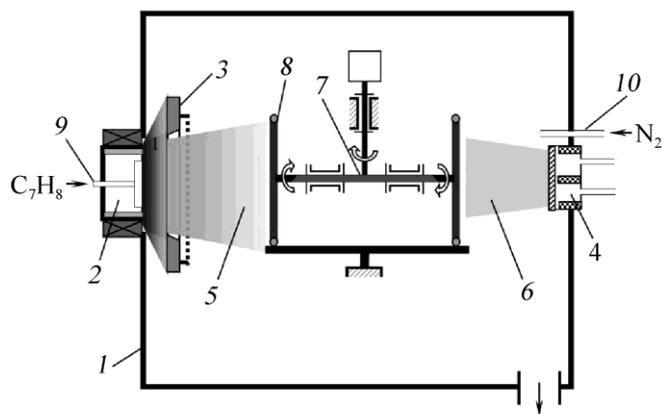


Рис.1. Схема установки для синтеза АУП. 1 – вакуумная камера, 2 – ионный источник, 3 – электродная система, 4 – магнетрон, 5 – поток плазмы ионного источника, 6 – поток плазмы магнетрона, 7 – система вращения подложек, 8 – подложкодержатель, 9 – трубка для подачи толуола, 10 – трубка для подачи азота.

ференционного микроскопа МИИ-4.

На рис.1 приведена схема установки для получения АУП. Подача газа в камеру происходит отдельно, что позволяет активировать молекулярный азот магнетронным методом [21]. При напряжении от 2 до 5 кВ между анодом и катодом происходит ионизация газовой смеси и образуется плазма. Для управления кинетической энергией ионов, которые достигают подложки, создается отрицательное смещение на подложке. Таким образом создается однородный поток положительных ионов C^+ , H^+ и N^+ , которые образуют АУП на поверхности стекла.

3. Теоретический расчет параметров просветляющих пленок

Так как получение просветляющих слоев АУП на разных подложках требует затраты специальных материалов и времени, то логично сперва теоретически рассчитать оптимальные параметры многослойных систем из АУП, которые должны быть выращены. Параметрами многослойных АУП структур, которые существенно влияют на просветляющие свойства этих систем, являются толщина и показатель преломления отдельного слоя.

Основой для представленных ниже вычислений служит так называемый метод обобщенной трансфер-матрицы, развитый для определения параметров рассеяния произвольной многослойной структуры при наличии поглощения [22,23]. Согласно данному методу, между амплитудами сходящихся и расходящихся волн по обе стороны слоистой структуры существует линейная связь, которая может быть представлена соответствующей трансфер-матрицей. Эта матрица, записанная посредством амплитуды отражения $R(k)$ и прохождения $T(k)$, имеет вид

$$\hat{M} = \begin{pmatrix} \frac{1}{T(-k)} & \frac{-R(-k)}{T(-k)} \\ \frac{-R(k)}{T(k)} & \frac{1}{T(k)} \end{pmatrix}, \quad (1)$$

Основной результат теории матриц переноса гласит, что трансфер-матрица всей структуры равна произведению трансфер-матриц отдельных ее слоев, взятых в определенном порядке. Применительно к рассматриваемой нами четырехслойной структуре данное утверждение записывается в виде следующего матричного равенства:

$$\hat{M} = \hat{M}_4 \hat{M}_3 \hat{M}_2 \hat{M}_1, \quad (2)$$

где \hat{M}_j является трансфер-матрицей j -ого слоя и слои нумеруются слева направо. Заметим, что согласно принятой нумерации, значение $j=4$ соответствует подложке. Вводя для каждого из слоев структуры свои амплитуды отражения и прохождения r_j и t_j , из (1) и (2) можно записать следующее матричное уравнение:

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{T(-k)} & \frac{-R(-k)}{T(-k)} \\ \frac{-R(k)}{T(k)} & \frac{1}{T(k)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{T_s(-k)} & \frac{-R_s(-k)}{T_s(-k)} \\ \frac{-R_s(k)}{T_s(k)} & \frac{1}{T_s(k)} \end{pmatrix} \prod_{j=3}^1 \begin{pmatrix} \frac{1}{t_j(-k)} & \frac{-r_j(-k)}{t_j(-k)} \\ \frac{-r_j(k)}{t_j(k)} & \frac{1}{t_j(k)} \end{pmatrix}, \quad (3)$$

где для амплитуд отражения и прохождения подложки введены обозначения $r_4 \equiv R_s(k)$ и $t_4 \equiv T_s(k)$.

Для случая однородных слоев

$$\frac{1}{t_j(k)} = \exp\{ika_j\} \left[\cos[q_j a_j] - i \frac{q_j^2 + k^2}{2kq_j} \sin[q_j a_j] \right], \quad (4)$$

$$\frac{r^{(j)}(k)}{t^{(j)}(k)} = i \frac{q_j^2 - k^2}{2kq_j} \exp\{i2kb_j\} \sin[q_j a_j], \quad (5)$$

где $j=1,2,3,4$, a_j – толщина j -ого слоя, b_j – координата середины j -ого слоя, $q_j = k\varepsilon_j^{1/2}$, $k = \omega/c$ и ε_j – диэлектрическая проницаемость j -ого слоя, которая, как было отмечено выше, может также являться комплексной величиной. Ясно, что вычисление произведения (3) сразу приводит к окончательному выражению для величин $R(k)$ и $T(k)$, посредством которых выражаются интенсивности отраженного и прошедшего излучений:

$$I_R(\lambda) = RR^*, \quad I_T(\lambda) = TT^*. \quad (6)$$

Для сравнения теоретических расчетов интенсивности пропускания и отражения волны с экспериментальными данными необходимо иметь в виду, что любой прибор измеряет интенсивность излучения в определенной малой, но все же конечной области частот: $I(\lambda)\Delta\lambda$, где λ – длина волны в вакууме. Вели-

чина $d\lambda$ является важной характеристикой измерительного прибора, которая применительно к нашему случаю имеет порядок нескольких ангстрем. Согласно вышесказанному, для проведения соответствующего сравнения необходимо усреднение теоретически рассчитанной интенсивности по малому интервалу $\Delta\lambda$:

$$\bar{I}(\lambda) = \frac{1}{\Delta\lambda} \int_{\lambda-\Delta\lambda/2}^{\lambda+\Delta\lambda/2} I(\lambda)\Delta\lambda, \quad (7)$$

где $\bar{I}(\lambda)$ означает усредненную по малому интервалу интенсивность.

4. Результаты и обсуждение

Для исследования структуры АУП использовались рамановские спектры рассеяния, так как они дают возможность различить и выявить соотношение фаз sp^3 и sp^2 в АУП. Исследования рамановских спектров полученных АУП проводились с помощью спектрометра Nicolet 5700 NXR с использованием в качестве источника возбуждения лазера с длиной волны 1064 нм. Рамановский спектр АУП, полученных при соотношении толуола и азота 80:20, показан на рис.2. На рисунке приведены экспериментальные кривые, расчетные гауссовские компоненты и суммарная огибающая гауссовских контуров, которая с большой точностью совпадает с экспериментальной кривой. Рамановский спектр разложен на две гауссовские кривые соответственно на $\approx 1360 \text{ см}^{-1}$ и $\approx 1560 \text{ см}^{-1}$.

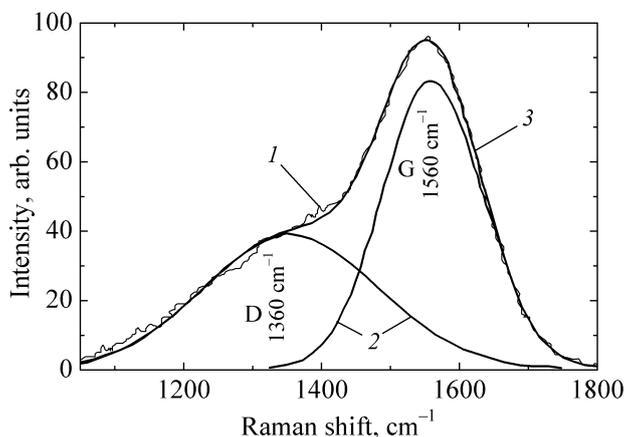


Рис.2. Рамановский спектр АУП, полученный при соотношении толуола и азота 80:20.

Показатель преломления выращиваемых АУП можно изменить с помощью изменения мощности плазмы и концентрации азота. Для выявления этой зависимости проводились детальные измерения, результаты которых приведены на рис.3. Как видно из рисунка, с увеличением мощности плазмы в пределах от 50 до 120 Вт показатель преломления в среднем увеличивается от значения

1.6 до 2.5. Выше значения 120 Вт с увеличением мощности плазмы показатель преломления или не изменяется, или уменьшается в зависимости от количества азота.

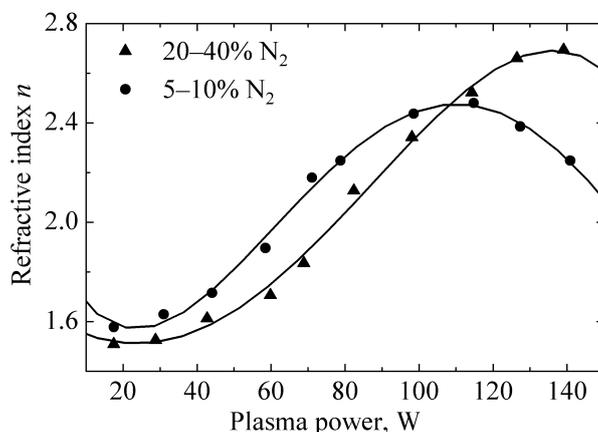


Рис.3. Зависимость показателя преломления АУП от мощности плазмы при разных концентрациях азота.

Исходя из теоретических расчетов, были выращены трехслойные антиотражающие системы на подложке из стекла. Слои АУП антиотражающей системы имеют параметры, которые были рассчитаны с помощью вышеприведенных уравнений и программы Mathematica 8.0. На рис.4 приведены экспериментально измеренные и теоретически рассчитанные кривые отражения в зависимости от длины волны параметров трехслойной структуры, схематически показанной на вставке. Трехслойная система имеет следующие параметры: $d_1 = 90$ нм, $n_1 = 1.45$, $d_2 = 130$ нм, $n_2 = 1.9$, $d_3 = 70$ нм, $n_3 = 1.6$ и $n = 1.44$ для подложки из стекла. Как видно, теоретически рассчитанная и экспериментально измеренная кривые различаются по величине, но их поведение одинаково. Это различие объясняется тем, что АУП имеют некоторую неоднородность в пока-

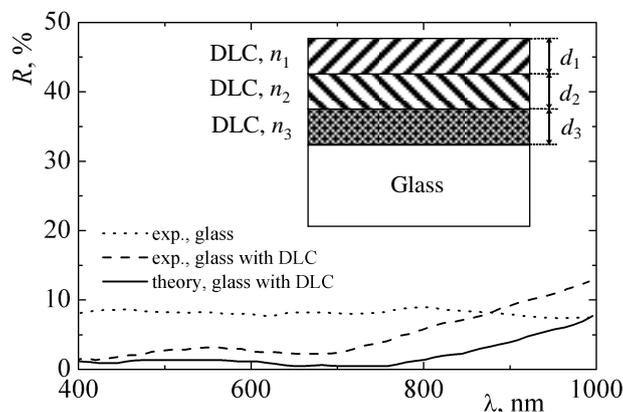


Рис.4. Зависимость отражения АУП от длины волны.

зателе преломления по глубине к подложке. Кроме того, в теоретических расчетах не учитывается дисперсия показателя преломления АУП и подложки. Отметим, что минимальное значение экспериментально измеренного отражения примерно равняется 10% на длине волны $\lambda = 488$ нм.

На рис.5 приведены экспериментально измеренные и теоретически рассчитанные кривые пропускания в зависимости от длины волны для той же трехслойной структуры. Как и при отражении, экспериментальные измеренные и теоретически рассчитанные кривые имеют некоторую разницу, но ход кривых совпадает. Кривая пропускания принимает свое максимальное значение 93% при той же длине волны, что и кривая отражения (минимальное). Пропускание стекла без трехслойной структуры принимало максимальное значение 91.6%. Таким образом, трехслойная структура из АУП не только является защитным слоем для стекла, но также увеличивает его пропускные способности, то есть антиотражение. Наконец на рис.6 приведено СЭМ изображение поверхности АУП, где отчетливо виден зернистый характер поверхности АУП.

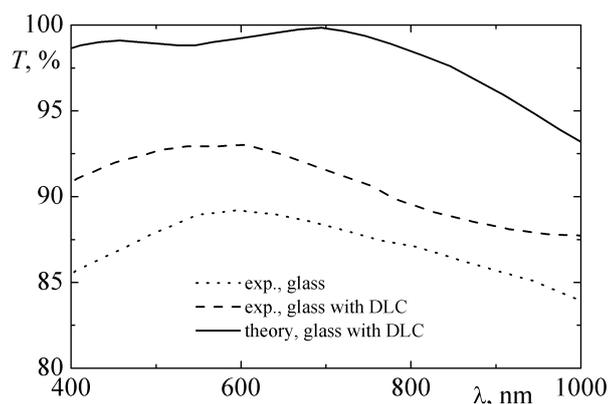


Рис.5. Зависимость пропускания АУП от длины волны.

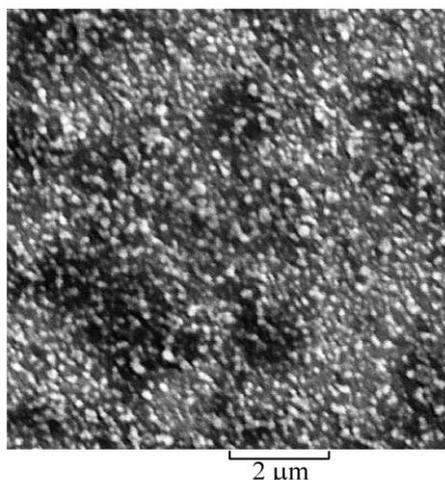


Рис.6. СЭМ изображение поверхности АУП.

5. Заключение

Нами показано, что метод химического газофазного плазменного осаждения дает возможность выращивать трехслойные АУП на стекле из толуола и молекулярного азота с наперед заданными параметрами. Это позволяет получить антиотражающие и защитные покрытия на стекле. Отметим, что отражение АУП в видимой области спектра принимает значение примерно 3%.

ЛИТЕРАТУРА

1. **J. Robertson.** Mater. Sci. Eng., **R37**, 129 (2002).
2. Diamond Films and Coatings, **R.F. Davis** (ed.), William Andrew Publishing, Noyes, 1993.
3. **S. Hidetoshi.** Jap. J. Appl. Phys., **51**, 090120 (2012).
4. **J. Robertson.** Diamond and Relat. Mater., **3**, 361 (1994).
5. **Q. Wei, R.J. Narayan, A.K. Sharma, J. Sankar, J. Narayan.** J. Vac. Sci. Technol. A, **17**, 3406 (1999).
6. **N.K. Cuong, M. Tahara, N. Yamauchi, T. Sone.** Surface and Coatings Technol., **1024**, 174 (2003).
7. **K. Baba, R. Hatada, S. Flege, W. Ensinger, Y. Shibata, J. Nakashima, T. Sawase, T. Morimura.** Vacuum, **89**, 179 (2013).
8. **N. Dwivedi, S. Kumar, H.K. Malik, Govind, C.M.S. Rauthan, O.S. Panwar.** Appl. Surf. Science, **257**, 6804 (2011).
9. **R.D. Mansano, A.P. Mousinho.** Phys. Stat. Sol. (c), **9**, 1431 (2012).
10. **A.H. Mukhtar, J.A. Byrne, J.A.D. McLaughlin, A. Elhissi, W. Ahmed.** Appl. Surf. Science, **273**, 507 (2013).
11. **H. Pang, X. Wang, G. Zhang, H. Chen, et al.,** Appl. Surf. Science, **256**, 6403 (2010).
12. **A. Hu, W.W. Duley.** Chem. Phys. Lett., **450**, 375 (2008).
13. **H. Wong, Y.M. Foong, D.H.C. Chua.** Appl. Surf. Science, **257**, 9616 (2011).
14. **Sh. Ohmagari, T. Yoshitake, A. Nagano, R. Ohtani, H. Setoyama, E. Kobayashi, K. Nagayama.** Diamond and Relat. Mater., **19**, 911 (2010).
15. **W.S. Choi, K. Kim, J. Yi, B. Hong.** Mater. Lett., **62**, 577 (2008).
16. **T.V. Semkina, A.N. Shmyryeva.** Diamond and Relat. Mater., **11**, 1329 (2002).
17. **Zh. Panosyan A. Khachatryan, Y. Yengibaryan, A. Voskanyan, R. Gzraryan.** Proc. 20th European Photovoltaic conference, 2005, p. 236.
18. **W.S. Choi, K. Kim, Yi. Junsin, B. Hong.** Mater. Lett., **62**, 577 (2008).
19. **A. Gharibyan, D.B. Hayrapetyan, Zh. Panosyan, Y. Yengibaryan.** Appl. Optics, **50**, G69 (2012).
20. **Zh. Panosyan, A.V. Meliksetyan, S.S. Voskanyan, Y.V. Yengibaryan, A.A. Sahakyan, A.T. Darbasyan.** Diamond and Relat. Mater., **15**, 394 (2006).
21. **Zh. Panosyan, A. Darbasyan, V. Meliksetyan, S. Voskanyan, A. Voskanyan, A. Sahakyan, R. Gzraryan.** Thin Solid Films, **517**, 5404 (2005).
22. **A.Zh. Khachatryan.** Armenian J. Phys., **3**, 178 (2010).
23. **A.Zh. Khachatryan.** Armenian J. Phys., **4**, 90 (2011).

ԵՌԱՇԵՐՏ ԼՈՒՍԱՊԱՊԱՅԾԱՌԱՅՆՈՂ ԱԾԽԱԾՆԱՅԻՆ
ԱԼՄԱՍՏԱՆՄԱՆ ԹԱՂԱՆԹՆԵՐԸ ԱՊԱԿՈՒ ՎՐԱ
Ժ.Ռ. ՓԱՆՈՍՅԱՆ, Ա.Ժ. ԽԱՉՍՏՐՅԱՆ, Դ.Բ. ՀԱՅՐԱՊԵՏՅԱՆ,
Ս.Ս. ՈՍԿԱՆՅԱՆ, Ե.Վ. ԵՆԳԻԲԱՐՅԱՆ

Քիմիական գազափուլային պլազմային նստեցման մեթոդով ապակու վրա աճեցվել են եռաշերտ ալմաստանման ածխածնային թաղանթներ տոլուոլի և մոլեկուլյար ազոտի բաժանման միջոցով: Ընդհանրացված տրանսֆեր մատրիցի մեթոդի միջոցով տեսականորեն հաշվարկվել են եռաշերտ համակարգի այն օպտիմալ պարամետրերը, որոնց համար անդրադարձման գործակիցը 400-750 նմ ալիքի երկարության միջակայքում ընդունում է նվազագույն արժեք: Դուրս է բերվել ստացված թաղանթների բեկման ցուցչի կախվածությունը պլազմայի հզորությունից և գազային խառնուրդում ազոտի կոնցենտրացիայից:

THREE-LAYER ANTIREFLECTION DIAMOND-LIKE CARBON FILMS ON GLASS
ZH.R. PANOSYAN, A.ZH. KHACHATRIAN, D.B. HAYRAPETYAN,
S.S. VOSKANYAN, Y.V. YENGIBARYAN

Three-layered diamond-like carbon films were grown on the glass from decomposition of toluene and nitrogen by Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition technique. Using the generalized transfer-matrix technique, the optimal parameters of three-layered structures, for which the reflection in the range of 400-750 nm has a minimum, were calculated theoretically. A dependence of the grown films refractive index on the plasma power and nitrogen concentration in the gas mixture was investigated.

УДК 536.413

ОЦЕНКА КОЭФФИЦИЕНТА ТЕПЛООВОГО РАСШИРЕНИЯ ТВЕРДЫХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ДИЭЛЕКТРИКОВ ПРИ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

А.В. ЕГАНЯН¹, А.С. КУЗАНЯН^{1*}, В.С. СТАТОПОУЛОС²

¹Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак, Армения

²General Department of Applied Sciences, Technological Educational Institute of Sterea Ellada, Chalkida, Greece

*e-mail: akuzanyan@yahoo.com

(Поступила в редакцию 22 июля 2014 г.)

Получено обобщенное выражение для приближённой оценки коэффициента теплового линейного расширения твёрдых кристаллических диэлектриков при температурах выше температуры Дебая, которое позволяет вести направленный поиск материалов с требуемым значением коэффициента теплового расширения. На примере редкоземельных магниевого гексаалюминатов показано, что расчёты по полученному выражению хорошо согласуются с экспериментальными значениями. Для этих соединений получено также выражение для оценки в первом приближении величины внутренней энергии кристаллической решетки.

1. Введение

В настоящее время разработка нового поколения теплоизоляционных покрытий газотурбинных генераторов и реактивных двигателей, позволяющих повысить рабочую температуру этих агрегатов на несколько сот градусов, находится в центре внимания ученых и конструкторов. Среди материалов-претендентов на роль верхнего слоя теплоизоляционного покрытия, обладающих повышенной термостойкостью и высокой устойчивостью к термоциклированию, особый интерес представляют редкоземельные магневые гексаалюминаты $RE\text{MgAl}_{11}\text{O}_{19}$, где RE – редкоземельный элемент. Эти соединения имеют пространственную группу $R\bar{6}3/mmc$, структурный тип магнетоплюмбита $\text{PbFe}_{12}\text{O}_{19}$ [1,2], и обладают рядом ценных свойств, основными из которых являются низкая теплопроводность и структурная стабильность при высоких температурах. При направленном поиске модификаций гексаалюминатов с улучшенными характеристиками большое содействие может оказать предварительная оценка их основных теплофизических характеристик. В нашей предыдущей работе [3] было предложено обобщенное выражение для приближенной оценки решеточной составляющей коэффициента теплопроводности твердых кристаллических диэлектриков. В данной работе получено обобщенное выражение для оценки коэффициента теплового линейного расширения твёрдых

кристаллических диэлектриков при температурах выше температуры Дебая ($T > 1250^\circ\text{C}$). На основе этого выражения для гексаалюминатов рассчитан коэффициент теплового линейного расширения в температурной области, которая предполагается рабочей для нового поколения теплоизоляционных покрытий.

Коэффициент теплового линейного расширения представляется в следующем виде [4]

$$\alpha = \frac{A'}{M' V'^{2/3} \theta^2}, \quad (1)$$

где $A' = \text{const}$, M' и V' – усредненные атомные масса и объем, соответственно, θ – температура Дебая. Постоянная A' для простых соединений определяется эмпирическим путем, затем, зная состав соединения и температуру Дебая, вычисляется α . Однако выражение (1) не позволяет делать предварительные оценки и его неудобно применять к сложным соединениям. Нашей задачей являлось определение коэффициента A' и получение наиболее удобного выражения для оценки коэффициента теплового расширения соединения произвольного состава.

2. Обобщенное выражение коэффициента теплового расширения

В первую очередь преобразуем уравнение (1), перейдя от атомного объема к объему элементарной ячейки. Представим M' через M/n , где M – масса атомов элементарной ячейки, а n – число атомов (ионов) в элементарной ячейке. Аналогично $V'^{2/3} \rightarrow (V P/n)^{2/3}$, где V – объем элементарной ячейки, P – коэффициент плотнейшей упаковки, а $A' \rightarrow A = \text{const}$, тогда уравнение (1) примет вид

$$\alpha = \frac{A n^{5/3}}{P^{2/3} M V^{2/3} \theta^2}. \quad (2)$$

Поиск параметра A проводился в предположении, что он должен быть выражен через упругие параметры вещества. Исходя из закона Грюнайзена [5] ($\alpha = C_V \gamma / 3B$, где C_V – удельная теплоемкость при постоянном объеме, γ – постоянная Грюнайзена, B – адиабатический модуль всестороннего сжатия) и с учетом (2), где $A \sim \alpha$, будем искать A в виде

$$A = \frac{9}{4} \frac{3Rn\gamma}{G\delta}, \quad (3)$$

где R – газовая постоянная, δ и G – соответственно коэффициент Пуассона и модуль скольжения.

Для следующего шага было использовано несколько известных соотношений. Первое – для модуля скольжения [6]

$$G = \frac{E}{2(1+\delta)}, \quad (4)$$

где E – модуль Юнга; второе – для коэффициента Пуассона [7]

$$\delta = \frac{4\gamma / 3 - 1}{2\gamma + 1}; \quad (5)$$

третье – полученное в [3] эмпирическое выражение при $T \geq \theta$ для модуля Юнга

$$E = 4788.2\omega^{-1.89}. \quad (6)$$

В последнем структурная рыхлость ω задается выражением

$$\omega = \frac{M}{m\rho} = \frac{M}{m \frac{ZM}{VN_A}} = \frac{0.6022V}{n}, \quad (7)$$

где m – число атомов в молекуле, ρ – плотность, Z – число формульных единиц в элементарной ячейке, $Zm = n$ и N_A – число Авогадро. Уравнение (7) написано в виде, позволяющем размерность V представить в Å^3 .

Если подставить выражение (7) для ω в (6), то получим модуль Юнга

$$E = \frac{12298.779n^{1.86}}{V^{1.86}}. \quad (8)$$

Подставляя выражения (4) и (5) в (3), а также учитывая (8), получим параметр

$$A = \frac{10.9767 \times 10^{-3} R\gamma^2 V^{1.86}}{n^{0.86} (4\gamma - 3)}. \quad (9)$$

Подставляя выражение (9) для A в (2), найдем коэффициент линейного расширения

$$\alpha = \frac{10.9767 \times 10^{-3} R\gamma^2 n^{0.806} V^{6/5}}{(4\gamma - 3) P^{2/3} M \theta^2}. \quad (10)$$

Можно представить α в более простом виде:

$$\alpha = \frac{CV^{6/5}}{M\theta^2}, \quad (11)$$

где параметр C равен

$$C = \frac{10.9767 \times 10^{-3} R\gamma^2 n^{0.806}}{P^{2/3} (4\gamma - 3)}. \quad (12)$$

Связь между параметрами A и C можно представить в виде

$$A = \frac{CV^{1.86} P^{2/3}}{n^{1.66}}. \quad (13)$$

Таким образом, мы получили обобщенное и более удобное для практического использования выражение для коэффициента линейного расширения (11), а также установили связь постоянной A с упругими параметрами вещества.

3. Коэффициент теплового линейного расширения и внутренняя энергия решетки гексаалюминатов

Проведем оценку величины α для некоторых гексаалюминатов. Определим C для гексаалюминатов по формуле (12), предположив, что $\gamma = 1.4$ [6] мало меняется для соединений со структурой гексаалюмината, $n = 64$ и $P \approx 0.72$. Тогда $C \approx 2.3862$, и температура Дебая для гексаалюминатов задается в [3] выражением

$$\theta = \frac{3013.34 \times 10^3}{M^{1/2} V^{0.763}}. \quad (14)$$

Если возвести θ в квадрат и подставить в формулу (11), то для коэффициента теплового линейного расширения гексаалюминатов получим

$$\alpha \approx 2.63 \times 10^{-13} V^{2.726}. \quad (15)$$

Учитывая, что $2.72 \approx e$ (основание натурального логарифма), выражение (15) можно представить в виде

$$\alpha = 2.63 \times 10^{-13} V^e. \quad (16)$$

Данное выражение позволяет оценивать α для гексаалюминатов по известному объему элементарной ячейки соединения – параметру, который в материаловедческих исследованиях определяется одним из первых.

Коэффициент теплопроводности гексаалюминатов при температуре Дебая задается выражением [3]

$$k = \frac{22.931 \times 10^6}{MV^{1.526}}. \quad (17)$$

Используя (15) и (17), можно получить связь между k и α для гексаалюминатов при температуре Дебая в виде

$$\alpha k \cong \frac{6 \times 10^6 V^{6/5}}{M}. \quad (18)$$

Известно, что в первом приближении внутренняя энергия решетки определяется выражением [8]

$$U_0 = \frac{3 C_V}{2 \alpha}. \quad (19)$$

Подставляя $C_V = 3Rn$ и учитывая (10), получим

$$U_0 = \frac{4 \times 10^2 (4\gamma - 3) P^{2/3} n^{1/5} M \theta^2}{\gamma^2 V^{6/5}}. \quad (20)$$

Используя (14) и подставляя значения n , P и γ для гексаалюминатов (в предположении, что от состава к составу γ изменяется незначительно), получим

$$U_0 = 88.12 \times 10^{14} V^{-e}. \quad (21)$$

Уравнение (21) позволяет оценивать внутреннюю энергию решетки гексаалю-

минатов при высоких температурах ($T \geq \theta$), если известен объем элементарной ячейки соединения.

4. Практическая оценка коэффициента теплового линейного расширения и внутренней энергии решетки гексаалюминатов

Оценим значения α для гексаалюминатов $\text{LaMgAl}_{11}\text{O}_{19}$, $\text{SmMgAl}_{11}\text{O}_{19}$, $\text{GdMgAl}_{11}\text{O}_{19}$ и сравним с экспериментальными значениями, полученными в [9].

Для $\text{LaMgAl}_{11}\text{O}_{19}$ при $V = 594.49 \text{ \AA}^3$ [1] значение коэффициента теплового расширения, рассчитанное по формуле (16), будет $\alpha_{\text{cal}} \approx 9.6 \times 10^{-6}$, а при $V = 593.737 \text{ \AA}^3$ [10] – $\alpha_{\text{cal}} \approx 9.56 \times 10^{-6}$. Эти значения хорошо согласуются с полученными в [9] для $\text{LaMgAl}_{11}\text{O}_{19}$ при $T = 1000^\circ\text{C}$ экспериментальными данными $\alpha_{\text{m}} = 9.5 \times 10^{-6}$. Соответственно для

$$\text{SmMgAl}_{11}\text{O}_{19} - V = 589.671 \text{ \AA}^3 [10] \rightarrow \alpha_{\text{cal}} \approx 9.4 \times 10^{-6}, \alpha_{\text{m}} = 9.7 \times 10^{-6} [9];$$

$$\text{GdMgAl}_{11}\text{O}_{19} - V = 586.116 \text{ \AA}^3 [10] \rightarrow \alpha_{\text{cal}} \approx 9.23 \times 10^{-6}, \alpha_{\text{m}} = 9.6 \times 10^{-6} [9].$$

Таким образом, в ряду гексаалюминатов La, Sm и Gd с уменьшением объема элементарной ячейки наблюдается уменьшение значений α_{cal} , тогда как значения α_{m} по данным [9] меняются незначительно. Однако, максимальное различие между вычисленными и экспериментальными значениями в случае $\text{GdMgAl}_{11}\text{O}_{19}$ ($\alpha_{\text{m}} - \alpha_{\text{cal}} = 0.37 \times 10^{-6}$) составляет всего 4 %. Если учесть также ошибку эксперимента, то можно утверждать, что выражение (16) для оценки коэффициента теплового линейного расширения гексаалюминатов позволяет получать значения, находящиеся в хорошем согласии с экспериментом.

Используя приведенные выше данные величины объема элементарной ячейки, можно по формуле (21) оценить внутреннюю энергию решетки гексаалюминатов при высоких температурах ($T \geq \theta$). Зависимость внутренней энергии решетки от объема элементарной ячейки для гексаалюминатов La, Sm и Gd приводится на рис.1. Отметим, что оценив внутреннюю энергию решетки соединения, можно решить ряд важных прикладных задач.

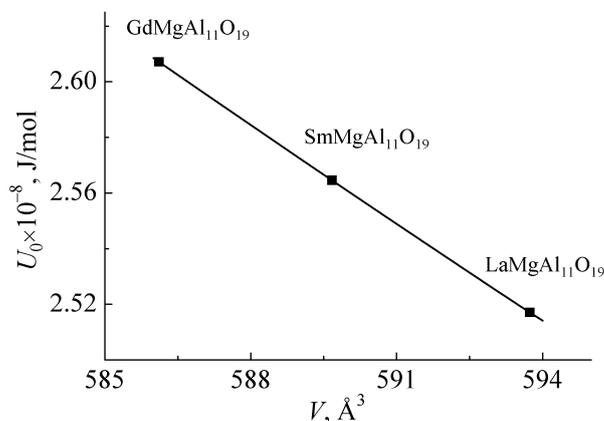


Рис.1. Взаимосвязь внутренней энергии решетки и объема элементарной ячейки гексаалюминатов.

5. Заключение

Для твёрдых кристаллических диэлектриков при высоких температурах ($T \geq \theta$) получены обобщенные выражения для приближенной оценки коэффициента теплового линейного расширения и внутренней энергии кристаллической решетки, устанавливающие связь этих величин с объемом элементарной ячейки и упругими параметрами соединения. На основе этих выражений для редкоземельных магниевых гексаалюминатов при температурах выше температуры Дебая получены простые соотношения, позволяющие оценить коэффициент теплового линейного расширения и внутреннюю энергию кристаллической решетки с использованием значения удельной плотности соединения либо объема элементарной ячейки. Показано, что вычисленные значения коэффициента теплового линейного расширения гексаалюминатов лантана, самария и гадолиния хорошо согласуются с экспериментальными данными.

Авторы благодарны Еврокомиссии за финансирование работы в рамках гранта №310750 «THEBARCODE - Development of multifunctional Thermal Barrier Coatings and modeling tools for high temperature power generation with improved efficiency» FP7-NMP-2012-SMALL-6.

ЛИТЕРАТУРА

1. В.А. Ефремов, Н.Г. Черная, В.К. Трунов, В.Ф. Писаренко. Кристаллография, **33**, 38 (1988).
2. R. Gadow, M. Lischka. Surf. Coat. Technol., **151–152**, 392 (2002).
3. А.В. Еганян, А.С. Кузанын, В. Статопулос. Изв. НАН Армении, Физика, **49**, 278 (2014).
4. И.В. Бондарь. ФТП, **46**, 620 (2012).
5. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Статистическая физика, М., Наука, 1976.
6. X. Chen, Y. Zhao, W. Huang et al. J. Europ. Ceram. Soc., **31**, 2285 (2011).
7. В.Н. Беломестных. Письма в ЖТФ, **30**, 14 (2004).
8. А.И. Слуцкер, Ю.И. Поликарпов, Д.Д. Каров, И.В. Гофман. ФТТ, **55**, 610 (2013).
9. N.P. Bansal, D. Jhu. Surf. Coat. Technol., **202**, 2698 (2008).
10. D. Saber, A.M. Lejus. Mat. Res. Bull., **16**, 1325 (1981).

ESTIMATION OF THERMAL EXPANSION COEFFICIENT IN SOLID CRYSTAL DIELECTRICS AT HIGH TEMPERATURES

A.V. YEGANYAN, A.S. KUZANYAN, V.S. STATHOPOULOS

A generalized expression is obtained for approximate estimation of the thermal linear expansion coefficient in solid crystal dielectrics above the Debye temperature, which allows a goal-directed search for materials having required values of thermal expansion coefficient. The evaluations using the mentioned expression are shown to be in a good agreement with experimentally measured values for rare-earth magnesium hexaaluminates. To estimate, as a first approximation, the quantity of crystal-lattice internal energy, an expression for these compounds is derived as well.

УДК 548.0

ЗАВИСИМОСТЬ ПАРЦИАЛЬНОЙ ПЛОЩАДИ МОЛЕКУЛ ОТ ТРЕТЬЕЙ КОМПОНЕНТЫ В ЛИОТРОПНЫХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛАХ

Г.Г. БАДАЛЯН*, Х.М. КАЗАРЯН, С.М. ЯЙЛОЯН

Ереванский государственный университет, Армения

*e-mail: hbadal@ysu.am

(Поступила в редакцию 7 июля 2014 г.)

Методом дифракции рентгеновских лучей одновременно под большими и малыми углами исследована парциальная площадь одной молекулы лиотропного жидкого кристалла при наличии третьей компоненты. Исследованы системы пентадецилсульфонат-вода при наличии холестерина и лецитин-вода при наличии деканола. Показано, что при увеличении концентрации холестерина уменьшается свободная площадь головки одной амфифильной молекулы, а при увеличении концентрации воды она увеличивается, но медленнее, чем в случае двухкомпонентной системы. Подобная картина наблюдается также для системы лецитин-вода-деканол.

1. Введение

В работе [1] методом одновременной дифракции рентгеновских лучей под большими и малыми углами изучена парциальная площадь (свободная площадь) на одну головку амфифильного вещества, образующего лиотропный жидкий кристалл, и выявлена ее роль для явлений, происходящих в биологических системах. Полученные данные относились только к двухкомпонентным жидким кристаллам, где были использованы ионная система пентадецилсульфонат-водная и цвиттер-ионная лецитин-водная система. Однако, в биологических мембранах присутствуют разные белки и липиды, которые существенно влияют на строение и деятельность бислоя. По этой причине возникает необходимость исследования роли третьей компоненты, в присутствии которой в данной работе изучено изменение свободной площади на одну головку амфифильного вещества в зависимости от концентрации растворителя (воды).

Трехкомпонентные системы имеют большее практическое значение, нежели двухкомпонентные. В системе пентадецилсульфонат-вода в качестве третьей компоненты был использован холестерин, а в системе лецитин-вода – деканол. В настоящей работе, как в работе [1], для определения парциальной площади амфифильной молекулы были использованы дифракционные рефлекссы под большими углами, а площадь на одну молекулу третьей компоненты найдена комбинированием данных, полученных рентгеновской дифракцией под большими и малыми углами в зависимости от концентрации третьей компоненты.

2. Экспериментальная часть

Уравнение для ламеллярной структуры лиотропных жидких кристаллов, впервые полученное Лузатти [2] на основе простых соображений, имеет вид

$$d = d_l \left(1 + \frac{\rho_l c_w}{\rho_w c_l} \right), \quad (1)$$

где d – период идентичности структуры жидкокристаллической системы, d_l – толщина ламеллы, ρ_l и ρ_w – плотность соответственно ламеллы и воды, c_l – концентрация липида, c_w – концентрация воды. Несмотря на то, что уравнение (1) на вид очень простое, оно содержит две следующие особенности. В уравнении (1) d_l – постоянная величина, и при больших концентрациях воды c_w в образце образуется свободная фаза воды, которая не принимает участия в формировании структуры лиотропного жидкого кристалла. Для преодоления этих сложностей авторами работы [1] было предложено двухпараметрическое уравнение Лузатти, которое имеет вид

$$d = l + \left(k + \frac{2m_0}{\rho_w S_0} \right) \frac{c_w}{c_l}, \quad (2)$$

где l – длина одной амфифильной молекулы, k – коэффициент набухания, m_0 – масса одной молекулы и S_0 – парциальная площадь одной амфифильной молекулы.

Для параметров уравнения (1) из эксперимента определяется только d , в то время как для уравнения (2) определяются два параметра: d из дифракции рентгеновских лучей под малыми углами (кассета 8, рис.1) и параметр S_0 из дифракции рентгеновских лучей под большими углами (кассета 7, рис.1).

Эксперименты проводились методом дифракции рентгеновских лучей

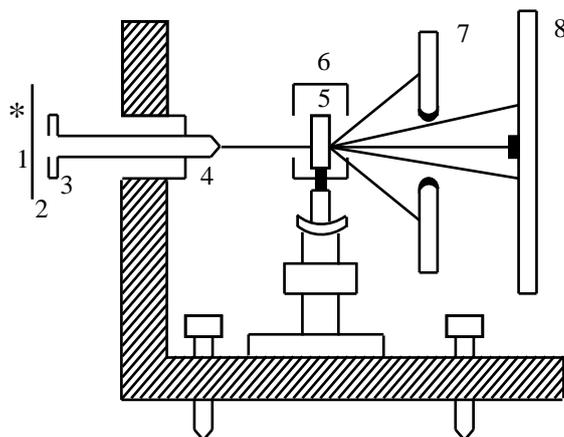


Рис.1. Схема эксперимента: 1 – источник рентгеновских лучей, 2 – фильтр, 3 – диафрагма, 4 – коллиматор, 5 – образец, 6 – камера, 7 и 8 – кассеты с пленкой.

одновременно под малыми и большими углами на рентгеновском аппарате УРС-2 с трубкой БСВ-29 Си. Образцы были изготовлены в виде цилиндра из кварцевого стекла, заполненного лиотропным жидким кристаллом разной концентрации.

3. Результаты и их обсуждение

Для системы пентадецилсульфонат-вода зависимость изменения парциальной площади молекулы от относительной концентрации воды c_l/c_w для каждой компоненты приведена на рис.2.

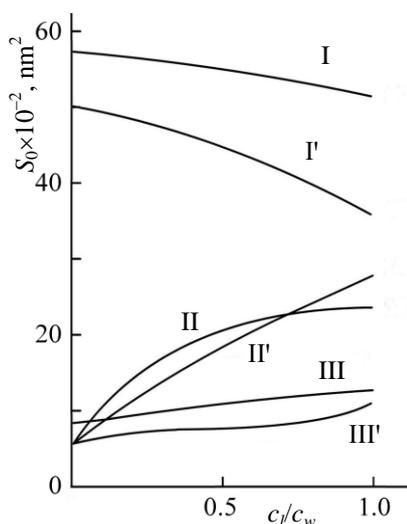


Рис.2. Изменение парциальной площади S_0 молекулы от относительной концентрации воды c_l/c_w для системы пентадецилсульфонат-вода: I – парциальная площадь молекулы пентадецилсульфоната при $c_l/c_x = 0.5\%$, где c_x – концентрация третьей компоненты, I' – при $c_l/c_x = 1.0\%$; II – парциальная площадь молекулы холестерина $c_l/c_x = 0.5\%$, II' – при $c_l/c_x = 1.0\%$; III – парциальная площадь молекулы воды при $c_l/c_x = 0.5\%$, III' – $c_l/c_x = 1.0\%$.

Вышеуказанные парциальные площади для каждой компоненты получены при относительных концентрациях c_l/c_w . Здесь нужно отметить четыре обстоятельства:

1. Свободная площадь одной молекулы воды, которая при той же концентрации равна 0.22 nm^2 , убывает с ростом концентрации холестерина и стремится к нулю при больших концентрациях холестерина. Это можно объяснить свойством локализации холестерина в ламелле, когда взаимодействие хвостов увеличивается настолько, что дальнейшее набухание ламеллы прекращается, вода локализуется в межламеллярных пространствах и, в результате, удаляет ламеллы друг от друга (увеличивается d), не изменяя структуру ламеллы. Это явление можно считать переходом с одномерного набухания к не набухающей

системе [3]. Дальнейший рост концентрации воды приводит к возникновению свободной водной фазы, которая не участвует в образовании жидкого кристалла [4]. По этой причине ее свободная площадь стремится к нулю. Наличие свободной воды с легкостью регистрируется при помощи поляризационного оптического микроскопа (рис.3).

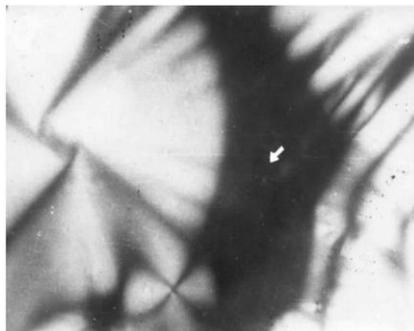


Рис.3. Свободная водная фаза лиотропно жидкокристаллической системы пентадецилсульфонат–вода, концентрация амфифила 52%, увеличение 800 раз.

2. С ростом концентрации воды площадь на одну молекулу амфифила растет медленнее, чем в случае двухкомпонентной системы. Это означает, что наличие холестерина способствует росту вандерваальсовского взаимодействия и, следовательно, оно в состоянии компенсировать электростатическое отталкивание. Это, в свою очередь, способствует стабилизации ламеллы и смещает концентрацию перехода к гексагональной структуре в область более высоких концентраций. А это, в свою очередь, делает возможным убывание количества амфифильного вещества при концентрации мицеллообразования. Поскольку наличие третьей компоненты стабилизирует параметры ламеллы и рост d является результатом только роста межламеллярного водного слоя, следовательно, набухание всего образца есть результат межламеллярного взаимодействия.

3. Площадь на одну молекулу холестерина (рис.2), зависящая от концентрации, непрерывно растет, что типично для характера взаимодействия всех растворителей и растворяющихся материй [5,6]. Аппроксимируя график, можно определить предельную парциальную площадь холестерина, которая равна 0.21 nm^2 и сравнительно меньше, чем поперечное сечение холестерина (0.37 nm^2). Это можно объяснить тем, что в тех молекулах холестерина, которые внедряются в межмолекулярные пространства бислоя, происходят конформационные изменения, уменьшающие поперечные сечения отдельных молекул холестерина. Вместе с этим, в результате взаимодействия холестерина и бислоя последний максимально набухает. Дальнейшее увеличение концентрации воды не влияет на изменение толщины ламеллы, оно просто удаляет их друг от друга, занимая межламеллярные пространства [4]. Рост парциальной площади холе-

стерина, обусловленный его концентрацией, происходит из-за того, что его добавление приводит к упорядочению углеводородных хвостов молекул, составляющих бислои. Вследствие этого освобождается некоторое пространство для парциальных площадей холестерина. При малых концентрациях холестерина углеводородные хвосты упорядочены не полностью, расположены более хаотично и занимают большое пространство.

4. Изменение парциальной площади для амфифильной молекулы более сложное, чем для молекул воды и холестерина. Если убывание парциальной площади амфифильной молекулы при увеличении концентрации холестерина можно объяснить увеличением вандерваальсовских взаимодействий углеводородных хвостов, то при малых концентрациях холестерина резкое увеличение этой парциальной площади трудно интерпретировать. Вероятно, оно объясняется упорядоченностью углеводородных хвостов, которое, в свою очередь, приводит к росту электростатического отталкивания и, следовательно, к удалению амфифильных молекул друг от друга и росту парциальной площади. Возможно также, что увеличение упорядоченности приводит к увеличению взаимодействия воды, находящейся вблизи поверхности ламеллы, вследствие чего увеличивается гидратация одной головки. Из-за отталкивания молекул воды в окружении головки они удаляются друг от друга, а парциальная площадь увеличивается. Более вероятным кажется, что оба механизма роста парциальной площади действуют одновременно. Комбинация этих двух механизмов и является той причиной, которая приводит к резкому росту парциальной площади при малых концентрациях холестерина. Этим объясняется также то, что при малых концентрациях холестерина минимальная парциальная площадь амфифильной головки больше (0.23 нм^2), чем при больших концентрациях (0.19 нм^2).

В системе лецитин-вода-деканол мы имеем дело не с анионной головкой, а с цвиттер-ионом (диполем), что существенно меняет характер электростатического взаимодействия. В случае анионной молекулы взаимодействие только отталкивающее, в то время как для системы лецитин-вода-деканол оно может быть также притягивающим, если угол диполя с плоскостью ламеллы мал. По этой причине две другие составляющие, входящие в состав жидкого кристалла, а именно, вода и деканол, могут иметь опосредованное воздействие, меняя угол диполя и заставляя отталкивающие электростатические силы превращаться в притягивающие, что может сильно уменьшить парциальную площадь как фосфолипидной молекулы, так и молекулы деканола.

На рис.4 для каждой компоненты системы лецитин-вода приведена зависимость парциальной площади от относительной концентрации воды c_1/c_w . Сравнивая этот график с рис.2, можно заметить, что свободная площадь одной молекулы системы лецитин-вода убывает с ростом концентрации воды. Такое поведение этой системы можно объяснить тем, что холестерин не имеет существенного влияния на взаимодействие с водой и в довольно большой области концентрации в системе лецитин-вода не образуются мицеллы. Вместо этого

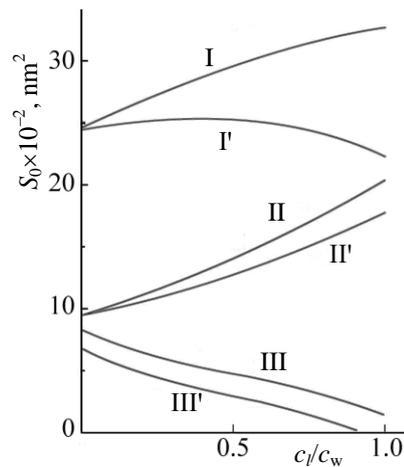


Рис.4. Изменение парциальной площади S_0 молекулы от относительной концентрации воды c_l/c_w для системы лецитин-вода: I – парциальная площадь молекулы лецитина при $c_l/c_x = 0.5\%$, I' – при $c_l/c_x = 1.0\%$; II – парциальная площадь молекулы деканола $c_l/c_x = 0.5\%$, II' – при $c_l/c_x = 1.0\%$; III – парциальная площадь молекулы воды при $c_l/c_x = 0.5\%$, III' – $c_l/c_x = 1.0\%$.

существуют димеры и тримеры, которые при дальнейшем увеличении концентрации амфифильного вещества образуют ламеллы, в отличие от пентадецилсульфоната, наличие которого даже в малой концентрации обеспечивает мицеллообразование [7]. Вероятно, причина этого в ориентации групп ОН воды по отношению к полярным головкам лецитина, которые уменьшают чувствительность последних относительно изменений концентрации воды. Например, при росте концентрации воды парциальная площадь липида убывает от 58 nm^2 до 40 nm^2 . Сравнивая это с поперечной площадью углеводородного хвоста (36 nm^2), можно заметить, что парциальная площадь на одну молекулу больше, и даже при ее наименьшем значении она больше, чем поперечная площадь. Значит, более медленное изменение парциальной площади амфифильной молекулы в зависимости от концентрации воды есть результат нарушения упорядоченности углеводородных хвостов. Полученные результаты позволяют предположить, что непосредственный размер парциальной свободной площади амфифильной молекулы вместе с толщиной ламеллы имеет важное значение для определения свободного объёма, что в свою очередь способствует пониманию вклада энтропического фактора в структуру и биологическую функцию системы. Следовательно, величина парциальной свободной площади может являться важным параметром для построения теоретических моделей для разных агрегаций амфифильного вещества. Это означает, что она может являться и важным параметром стабильности лиотропного жидкого кристалла. Отметим также, что парциальная свободная площадь может быть важным, непосредственно изменяемым, параметром при изучении термодинамических свойств системы.

ЛИТЕРАТУРА

1. **H.G. Badalyan, M.A. Stepanyan, Kh.M. Ghazaryan.** Proc. International Conference on Electrons, Positrons, Neutrons and X-Rays Scattering Under External Influences, Yerevan–Meghri, Armenia, 2009, p.220.
2. **F. Reiss-Husson, V. Luzatti.** J. Colloid & Interface Science, **21**, 534 (1966).
3. **A.G. Pogosyan, H.G. Badalyan, A.A. Shaginyan.** Int. J. Mod. Phys. C, **11**, 153 (2000).
4. **A.A. Shaginyan, H.G. Badalyan, Kh.M. Ghazaryan, Sh.S. Sahakyan, M.Kh. Minasyants.** Biophysics, **42**, 609 (1997).
5. **D. Popescu, G. Victor.** Biophys. Chem., **39**, 283 (1991).
6. **R.A. Sperling, W.J. Parak.** Phil. Trans. R. Soc. A, **368**, 1333 (2010).
7. **R.H. de Rossi, O.F. Silva, R.V. Vico, C.J. Gonzalez.** Pure Appl. Chem., **81**, 755 (2009).

ՍՈՒԵԿՈՒԼԻ ԱԶՍ ՄԱԿԵՐԵՄԻ ԿԱԽՎԱԾՈՒԹՅՈՒՆԸ
ԵՐՐՈՐԴ ԲԱՂԱԴՐԻՉԻ ԱՌԿԱՅՈՒԹՅՈՒՆԻՑ
ԼԻՈՏՐՈՊ ՀԵՂՈՒԿ ԲՅՈՒՐԵՂՆԵՐՈՒՄ

Հ.Գ. ԲԱԴԱԼՅԱՆ, Խ.Մ. ՂԱԶԱՐՅԱՆ, Ս.Մ. ՅԱՅԼՈՅԱՆ

Ռենտգենյան ճառագայթների մեծ և փոքր անկյունների տակ դիֆրակցիայի մեթոդով ուսումնասիրված է լիոտրոպ հեղուկ բյուրեղը կազմող ամֆիֆիլ մեկ մոլեկուլի գլխիկին ընկնող ազատ մակերեսը երրորդ բաղադրիչի առկայության դեպքում: Ուսումնասիրված է պենտադեցիլսուլֆոնատ-ջուր համակարգը խոլեստերոլի առկայության դեպքում և լեցիտին-ջուր համակարգը դեկանոլի առկայությամբ: Ցույց է տրված, որ խոլեստերոլի կոնցենտրացիայի աճին զուգընթաց ամֆիֆիլ մոլեկուլի գլխիկի ազատ մակերեսը նվազում է, իսկ ջրի կոնցենտրացիայի աճի դեպքում այն աճում է, բայց ավելի դանդաղ, քան երկբաղադրիչ համակարգի դեպքում: Նույնը դիտվում է նաև լեցիտին-ջուր-դեկանոլ համակարգի համար:

DEPENDENCE OF PARTIAL MOLECULES SURFACE AREA
ON THE THIRD COMPONENT IN LIOTROPIC LIQUID CRYSTALS

H.G. BADALYAN, Kh.M. GHAZARYAN, S.M. YAYLOYAN

Free surface of one amphiphilic molecule head of a lyotropic liquid crystal has been investigated by X-Ray diffraction method, at small and large angles, in the presence of the third component. The pentadecylsulphonat-water system in the presence of cholesterol as well as the lecithin-water system in the presence of decanol were investigated. It is shown that the above mentioned free surface decreases if the cholesterol concentration increases, while this surface increases in the case of water concentration increase. However, it increases slower than in the case of the two-component system. The same is observed for the lecithin-water-decanol system.

УДК 548.732

ДВЕ СХЕМЫ ДИФРАКЦИИ ШИРОКО РАСХОДЯЩЕГОСЯ ПУЧКА РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

К.Т. АВЕТЯН, Л.В. ЛЕВОНЯН, О.С. СЕМЕРДЖЯН,
М.М. АРАКЕЛЯН*, О.М. БАДАЛЯН, Д.А. ЗЕЙНАЛЯН

Ереванский государственный университет, Армения

* e-mail: marakelyan@ysu.am

(Поступила в редакцию 16 апреля 2014 г.)

Рассмотрены особенности двух схем дифракции широко расходящегося пучка рентгеновского излучения: d - c (диафрагма-кристалл) и c - d (кристалл-диафрагма). Установлено и экспериментально подтверждено, что при схеме c - d дифракционное изображение является топографической картой исследуемого участка кристалла. Установлено также, что при схеме d - c и при $L = 2l$ (l , L – соответственно расстояния кристалла и фотопластинки от диафрагмы) ветви гипербола, сформированных характеристическими излучениями K_{α} , K_{β} (включая отражения второго и третьего порядков) на данном семействе плоскостей (hkl), сливаются в одну прямую. Экспериментально установлено, что характер слияния очень чувствителен к структурным несовершенствам исследуемого кристалла.

1. Введение

Дифракционное изображение, сформированное широко расходящимся пучком (ШРП) характеристического рентгеновского излучения, содержит обширную информацию относительно особенностей кристаллической структуры исследуемого объекта, поскольку одновременно регистрируется большое число рефлексов брэгговских отражений. В настоящее время существуют два основных направления для осуществления дифракции ШРП рентгеновского излучения: точечный источник рентгеновского излучения расположен на поверхности исследуемого объекта (или под поверхностью) – метод Косселя; точечный источник расположен над поверхностью исследуемого объекта – метод псевдокосселя [1-3]. Методы отличаются способом возбуждения характеристического излучения, методом создания точечного источника излучения.

Нами были применены две несколько иные схемы осуществления дифракции ШРП с использованием стандартного источника излучения – рентгеновской трубки с линейным фокусным пятном [4,5].

В одной из схем рентгеновское излучение проходит через диафрагму (воронкообразное отверстие диаметром 30–50 мкм в пластине тантала) и падает на исследуемый кристалл. На фотографическую пластину, установленную за кристаллом, попадает только дифрагированное излучение. Первичное (недифрагированное) излучение задерживается ловушкой [4]. Диафрагма, кристалл и

фотографическая пластина помещены в небольшую камеру, которая во время экспозиции вращается вокруг оси диафрагмы. Эту схему мы назвали схемой $d-c$ (диафрагма–кристалл) (рис.1а). В схеме $d-c$ диафрагма действует как точечный источник. При установке диафрагмы вплотную к исследуемому образцу (до или после образца) схема аналогична схеме Косселя, и дифракционное изображение не отличается от классической косселеграммы. При установке диафрагмы на расстоянии 2–3 мм и больше схема аналогична схемам ШРП, и дифракционное изображение является псевдокосселеграммой. Таким образом, сравнительно простая схема дает возможность получать и косселеграмму, и псевдокосселеграмму одного и того же образца. Разница таких дифракционных изображений заключается в том, что косселеграммы формируются на локальном участке исследуемого кристалла, определяемом диаметром диафрагмы, и не являются топографической картой исследуемого образца, а псевдокосселеграмма формируется на сравнительно большой площади исследуемого кристалла. Однако такое дифракционное изображение, как мы увидим в дальнейшем, тоже не является топографической картой исследуемого участка кристалла.

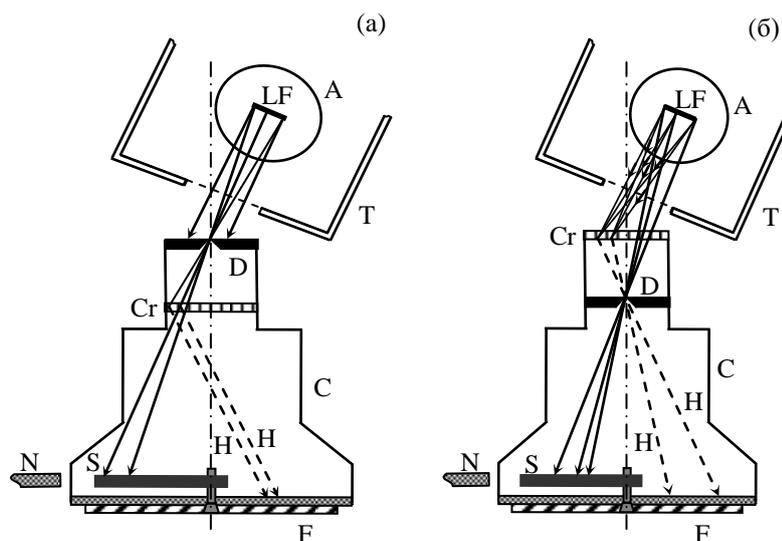


Рис.1. Схема эксперимента. (а) Схема $d-c$ (диафрагма–кристалл), (б) Схема $c-d$ (кристалл – диафрагма). Т – рентгеновская трубка, А – анод, LF – линейный фокус, С – камера, Cr – исследуемый кристалл, D – диафрагма, S – неподвижная заслонка, F – фотографическая пластина, N – постоянный магнит, H – дифрагированное излучение.

При схеме $d-c$, как было сказано, первичное (недифрагированное) излучение задерживается ловушкой и на фотографическую пластину не попадает. При такой схеме становится возможным исследовать образцы очень малых размеров.

В другой схеме исследуемый кристалл «освещается» расходящимся

рентгеновским излучением так, что в любой точке исследуемой части кристалла удовлетворяется условие Брэгга, причем для нескольких семейств атомных плоскостей одновременно (многоволновая дифракция) (рис.1б) [5].

После кристалла на расстоянии 2–5 мм устанавливается диафрагма. На фотографическую пластину, установленную после диафрагмы, падает только дифрагированное излучение, проходящее через диафрагму. Первичное (недифрагированное) излучение задерживается ловушкой, расположение которой относительно источника излучения при вращении камеры не меняется. Поскольку для определенного семейства плоскостей (hkl) и для данной длины волны характеристического излучения угол дифракции определен, то через диафрагму может проходить излучение, дифрагированное в определенных точках кристалла. Эти точки мы назвали активными точками, а схему – схемой $c-d$ (кристалл–диафрагма). Аналог схемы $c-d$ нам неизвестен.

2. Особенности схем $d-c$ и $c-d$

Как уже было сказано, при схеме $c-d$ кристалл в виде тонкой пластины освещается так, что в любой точке исследуемого участка для данной длины волны характеристического излучения удовлетворяется условие дифракции. Распределение активных точек на поверхности кристалла определяется следующим требованием: излучение, дифрагированное в активной точке $M(x, y, z)$ поверхности кристалла, проходит через диафрагму. Если начало прямоугольной системы координат совместим с центром диафрагмы, ось z – с нормалью к фотографической пластине (ось диафрагмы), то для активных точек будем иметь

$$x_1 \cos \alpha + y_1 \cos \beta + z_1 \cos \gamma = -\sqrt{x_1^2 + y_1^2 + z_1^2} \sin \theta_{hkl},$$

где α, β, γ – углы между направлением $[hkl]$ и осями координат. Это уравнение конических поверхностей, оси которых совпадают с направлениями $[hkl]$, а вершина – общая для всех семейств атомных плоскостей (hkl) и совпадает с центром диафрагмы. Для сечения конических поверхностей плоскостью $z_1 = 1$ (внешняя грань кристалла) получим

$$\begin{aligned} x_1^2 (\cos^2 \alpha - \sin^2 \theta) + 2x_1 y_1 \cos \alpha \cos \beta + y_1^2 (\cos^2 \beta - \sin^2 \theta) + \\ + 2x_1 l \cos \alpha \cos \gamma + 2y_1 l \cos \beta \cos \gamma + l^2 (\cos^2 \gamma - \sin^2 \theta) = 0. \end{aligned} \quad (1)$$

Это означает, что активные точки будут распределены на гиперболах, поскольку

$$AC - B^2 = (\cos^2 \alpha - \sin^2 \theta)(\cos^2 \beta - \sin^2 \theta) - \cos^2 \alpha \cos^2 \beta < 0.$$

Конические поверхности простираются неограниченно в обе стороны от вершины, поэтому они пересекаются с плоскостью $z = -L$, где установлена фотографическая пластинка. Дифракционное изображение, сформированное на фотопластине, представляет собой набор конических сечений – набор гипербол, определяемых уравнением

$$x^2 (\cos^2 \alpha - \sin^2 \theta) + 2xy \cos \alpha \cos \beta + y^2 (\cos^2 \beta - \sin^2 \theta) + 2Lx \cos \alpha \cos \gamma + 2Ly \cos \beta \cos \gamma + L^2 (\cos^2 \gamma - \sin^2 \theta) = 0. \quad (1a)$$

Поскольку гиперболы (1) и (1a) подобны (угловые коэффициенты асимптот одни и те же), то между распределением активных точек на поверхности кристалла и распределением дифракционного максимума на фотопластине существует однозначное соответствие, то есть каждой активной точке $M_1(x_1, y_1)$ на поверхности кристалла соответствует одна точка $M(x, y)$ на дифракционном изображении. Другими словами, дифракционное изображение, сформированное такой схемой, является увеличенным изображением или топографической картой распределения активных точек с коэффициентом увеличения $K = L/l$.

В схеме d -с кристалл освещается расходящимся пучком излучения, исходящего из диафрагмы, которая действует как точечный источник, установленный над кристаллом. Распределение активных точек на поверхности кристалла определяется из следующего условия: угол Φ_1 между падающим пучком, проходящим через диафрагму и точку $M(x_1, y_1)$ (вектор \mathbf{K}_0), и нормалью к плоскости (hkl) (вектор \mathbf{H}) равен $\pi/2 + \theta$. Отсюда следует, что если исследуемый кристалл в виде тонкой пластины установлен на плоскости $z = -1$, то распределение активных точек на поверхности кристалла определится уравнением (1). Назовем это условием (1).

Дифрагированное в точке $M_1(x_1, y_1, z_1)$ излучение падает на фотографическую пластину. На распределение дифракционных максимумов на фотографической пластине помимо условия (1) налагается другое условие: угол Φ между дифрагированным лучом, проходящим через точку $M_1(x_1, y_1, z_1)$ на поверхности кристалла и точку $M(x, y, z)$ на фотографической пластине (вектор \mathbf{K}) и вектором \mathbf{H} равен $\Phi = \pi/2 - \theta_{hkl}$ (условие (2)). Если фотографическая пластинка установлена на плоскости $z = -L$, то уравнение, определяющее распределение дифракционного максимума, будет иметь вид

$$(x - x_1)^2 (\cos^2 \alpha - \sin^2 \theta) + 2(x - x_1)(y - y_1) \cos \alpha \cos \beta + (y - y_1)^2 (\cos^2 \beta - \sin^2 \theta) + 2(x - x_1)(L - l) \cos \alpha \cos \gamma + 2(y - y_1)(L - l) \cos \beta \cos \gamma + (L - l)^2 (\cos^2 \gamma - \sin^2 \theta) = 0. \quad (2)$$

Помимо условий (1) и (2), учитывая компланарность векторов $\mathbf{K}_0, \mathbf{K}, \mathbf{H}$, т.е. $\mathbf{K}[\mathbf{K}_0 \mathbf{H}] = 0$, получим

$$(yl - y_1L) \cos \alpha + (Lx_1 - lx) \cos \beta + (xy_1 - x_1y) \cos \gamma = 0. \quad (3)$$

Таким образом, при схеме d -с, как и при любой схеме, в которой точечный источник установлен на расстоянии $z_1 = -1$ над кристаллом ($z_1 \neq 0$), распределение дифракционных максимумов на фотографической пластине, установленной на расстоянии $z_1 = -L$, определяется уравнениями (1)–(3). В общем случае это уравнение четвертой степени [1]. Следовательно, при схеме d -с

дифракционное изображение не может быть топографической картой исследуемого кристалла, поскольку активные точки распределены на гиперболах.

Рассмотрим простой случай, когда кристалл ориентирован так, что для семейства плоскостей $(hk0)$ $\cos \alpha = \pm 1$. При такой ориентации распределение активных точек на поверхности кристалла определяется уравнением

$$x_1^2/(l^2 \operatorname{tg}^2 \theta) - y_1^2/l^2 = 1. \quad (4)$$

Распределение дифракционного максимума определяется уравнением

$$x^2/(L-2l)^2 \operatorname{tg}^2 \theta - y^2/L^2 = 1. \quad (5)$$

Гиперболы (4) и (5) не подобны, поскольку отличаются угловые коэффициенты асимптот $y_1 = x_1 \operatorname{ctg} \theta$ и $y = Lx \operatorname{ctg} \theta / (L-2l)$, причем во втором случае угловой коэффициент асимптоты зависит также от расстояний L и l . Сравнивая (4) и (5), убедимся, что увеличение дифракционного изображения (отношение координат двух гипербол) в направлении действительной оси (в этом случае ось x – направление нормали к плоскости) отличается от увеличения в направлении мнимой оси (ось y), т.е. для действительной оси $k_r = x/x_1 = (2z_1 - z)/z = (2l - L)/l$ и для мнимой оси $k_i = y/y_1 = z/z_1 = L/l$.

Заметим, что в качестве оси x можно выбрать направление нормали к любой из плоскостей $(hk0)$, принадлежащих зоне z . Отсюда следует, что гиперболы дифракционного изображения кристалла, сформированные широко расходящимся пучком характеристического рентгеновского излучения по схеме d - c , как и при любой схеме, при которой точечный источник расположен перед кристаллом, не подобны гиперболам активных точек на поверхности кристалла. Значит, дифракционное изображение не является топографической картой кристалла.

Остановимся на весьма существенном отличии схем c - d и d - c . При схеме c - d любая точка исследуемой части кристалла освещается излучением в широких угловых пределах, поэтому во всех точках дифракция будет многоволновой. Излучение, дифрагированное на какой-либо плоскости (hkl) , имеет строго определенное направление. Поэтому, если через диафрагму проходит одна из дифрагированных волн, исходящих из данной активной точки, то другая волна, исходящая из этой же точки, через диафрагму пройти не может. Значит, можно утверждать, что при схеме c - d дифракционное изображение формируется только одной дифрагированной волной, т.е. в каждую точку дифракционного изображения приходит информация только от одной соответствующей активной точки. Другими словами, многоволновой характер дифракции не проявляется. Следовательно, дифракционное изображение при схеме c - d является топографической картой активных точек на поверхности кристалла.

При схеме d - c многоволновой характер дифракции проявляется в том, что все дифрагированные волны без ограничения достигают фотографической пластины. При этом в данную точку дифракционного изображения доходят

волны, дифрагированные на разных активных точках кристалла, т.е. происходит наложение информации. Поэтому в этом случае дифракционное изображение не является топографической картой исследуемого кристалла.

3. Эксперимент

На рис.2а приведено дифракционное изображение кристалла LiF, сформированное характеристическими излучениями Mo K_α и K_β , полученными по схеме $c-d$. Интенсивные линии – гиперболы, сформированные излучением K_α , менее интенсивные – излучением K_β . Белый кружок в центре – “тень” валика, на котором насажена ловушка первичного (недифрагированного) пучка. В кристалле в виде пластины толщиной 0.5 мм проделано круглое отверстие диаметром 0.8 мм. Большая грань кристалла – плоскость (001) ориентирована параллельно фотографической пластине. Кристалл установлен так, что “изображение” отверстия на рис.2а приходится на пересечение гипербол, сформированных отражениями $(\bar{2}00)$, $(0\bar{2}0)$ и $(\bar{2}\bar{2}0)$ (центр отверстия совпадает с узлом $[[\bar{2}\bar{2}0]]$). На дифракционной картине отчетливо выделяется изображение отверстия (светлый круг). Как видно на рисунке, в пределах изображения этого круга гиперболы $(\bar{2}00)$, $(0\bar{2}0)$ и $(\bar{2}\bar{2}0)$ прерываются, что свидетельствует о том, что при схеме $c-d$ в область этого круга информация поступает только от окрестности узла $[[\bar{2}\bar{2}0]]$ с размерами отверстия. От других участков кристалла в эту точку изображения информация не поступает.

Таким образом, можно утверждать, что при схеме $c-d$ между распределением активных точек на поверхности кристалла и распределением дифракционного максимума на изображении существует однозначное соответствие, т.е. дифракционное изображение является топографической картой активных точек.

На рис.2б приведено дифракционное изображение того же кристалла

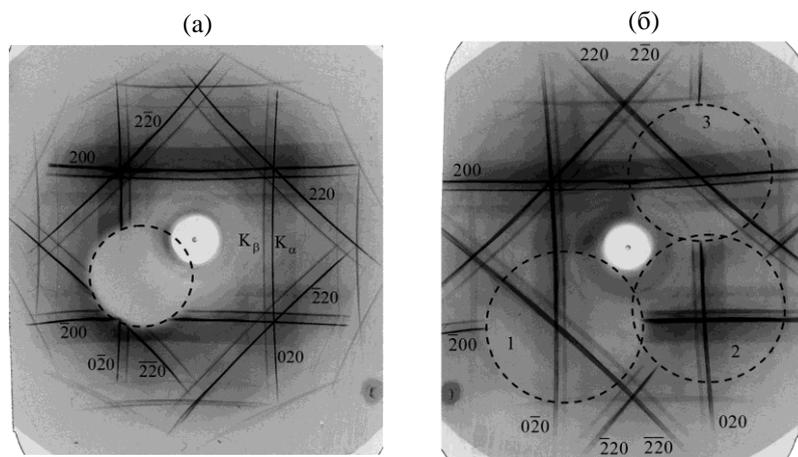


Рис.2. (а) Дифракционное изображение кристалла LiF, полученное по схеме $c-d$. (б) Дифракционное изображение кристалла LiF, полученное по схеме $d-c$.

LiF, полученное по схеме d - c . Сохранено взаимное расположение отверстия в кристалле и диафрагмы, т.е. узел кристалла, совпадающий с центром отверстия, соответствует узлу кристалла $[[\bar{2}\bar{2}0]]$. Как видно на дифракционной картине, отчетливое «изображение» отверстия не формируется. Наличие отверстия проявляется в трех разных местах дифракционной картины. На участке 1 (окрестность рефлекса $[[\bar{2}\bar{2}0]]$ на картине) прервана гипербола $(\bar{2}00)$, на участке 2 (окрестность рефлекса $[[\bar{2}20]]$) прервана гипербола $(\bar{2}20)$ и на участке 3 (окрестность рефлекса $[[220]]$) прервана гипербола (020) .

Выходит, что при схеме d - c при данном расположении диафрагмы и отверстия в кристалле излучение, дифрагированное от того участка в объеме кристалла, где просверлено отверстие, поступает на три разных участка дифракционного изображения. И наоборот, на многие участки дифракционного изображения информация поступает от разных частей кристалла. Значит, при схеме d - c происходит наложение информации.

Особый интерес представляет собой случай $L = 2l$, при этом действительная ось гипербол $a = (L - 2l) \operatorname{ctg} \theta = 0$. В этом случае увеличение дифракционного изображения в направлении действительной оси (в этом случае ось x) равно нулю, и гипербола превращается в прямую $x = 0$, совпадающую с осью u . Таким образом, в этом случае сливаются в одну линию не только две ветви каждой из гипербол, сформированных на данной плоскости $(hk0)$ характеристическими излучениями K_{α_1} и K_{α_2} всех порядков, но и гиперболы, сформированные излучением K_{β} . Кроме того, в линию $x = 0$ сливается и непрерывный ряд гипербол, сформированных непрерывным фоном излучения трубки, причем для каждой из плоскостей $(hk0)$ прямая u параллельна этой плоскости. На рис.3а приведено дифракционное изображение кристалла KCl, полученное схемой c - d .

На рис.3б представлено дифракционное изображение того же кристалла, сформированное по схеме d - c при расстояниях $L = 2l$. Как видно на изображении,

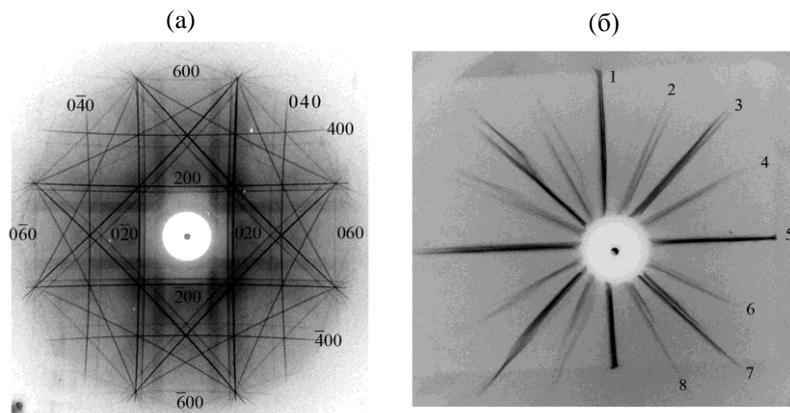


Рис.3. (а) Дифракционное изображение кристалла KCl, полученное схемой c - d . (б) Дифракционное изображение кристалла KCl по схеме d - c при расстояниях $L = 2l$.

для некоторых отражений (например, рис.3б, линия 1) слились в одну прямую линию не только две ветви каждой из гипербол, сформированных характеристическими излучениями K_{α_1} и K_{α_2} всех порядков: (020) , $(0\bar{2}0)$, (040) , $(0\bar{4}0)$, (060) , $(0\bar{6}0)$, но и все гиперболы, сформированные излучением K_{β} . Однако такое слияние наблюдается не для всех отражений. Очевидно, полное слияние ветвей гипербол возможно для более или менее совершенных кристаллов при соблюдении условия $L = 2l$. В реальных кристаллах наличие локальных структурных несовершенств приводит к тому, что разные ветви одной и той же гиперболы искажаются неодинаково, и ждать полного слияния ветвей гипербол не приходится.

Таким образом, дифракционное изображение, полученное при схеме $L = 2l$ является методом исследования структурных несовершенств кристаллических пластин сравнительно больших размеров. Насколько этот метод эффективен, покажут дальнейшие исследования.

ЛИТЕРАТУРА

1. **В.В. Лидер.** Кристаллография, **56**, 195 (2011).
2. **В.Ш. Шехтман, И.М. Шмытько и др.** Докл. АН СССР, **205**, 834 (1972).
3. **В.В. Аристов, В.Ш. Шехтман, И.М. Шмытько.** Кристаллография, **21**, 50 (1976).
4. **К.Т. Аветян, М.М. Аракелян.** Кристаллография, **53**, 816 (2008).
5. **К.Т. Аветян.** Кристаллография, **55**, 788 (2010).

TWO SCHEMES OF DIFFRACTION OF WIDELY DIVERGENT BEAM OF X-RAY RADIATION

K.T. AVETYAN, L.V. LEVONYAN, O.S. SEMERJYAN,
M.M. ARAKELYAN, O.M. BADALYAN, D.A. ZEYNALYAN

The peculiarities of two schemes of diffraction of a widely divergent beam of X-ray radiation are considered: $d-c$ (diaphragm – crystal) and $c-d$ (crystal – diaphragm). We determined and experimentally confirmed that in $c-d$ scheme the diffraction image is a topographic map of the studied site of the crystal. We determined also that in the scheme of $d-c$ and at $L = 2l$ (l and L are respectively, crystal and photographic plate distances from the diaphragm) the branches of the hyperboles, created by the characteristic radiations K_{α} and K_{β} (including reflections of the second and third orders) from the given family of the planes (hkl) , merge to one straight line. We experimentally determined that the behavior of confluence is very sensitive to the structural imperfections of the studied crystal.

УДК 539.1

АНАЛИЗ И МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ДВИЖЕНИЯ ДИСЛОКАЦИЙ В МОНОКРИСТАЛЛАХ АЛЮМИНИЯ

М.М. АРАКЕЛЯН

Ереванский государственный университет, Армения

e-mail: marakelyan@ysu.am

(Поступила в редакцию 28 апреля 2014 г.)

Исследовано движение дислокации Френкеля–Конторовой в монокристаллах алюминия при низких температурах. С использованием синус-уравнения Гордона осуществлено математическое моделирование сравнительного движения дислокаций в кристаллах с учетом барьера Пайерлса и без его учета. Показано, что при учете этого барьера в алюминии дислокация движется в направлении скольжения посредством туннелирования перегибов. Произведена количественная оценка возможности такого эффекта

1. Введение

Одним из первых приложений модели Френкеля–Конторовой (ФК) была теория дислокаций в металлах [1]. Как известно, дислокации ответственны за большинство механических свойств твердых тел. Модель ФК была первой моделью, которая позволила получить простые аналитические зависимости, позволяющие моделировать процесс движения дислокаций. В этой модели для краевой дислокации атомы над плоскостью скольжения заменены рядами материальных точек, связанных одинаковыми пружинами, а атомы под плоскостью скольжения заменены подложкой, описываемой синусоидальным потенциалом. При движении дислокаций потенциальная энергия кристалла периодически меняется.

В идеальном бездефектном кристалле действуют только силы, обусловленные стационарным периодическим потенциалом Пайерлса. Эти силы можно рассматривать как минимальную внешнюю нагрузку [2]. Пайерлс и Набарро [2] предсказали вид периодического потенциала смещений, воздействующего на дислокацию. Из экспериментальных данных следует, что энергетический барьер Пайерлса действительно существует и его величина колеблется от 10^{-4} μ (ковалентные кристаллы) до 10^{-2} μ (плотноупакованные металлы), μ – модуль сдвига [2]. Процесс термического перехода дислокации из одной долины Пайерлса в другую начинается с переброски в соседнюю долину короткого участка дислокации [1]. В алюминии, при малых плотностях дислокаций, дислокации наблюдаются в виде прямых линий вдоль кристаллографических направлений с малыми индексами, указывая на влияние барьера Пайерлса [2]. В [3] было экспериментально показано, что в алюминии при $t \leq 50$ К приложенное напря-

жение вызывает движение только одиночных перегибов, а термически активированное образование пар перегибов происходит при более высоких температурах. Известно также [4], что перегибы являются переносчиками массы, т.к. они начинают скользить при силе намного меньшей, чем требуется для движения дислокации как целой.

Низкотемпературное движение дислокаций в кристаллах может быть связано с туннелированием конечной части дислокации [4]. В такого рода задачах линейную дислокацию можно представить как упругую струну, лежащую первоначально в одном из локальных минимумов потенциала. Рельеф этого потенциала представляет собой последовательность локальных минимумов, каждый из которых находится ниже другого на величину, зависящую от приложенного к кристаллу напряжения. Движение дислокации сводится к туннелированию в соседний минимум определенного отрезка дислокации с последующим подтягиванием туда оставшейся ее части.

Дислокации ФК в монокристаллах алюминия с учетом потенциала Пайерлса можно считать топологическими солитонами [3]. Известно, что при низких температурах в алюминии имеет место скольжение дислокаций при аномально малых напряжениях. Попытки объяснить это явление классически приводят к несогласованным результатам. В настоящей работе ставится задача объяснить указанный эффект на основе квантового подхода. Моделирование процесса движения с использованием реальных констант дает возможность исследовать характер движения дислокаций в потенциале Пайерлса, выявить его коренное отличие от надбарьерного движения дислокаций.

2. Результаты

Для расчетов эффекта туннелирования квантовых систем удобно использовать квазиклассическое представление волновой функции в виде

$$\Psi \sim \exp(iS/h), \quad (1)$$

где S – классическое действие системы. Для туннельного эффекта существует мнимая часть S , определяющая затухание волновой функции в классически недоступной области.

Как известно, движение дислокаций в кристаллах с высокими барьерами Пайерлса происходит путем образования перегибов. Это явление при высоких температурах происходит за счет термических флуктуаций. При достаточно низких температурах термические флуктуации сменяются квантовыми, вероятность которых не зависит от температуры [4]. Такое явление носит характер квантового подбарьерного проникновения (туннелирования). Вероятность туннельного перехода задается известной формулой Фейнмана [5]

$$p = \left| \sum \exp(iS/h) \right|^2. \quad (2)$$

В чистых металлах при низких температурах основными препятствиями для движения дислокаций являются барьеры Пайерлса, а их преодоление про-

исходит путем зарождения на дислокациях перегибов. Начальная стадия деформирования обеспечивается перемещениями на сравнительно малые расстояния большого числа мелкомасштабных фрагментов дислокационных линий – перегибов.

Вычислим напряжение Пайерлса для дислокаций в алюминии $W_p = \mu b^3 / (300d)$ [2], где d – межплоскостное расстояние, \mathbf{b} – вектор Бюргерса. Расчеты дают 10^{-15} эрг, что согласуется с данными, полученными в работе [3], где на основании большого числа исследований кинетики дефектов кристаллической структуры было получено, что в образцах алюминия заметной подвижностью могут обладать только перегибы дислокаций. Известно, что перегибы адекватны солитонам, взаимодействующим с периодическим потенциалом решетки [3]. Согласно этой работе, эффективная масса солитонов $m_s = (0.2–0.5)m_p$, где m_p – масса протона. Будем считать $m_s = 0.3 m_p$. Тогда $m_s \approx 4.8 \times 10^{-25}$ г.

Подсчитаем кинетическую энергию перегибов (солитонов) в алюминии. Используя параметры из [2], получим кинетическую энергию солитона $E_{ks} \approx 0.24 \times 10^{-22}$ эрг.

Как известно из квантовой механики [6], туннельный эффект будет иметь заметное значение, когда

$$\frac{2}{h} \sqrt{2m_s(W_n - E_{ks})} l \approx 1, \quad (3)$$

где W_n – высота барьера Пайерлса, l – ширина барьера Пайерлса. Расчеты дают, что для солитонов в алюминии $2\sqrt{2m_s(W_n - E_{ks})} l / h \approx 0.73$, что позволяет предположить возможность туннелирования перегибов.

Таким образом, туннельный эффект возможен не только в квантовых системах, состоящих из одной частицы. Низкотемпературное движение дислокаций в кристаллах может быть связано с туннелированием конечной части дислокации, состоящей из многих частиц. Квантовые эффекты в кристаллах наблюдаются тогда, когда волновые функции атомов, находящихся в соседних узлах, перекрываются. Вероятность квантового туннелирования атома в соседний узел решетки характеризуется безразмерным параметром де Бура [7]

$$\Delta \sim h(mu)^{-1/2} / a, \quad (4)$$

где a – межатомное расстояние, m – масса атомов, u – энергия взаимодействия соседних атомов. Для большинства кристаллов параметр Δ очень мал. В квантовых кристаллах $\Delta \sim 1$, и эффект делокализации частиц существенен. При этом даже нулевые колебания сильно ангармоничны. Существуют кристаллы, в которых условие малости амплитуды нулевых колебаний может нарушаться для некоторых видов колебаний. Например, это относится к примесным атомам водорода в решетке тяжелых металлов [7], при этом величина амплитуды нулевых колебаний связана с малостью массы примесных атомов. Аналогично из-за малости массы солитонов (перегибов) и их слабого взаимодействия с атомами матрицы солитон может делокализоваться в кристалле, в то время как сами

атомы матрицы ведут себя классическим образом.

Оценим Δ для перегибов в алюминии, используя формулу (4). Согласно [2], для перегибов краевой дислокации

$$u = \frac{\mu b^2 a^2 (1-2\nu)}{8\pi L (1-\nu)}, \quad (5)$$

где ν – коэффициент Пуассона, L – расстояние между перегибами. Расчеты показывают, что в алюминии $u \sim 10^{-14}$ эрг и $\Delta \approx 0.4$. Для сравнения, в квантовых кристаллах для He^3 $\Delta \approx 0.49$, для неона $\Delta \approx 0.07$. Во всех чистых металлах параметр Δ ничтожно мал [7]. Таким образом, в алюминии существует возможность квантового туннелирования перегибов. Известно, что энергетический барьер Пайерлса уменьшается при росте температуры (хотя точный вид температурной зависимости не установлен) и с увеличением ширины дислокации. Рассчитаем ширину дислокации в алюминии при этих условиях. Как известно, алюминий имеет ГЦК структуру. Согласно [2], ширина дислокаций определяется формулой

$$\omega = \pi d \left[\frac{E}{\mu(1-\nu^2)} \right]^{1/2}, \quad (6)$$

где E – модуль Юнга. Расчеты дают для направления [111] значение ширины дислокации $\omega = 12.8 \times 10^{-8}$ см, для направления [220] – $\omega = 7.8 \times 10^{-8}$ см, для ширины перегиба – $(4-6) \times 10^{-8}$ см.

Таким образом, в рассматриваемом случае имеем узкий перегиб, который при перемещении вдоль линии дислокации преодолевает барьер Пайерлса.

Твердые тела, обычно, описываются сложными моделями с большим числом степеней свободы. Однако, относительно простая модель дислокаций ФК стала универсальным инструментом нелинейной физики [8]. Для континуальной модели ФК была развита математическая теория, которая связала модель ФК с математической теорией солитонов. В рамках этой теории дислокация ФК является топологическим солитоном. В континуальном приближении модель ФК сводится к точно интегрируемому синус–уравнению Гордона, которое нашло свое применение при изучении дислокаций, а также перегибов и бризеров. Оно также применяется в теории слабой сверхпроводимости как нелинейное уравнение, описывающее джозефсоновские контакты [9].

Синус-уравнение Гордона имеет следующий вид [9]:

$$\ddot{\varphi}_n = \frac{2\pi f_0}{ma} \sin \varphi_n + \frac{ka^2}{m} \varphi_n'', \quad (7)$$

где φ_n – смещение n -го атома от положения равновесия в угловых единицах, m – масса атома, $f_0 = m(v_0)^2 a / (2\pi(l_0)^2)$, где l_0 – параметр, который увеличивается при увеличении жесткости пружины и уменьшении силы со стороны подложки, то есть уменьшается с увеличением барьера Пайерлса, v_0 – скорость звука.

Поскольку $W_n = 2\pi b f_0 / 300$ [2], то из (7) следует, что синус-уравнение Гордона принимает вид

$$\ddot{\varphi}_n \frac{1}{\omega^2} = \sin \varphi_n + \frac{v_0^2}{\omega^2} \varphi_n'' , \quad (8)$$

где $\omega^2 = 300W_p / (mab)$ – характерная частота, $v_0^2 = ka^2 / m$.

Переходя к безразмерным переменным $x = (v_0 / \omega) \tilde{x}$ и $t = \tilde{t}(\omega)$, получим

$$\ddot{\varphi}_n = \sin \varphi_n + \varphi_n'' . \quad (9)$$

Как указано в работе [2], энергетический барьер периодических смещений Пайерлса для перегибов должен быть меньше, чем барьер Пайерлса для дислокаций.

При расчетах использовались следующие константы: $v_1 = 10^{-1}$ см/с – скорость дислокации, $v_0 = 6 \times 10^5$ см/с – скорость звука в алюминии, $b = 2.57 \times 10^{-8}$ см и $m = 4.5 \times 10^{-23}$ г – масса атомов алюминия.

Представим сравнительный численный эксперимент при надбарьерном движении полной дислокации и туннелировании посредством перегибов в алюминии.

Как видно из рис.1, одна из дислокаций совершает туннельный переход в направлении скольжения с высоким барьером Пайерлса (жирная линия) ($W_p \sim 4.14 \times 10^{-15}$ эрг [3]), другая, для сравнения, совершает надбарьерное движение. Дислокация, совершающая туннельный переход, из-за отсутствия трения движется быстрее ($t_1 < t_2 < t_3 < t_4$).

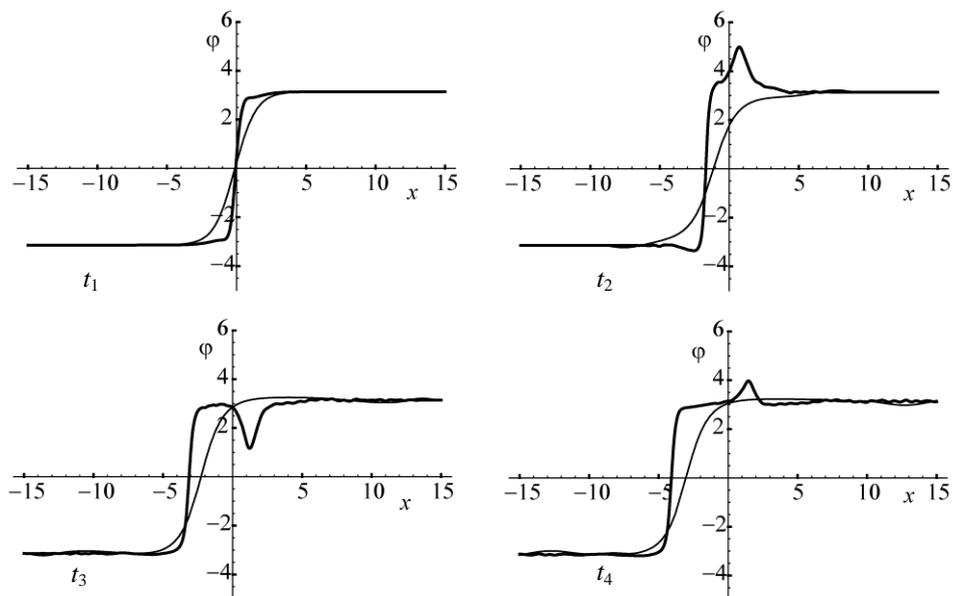


Рис.1. Поле смещений двух дислокаций для разных моментов времени.

Из рис.2 следует, что скорость дислокации, совершающей надбарьерное движение, в процессе скольжения знака не меняет, оставаясь постоянной по модулю.

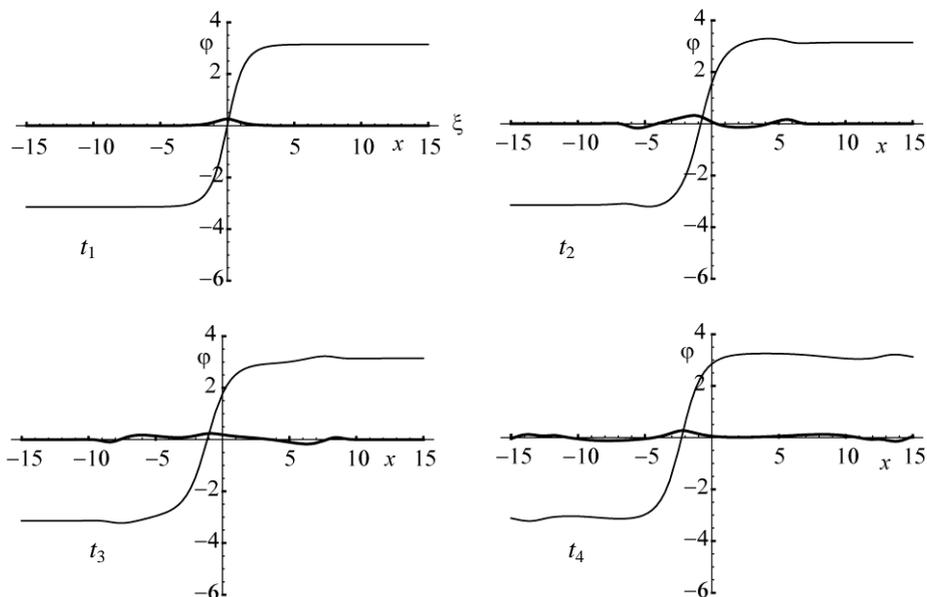


Рис.2. Поле смещений дислокации, совершающей надбарьерное движение, и распределение скоростей той же дислокации по координате для разных моментов времени (жирная линия).

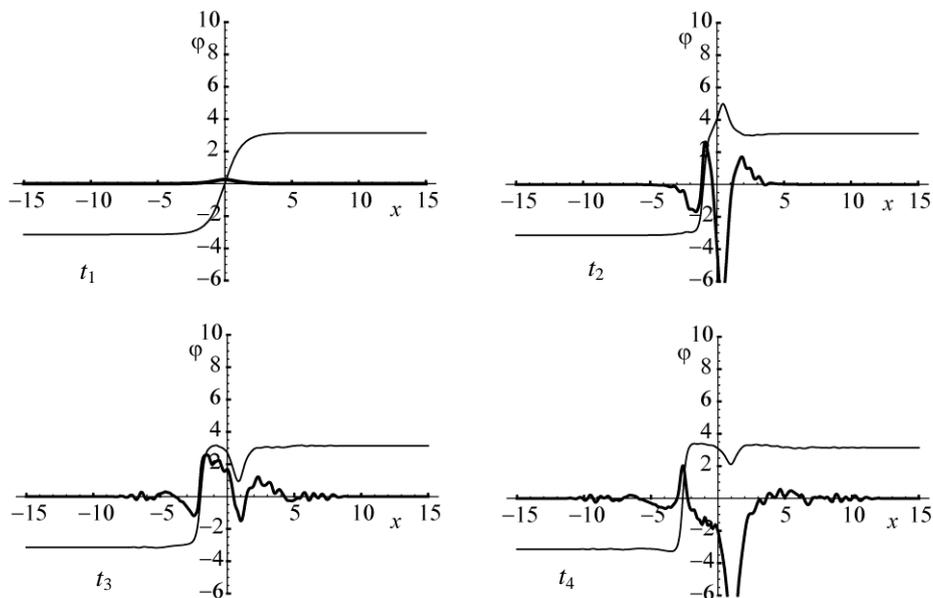


Рис.3. Поле смещений дислокации, движущейся посредством туннелирования перегибов, и распределение скоростей той же дислокации по координате для разных моментов времени.

Из рис.3 видно, что скорость отдельных фрагментов дислокации (перегибов) при туннелировании различна и меняет знак в процессе скольжения, дислокация движется скачкообразно, совершает колебания в направлении скольжения. Полученный результат находится в согласии с результатами работы [10], где показано, что при низких температурах в меди и алюминии деформация приобретает скачкообразный характер.

Отметим, что экспериментально наблюдаемая низкотемпературная скачкообразная деформация в алюминии описана также в обзоре [11]. В работе [12] дана интерпретация низкотемпературных аномалий движения дислокаций с динамическими перегибами в чистых металлах. Показано, что отжиг образца, приводящий к исчезновению перегибов, вызывает подавление указанных особенностей.

3. Заключение

Таким образом, проведенный нами теоретический расчет и математическое моделирование позволяют заключить, что в алюминии, с учетом барьера Пайерлса, дислокация ФК движется посредством туннелирования перегибов. Сделана теоретическая оценка возможности такого эффекта. Моделирование полей смещений и скоростей при движении дислокации демонстрирует туннелирование дислокаций.

Полученный результат объясняет аномальное уменьшение напряжения пластического течения и рост деформационного упрочнения в алюминии при низких температурах [10,13].

ЛИТЕРАТУРА

1. Т. Судзуки, Х. Есиага, Ц. Такеути. Динамика дислокаций и пластичность. М., Атомиздат, 1972.
2. Дж. Хирт, И. Лоте. Теория дислокаций. М., Атомиздат, 1972.
3. В.А. Мелик-Шахназаров, И.И. Мирзоева, И.А. Наскидашвили. Письма в ЖЭТФ, **43**, 247 (1986).
4. Б.В. Петухов, В.Л. Покровский. ЖЭТФ, **63**, 634 (1972).
5. Р. Фейнман, А. Хибс. Квантовая механика и интегралы по траекториям. М., Мир, 1968.
6. Д.И. Блохинцев. Основы квантовой механики. М., Высшая школа, 1961.
7. Ф. Андреев. УФН, **118**, 251 (1976).
8. О.М. Браун, Ю.Ц. Кившарь. Модель Френкеля–Конторовой. Концепции, методы и приложения. Physics – Monograph (Ed. W.Beigbock), 2008.
9. Солитоны в действии. Под ред. К.Лонгрена, Э.Скотта. М., Мир, 1981.
10. В.В. Пустовалов, Н.В. Исаев и др. Физика низких температур, **34**, 842 (2008).
11. В.В. Пустовалов. Физика низких температур, **26**, 515 (2000).
12. Л.П. Межев-Деглин, С.И. Мухин. Физика низких температур, **37**, 1011 (2011).
13. Т.А. Parkhomenko, V.V. Pustovalow. Phys. stat. sol.(a), **74**, 11 (1982).

ԱԼՅՈՒՄԻՆԻՒՄԻ ՄԻԱԲՅՈՒՐԵՂՆԵՐՈՒՄ ԴԻՍԼՈՎԱՑԻԱՆՆԵՐԻ ՇԱՐԺՄԱՆ
ՎԵՐԼՈՒԾՈՒԹՅՈՒՆԸ ԵՎ ՄԱԹԵՄԱՏԻԿԱԿԱՆ ՄՈԴԵԼԱՎՈՐՈՒՄԸ

Մ.Մ. ԱՌԱՔԵԼՅԱՆ

Հետազոտված է ցածր ջերմաստիճաններում այլումինիումի միաբյուրեղում Ֆրենկել-Կոնտորովայի դիսլոկացիայի շարժումը: Մինուս-Գորդոնի հավասարման օգտագործմամբ կատարված է դիսլոկացիաների համեմատական շարժման մաթեմատիկական մոդելավորում, մի դեպքում հաշվի առնելով κ , մյուս դեպքում, հաշվի չառնելով Պայերլսի պատնեշը: Ցույց է տրված, որ Պայերլսի պատնեշը հաշվի առնելու դեպքում դիսլոկացիան սահքի ուղղությամբ շարժվում է ծովածքների թունելավորման միջոցով: Կատարված է նշված երևույթի քանակական գնահատումը:

ANALYSIS AND MATHEMATICAL MODELING OF DISLOCATIONS
MOTION IN ALUMINUM SINGLE CRYSTALS

M.M. ARAKELYAN

Motion of a Frenkel–Kontorova dislocation in aluminum monocrystals at low temperatures is studied. Comparative mathematical modeling of dislocations motion in a Peierls potential relief and without it is performed by using the sine-Gordon equation. It is shown that in a Peierls relief dislocations transitions are of the quantum tunneling type. Quantitative estimate of the possibility of such effect is made.

УДК 548.732

РЕНТГЕНОВСКАЯ БРЭГГОВСКАЯ ДИФРАКЦИЯ СФЕРИЧЕСКОЙ ВОЛНЫ С УЧЕТОМ ДВУМЕРНОЙ КРИВИЗНЫ ВОЛНОВОГО ФРОНТА

М.К. БАЛЯН

Ереванский государственный университет, Армения

e-mail: mbalyan@ysu.am

(Поступила в редакцию 14 июля 2014 г.)

Рассмотрена симметричная брэгговская дифракция сферической рентгеновской волны в идеальном полубесконечном кристалле с плоской входной поверхностью. В отличие от стандартной теории учитывается двумерная кривизна волнового фронта падающей на кристалл волны. С использованием соответствующей функции Грина приведено общее выражение для амплитуды отраженной волны на входной поверхности кристалла. На основе этого выражения проанализированы различные случаи в зависимости от расстояния источник–кристалл: случай близко расположенного к кристаллу источника и случаи кристалла в зонах Френеля и Фраунгофера (удаленный источник) падающего излучения. Представлены распределения интенсивности отраженной волны с учетом двумерной кривизны волнового фронта падающего излучения. Численные расчеты подтверждают правильность используемых приближений.

1. Введение

При рассмотрении дифракции рентгеновской сферической волны важным параметром является расстояние источник–кристалл. Здесь необходимо различать три случая расстояний источник–кристалл: близко расположенный источник, источник на средних расстояниях и удаленный источник. В первом случае размер первой зоны Френеля падающей волны намного меньше характерного расстояния изменения функции точечного источника, во втором случае – имеет тот же порядок, а в третьем случае (концепция локально плоской волны) – намного больше. Случай близко расположенного источника рассматривался в работе [1]. Для среднего расстояния задача рассматривалась в [2]. Для больших расстояний задачу можно рассматривать на основе концепции падающей локально-плоской волны. Этот подход для геометрии Лауэ был рассмотрен в [3], а для геометрии Брэгга в [4]. В этих работах не учитывается двумерная кривизна волнового фронта падающей волны. В работах [5-8] была разработана динамическая теория, учитывающая двумерную кривизну волнового фронта падающей волны (в уравнениях динамической дифракции учитываются вторые производные амплитуд в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении). В работе [8] на основе общего формализма для геометрии Лауэ, развитого

в [6], рассмотрена концепция локально-плоской волны в геометрии Лауэ с учетом двумерной кривизны волнового фронта падающей волны. В работе [7] представлена общая теория для геометрии Брэгга, учитывающая двумерную кривизну волнового фронта падающего на кристалл излучения.

В данной работе, используя результаты работы [7], рассматривается динамическая брэгговская дифракция рентгеновской сферической волны в зависимости от расстояния источник–кристалл с учетом двумерной кривизны волнового фронта падающей волны.

2. Основные формулы

Согласно [7], амплитуду отраженной волны в симметричном случае Брэгга для полубесконечного кристалла с учетом двумерной кривизны волнового фронта, падающего на кристалл от точечного источника монохроматической волны, можно написать в виде:

$$E'_h(\mathbf{r}) = A e^{i\Phi_0(\mathbf{r})} \int_0^{+\infty} \frac{J_1(\sigma x')}{x'} e^{i\Phi(x',y)} dx', \quad (1)$$

где

$$\Phi_0 = k \left(\frac{x^2 \sin^2 \theta}{2L_s} - \Delta\theta \sin\theta x - \frac{x \cos\theta y^2}{2L_s^2} + \frac{y^2}{2L_s} - \frac{y^4}{8L_s^3} \right), \quad (2)$$

$$\Phi = \frac{kx'^2 \sin^2 \theta}{2L_s} + \beta(x, y)x', \quad (3)$$

$$\beta(x, y) = k \sin\theta \left(\frac{\chi_0}{\sin 2\theta} + \Delta\theta - \frac{x \sin\theta}{L_s} - \frac{y^2 \operatorname{tg}\theta}{2L_s^2} \right). \quad (4)$$

Здесь $\sigma = k\sqrt{\chi_h\chi_{\bar{h}}}/(2\sin\theta)$, J_1 – функция Бесселя первого порядка, координаты источника $\xi_s = y_s = 0$ (см. рис.1), $\Delta\theta = (\theta_i - \theta)$ – отклонение центрального луча падающей волны от точного угла Брэгга θ для данной длины волны излучения, θ_i – угол скольжения центрального луча падающей волны относительно отражающих плоскостей, L_s – расстояние источник–кристалл, $A = i(E_0^i/L_s)\sqrt{\chi_h\chi_{\bar{h}}}$, E_0^i – постоянная амплитуда падающей волны, χ_0 , χ_h , $\chi_{\bar{h}}$ – Фурье-коэффициенты поляризуемости кристалла, x и y – координаты точки наблюдения на входной поверхности кристалла, \mathbf{r} – радиус-вектор точки наблюдения, поляризационный фактор для краткости записи подставлен равным единице. Координатная система xuz связана с входной поверхностью кристалла (рис.1), причем, ось u перпендикулярна к плоскости дифракции (xz), ось z перпендикулярна к входной поверхности кристалла и направлена вглубь кристалла, ось x находится в плоскости дифракции и направлена параллельно входной поверхности кристалла. Начало координатной системы находится в точке пересечения центрального

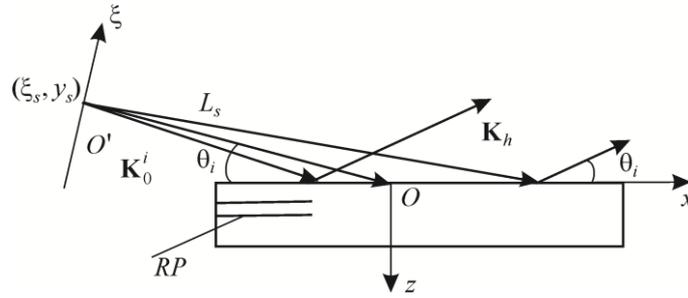


Рис.1. Общая схема брэгговской дифракции рентгеновской сферической волны в плоскости дифракции. Ось источника $O'\xi$ перпендикулярна центральному лучу падающей волны в плоскости дифракции, (ξ_s, y_s) – координаты некоторой точки источника, \mathbf{K}_0^i , L_s – средний волновой вектор падающей волны и среднее расстояние источник–кристалл, RP – отражающие плоскости, параллельные входной поверхности кристалла, \mathbf{K}_h – волновой вектор отраженной волны, θ_i – угол скольжения центрального луча относительно отражающих плоскостей, координатные оси x , z находятся в плоскости дифракции, ось y перпендикулярна к плоскости рисунка.

луча падающей волны и входной поверхности кристалла. Отражающие плоскости параллельны входной поверхности кристалла.

В формулах (1)–(4) основным отличием от стандартной теории является зависимость локального параметра отклонения β от условия Брэгга не только от x , но и от y . Как видно из (4), постоянные значения β определяются переменной $\eta(x, y) = x + y^2/(2L_s \cos\theta)$ и находятся на параболах $\eta(x, y) = \text{const}$. Это легко объяснить тем, что в симметричном случае Брэгга для падающей на кристалл сферической волны от точечного источника, точному условию Брэгга на поверхности кристалла удовлетворяют точки, лежащие на окружности с радиусом $L_s \cos\theta$ и с центром, являющимся проекцией источника на поверхность кристалла. Так как мы рассматриваем дифракцию вблизи поверхности кристалла, непосредственно примыкающей к точке падения центрального луча сферической волны (около точки на поверхности с координатами $(0,0,0)$), то в этой области окружность приближенно заменяется соответствующей параболой.

Основной вклад в интеграл в формуле (1) дает область интегрирования по x' , заключенная между нулем и первым нулем функции $J_1(\text{Re}[\sigma] x')/x'$, т.е. $0 \leq x' \leq 3.8/\text{Re}[\sigma]$. Введем параметр

$$D = \frac{(\lambda L_s)^{1/2} / \sin\theta}{3.8 / \text{Re}[\sigma]}, \quad (5)$$

который имеет смысл отношения размера первой зоны Френеля к размеру апертуры, т.е. является аналогом волнового параметра дифракции (в дальнейшем просто параметр дифракции), известного из оптики для света видимого диапазона [9,10].

3. Распределение интенсивности в зависимости от расстояния источник–кристалл

3.1. Близко расположенный к кристаллу источник

Согласно формуле (5), для близко расположенного к кристаллу источника $D \ll 1$ ($L_s \rightarrow 0$). Как видно из (1) и (3), в этом случае экспонента с квадратичным по x' членом в фазе падающей волны под интегралом в формуле (1) быстро осциллирует в эффективной области интегрирования $0 \leq x' \leq 3.8/\text{Re}[\sigma]$. Для приближенного вычисления интеграла можно применять метод стационарной фазы [9,10]. Выполняя интегрирование, для амплитуды находим

$$E'_h(x, y, z = 0) = B \exp[i\psi(x, y)] \exp\left[-\frac{\mu\eta(x, y)}{2 \cos \theta}\right] \frac{J_1(\sigma\eta(x, y))}{\sigma\eta(x, y)} H(\eta(x, y)). \quad (6)$$

Здесь

$$B = A\sigma e^{i\pi/4} \sqrt{\frac{2\pi L_s}{k \sin^2 \theta}}, \quad (7)$$

$$\psi(x, y) = k \left(\frac{\chi_{0r}}{2 \cos \theta} \eta(x, y) + \frac{y^2}{2L_s} + \Delta\theta \frac{y^2 \text{tg} \theta}{2L_s} - \frac{xy^2}{2L_s^2 \cos \theta} - \frac{y^4}{8L_s^3 \cos^2 \theta} \right), \quad (8)$$

$\mu = k\chi_{0i}$ – линейный коэффициент поглощения кристалла, χ_{0r} и χ_{0i} – действительная и мнимая части χ_0 , соответственно. Интенсивность на входной поверхности равна квадрату модуля амплитуды (6). Как видно из (6), равные значения интенсивности лежат на параболах $\eta(x, y) = \text{const}$. Если точки наблюдения ограничить условием $|\sigma|y^2/(2L_s \cos \theta) \ll 1$, то для распределения интенсивности приходим к выражению, известному из стандартной теории. Размеры области отражения на поверхности кристалла имеют порядок $\eta(x, y) \sim 3.8/\text{Re}[\sigma]$. Представляет интерес оценка размеров области отражения на линиях $x = 0$ и $y = 0$ и сравнение их друг с другом.

В качестве примера рассмотрим Si(220) отражение, $\lambda = 0.71 \text{ \AA}$ (17.46 кэВ), $L_s = 0.1$ м, σ -поляризация, $\theta \sim 10.63^\circ$, $\text{Re}[\sigma] \sim 8.58 \times 10^4 \text{ м}^{-1}$, $\Delta\theta = -\text{Re}[\chi_0]/\sin 2\theta$. Согласно формуле (5), для параметра дифракции имеем $D \approx 0.3$. Это означает, что можно применять приближение близко расположенного к кристаллу источника. Как было сказано выше, размер области отражения определяется условием $\eta(x, y) \sim 3.8/\text{Re}[\sigma]$. Исходя из этого, на линии $y = 0$ для размера области отражения имеем $|x| \sim 3.8/\text{Re}[\sigma] \approx 44$ мкм. На линии $x = 0$ для размера области отражения получаем $2|y| \sim 2(3.8 \times 2L_s \cos \theta / \text{Re}[\sigma])^{1/2} \sim 5.9$ мм. Как и следовало ожидать, на линии $x = 0$ в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении размер области отражения на два порядка превышает размер области отражения в плоскости дифракции на линии $y = 0$. Распределение интенсивности на линии $y = 0$, согласно (6), соответствует распределению интенсивности, известному из стандартной теории динамической дифракции [11,12]. На рис.2 показано распределение интенсивности отраженной волны на линии

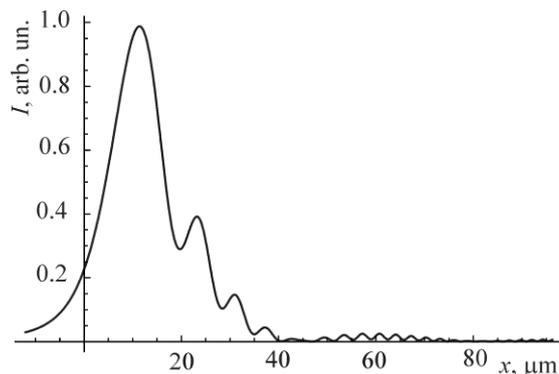


Рис.2. Распределение интенсивности отраженной волны на входной поверхности кристалла на линии $y = 0$ в плоскости дифракции. Близко расположенный к кристаллу источник, $L_s = 0.1$ м. Численный расчет по точной формуле (1).

$y = 0$, полученное с помощью прямого численного интегрирования (1). Как видно из рисунка, размер области отражения соответствует вышеприведенной оценке несмотря на то, что из-за дополнительной фазы, вносимой функцией точечного источника под интегралом, максимум интенсивности слегка смещен от точки $x = 0$ и достигается в точке $x = 11.5$ мкм. Имея ввиду это обстоятельство, на рис.3а приведено распределение интенсивности по y не на линии $x = 0$, а на линии $x = 11.5$ мкм, основанное на численном интегрировании точной формулы (1). В качестве сравнения на рис.3б приведено распределение интенсивности на линии $x = 0$ согласно приближенной формуле (6). Как видно из этих рисунков, приближенная формула адекватно описывает поведение интенсивности в рассматриваемом случае. Размер области отражения соответствует вышеприведенной оценке. Для представления поведения интенсивности во всей области отражения на рис.4 приведена расчетная топограмма по приближенной формуле (6). Хорошо видно, что линии постоянных значений интенсивности лежат на параболах $\eta(x, y) = \text{const}$.

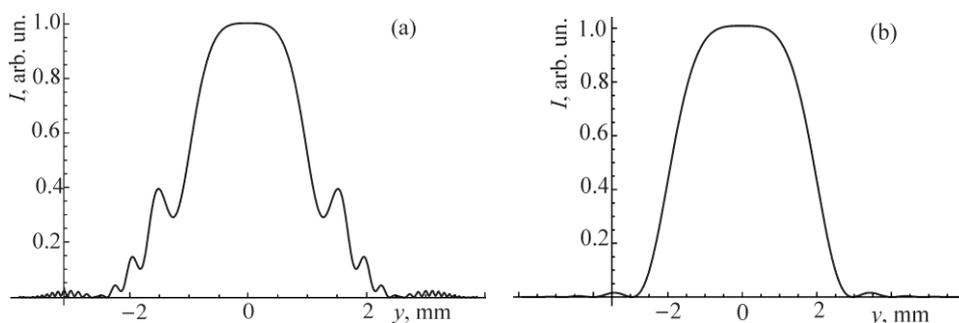


Рис.3. (а) Распределение интенсивности отраженной волны на входной поверхности кристалла на линии $x = 0$. Численный расчет по точной формуле (1). (б) То же самое с использованием приближенной формулы (6). Близко расположенный к кристаллу источник, $L_s = 0.1$ м.

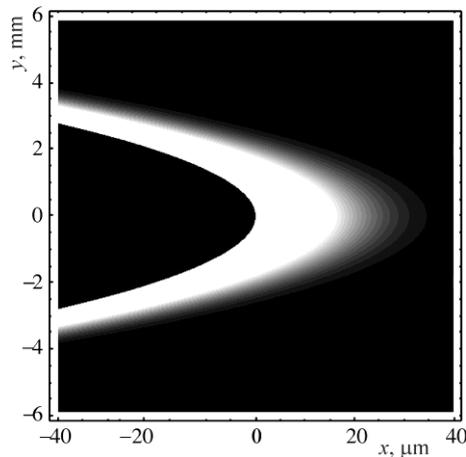


Рис.4. Расчетная топограмма интенсивности отраженной волны на входной поверхности кристалла согласно приближенной формуле (6). Близко расположенный к кристаллу источник, $L_s = 0.1$ м.

3.2. Источник на среднем расстоянии и удаленный источник

Согласно (5), для средних расстояний источник–кристалл параметр дифракции $D \sim 1$. В этом случае кристалл находится в зоне Френеля падающего излучения. Распределение интенсивности можно найти только численным интегрированием, используя точную формулу (1). В этом случае важно знать сколько зон Френеля падающей волны поместится в эффективной области интегрирования $3.8/\text{Re}[\sigma]$.

Для удаленного источника $D \gg 1$, и в подинтегральном выражении в формуле (1) можно игнорировать квадратичным относительно x' членом в фазе падающей волны (см. формулу (3)), что является условием нахождения кристалла в зоне Фраунгофера падающего излучения. Этот случай в геометрии Лауэ в рамках стандартной теории рассматривался в [3], а с учетом двумерной кривизны падающего излучения – в работе [8]. В работе [3] введен термин “концепция локально-плоской волны” для случая игнорирования вышеупомянутым квадратичным членом, когда падающая волна представляется в виде плоских волн с различными направлениями волнового вектора. Каждой такой плоской волне соответствует свой локальный параметр отклонения от условия Брэгга.

После игнорирования квадратичным относительно x' членом в фазе падающей волны в подинтегральном выражении в формуле (1) амплитуда (1) будет пропорциональна Фурье-образу функции точечного источника $J_1(\sigma x') / x'$, а квадрат ее модуля с одной стороны есть интенсивность отраженной волны на входной поверхности кристалла, а с другой стороны пропорциональна коэффициенту отражения, поведение которого в зависимости от угла отклонения от условия Брэгга есть кривая качания. Коэффициент отражения $R(\Delta\Theta) =$

$R(\Delta\theta_1 + \Delta\theta_2)$ зависит от суммы локального угла отклонения от условия Брэгга в плоскости дифракции $\Delta\theta_1(x) = \chi_0/\sin 2\theta + \Delta\theta - x\sin\theta/L_s$ (χ_0 – комплексная величина, поэтому $\Delta\theta_1$ правильнее называть параметром) и локального угла отклонения в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении $\Delta\theta_2(y) = -\text{tg}\theta y^2/(2L_s)$:

$$\Delta\Theta(x, y) = \Delta\theta_1(x) + \Delta\theta_2(y) = \frac{\chi_0}{\sin 2\theta} + \Delta\theta - x\sin\theta/L_s - \text{tg}\theta y^2 / (2L_s^2), \quad (9)$$

причем, $\beta(x, y) = k\sin\theta\Delta\Theta(x, y)$. Используя табличный интеграл [4], для амплитуды в приближении локально-плоской волны из (1) получим

$$E'_h(\mathbf{r}) = e^{i\Phi_0(\mathbf{r})} \frac{E_0^i}{L_s} \Gamma(x, y), \quad (10)$$

где

$$\Gamma(x, y) = -\sqrt{\frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}}} \frac{\sigma}{\beta(x, y) + [\beta^2(x, y) - \sigma^2]^{1/2}}. \quad (11)$$

Снова в качестве примера рассмотрим Si(220) отражение, $\lambda = 0.71 \text{ \AA}$ (17.46 кэВ), $L_s = 5 \text{ м}$, $\Delta\theta = -\text{Re}[\chi_0]/\sin 2\theta$, σ -поляризация, параметр дифракции $D \approx 2.3$. Игнорируя зависимость $\beta(x, y)$ от y в (10)–(11), мы получим результат стандартной динамической теории для падающей волны с цилиндрическим фронтом. Если принять в (10) зависимость $\beta(x, y)$ от y , т.е. учитывать двумерную кривизну волнового фронта падающей волны, то приходим к распределению интенсивности и кривой качания с учетом двух углов отклонения от выбранного точного направления Брэгга. Согласно (10) и (11), в плоскости дифракции с заметной амплитудой отражаются волны, для которых $x/L_s \sim |\chi_h|$, а в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении с заметной амплитудой отражаются волны, для которых $y/L_s \sim |\chi_h|^{1/2}$. Учитывая, что для рентгеновских лучей $|\chi_h| \sim 10^{-5} - 10^{-6}$, заключаем, что область отражения в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении в случае удаленного источника на несколько порядков шире, чем то же в плоскости дифракции. На рис.5а показана кривая качания, т.е. коэффициент отражения $R(0, y) = |\Gamma|^2$, на линии $x = 0$ в зависимости от y , полученная численным методом интегрирования точной формулы (1). Для сравнения, та же кривая, рассчитанная на основе приближенной формулы (11), показана на рис.5б. Как видно из рисунков, получено достаточно хорошее совпадение приближенных вычислений с результатами численных расчетов несмотря на то, что вместо условия $D \gg 1$, имеем $D \approx 2.3$. Заметим, что параболы постоянных значений интенсивности для выбранного расстояния имеют настолько большой радиус кривизны $L_s \cos\theta \approx 5 \text{ м}$ у вершины параболы, что для показанных на рис.4 границах по y кривизна параболы не имеет значения и лентообразный пучок будет равномерно отражаться во всей области для указанных на рис.4 границах по y . Как видно из рис.5б, коэффициент отражения на

краях области отражения чуть больше по значению, чем в центре. Именно у краев области отражения значение коэффициента отражения равно 0.995, а в центре – 0.9849. Это есть следствие поглощения. Из-за линейной зависимости локального параметра отклонения от условия Брэгга от координаты в плоскости дифракции коэффициент отражения в плоскости дифракции из-за поглощения имеет чуть большее значение на одном краю области отражения, чем в центре, и чуть меньшее значение на другом краю области отражения, чем в центре (т.е. коэффициент отражения относительно центра области отражения асимметричен из-за поглощения) [11,12]. В перпендикулярном к плоскости дифракции направлении кривая отражения симметрична и имеет чуть большее значение на обоих краях области отражения, чем в центре, т.к. локальный параметр отклонения от условия Брэгга квадратично зависит от координаты в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении. Численный расчет на рис.5а показывает, что коэффициент отражения по значению у краев области отражения больше, чем в центре, однако это скорее дифракционный эффект, чем эффект поглощения, так как разница значений в центре и у краев намного больше, чем было бы только вследствие поглощения. Это утверждение мы проверили, искусственно полагая мнимые части Фурье-коэффициентов поляризуемости кристалла равными нулю, т.е. считая кристалл непоглощающим. Кривая на рис.5а остается неизменной, в то время как кривая на рис.5б в центре и на обоих краях приобретает одно и то же значение коэффициента отражения. Данные для кристалла взяты из [12].

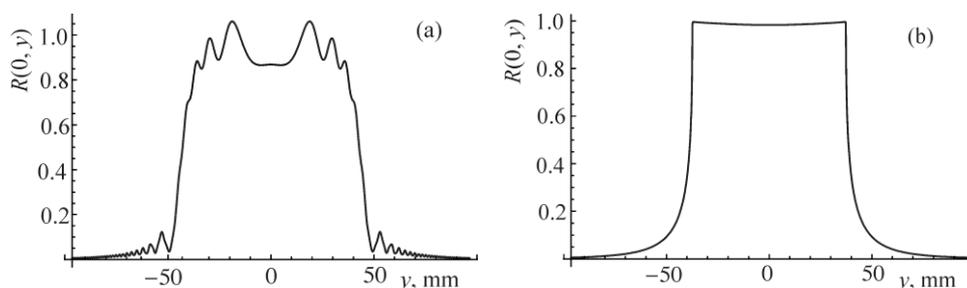


Рис.5. (а) Кривая качания (коэффициент отражения) на линии $x = 0$ в зависимости от y . Численный расчет на основе точной формулы (1). (б) То же самое на основе приближения локально-плоской волны по формуле (11). Удаленный источник, $L_s = 5$ м.

4. Заключение

В общем случае интенсивность отраженной волны зависит от отклонения падающей волны от некоторого точного направления Брэгга как в плоскости дифракции, так и в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении. Это значит, что интенсивность отраженной рентгеновской сферической волны

зависит от двух локальных углов отклонения от точного направления Брэгга. Вместе с тем, в формировании интенсивности существенную роль играет расстояние источник–кристалл. В данной работе в зависимости от расстояния источник–кристалл и от двух углов отклонения от точного угла Брэгга проанализировано распределение интенсивности отраженной от идеального полубесконечного кристалла рентгеновской сферической волны в симметричной брэгговской геометрии дифракции. Локальный параметр отклонения от условия Брэгга линейно зависит от координаты в плоскости дифракции и квадратично от координаты в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении. Вследствие этого размер области отражения в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении на несколько порядков превышает ту же величину в плоскости дифракции. Когда кристалл находится в зоне Френеля падающего излучения, распределение интенсивности можно получить только с помощью численного интегрирования точной формулы для амплитуды отраженной волны. Для близко расположенного источника и для удаленного источника сделаны приближения, которые адекватно описывают поведение отраженной волны на входной поверхности кристалла.

Для близко расположенного источника поведение отраженной волны можно описать с помощью функции точечного источника для задачи брэгговской дифракции. В отличие от стандартной теории функция точечного источника зависит как от координаты в плоскости дифракции, так и от координаты в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении. Геометрическое место точек постоянных значений интенсивности – параболы, которые аппроксимируют окружность точек на поверхности кристалла, где удовлетворяется точное условие Брэгга.

Для удаленного точечного источника (зона Фраунгофера) падающая волна с двумерной кривизной волнового фронта представлена в виде совокупности локально-плоских волн с локальными угловыми отклонениями от направления Брэгга. Учитывая зависимость интенсивности отраженной волны от двух углов отклонения от выбранного направления Брэгга, представлена кривая качания для падающей волны с двумерной кривизной волнового фронта. В этом случае вместо качания кристалла около направления Брэгга, кривую качания можно получить как распределение интенсивности отраженной волны. Из-за квадратичной зависимости локального параметра отклонения от условия Брэгга от координаты в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении коэффициент отражения симметричен по этой координате и на краях области отражения имеет чуть большее значение, чем в центре из-за поглощения. Тогда как в плоскости дифракции тот же коэффициент отражения из-за линейной зависимости от соответствующей координаты и из-за поглощения асимметричен и имеет чуть большее значение на одном краю области отражения, чем на другом краю. Численные расчеты подтверждают правильность сделанных приближений.

ЛИТЕРАТУРА

1. **T. Uragami.** J. Phys. Soc. Japan, **27**, 147 (1969).
2. **Л.А. Арутюнян, К.Г. Труни.** Металлофизика, **7**, 15 (1985).
3. **V. Mocella, Y. Epelboin, P. Guigay.** Acta Cryst. A, **56**, 308 (2000).
4. **А.Н. Grigoryan, М.К. Balyan, А.Н. Toneyan.** J. Synchrotron Rad., **17**, 332 (2010).
5. **М.К. Балян.** Изв. НАН Армении, Физика, **49**, 62, (2014).
6. **М.К. Балян.** Изв. НАН Армении, Физика, **49**, 130 (2014).
7. **М.К. Балян.** Изв. НАН Армении, Физика, **49**, 284 (2014).
8. **М.К. Балян.** Изв. НАН Армении, Физика, **49**, 446 (2014).
9. **М.Б. Виноградова, О.В. Руденко, А.П. Сухоруков.** Теория волн. М., Наука, 1979.
10. **S. Solimeno, B. Crosignani, P. Di Porto.** Guiding, diffraction and Confinement of Optical Radiation. New York, Academic Press, Inc., 1986.
11. **A. Authier.** Dynamical theory of X-ray diffraction. Oxford University Press, 2001.
12. **З.Г. Пинскер.** Рентгеновская кристаллооптика. М., Наука, 1982.

ՌԵՆՏԳԵՆՅԱՆ ՍՖԵՐԻԿ ԱԼԻՔԻ ԲՐԵԳՅԱՆ ԴԻՖՐԱԿՑԻԱՆ
ԱԼԻՔՍՅՆԻ ԸՄԿՍՏԻ ԵՐԿՉՍՓ ԿՈՐՈՒԹՅԱՆ ՀԱՇՎԱՌՄԱՍԲ

Մ.Կ. ԲԱԼՅԱՆ

Դիտարկված է ռենտգենյան սֆերիկ ալիքի սիմետրիկ բրեգյան դիֆրակցիա հարթ մուտքի մակերևույթով կատարյալ կիսասանվերջ բյուրեղում: Ի տարբերություն ստանդարտ տեսության, հաշվի է առնվում բյուրեղի վրա ընկնող ալիքի ճակատի երկչափ կորությունը: Համապատասխան Գրինի ֆունկցիայի օգտագործմամբ բերված է անդրադարձած ալիքի ամպլիտուդի ընդհանուր արտահայտությունը բյուրեղի մուտքի մակերևույթին: Այդ արտահայտության հիման վրա, կախված աղբյուր-բյուրեղ հեռավորությունից, վերլուծված են տարբեր դեպքեր՝ մոտ տեղավորված աղբյուր, աղբյուր ֆրենելյան գոտում և Ֆրաունհոֆերի գոտում (մեծ հեռավորության վրա գտնվող աղբյուրի դեպքը): Ներկայացված է անդրադարձած ալիքի ինտենսիվությունը, հաշվի առնելով ընկնող ալիքի ճակատի երկչափ կորությունը: Թվային հաշվարկները հաստատում են արված մոտավորությունների ճշտությունը:

BRAGG DIFFRACTION OF X-RAY SPHERICAL WAVE
WITH ALLOWANCE FOR TWO-DIMENSIONAL CURVATURE OF WAVEFRONT

M.K. BALYAN

Symmetrical Bragg diffraction of an X-ray spherical wave in a perfect semi-infinite crystal with a flat entrance surface is considered. Unlike the standard theory the two-dimensional curvature of the incident wavefront is taken into account. Using the corresponding Green function a general expression for the amplitude of reflected wave on the entrance surface of the crystal is presented. Basing on this expression the different cases of a source placed near the crystal and placed in the Fresnel and Fraunhofer zones (at a large distance) are analyzed. The intensity distributions of the reflected wave depending on two dimensional curvature of the incident wavefront are presented. Numerical calculations confirm the correctness of the used approximations.

ԲՈՎԱՆԴԱԿՈՒԹՅՈՒՆ

Ա.Ա. Մարգարյան, Գ.Ա. Ամատունի, Վ.Վ. Մահակյան, Վ.Ս. Ցականով. Փնջի հիմնական և տարբերություն հետազոտների միջև կապը գծային արագացուցիչներում.....	3
Տ.Լ. Վարդանյան. Վիզլեր մագնիսների միջոցով փնջի էմիտանսի մարման էֆեկտը «ԲԵՆԴԼ»-կուտակիչ օղակում.....	14
Ր.Ա. Բաղդյան. Էլեկտրոնների սահուն անկումը օպտիկական անցումային ճառագայթման էքսպերիմենտներում.....	20
Դ.Ս. Մեղրակյան, Ա.Խ. Բաղդասարյան, Լ.Ռ. Մեղրակյան. Քվազիմիաչափ քվանտային հորում էլեկտրոնի երկուղի ցրումը և ճառագայթումը.....	25
Ա.Հ. Գևորգյան. Քիրալ ֆոտոնային բյուրեղի վերջավոր հաստությամբ շերտի կլանումը և էմիսիան.....	38
Ս.Թ. Գևորգյան, Մ.Ս. Գևորգյան. Դաշտի մոդերի քառակուսային ամպլիտուդների ֆլուկտուացիաների և ֆոտոնների թվերի ֆլուկտուացիաների կորելյացիաների դինամիկական ներդեգնատորային երրորդ հարմոնիկի գեներացիայի երևույթում..	52
Տ.Վ. Գևորգյան. Եռաֆոտոն վիճակները փուլային տարածությունում.....	59
Վ.Գ. Բաբաջանյան, Ռ.Բ. Կոստանյան, Պ.Հ. Մուծիկյան. Ճառագայթման գերման երևույթի ազդեցությունը $YAG:Er^{3+}$ բյուրեղի ինֆրակարմիր լյումինեսցենցիայի բնութագրերի վրա.....	66
Դ.Լ. Հովհաննիսյան, Հ.Լ. Մարգարյան, Ն.Հ. Հակոբյան, Վ.Ս. Հարությունյան, Վ.Վ. Բեյլյան, Ա.Ս. Սոլումատին. Ճառագայթման կառավարումը ալիքի երկարության միջին ԻԿ տիրույթում հեղուկ բյուրեղային փուլային ցանցի միջոցով.....	74
Ռ.Կ. Հովսեփյան, Ա.Ռ. Պողոսյան, Է. Ե. Էլբակյան. ZnO լայնգոտիական կիսահաղորդիչների վրա հիմնված գրանուլացված կառուցվածքների հաղորդականությունը.	85
Ժ.Ռ. Փանոսյան, Ա.Ժ. Խաչատրյան, Դ.Բ. Հայրապետյան, Ս.Ս. Ոսկանյան, Ե.Վ. Ենգիբարյան. Եռաշերտ լուսապայծառացնող ածխածնային ալմաստանման թաղանթները ապակու վրա.....	96
Ա.Վ. Եգանյան, Ա.Ս. Կուզանյան, Վ.Ս. Ստաթոպոտու. Պինդ բյուրեղական դիելեկտրիկներում ջերմային ընդարձակման գործակցի գնահատումը բարձր ջերմաստիճաններում.....	105
Հ.Գ. Բաղդայան, Խ.Ս. Ղազարյան, Ս.Ս. Ցայլոյան. Մոլեկուլի ազատ մակերեսի կախվածությունը երրորդ բաղադրիչի առկայությունից լիտորոպ հեղուկ բյուրեղներում.....	111
Կ.Թ. Ավետյան, Լ.Վ. Լևոնյան, Հ.Ս. Մեմերջյան, Մ.Ս. Առաքելյան, Օ.Ս. Բաղայան, Դ.Ա. Զեյնալյան. Ռենտգենյան ճառագայթման լայն տարամիտված փնջի դիֆրակցիայի երկու սխեմաներ.....	118
Ս.Ս. Առաքելյան. Ալյումինիումի միաբյուրեղներում դիսլոկացիաների շարժման վերլուծությունը և մաթեմատիկական մոդելավորումը.....	126
Մ.Կ. Բալյան. Ռենտգենյան սֆերիկ ալիքի բրեկյան դիֆրակցիանալիքային ճակատի երկչափ կորության հաշվառմամբ.....	134

CONTENTS

A.A. Sargsyan, G.A. Amatuni, V.V. Sahakyan, V.M. Tsakanov. On the relationship between beam original and difference orbits in linear accelerators	3
T.L. Vardanyan. Damping viggler effect in CANDLE storage ring	14
R.A. Baghiyan. Grazing incidence of electrons in experiments on optical transition radiation	20
D.M. Sedrakian, A.Kh. Bagdasaryan, L.R. Sedrakyan. Two-channel scattering and emission of electron in a quasi-one-dimensional quantum hole	25
A.H. Gevorgyan. Absorption and emission of a finite layer of chiral photonic crystal ...	38
S.T. Gevorgyan, M.S. Gevorgyan. Dynamics of correlation of quadrature amplitudes fluctuations and of correlation of photon number fluctuations of field modes in intracavity third-harmonic generation process	52
T.V. Gevorgyan. Three-photon states in phase space	59
V.G. Babajanyan, R.B. Kostanyan, P.H. Muzhikyan. Influence of radiation trapping on the characteristics of IR luminescence of YAG:Er ³⁺ crystal	66
D.L. Hovhannisyan, H.L. Margaryan, N.H. Hakobyan, V.M. Aroutiounian, V.V. Belyaev, A.S. Solomatin. Radiation control in the mid IR wavelength range using the liquid crystal phase grating	74
R.K. Hovsepyan, A.R. Poghosyan, E.Y. Elbakyan. Conductivity of the granular structures based on wide-band ZnO semiconductors	85
Zh.R. Panosyan, A.Zh. Khachatryan, D.B. Hayrapetyan, S.S. Voskanyan, Y.V. Yengibaryan. Three-layer antireflection diamond-like carbon films on glass	96
A.V. Yeganyan, A.S. Kuzanyan, V.S. Stathopoulos. Estimation of thermal expansion coefficient in solid crystal dielectrics at high temperatures	105
H.G. Badalyan, Kh.M. Ghazaryan, S.M. Yayloyan. Dependence of partial molecules surface area on the third component in liotropic liquid crystals	111
K.T. Avetyan, L.V. Levonyan, O.S. Semerjyan, M.M. Arakelyan, O.M. Badalyan, D.A. Zeynalyan. Two schemes of diffraction of widely divergent beam of X-ray radiation	118
M.M. Arakelyan. Analysis and mathematical modeling of dislocations motion in aluminum single crystals	126
M.K. Balyan. Bragg diffraction of X-ray spherical wave with allowance for two-dimensional curvature of wavefront	134

СОДЕРЖАНИЕ

А.А. Саргсян, Г.А. Амадуни, В.В. Саакян, В.М. Цаканов. О соотношении между основной и разностной траекториями пучка в линейных ускорителях .	3
Т.Л. Варданян. Радиационное сжатие эмиттанса электронного пучка в накопительном кольце “КЕНДЛ” с помощью виглер-магнитов	14
Р.А. Багиян. Скользящее падение электронов в экспериментах по оптическому переходному излучению	20
Д.М. Седракян, А.Х. Багдасарян, Л.Р. Седракян. Двухканальное рассеяние и излучение электрона в квантовой квазиодномерной яме	25
А.А. Геворгян. Поглощение и эмиссия конечного слоя хирального фотонного кристалла	38
С.Т. Геворгян, М.С. Геворгян. Динамика корреляции флуктуаций квадратурных амплитуд и корреляции флуктуаций числа фотонов мод поля в процессе внутрирезонаторной генерации третьей гармоники	52
Т.В. Геворгян. Трехфотонные состояния в фазовом пространстве.....	59
В.Г. Бабаджанян, Р.Б. Костанян, П.Г. Мужикян. Влияние пленения излучения на характеристики ИК люминесценции кристалла YAG:Er ³⁺	66
Д.Л. Оганесян, А.Л. Маргарян, Н.Г. Акопян, В.М. Арутюнян, В.В. Беляев, А.С. Соломатин. Управление излучением в среднем ИК диапазоне длин волн с помощью жидкокристаллической фазовой решетки	74
Р.К. Овсепян, А.Р. Погосян, Э.Е. Элбакян. Проводимость гранулированных структур на основе широкозонных полупроводников ZnO	85
Ж.Р. Паносян, А.Ж. Хачатрян, Д.Б. Айрапетян, С.С. Восканян, Е.В. Енгибарян. Трехслойные антиотражающие алмазоподобные углеродные пленки на стекле	96
А.В. Еганян, А.С. Кузаян, В.С. Статопoulos. Оценка коэффициента теплового расширения твердых кристаллических диэлектриков при высоких температурах	105
Г.Г. Бадалян, Х.М. Казарян, С.М. Яйлоян. Зависимость парциальной площади молекул от третьей компоненты в лиотропных жидких кристаллах	111
К.Т. Аветян, Л.В. Левонян, О.С. Семерджян, М.М. Аракелян, О.М. Бадалян, Д.А. Зейналян. Две схемы дифракции широко расходящегося пучка рентгеновского излучения.....	118
М.М. Аракелян. Анализ и моделирование процесса движения дислокаций в монокристаллах алюминия	126
М.К. Балян. Рентгеновская брэгговская дифракция сферической волны с учетом двумерной кривизны волнового фронта	134

Заказ № 548

Тираж 150. Сдано в набор 27.11.2014.

Подписано к печати 04.12.2014. Печ. л. 9.25.

Бумага офсетная. Цена договорная.

Типография НАН РА. Ереван, пр. Маршала Баграмяна, 24.