



ИЗВЕСТИЯ  
НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК АРМЕНИИ

ՏԵՂԵԿԱԳԻՐ  
ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ԳԻՏՈՒՅՑՈՒՆՆԵՐԻ ԱԶԳԱՅԻՆ ԱԿԱԴԵՄԻԱՅԻ

PROCEEDINGS  
OF NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF ARMENIA



ՄԱՐԿԵՏԻՆԳ  
ՓԻՆԱԿԱ

1997 թ.

58

№ 3

© 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. Мирзаханян, ответственный секретарь

ԽՄԲԱԳՐԱԿԱՆ ԿՈՒԵԳԻԱ

Վ. Մ. Հարությունյան, գլխավոր խմբագիր  
Է. Գ. Շարոյան, 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. Mkrchyan  
D. H. Sarkisyan  
A. M. Sirunyan  
Yu. S. Chilingaryan  
A. A. Mirzakhanyan, 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 539.184

## **АНАЛИТИЧЕСКИЕ РЕШЕНИЯ КВАНТОВОЙ ДВУХУРОВНЕВОЙ ЗАДАЧИ В ДВАЖДЫ, БИ- И ТРИКОНФЛЮЭНТНЫХ ФУНКЦИЯХ ГОЙНА**

Т.А. ШАХВЕРДЯН<sup>1,2</sup>, Т.А. ИШХАНЫАН<sup>1,2\*</sup>,  
А.Е. ГРИГОРЯН<sup>1</sup>, А.М. ИШХАНЫАН<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак, Армения

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия

\*e-mail: tishkhanyan@gmail.com

(Поступила в редакцию 29 апреля 2015 г.)

Получены пять классов моделей квантовой временной двухуровневой задачи, которые решаются в дважды конфлюэнтных функциях Гойна, пять других классов – в биконфлюэнтных функциях Гойна и один класс – в триконфлюэнтных функциях Гойна. Найденные классы расширяют все известные семейства двух- и трёхпараметрических моделей, решаемых в конфлюэнтных гипергеометрических функциях, до более общих четырёхпараметрических классов, включающих трёхпараметрические функции модуляции расстройки поля. Введенные специальные модели описывают разные нелинейные (параболические, кубические,  $\sinh$ ,  $\cosh$ , и т.д.) процессы с касанием или прохождением уровней, двукратным или трёхкратным пересечением уровней, а также периодически повторяющиеся процессы касания или пересечения резонанса. Показано, что существуют дополнительные классы, которые могут быть получены при использовании уравнений, решениями которых являются функции, включающие производные конфлюэнтных функций Гойна. Представлено по одному примеру такого класса для каждого из трёх рассматриваемых конфлюэнтных уравнений Гойна.

### **1. Введение**

Квантомеханические модели с малым числом состояний широко используются при изучении ряда явлений во многих областях квантовой физики [1–6]. Они являются хорошим начальным приближением в случаях, когда при взаимодействии с внешним полем лишь некоторые из энергетических уровней реальной квантовой системы участвуют в переходах, в то время как другие остаются пассивными. В рамках представлений малочисленных состояний важную роль сыграли аналитические решения двухуровневой задачи, которые широко использовались в физике столкновений, при управлении атомами посредством внешних лазерных полей, при исследовании туннельных эффектов в комплексных биологических системах, в химической динамике и, в общем, в теории квантовых неадиабатических переходов [1–20].

В данной работе рассматриваются решения полуклассической временной двухуровневой задачи в двойные, би- и триконфлюэнтных функциях Гойна [21–23], являющихся представителями класса математических функций Гойна, которые обобщают многие привычные специальные функции, включая гипергеометрические, функции Эйри, Бесселя, Матьё и т.д. Недавно нами была изучена задача сведения двухуровневой системы к общему и конфлюэнтному уравнениям Гойна и были получены, соответственно, 35 5-параметрических [24] и 15 4-параметрических [25] классов моделей, разрешимых в этих функциях. Ранее для расширения моделей, допускающих решение в вырожденных гипергеометрических функциях, было использовано биконфлюэнтное уравнение Гойна, что привело к 5 4-параметрическим классам моделей, разрешимым в биконфлюэнтных функциях Гойна [26].

Метод, применяемый для нахождения конфигураций поля, для которых двухуровневая задача сводится к уравнению, имеющему известное аналитическое решение, основан на следующем общем свойстве разрешимых моделей. Рассмотрим временные уравнения Шрёдингера, определяющие полуклассическую временную двухуровневую задачу. Это – система двух дифференциальных уравнений первого порядка для амплитуд вероятности двух вовлечённых квантовых состояний  $a_{1,2}(t)$ , содержащих две произвольные реальные функции времени  $U(t)$  и  $\delta(t)$ :

$$i \frac{da_1}{dt} = U e^{-i\delta} a_2, \quad i \frac{da_2}{dt} = U e^{+i\delta} a_1. \quad (1)$$

Легко проверить, что, если функции  $a_{1,2}^*(z)$  являются решениями системы, переписанной для вспомогательного аргумента  $z$  для некоторых функций  $U^*(z)$  и  $\delta^*(z)$ , то функции  $a_{1,2}(t) = a_{1,2}^*(z(t))$  являются решениями системы (1) для конфигурации поля, определяемой как

$$U(t) = U^*(z) \frac{dz}{dt}, \quad \delta_i(t) = \delta_z^*(z) \frac{dz}{dt} \quad (2)$$

для произвольной комплекснозначной функции  $z(t)$  [27–30].

Это свойство позволяет группировать все разрешаемые модели в отдельные классы, каждый из которых содержит модели, которые путём преобразований (2) получаются из одних и тех же функций модуляции  $U^*(z)$  и  $\delta_z^*(z)$  для амплитуды и расстройки, соответственно. Тогда поиск всего множества моделей, разрешимых через определенную специальную функцию, сводится к идентификации независимых пар  $\{U^*, \delta_z^*\}$ , именуемых базовыми интегрируемыми моделями, для которых решение двухуровневой задачи записывается через данную специальную функцию.

Рассматриваются дважды, би- и триконфлюэнтные функции Гойна, которые являются решениями частных типов конфлюэнтных модификаций общего уравнения Гойна [31], полученные путём слияния его некоторых сингуляр-

ных точек [21–23]. Все три рассматриваемых уравнения могут быть записаны в виде

$$P(z)u_{zz} + (\gamma + \delta z + \varepsilon z^2)u_z + (\alpha z - q)u = 0, \quad (3)$$

где  $P(z) = z^2$ ,  $z$  и  $1$  для дважды, би- и триконфлюэнтного уравнений Гойна, соответственно.

Техника нахождения двухуровневых моделей, для которых уравнения Шрёдингера (1) сводятся к целевому уравнению (то есть, в данном случае – к дважды, би- и триконфлюэнтному уравнениям Гойна (3)), следующая. Рассмотрим дифференциальное уравнение для  $a_2$ , полученное из системы (1) путём исключения  $a_1$ ,

$$\frac{d^2 a_2}{dt^2} + \left( -i\delta_t - \frac{U_t}{U} \right) \frac{da_2}{dt} + U^2 a_2 = 0. \quad (4)$$

Замена зависимой переменной  $a_2 = \phi(z) u(z)$  вместе с (2) приводит уравнение (4) к следующему уравнению для новой зависимой переменной  $u(z)$ :

$$u_{zz} + \left( 2 \frac{\phi_z}{\phi} - i\delta_z^* - \frac{U_z^*}{U^*} \right) u_z + \left( \frac{\phi_{zz}}{\phi} + \left( -i\delta_z^* - \frac{U_z^*}{U^*} \right) \frac{\phi_z}{\phi} + U^{*2} \right) u = 0. \quad (5)$$

Здесь и далее строчные латинские индексы означают дифференцирование по соответствующей переменной. Данное уравнение становится одним из трёх конфлюэнтных уравнений Гойна (3), если

$$2 \frac{\phi_z}{\phi} - i\delta_z^* - \frac{U_z^*}{U^*} = \frac{\gamma + \delta z + \varepsilon z^2}{P(z)}, \quad (6)$$

$$\frac{\phi_{zz}}{\phi} + \left( -i\delta_z^* - \frac{U_z^*}{U^*} \right) \frac{\phi_z}{\phi} + U^{*2} = \frac{\alpha z - q}{P(z)}, \quad (7)$$

где  $P(z) = z^2$ ,  $z$  и  $1$ . Несмотря на то, что это недоопределённая система двух нелинейных уравнений для трёх неизвестных функций  $U^*(z)$ ,  $\delta^*(z)$  и  $\phi(z)$ , общее решение которой неизвестно, много частных решений может быть найдено, применяя некий анзац, который приходит на ум при исследовании структуры правых частей уравнений (6) и (7).

Такой подход уже был использован нами при обобщении известных моделей, разрешаемых в гипергеометрических функциях, для шести бесконечных трёхпараметрических классов [28,29], а также при обобщении моделей, разрешаемых в вырожденных гипергеометрических функциях, для трёх бесконечных трёхпараметрических классов [30]. Как было отмечено выше, нами недавно обсуждалась возможность решения двухуровневой задачи в общих и одноконфлюэнтных функциях Гойна [24,25]. Были выведены 35 5-параметрических и 15 4-параметрических класса моделей, которые допускают решения в этих функциях, примечательная особенность которых заключается в расширении

множества функций модуляции расстройки от содержащих не более двух параметров до многопараметрических. В случае постоянной расстройки внешнего поля получаются двухпиковые симметричные либо асимметричные импульсы с контролируемой шириной [25]. В общем случае переменной расстройки возможно множество моделей пересечения уровней, включающее в себя симметричные или асимметричные модели нелинейного прохождения через резонанс [32,33], модели с касаниями уровней [34–36], процессы с двумя [36] и многими (периодическими) временными точками пересечения резонанса [37–40].

В данной работе использованы методы [24–30] и получены 5 4-параметрических основных моделей, разрешимых в дважды конфлюэнтных функциях Гойна, найдены ещё 5 моделей, разрешимых в биконфлюэнтных функциях Гойна, и одна модель, разрешимая в триконфлюэнтных функциях Гойна. Эти модели обобщают все ранее известные двух и трёхпараметрические основные модели, разрешимые в конфлюэнтных гипергеометрических функциях, до уровня более общих четырехпараметрических, включающих трёхпараметрические функции модуляции расстройки. Далее применяется преобразование независимой переменной для генерирования разных семейств реальных конфигураций поля с реальной частотой Раби  $U(t)$  и расстройкой  $\delta(t)$ . Полученные модели описывают разные нелинейные по времени (параболические, кубические,  $\sinh$ ,  $\cosh$  и т.д.) процессы с прохождением и касанием уровней, а также процессы с двойным, тройным и периодическим пересечением резонанса.

## 2. Модели решений двухуровневой задачи в дважды конфлюэнтных функциях Гойна

Дважды конфлюэнтное уравнение Гойна записывается как [21–23]

$$\frac{d^2 u}{dz^2} + \left( \frac{\gamma}{z^2} + \frac{\delta}{z} + \varepsilon \right) \frac{du}{dz} + \frac{\alpha z - q}{z^2} u = 0. \quad (8)$$

Соответственно уравнения (6) и (7) можно переписать в виде

$$\frac{\gamma}{z^2} + \frac{\delta}{z} + \varepsilon = 2 \frac{\phi_z}{\phi} - i \delta_z^* - \frac{U_z^*}{U^*}, \quad (9)$$

$$\frac{\alpha z - q}{z^2} = \frac{\phi_{zz}}{\phi} + \left( -i \delta_z^* - \frac{U_z^*}{U^*} \right) \frac{\phi_z}{\phi} + U^{*2}. \quad (10)$$

Исследование структур этих уравнений предполагает поиск их частных решений в следующей форме:

$$\frac{\phi_z}{\phi} = \frac{\alpha_2}{z^2} + \frac{\alpha_1}{z} + \alpha_0 \Leftrightarrow \phi = z^{\alpha_1} e^{\alpha_0 z - \alpha_2/z}, \quad (11)$$

$$\frac{U_z^*}{U^*} = \frac{k}{z} \Leftrightarrow U^* = U_0^* z^k, \quad (12)$$

$$\delta_z^* = \frac{\delta_2}{z^2} + \frac{\delta_1}{z} + \delta_0. \quad (13)$$

Умножив уравнение (10) на  $z^4$ , получаем, что для произвольных  $\delta_{0,1,2}$  произведение  $U_0^{*2} z^{2k+4}$  должно быть полиномом по  $z$  не более четвёртой степени. Следовательно,  $k$  является целым или полуцелым числом, удовлетворяющим неравенствам  $0 \leq 2k + 4 \leq 4$ . Это приводит к пяти возможным значениям для  $k$ , а именно,  $k = -2, -3/2, -1, -1/2, 0$ , образующим соответственно пять классов двухуровневых моделей, разрешимых в дважды конфлюэнтных функциях Гойна. Функции амплитудной модуляции для этих классов даются как

$$\frac{U^*}{U_0^*} = \frac{1}{z^2}, \quad \frac{1}{z\sqrt{z}}, \quad \frac{1}{z}, \quad \frac{1}{\sqrt{z}}, \quad 1. \quad (14)$$

Согласно уравнениям (2), реальные физические конфигурации поля, для которых решение двухуровневой задачи даётся в дважды конфлюэнтных функциях Гойна, запишутся как

$$U(t) = U_0^* z^k \frac{dz}{dt}, \quad (15)$$

$$\delta_t(t) = \left( \frac{\delta_2}{z^2} + \frac{\delta_1}{z} + \delta_0 \right) \frac{dz}{dt}, \quad (16)$$

где  $k = -2, -3/2, -1, -1/2, 0$ , а параметры  $U_0^*$ ,  $\delta_{0,1,2}$  являются комплексными постоянными, взятыми таким образом, чтобы функции  $U(t)$  и  $\delta(t)$  являлись реальными для выбранного комплекснозначного преобразования  $z(t)$ . Так как эти параметры выбираются произвольным образом, полученные классы в общем случае являются четырехпараметрическими.

Решение двухуровневой задачи (1) в явном виде записывается как

$$a_2 = z^{\alpha_1} e^{\frac{\alpha_0 z - \alpha_2}{z}} H_D(\gamma, \delta, \varepsilon; \alpha, q; z), \quad (17)$$

где параметры дважды конфлюэнтной функции Гойна  $\gamma, \delta, \varepsilon, \alpha, q$  находятся по формулам

$$\gamma = 2\alpha_2 - i\delta_2, \quad \delta = 2\alpha_1 - i\delta_1 - k, \quad \varepsilon = 2\alpha_0 - i\delta_0, \quad (18)$$

$$\alpha = \alpha_1 \varepsilon - \alpha_0(k + i\delta_1) + Q'''(0) / 6, \quad (19)$$

$$q = \alpha_1(1 + k + i\delta_1 - \alpha_1) - \alpha_2 \varepsilon + i\alpha_0 \delta_2 - Q''(0) / 2, \quad (20)$$

здесь  $Q(z) = U_0^{*2} z^{2k+4}$  и

$$\alpha_0^2 - i\alpha_0 \delta_0 + Q^{(4)}(0) / 4! = 0, \quad (21)$$

$$\alpha_1 \gamma - \alpha_2(2 + k + i\delta_1) + Q'(0) = 0, \quad (22)$$

$$\alpha_2^2 - i\alpha_2 \delta_2 + Q(0) = 0. \quad (23)$$

Формально, степенные разложения дважды конфлюэнтной функции Гойна  $H_D$  могут быть сконструированы подстановкой [21–23]

$$H_D(\gamma, \delta, \varepsilon; \alpha, q; z) = e^{\nu_0 z - \nu_1/z} z^\mu \sum c_n z^n, \quad (24)$$

однако радиус сходимости этого ряда нулевой. Тем не менее, возможно асимптотическое разложение, которое может оказаться полезным как в теоретических исследованиях, так и в практических приложениях [21–23]. Например, будучи оборванным, ряд представляет конечное замкнутое точное решение в виде квазиполиномов.

Коэффициенты ряда (24) в общем случае удовлетворяют пятичленному рекуррентному соотношению. Тем не менее, соотношение может упроститься до трёхчленного, если  $\nu_1 = 0$  или  $-\gamma$  и  $\nu_0 = 0$  или  $-\varepsilon$ . В простейшем случае  $\nu_0 = \nu_1 = 0$  результат записывается как

$$R_n c_n + Q_{n-1} c_{n-1} + P_{n-2} c_{n-2} = 0, \quad (25)$$

$$R_n = \gamma(n + \mu), \quad (26)$$

$$Q_n = (n + \mu)(n + \mu + \delta - 1) - q, \quad P_n = \alpha + \varepsilon(n + \mu). \quad (27)$$

Если  $\gamma \neq 0$ , ряд обрывается слева при  $\mu = 0$ . Справа ряд обрывается для некоторого  $n = N$  ( $N = 1, 2, 3, \dots$ ), если  $\alpha + \varepsilon N = 0$  и  $c_{N+1} = 0$ . Последнее уравнение есть полиномиальное уравнение степени  $(N + 1)$  для параметра  $q$ .

Для приведения примеров конфигураций поля, генерируемых моделями (13), (14) и уравнениями (15), (16), рассмотрим замены  $z(t) = e^t$  и  $z(t) = e^{it}$ .

В случае  $z(t) = e^t$  и  $U_0^* = U_0$  получаются семейства

$$U(t) = U_0 e^{(k+1)t}, \quad \delta_t(t) = \delta_0 e^t + \delta_1 + \delta_2 e^{-t}, \quad (28)$$

для которых расстройка изменяется таким образом, что частота поля может пересечь резонанс  $\delta_t = 0$  до двух раз. В случае  $k = -1$  амплитуда поля постоянна.

Если  $\delta_2 = \delta_0$ , конфигурация поля для  $k = -1$  определяется соотношениями

$$U(t) = U_0, \quad \delta_t(t) = \delta_1 + 2\delta_0 \cosh(t). \quad (29)$$

В зависимости от параметров  $\delta_{0,1}$  возможны процессы с двукратным пересечением, касанием и отсутствием пересечения резонанса (рис.1). Касание резонанса имеет место, если  $\delta_1 = -2\delta_0$ .

В случае  $\delta_2 = -\delta_0$  конфигурация поля для  $k = -1$

$$U(t) = U_0, \quad \delta_t(t) = \delta_1 + 2\delta_0 \sinh(t), \quad (30)$$

что приводит к единичному пересечению резонанса (рис.2). Для ненулевых  $\delta_1$  пересечение асимметрично по времени, если же  $\delta_1 = 0$ , то оно симметрично и квазилинейно по времени:  $\delta_t \sim 2\delta_0 t$ , когда  $t \rightarrow 0$  (согласно терминологии [32],

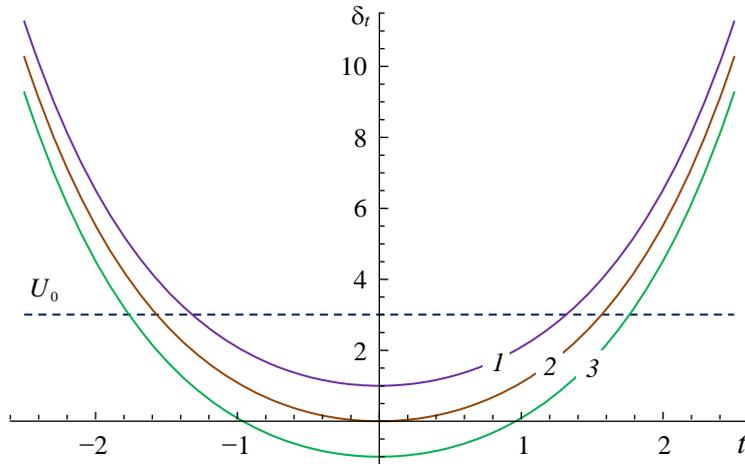


Рис.1. Дважды конфлюэнтный класс Гойна,  $k = -1$ ,  $z(t) = e^t$ ,  $U_0 = 3$ . Расстройки соответствуют  $\delta_2 = \delta_0 = 1$  и  $\delta_1 = -1; -2; -3$  (кривые 1, 2, 3, соответственно).

такое пересечение является примером суперлинейного пересечения, так как при  $t \rightarrow \infty$  расстройка расходитя быстрее линейной расстройки Ландау–Зинера).

Решение двухуровневой задачи (1) для конфигурации (28), соответствующей выбору  $\alpha_{0,1,2} = 0$  ( $\phi(z) = 1$ ), записывается как

$$a_2 = H_D(-i\delta_2, 1 - i\delta_1, -i\delta_0; 0, -U_0^2; e^t). \quad (31)$$

Второе независимое решение выводится путём использования другого выбора

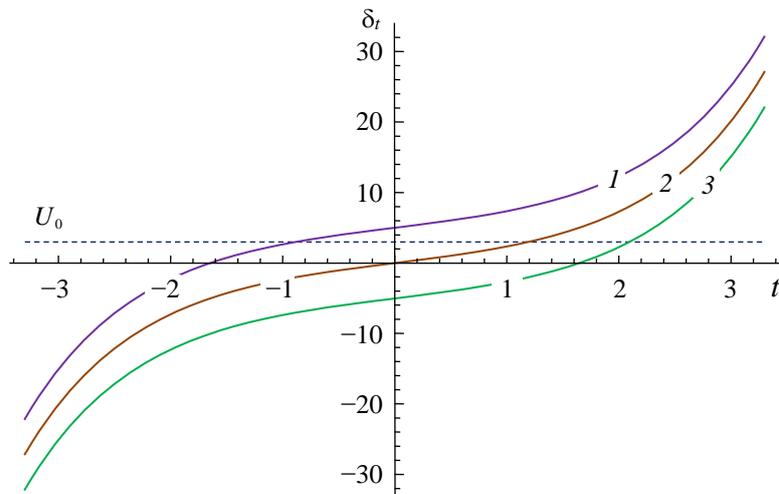


Рис.2. Дважды конфлюэнтный класс Гойна,  $k = -1$ ,  $z(t) = e^t$ ,  $U_0 = 3$ . Расстройки соответствуют  $\delta_2 = -\delta_0 = -1$  и  $\delta_1 = 5; 0; -5$  (кривые 1, 2, 3, соответственно).

тройки параметров  $\alpha_{0,1,2}$  (см. уравнения (21)–(23)).

Другая модель пересечения уровней получается заменой  $z(t) = e^{i(t-t_0)}$  ( $t_0 = \text{const}$ ). Вновь, рассматривая класс  $k = -1$  с  $U_0^* = -iU_0$ ,  $\delta_0 = \delta_2 = -i\Delta_2 / 2$  и  $\delta_1 = -i\Delta_1$ , получаем следующую конфигурацию

$$U(t) = U_0, \quad \delta_t(t) = \Delta_1 + \Delta_2 \cos(t - t_0), \quad (32)$$

которая характеризуется периодически повторяющимися процессами касания или пересечения резонанса (рис.3). В этом случае решение двухуровневой задачи, соответствующее выбору  $\alpha_{0,1,2} = 0$ , записывается в явном виде как

$$a_2 = H_D(-\Delta_2 / 2, 1 - \Delta_1, -\Delta_2 / 2; 0, U_0^2; e^{i(t-t_0)}). \quad (33)$$

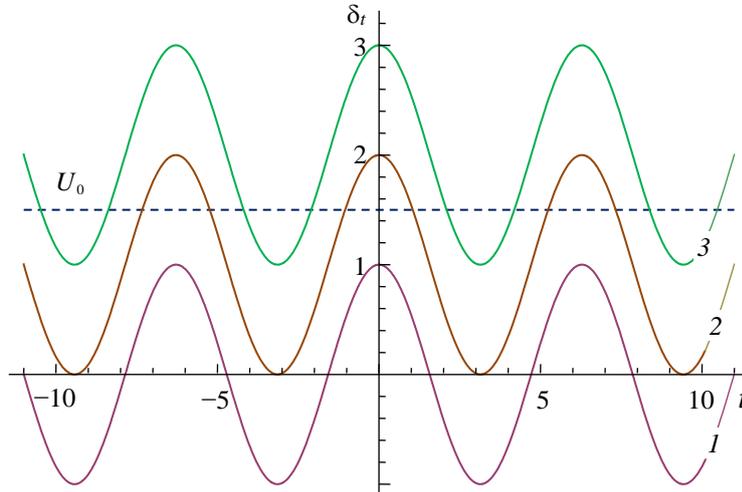


Рис.3. Дважды конфлюэнтный класс Гойна,  $k = -1$ ,  $z(t) = e^{i(t-t_0)}$ ,  $U_0 = 1.5$ . Расстройки соответствуют  $t_0 = 0$ ,  $\Delta_2 = 1$  и  $\Delta_1 = 0$ ; 1; 2 (кривые 1, 2, 3, соответственно).

### 3. Двухуровневые модели, разрешимые в биконфлюэнтных функциях Гойна

Биконфлюэнтное уравнение Гойна имеет вид

$$\frac{d^2 u}{dz^2} + \left( \frac{\gamma}{z} + \delta + \varepsilon z \right) \frac{du}{dz} + \frac{\alpha z - q}{z} u = 0. \quad (34)$$

Следовательно, уравнения (6) и (7) в данном случае переписутся как:

$$\frac{\gamma}{z} + \delta + \varepsilon z = 2 \frac{\phi_z}{\phi} - i\delta_z^* - \frac{U_z^*}{U^*}, \quad (35)$$

$$\frac{\alpha z - q}{z} = \frac{\phi_{zz}}{\phi} + \left( -i\delta_z^* - \frac{U_z^*}{U^*} \right) \frac{\phi_z}{\phi} + U^{*2}. \quad (36)$$

Ищем решения этих уравнений в виде

$$\frac{\phi_z}{\phi} = \frac{\alpha_1}{z} + \alpha_0 + \alpha_2 z \Leftrightarrow \phi = z^{\alpha_1} e^{\alpha_0 z + \frac{\alpha_2}{2} z^2}, \quad (37)$$

$$\frac{U_z^*}{U^*} = \frac{k}{z} \Leftrightarrow U^* = U_0^* z^k, \quad (38)$$

$$\delta_z^* = \frac{\delta_1}{z} + \delta_0 + \delta_2 z. \quad (39)$$

Умножая уравнение (36) на  $z^2$ , видим, что для произвольных  $\delta_{0,1,2}$  произведение  $U_0^{*2} z^{2k+2}$  является полиномом по  $z$  не более, чем четвёртой степени. Следовательно,  $k$  является целым или полуцелым и удовлетворяет неравенствам  $0 \leq 2k + 2 \leq 4$ , что приводит к пяти возможным значениям для  $k$ , а именно  $k = -1, -1/2, 0, 1/2, 1$ , которые образуют пять классов двухуровневых моделей, разрешимых в биконфлюэнтных функциях Гойна. Функции амплитудной модуляции для этих классов приведены ниже:

$$\frac{U^*}{U_0^*} = \frac{1}{z}, \quad \frac{1}{\sqrt{z}}, \quad 1, \quad \sqrt{z}, \quad z. \quad (40)$$

Таким образом, конфигурации поля, для которых решение двухуровневой задачи записывается в биконфлюэнтных функциях Гойна, даются формулами [26]

$$U(t) = U_0^* z^k \frac{dz}{dt}, \quad (41)$$

$$\delta_t(t) = \left( \frac{\delta_1}{z} + \delta_0 + \delta_2 z \right) \frac{dz}{dt}, \quad (42)$$

где  $k = -1, -1/2, 0, 1/2, 1$  и  $U_0^*$ ,  $\delta_{0,1,2}$  являются комплексными постоянными, подобранными таким образом, чтобы функции  $U(t)$  и  $\delta(t)$  являлись реальными для выбранного комплекснозначного  $z(t)$ . Так как эти параметры произвольные, полученные классы являются четырехпараметрическими.

Точное решение исходной двухуровневой задачи (1) имеет явный вид

$$a_2 = z^{\alpha_1} e^{\alpha_0 z + \frac{\alpha_2}{2} z^2} H_B(\gamma, \delta, \varepsilon; \alpha, q; z), \quad (43)$$

где параметры биконфлюэнтной функции Гойна  $\gamma$ ,  $\delta$ ,  $\varepsilon$ ,  $\alpha$ ,  $q$  даются формулами

$$\gamma = 2\alpha_1 - i\delta_1 - k, \quad \delta = 2\alpha_0 - i\delta_0, \quad \varepsilon = 2\alpha_2 - i\delta_2, \quad (44)$$

$$\alpha = \alpha_0(\alpha_0 - i\delta_0) + \alpha_1(2\alpha_2 - i\delta_2) + \alpha_2(1 - k - i\delta_1) + Q''(0) / 2, \quad (45)$$

$$q = \alpha_0(k + i\delta_1) - \alpha_1(2\alpha_0 - i\delta_0) - Q'(0), \quad (46)$$

где  $Q(z) = U_0^{*2} z^{2k+2}$  и

$$\alpha_0 \varepsilon - i\alpha_2 \delta_0 + Q'''(0) / 3! = 0, \quad (47)$$

$$\alpha_1^2 - \alpha_1(1 + k + i\delta_1) + Q(0) = 0, \quad (48)$$

$$\alpha_2^2 - i\alpha_2 \delta_2 + Q^{(4)}(0) / 4! = 0. \quad (49)$$

Точка 0 является регулярной сингулярной точкой уравнения (34), следовательно, уравнение допускает решение в виде ряда Фробениуса

$$u = z^\mu \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^n. \quad (50)$$

Подстановка уравнения (50) в уравнение (34) даёт следующее рекуррентное соотношение для коэффициентов разложения:

$$R_n c_n + Q_{n-1} c_{n-1} + P_{n-2} c_{n-2} = 0, \quad (51)$$

$$R_n = (n + \mu)(n + \mu - 1 + \gamma), \quad (52)$$

$$Q_n = \delta(n + \mu) - q, \quad P_n = \alpha + \varepsilon(n + \mu), \quad (53)$$

где  $\mu = 0$  или  $\mu = 1 - \gamma$ .

В отличие от степенного ряда для дважды конфлюэнтного уравнения Гойна, данный ряд сходится всюду на комплексной плоскости. Ряд обрывается справа для некоторого  $n = N = 1, 2, 3, \dots$ , тем самым генерируя конечное замкнутое полиномиальное решение при условии, что  $\alpha + \varepsilon(N + \mu) = 0$  и  $c_{N+1} = 0$ . Последнее уравнение является полиномиальным уравнением  $(N + 1)$  степени для  $q$ .

Классы (41) и (42) включают в себя все известные вырожденные гипергеометрические модели пересечения уровней. Например, положив  $\delta_0 = 0$  и сделав замену  $z \rightarrow \sqrt{z}$ , для классов с  $k = -1, 0, 1$  получим классы Ландау–Зинера–Майорана–Штюкельберга [9–12], Никитина [5,13] и Кротерса [14], соответственно.

Более того, полученные классы допускают другие интересные модели пересечения уровней. При выборе  $k = -1/2$  с  $U_0^* = U_0 / 2$ ,  $\delta_0 = \Delta_1 / 2$ ,  $\delta_1 = 0$  и  $\delta_2 = \Delta_2 / 2$  и заменой  $z(t) = t^2$  получается нелинейная по времени модель пересечения уровней, а именно кубическая модель пересечения уровней с постоянной амплитудой, которая допускает одно или три пересечения резонанса (рис.4):

$$U(t) = U_0, \quad \delta_t(t) = \Delta_1 t + \Delta_2 t^3. \quad (54)$$

Решение двухуровневой задачи для этой модели, соответствующее выбору

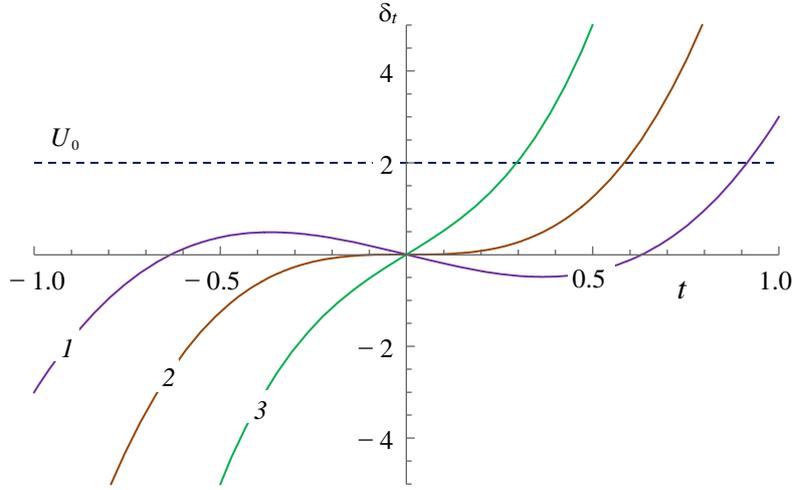


Рис.4. Биконфлюэнтный класс Гойна,  $k = -1/2$ ,  $z(t) = t^2$ ,  $U_0 = 2$ . Расстройки соответствуют  $(\Delta_1, \Delta_2) = (-2, 5)$ ;  $(0, 10)$ ;  $(5, 20)$  (кривые 1, 2, 3, соответственно).

$\alpha_{1,2,3} = 0$  (см. уравнения (47)–(49)), записывается как

$$a_2 = H_B \left( \frac{1}{2}, -\frac{i\Delta_1}{2}, -\frac{i\Delta_2}{2}; 0, -\frac{U_0^2}{4}; t^2 \right). \quad (55)$$

Другой класс  $k = +1/2$  с  $U_0^* = 3U_0/2$ ,  $\delta_0 = \delta_1 = 0$ ,  $\delta_2 = 3\Delta_2/2$  с заменой  $z(t) = t^{2/3}$  порождает модель (с постоянной амплитудой) с бесконечно быстрым прохождением резонанса (рис.5):

$$U(t) = U_0, \quad \delta_i(t) = \Delta_2 t^{1/3}. \quad (56)$$

Решением двухуровневой задачи для этой модели (тут мы полагаем  $\alpha_{1,2} = 0$ ) является

$$a_2 = e^{\delta_i t^{2/3}/2} H_B \left( -\frac{1}{2}, \delta, -\frac{3i\Delta_2}{2}; \frac{\delta^2}{4}, \frac{\delta}{4}; t^{2/3} \right), \quad (57)$$

где  $\delta = -3iU_0^2 / \Delta_2$  и принимается, что  $t > 0$ .

#### 4. Двухуровневые модели, разрешимые в триконфлюэнтных функциях Гойна

Триконфлюэнтное уравнение Гойна записывается как

$$\frac{d^2 u}{dz^2} + (\gamma + \delta z + \varepsilon z^2) \frac{du}{dz} + (\alpha z - q)u = 0. \quad (58)$$

Следовательно, уравнения (6) и (7) принимают вид

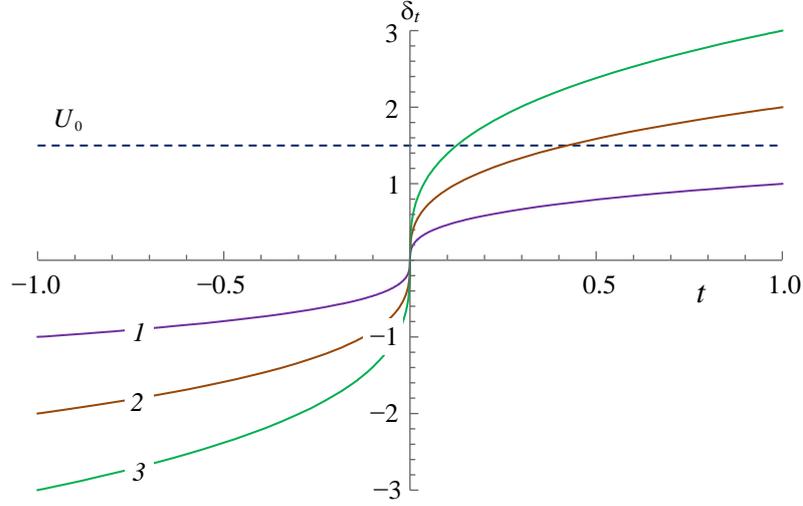


Рис.5. Биконфлюэнтный класс Гойна,  $k = +1/2$ ,  $z(t) = t^{2/3}$ ,  $U_0 = 1.5$ . Расстройки соответствуют  $\Delta_2 = 1; 2; 3$  (кривые 1, 2, 3, соответственно).

$$\gamma + \delta z + \varepsilon z^2 = 2 \frac{\phi_z}{\phi} - i \delta_z^* - \frac{U_z^*}{U^*}, \quad (59)$$

$$\alpha z - q = \frac{\phi_{zz}}{\phi} + \left( -i \delta_z^* - \frac{U_z^*}{U^*} \right) \frac{\phi_z}{\phi} + U^{*2}. \quad (60)$$

Исходя из структуры уравнения (59), ищем решения этих уравнений в виде

$$\frac{\phi_z}{\phi} = \alpha_0 + \alpha_1 z + \alpha_2 z^2, \quad \delta_z^* = \delta_0 + \delta_1 z + \delta_2 z^2, \quad \frac{U_z^*}{U^*} = k_0 + k_1 z + k_2 z^2. \quad (61)$$

Второе уравнение сразу же определяет единственно возможные значения параметров  $k_{1,2,3} = 0$ , следовательно,  $U^* = U_0^* = \text{const}$ , что определяет четырёхпараметрический класс с конфигурацией поля

$$U(t) = U_0^* \frac{dz}{dt}, \quad \delta_i(t) = (\delta_0 + \delta_1 z + \delta_2 z^2) \frac{dz}{dt}. \quad (62)$$

Решение исходной двухуровневой задачи для этого класса записывается как

$$a_2 = e^{\alpha_0 z + \frac{\alpha_1}{2} z^2 + \frac{\alpha_2}{3} z^3} H_T(\gamma, \delta, \varepsilon; \alpha, q; z), \quad (63)$$

где вовлечённые параметры задаются выражениями

$$\alpha_{1,2,3} = \{0, 0, 0\}, \quad \{\gamma, \delta, \varepsilon, \alpha, q\} = \{-i\delta_0, -i\delta_1, -i\delta_2, 0, -U_0^{*2}\} \quad (64)$$

или

$$\alpha_{1,2,3} = \{i\delta_0, i\delta_1, i\delta_2\}, \quad \{\gamma, \delta, \varepsilon, \alpha, q\} = \{i\delta_0, i\delta_1, i\delta_2, 2i\delta_2, -U_0^{*2} - i\delta_1\}. \quad (65)$$

Триконфлюэнтное уравнение Гойна (58) имеет только одну сингулярную точку. Эта – иррегулярная сингулярная точка ранга 3, находящаяся в точке  $z = \infty$ . Так как начало координат является обычной точкой, уравнение допускает решение в виде степенного ряда

$$u = z^\mu \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^n, \quad (66)$$

который сходится всюду на комплексной плоскости. Однако, на этот раз рекуррентное соотношение для коэффициентов разложения является четырёхчленным

$$S_n c_n + R_{n-1} c_{n-1} + Q_{n-2} c_{n-2} + P_{n-3} c_{n-3} = 0, \quad (67)$$

где

$$S_n = (n + \mu)(n + \mu - 1), \quad R_n = \gamma(n + \mu), \quad (68)$$

$$Q_n = \delta(n + \mu) - q, \quad P_n = \alpha + \varepsilon(n + \mu). \quad (69)$$

Для того, чтобы с уверенностью иметь разложение, из двух характеристических экспонент  $\mu = 0, 1$ , берётся большая,  $\mu = 1$  (другой выбор ведёт к логарифмическому решению). Ряд обрывается справа для некоторого  $n = N = 1, 2, 3, \dots$ , если  $\alpha + \varepsilon(N + \mu) = 0$  и параметры уравнения удовлетворяют условиям  $c_{N+1} = c_{N+2} = 0$ .

Стоит сделать замечание относительно четырёхчленного рекуррентного соотношения (67). Сравнение с вырожденными гипергеометрическими классами показывает, что конфигурация поля (62) обеспечивает расширение класса только в случае  $\delta_2 \neq 0$ , что автоматически подразумевает выполнение условия  $\varepsilon \neq 0$  (так как  $\varepsilon = \pm i\delta_2$ , см. уравнения (64) и (65)). Однако, в случае ненулевого  $\varepsilon$  смещением начала координат  $z \rightarrow z - z_0$  всегда можно добиться  $\gamma = 0$ . Так как в этом случае  $R_n = 0$  исчезает для всех  $n$ , рекуррентное соотношение (67) всегда может быть сведено к трёхчленному, хотя и с непоследовательными членами.

Применив замену  $z = \Delta(t - t_1)$  и выбрав  $U_0^* = U_0 / \Delta$ ,  $\delta_0 = 0$ ,  $\delta_1 = (t_1 - t_2) / \Delta$ ,  $\delta_2 = 1 / \Delta^2$ , получим конфигурацию поля с постоянной амплитудой и параболической расстройкой (рис.6):

$$U(t) = U_0, \quad \delta_t(t) = \Delta(t - t_1)(t - t_2). \quad (72)$$

При этом могут получиться модели без пересечений (если  $t_{1,2}$  имеют ненулевые мнимые части), либо модель с двойным пересечением резонанса (если  $t_{1,2}$  – ненулевые вещественные величины), либо модель с касанием резонанса (если  $t_1 = t_2 = 0$ ).

Решение двухуровневой задачи для данной модели при выборе  $\alpha_{1,2,3} = 0$  имеет вид

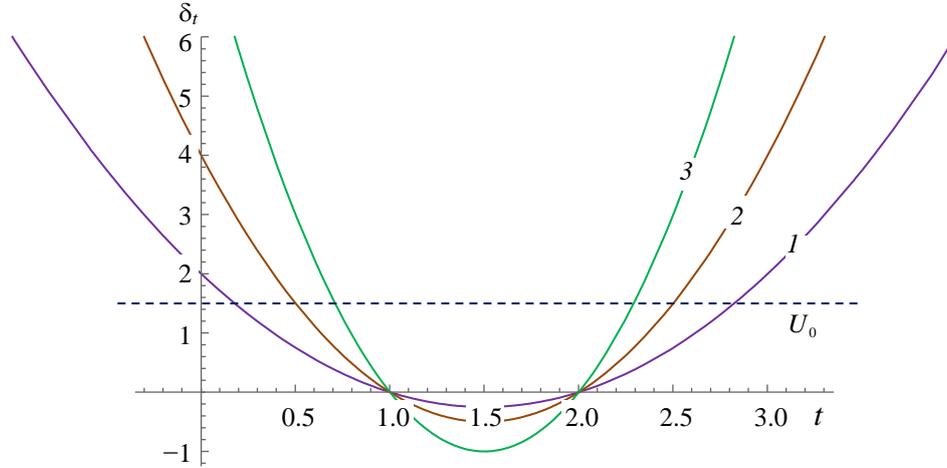


Рис.6. Триконфлюэнтный класс Гойна,  $z = \Delta(t - t_1)$ ,  $U_0 = 1.5$ . Расстройки соответствуют  $t_1 = 1$ ,  $t_2 = 2$  и  $\Delta = 1$ ; 2; 4 (кривые 1, 2, 3, соответственно).

$$a_2 = H_T \left( 0, -\frac{i(t_1 - t_2)}{\Delta}, -\frac{i}{\Delta^2}; 0, -\frac{U_0^2}{\Delta^2}; \Delta(t - t_1) \right). \quad (73)$$

Второе независимое решение даётся уравнением (63) для второго набора параметров уравнения (65).

### 5. Другие классы, разрешимые в функциях Гойна

Вышеуказанные классы не исчерпывают все возможности и не покрывают всё множество конфигураций поля, для которых решения двухуровневой задачи даются в функциях Гойна. Некоторые другие классы могут быть получены при рассмотрении уравнений, которым удовлетворяют производные от функций Гойна. Такое расширение возможно по той причине, что эти функции не принадлежат к классу функций Гойна, а удовлетворяют более сложным уравнениям, которые в общем имеют дополнительно ещё одну регулярную сингулярную точку [41–44].

В качестве примера рассмотрим триконфлюэнтное уравнение Гойна (58). Нетрудно проверить, что первая производная от его решения, взятая с весовым коэффициентом  $v(z) = e^{\gamma z} u_z$ , удовлетворяет уравнению

$$v_{zz} + \left( -\gamma + \delta z + \varepsilon z^2 - \frac{1}{z - z_0} \right) v_z + \frac{\Pi(z)}{z - z_0} v = 0, \quad (74)$$

где  $z_0 = q/\alpha$  и  $\Pi(z)$  – кубический полином:

$$\Pi(z) = -\gamma \varepsilon z^3 + (\alpha + \varepsilon - \gamma \delta + z_0 \gamma \varepsilon) z^2 + z_0 (\gamma \delta - 2\alpha - 2\varepsilon) z + z_0 (q - \delta). \quad (75)$$

Для ненулевого  $\alpha$  это уравнение имеет дополнительную регулярную сингулярность, расположенную в точке  $z = z_0$ . Если  $q = 0$  (заметим, что выполнения этого условия для ненулевого  $\alpha$  всегда можно добиться смещением начала координат) и, дополнительно,  $\alpha + \varepsilon = \gamma\delta$ , уравнение упрощается к виду

$$v_{zz} + \left( -\gamma + \delta z + \varepsilon z^2 - \frac{1}{z} \right) v_z - \gamma \varepsilon z^2 v = 0. \quad (76)$$

Сравнивая это уравнение с уравнением (4), переписанным для переменной  $z$ ,

$$\frac{d^2 a_2^*}{dz^2} + \left( -i\delta_z^* - \frac{U_z^*}{U^*} \right) \frac{da_2^*}{dz} + U^{*2} a_2^* = 0, \quad (77)$$

можно увидеть, что  $a_2^*(z) = v(z)$ , если

$$\delta_z^* = \delta_0 + \delta_1 z + \delta_2 z^2, \quad U^* = U_0^* z, \quad (78)$$

$$\gamma = i\delta_0, \quad \delta = -i\delta_1, \quad \varepsilon = -i\delta_2, \quad U_0^{*2} = -\gamma\varepsilon. \quad (79)$$

Тогда, согласно свойству (2), для класса моделей, заданных как (сравните с уравнением (62))

$$U(t) = U_0^* z \frac{dz}{dt}, \quad \delta_t(t) = (\delta_0 + \delta_1 z + \delta_2 z^2) \frac{dz}{dt} \quad (80)$$

с произвольной комплекснозначной функцией  $z(t)$ , решение двухуровневой задачи (1) запишется через производную от конфлюэнтной функции Гойна в виде (вспомним, что  $q = 0$  и  $\alpha + \varepsilon = \gamma\delta$ )

$$a_2 = e^{i\delta_0 z} \frac{d}{dz} H_T(i\delta_0, -i\delta_1, -i\delta_2; i\delta_2 + \delta_0\delta_1; 0; z). \quad (81)$$

Однако, не все параметры здесь являются независимыми. Последнее уравнение (79) вводит ограничение на параметр  $U_0^{*2} = -\delta_0\delta_2$ . Следовательно, класс (80) является трёхпараметрическим.

Используя производные от биконфлюэнтной и дважды конфлюэнтной функций Гойна, легко могут быть выведены сходные классы. Например, функция  $v = z^\sigma u_z$ , где  $u(z)$  является решением биконфлюэнтного уравнения Гойна (34), удовлетворяет уравнению

$$v_{zz} + \left( \frac{\gamma + 1 - 2\sigma}{z} + \delta + \varepsilon z - \frac{1}{z - z_0} \right) v_z + \frac{(\alpha + \varepsilon - \varepsilon\sigma)(z - z_0)^2}{z^2} v = 0, \quad (82)$$

где  $z_0 = q/\alpha$ ,  $\sigma = \gamma + \delta z_0 + \varepsilon z_0^2$  и  $(\alpha + \varepsilon)z_0 = (\delta + 2\varepsilon z_0)\sigma$ . Сравнение этого уравнения с уравнением (77) сразу же определяет класс

$$U(t) = U_0^* \frac{z - z_0}{z} \frac{dz}{dt}, \quad \delta_t(t) = \left( \frac{\delta_1}{z} + \delta_0 + \delta_2 z \right) \frac{dz}{dt}, \quad (83)$$

для которого решение двухуровневой задачи можно написать в виде

$$a_2 = z^\sigma \frac{d}{dz} H_B(-i\delta_1 + 2\sigma, -i\delta_0, -i\delta_2; \alpha; \alpha z_0; z), \quad (84)$$

где

$$\sigma = i(\delta_1 + \delta_0 z_0 + \delta_2 z_0^2), \quad \alpha = i\delta_2(1 - 2\sigma) - i\delta_0\sigma / z_0, \quad U_0^{*2} = \alpha + \varepsilon - \varepsilon\sigma. \quad (85)$$

В этом случае  $\delta_{0,1,2}$  и  $z_0$  являются произвольными вещественными параметрами. Следовательно, полученный класс является четырехпараметрическим.

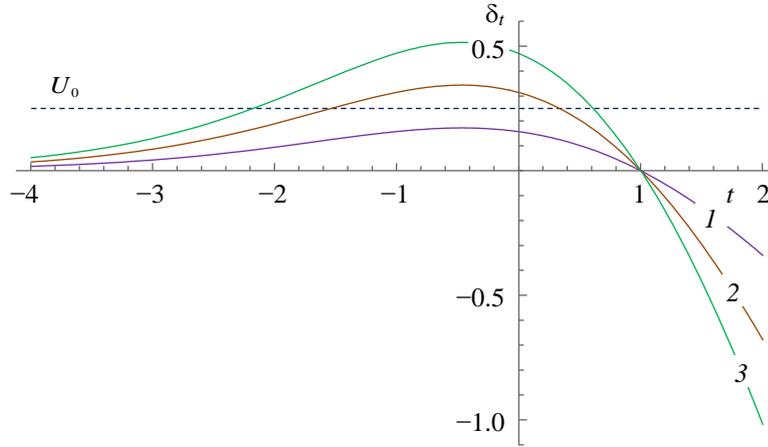


Рис.7. Биконфлюэнтный класс Гойна (83). Семейство с постоянной амплитудой и  $z_0 = -1$ :  $z = W(e^t)$ ,  $\delta_1 = 0$ ,  $\delta_2 = -\delta_0$ . Расстройки соответствуют  $\delta_0 = 1; 2; 3$  (кривые 1, 2, 3, соответственно).

Семейство с постоянной амплитудой конфигураций поля получается заменой

$$z(t) = -z_0 W(-e^{-t/z_0} / z_0), \quad (86)$$

где  $W$  – функция Ламберта [45]. Соответствующее семейство с модулируемыми расстройками показано на рис.7.

Таким же образом функция  $v = e^{-\sigma/z} u_z$  с решением дважды конфлюэнтного уравнения Гойна (8)  $u(z)$  и с выбором  $\alpha = -\varepsilon$  и  $q = \delta/2$  удовлетворяет уравнению

$$v_{zz} + \left( \frac{\gamma - 2\sigma}{z^2} + \frac{\delta + 2}{z} + \varepsilon - \frac{1}{z - z_0} \right) v_z - \frac{\varepsilon\sigma(z - z_0)^2}{z^4} v = 0, \quad (87)$$

где  $z_0 = q/\alpha$  и  $\sigma = \gamma - \delta^2/(4\varepsilon)$ . Сравнение этого уравнения с уравнением (77) даёт трёхпараметрический класс

$$U(t) = U_0^* \frac{z - z_0}{z^2} \frac{dz}{dt}, \quad \delta_r(t) = \left( \frac{\delta_2}{z^2} + \frac{\delta_1}{z} + \delta_0 \right) \frac{dz}{dt}, \quad (88)$$

здесь  $U_0^{*2} = -\varepsilon\sigma$ , для которого решение двухуровневой задачи напишется как

$$a_2 = e^{-\sigma/z} \frac{d}{dz} H_D(-i\delta_2 + 2\sigma, -i\delta_1, -i\delta_0; i\delta_0; -i\delta_1/2; z). \quad (89)$$

Именно из-за ограничения  $U_0^{*2} = -\varepsilon\sigma$  полученный класс является трёхпараметрическим. Семейство с постоянной амплитудой получается заменой (сравнить с уравнением (86))

$$z(t) = -\frac{z_0}{W(-z_0 e^{-t})} \quad (90)$$

с  $z_0 = -\delta_1 / (2\delta_0)$ . Однопараметрическое семейство конфигураций полей с постоянной амплитудой, характеризующихся асимметрически модулируемыми расстройками, показано на рис.8. Конечно же, и другие семейства, описывающие импульсы, например, с постоянной расстройкой, могут быть построены надлежащим выбором преобразования  $z(t)$  и вовлечённых параметров.

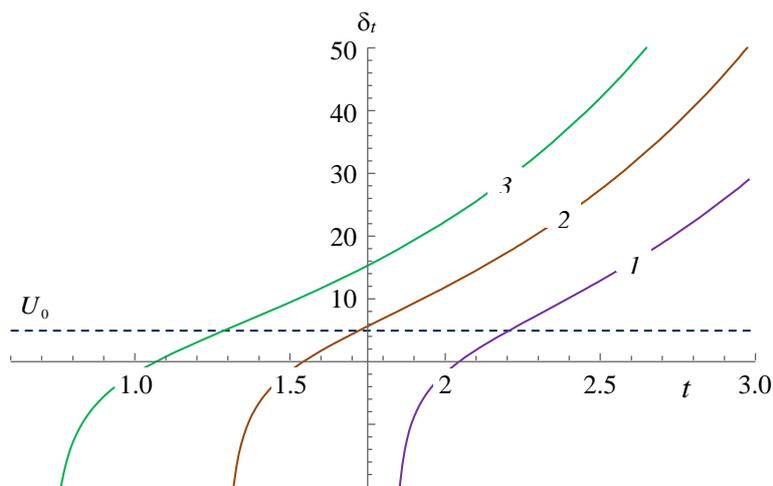


Рис.8. Дважды конфлюэнтный класс Гойна (88). Семейство с постоянной амплитудой  $z(t) = -z_0 / W(-z_0 e^{-t})$ ,  $z_0 = -\delta_1 / (2\delta_0)$ ,  $\delta_1 = -2 \times (25 - \delta_0^2)^{1/2}$ ,  $\delta_2 = -\delta_0$ . Расстройки соответствуют  $\delta_0 = 2; 3; 4$  (кривые 1, 2, 3, соответственно).

## 6. Обсуждение

Таким образом, представлены пять классов моделей квантовой временной двухуровневой задачи, разрешимых в дважды конфлюэнтных функциях Гойна, пять других классов, разрешимых в биконфлюэнтных функциях Гойна, и класс, разрешимый в триконфлюэнтных функциях Гойна. Все полученные классы являются четырехпараметрическими. В случае конфигурации поля с постоянной амплитудой модели описывают разные нелинейные (параболиче-

ские, кубические,  $\sinh$ ,  $\cosh$ , и т.д.) процессы с касанием или прохождением уровней, двойными или тройными пересечениями уровней. Модели, описывающие процессы с периодически повторяющимися касаниями или пересечениями резонанса, также возможны.

Нами показано, что множество других классов может быть получено при использовании уравнений, которым удовлетворяют производные функций Гойна. Для каждого из трёх конфлюэнтных уравнений Гойна нами представлено по одному примеру такого класса. Стоит отметить, что для гипергеометрических уравнений такие классы невозможны, так как производные гипергеометрических функций также являются гипергеометрическими функциями, в то время, как производные функций Гойна в общем случае не принадлежат к классу Гойна, а удовлетворяют более сложным уравнениям, содержащим ещё одну регулярную сингулярную точку [41–44].

Использованные функции Гойна являются решениями соответствующих конфлюэнтных модификаций общего уравнения Гойна, полученных слиянием его некоторых сингулярных точек. Для некоторых значений вовлечённых параметров каждое из этих трёх уравнений напрямую или путём замены зависимой или независимой переменной сводится к вырожденному гипергеометрическому уравнению. При этом вышеуказанные классы воспроизводят все три известных трёхпараметрических класса, решения которых даются в вырожденных гипергеометрических функциях [30].

Например, дважды конфлюэнтное уравнение Гойна напрямую сводится к вырожденному гипергеометрическому уравнению, если  $\gamma = q = 0$ . В этом случае система (18)–(23) становится переопределённой, и легко можно проверить, что решение существует только для классов  $k = -1, -1/2, 0$ . Таким же образом биконфлюэнтное уравнение Гойна прямо сводится к вырожденному гипергеометрическому, если  $\varepsilon = \alpha = 0$ . В этом случае система (44)–(49) также становится переопределённой, и легко можно проверить, что решение существует только для классов с  $k = -1, -1/2, 0$ . В обоих случаях  $\alpha_2 = \delta_2 = 0$ , что указывает на точное воспроизведение 3 трёхпараметрических вырожденных гипергеометрических классов [30].

Однако, триконфлюэнтное уравнение Гойна напрямую не сводится к конфлюэнтному гипергеометрическому уравнению. Если  $\varepsilon = 0$ , дополнительно необходимы замены как независимой, так и зависимой переменных, в то время как, если  $\varepsilon \neq 0$  и  $\gamma = \delta = 0$ , кубическая замена независимой переменной  $z$  на  $-\varepsilon(z - z_0)^3 / 3$  окажется достаточной. При этом можно убедиться, что триконфлюэнтный класс (62) во всех этих случаях воспроизводит вырожденный гипергеометрический класс (например, очевидно, что случай  $\gamma = \varepsilon = \alpha = 0$  является моделью Ландау-Зинера). Другой пример воспроизведения вырожденных гипергеометрических классов был приведен выше для биконфлюэнтного уравнения Гойна в случае замены  $z$  на  $\sqrt{z}$ . Этот случай представляет интерес, так

как воспроизведение получается для классов с  $k = -1, 0, 1$ . Следовательно, в дополнение к классам  $k = -1, -1/2, 0$  биконфлюэнтный класс  $k = +1$  также содержит в себе вырожденный гипергеометрический подкласс. В завершение можно убедиться, что это имеет место и для всех других классов. Тогда можно заключить, что все приведённые дважды, би- и триконфлюэнтные классы двух-уровневых моделей, каждый по-своему, являются различными обобщениями преобразов семейств вырожденных гипергеометрических моделей.

В заключение, коротко обсудим решения конфлюэнтных уравнений Гойна. Они являются нетривиальными функциями, теория которых до сих пор нуждается в развитии. Выше приведены общие решения конфлюэнтных уравнений Гойна в виде степенных рядов, однако в практических приложениях, особенно, когда рассматриваются нелинейные обобщения [46], может возникнуть потребность в более совершенных методиках. В подобных случаях можно попробовать разложения в иных, не просто степенных, функциях, например, в привычных специальных функциях, таких как вырожденные функции Куммера и Трикоми [21–23, 47–50], функции Бесселя [50–51], гипергеометрические функции Гаусса [21–23, 51], волновые функции Кулона [52–54], неполные гамма- и бета-функции [41, 55] и т.д. Возможны также разложения в высших трансцендентных функциях [56], например, в функциях Гурса и обобщенных гипергеометрических функциях Аппеля [57, 58]. В некоторых специальных случаях эти разложения могут обеспечить точные замкнутые решения.

Работа выполнена в рамках армяно-французской Международной ассоциированной лаборатории (CNRS-France и SCS-Armenia) IRMAS, при финансовой поддержке 7-й Рамочной программы ЕС (грант №. 295025-IPERA). Исследования были поддержаны ГКН МОН РА (грант № 13RB-052).

#### ЛИТЕРАТУРА

1. **L. Allen, J.H. Eberly.** Optical Resonance and Two-Level Atoms. New-York, Wiley, 1975.
2. **B.W. Shore.** Manipulating Quantum Structures Using Laser Pulses. New York, Cambridge University Press, 2011.
3. **B.W. Shore.** The Theory of Coherent Atomic Excitation. New York, Wiley, 1990.
4. **M.S. Child.** Molecular Collision Theory. London, Academic Press, 1974.
5. **E.E. Nikitin, S.Ya. Umanski.** Theory of Slow Atomic Collisions. Berlin, Springer-Verlag, 1984.
6. **H. Nakamura.** Nonadiabatic Transition: Concepts, Basic Theories and Applications. Singapore, World Scientific, 2012.
7. **I.I. Rabi.** Phys. Rev, **51**, 652 (1937).
8. **N. Rosen, C. Zener.** Phys. Rev, **40**, 502 (1932).
9. **L.D. Landau.** Phys. Z. Sowjetunion, **2**, 46 (1932).
10. **C. Zener.** Proc. R. Soc. London, Ser. A, **137**, 696 (1932).
11. **E. Majorana.** Nuovo Cimento, **9**, 43 (1932).

12. **E.C.G. Stückelberg.** *Helv. Phys. Acta*, **5**, 369 (1932).
13. **E.E. Nikitin.** *Opt. Spectrosc*, **6**, 431 (1962).
14. **D.S.F. Crothers, J.G. Hughes.** *J. Phys. B*, **10**, L557 (1977).
15. **Ю.Н. Демков, М. Кунике.** *Вестник Ленинград. госунивер. физ.-хим.*, **16**, 39 (1969).
16. **A. Bambini, P.R. Berman.** *Phys. Rev. A*, **23**, 2496 (1981).
17. **F.T. Hioe, C.E. Carroll.** *J. Opt. Soc. Am. B*, **3**, 497 (1985).
18. **K.-A. Suominen.** *Opt. Commun.*, **93**, 126 (1992).
19. **D. DeVault.** *Quantum Mechanical Tunnelling in Biological Systems.* Cambridge, Cambridge University Press, 1984.
20. **C. Zhu, Y. Teranishi, H. Nakamura.** *Adv. Chem. Phys.*, **117**, 127 (2001).
21. **A. Ronveaux.** *Heun's Differential Equations.* London, Oxford University Press, 1995.
22. **S.Yu. Slavyanov, W. Lay.** *Special Functions.* Oxford, Oxford University Press, 2000.
23. **F.W.J. Olver, D.W. Lozier, R.F. Boisvert, C.W. Clark (eds.).** *NIST Handbook of Mathematical Functions.* New York, Cambridge University Press, 2010.
24. **A.M. Ishkhanyan, T.A. Shahverdyan, T.A. Ishkhanyan.** *Eur. Phys. J. D*, **68**, (2014).
25. **A.M. Ishkhanyan, A.E. Grigoryan.** *J. Phys. A*, **47**, 465205 (2014).
26. **A.M. Ishkhanyan, K.-A. Suominen.** *J. Phys. A*, **34**, 6301 (2001).
27. **А.М. Исаакян.** *Известия НАН Армении, Физика*, **31**(4), 10 (1996).
28. **A.M. Ishkhanyan.** *J. Phys. A*, **33**, 5539 (2000).
29. **A.M. Ishkhanyan.** *Opt. Commun.*, **176**, 155 (2000).
30. **A.M. Ishkhanyan.** *J. Phys. A*, **30**, 1203 (1997).
31. **K. Heun.** *Math. Ann.*, **33**, 161 (1889).
32. **N.V. Vitanov, K.-A. Suominen.** *Phys. Rev. A*, **59**, 4580 (1999).
33. **D.A. Garanin, R. Schilling.** *Phys. Rev. B*, **66**, 174438 (2002).
34. **J. Lehto, K.-A. Suominen.** *Phys. Rev. A*, **86**, 033415 (2012).
35. **J. Lehto.** *Phys. Rev. A*, **88**, 043404 (2013).
36. **T.A. Shahverdyan, D.S. Mogilevtsev, A.M. Ishkhanyan, V.M. Red'kov.** *Nonlinear phenomena in complex systems*, **16**, 86 (2013).
37. **B.M. Garraway, S. Stenholm.** *Phys. Rev. A*, **45**, 364 (1992).
38. **Y. Kayanuma.** *Phys. Rev. B*, **47**, 9940 (1993).
39. **S.N. Shevchenko, S. Ashhab, F. Nori.** *Physics Reports*, **492**, 1 (2010).
40. **E.A. Ivanchenko.** *Physica B*, **358**, 308 (2005); **E.A. Ivanchenko, A.P. Tolstoluzhsky.** *Low Temp. Phys.*, **32**, 77 (2006).
41. **A. Ishkhanyan, K.-A. Suominen.** *J. Phys. A*, **36**, L81 (2003); **A.M. Ishkhanyan, K.-A. Suominen.** *J. Phys. A*, **34**, L591 (2001).
42. **P.P. Fiziev.** *J. Phys. A*, **43**, 035203 (2010).
43. **A.Ya. Kazakov, S.Yu. Slavyanov.** *Theor. Math. Phys.*, **155**, 722 (2008).
44. **S.Y. Slavyanov.** *Constr. Approx.*, **39**, 75 (2014).
45. **J.H. Lambert.** *Acta Helvetica* **3**, 128 (1758); **L. Euler.** *Acta Acad. Scient. Petropol.*, **2**, 29 (1783).
46. **A. Ishkhanyan, B. Joulakian, K.-A. Suominen.** *J. Phys. B*, **42**, 221002 (2009); **A.M. Ishkhanyan.** *Phys. Rev. A*, **81**, 055601 (2010); **A.M. Ishkhanyan.** *Eur. Phys. Lett.*, **90**, 30007 (2010).
47. **Th. Kurth, D. Schmidt.** *SIAM J. Math. Anal.*, **17**, 1086 (1986).
48. **T.A. Ishkhanyan, A.M. Ishkhanyan.** *AIP Advances*, **4**, 087132 (2014).

49. **B.D.B. Figueiredo.** *J. Math. Phys.*, **48**, 013503 (2007).
50. **L.J. El-Jaick, B.D.B. Figueiredo.** *J. Math. Phys.*, **49**, 083508 (2008).
51. **B.D.B. Figueiredo.** *J. Math. Phys.*, **46**, 113503 (2005).
52. **E.W. Leaver.** *J. Math. Phys.*, **27**, 1238 (1986).
53. **S. Mano, H. Suzuki, E. Takasugi.** *Prog. Theor. Phys.*, **95**, 1079 (1996).
54. **L.J. El-Jaick, B.D.B. Figueiredo.** *J. Phys. A*, **46**, 085203 (2013).
55. **A. Ishkhanyan.** *J. Phys. A*, **38**, L491 (2005).
56. **A. Erdélyi, W. Magnus, F. Oberhettinger, F. Tricomi.** *Higher Transcendental Functions.* New-York, McGraw-Hill, 1953.
57. **V.A. Shahnazaryan, T.A. Ishkhanyan, T.A. Shahverdyan, A.M. Ishkhanyan.** *Armenian Journal of Physics*, **5**, 146 (2012).
58. **C. Leroy, A.M. Ishkhanyan.** *Integral Transforms and Special Functions*, **26**, 451 (2015).

ANALYTIC SOLUTIONS OF THE QUANTUM TWO-STATE PROBLEM  
IN TERMS OF THE DOUBLE, BI- AND TRICONFLUENT HEUN FUNCTIONS

T.A. SHAHVERDYAN, T.A. ISHKHANYAN, A.E. GRIGORYAN, A.M. ISHKHANYAN

We derive five classes of quantum time-dependent two-state models solvable in terms of the doubleconfluent Heun functions, five other classes solvable in terms of the biconfluent Heun functions, and a class solvable in terms of the triconfluent Heun functions. These classes generalize all the known families of two- or three-parametric models solvable in terms of the confluent hypergeometric functions to more general four-parametric classes involving three-parametric detuning modulation functions. The particular models derived describe different non-linear (parabolic, cubic, sinh, cosh, etc.) level-sweeping or level-glancing processes, double- or triple-level-crossing processes, as well as periodically repeated resonance-glancing or resonance-crossing processes. Finally, we show that more classes can be derived using the equations obeyed by certain functions involving the derivatives of the confluent Heun functions. We present an example of such a class for each of the three discussed confluent Heun equations.

УДК 535.14

## **ДИНАМИКА КВАНТОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В ПРЕДСТАВЛЕНИИ МАГНУСА**

Г.А. АБОВЯН

Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак, Армения  
Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

e-mail: gor.abovyan@ysu.am

(Поступила в редакцию 27 апреля 2015 г.)

Рассмотрена динамика двухуровневой квантовой системы в электромагнитном поле возмущения в представлении Магнуса на сфере Блоха. Такой подход приводит к общим выражениям для вероятностей квантовых переходов вне рамок резонансного приближения. Получены приложения для случаев взаимодействия атома с монохроматическим полем возмущения, а также с гауссовыми импульсами.

### **1. Введение**

Двухуровневая квантовая система, взаимодействующая с импульсами электромагнитного поля, является одной из простейших моделей во многих областях физики и квантовой химии. Квантовые информационные технологии с кубитами на основе ионов в ловушке, атомов в резонаторе, квантовых ям и сверхпроводящих систем обычно реализуются на основе двухуровневых систем под действием оптических или микроволновых импульсов. Однако, до настоящего времени не найдено общее аналитическое решение динамики этой системы, в частности, при вычислении вероятностей квантовых переходов между состояниями кубита без различных приближений. Известным из них является резонансное приближение (приближение вращающейся волны), в котором пренебрегаются эффекты осциллирующих членов [1–3]. В последнее время рассматриваются режимы сильной связи двухуровневой квантовой системы с полем излучения, в которых эффекты вне резонансного приближения становятся важными [4,5]. Исследования эффектов вне рамок приближения вращающейся волны приведены в ряде работ [6–12]. Резонансное взаимодействие атома с бихроматическим полем рассмотрено в работах [13–19] и в случае амплитудной модуляции в работе [20]. Резонансные эффекты взаимодействия атома с лазерным полем в полном объеме исследованы в нелинейной оптике [21,22] и в атомной оптике [23]. В дополнение к многочисленным работам в этой области в настоящей работе для исследования двухуровневой системы в поле импульсов приводится подход, который позволяет сделать обобщение вне рамок резонанс-

ного приближения. Хорошо известно, что исследование возмущенной двухуровневой системы упрощается при использовании переменных Блоха для вектора состояния [24,25]. В предложенном здесь подходе используется матрица временной эволюции квантовой системы в формулировке Магнуса [26], которая записывается в переменных Блоха. В рамках такого подхода удастся получить общие аналитические выражения для вероятностей переходов между состояниями атома вне резонансного приближения.

## 2. Матрица эволюции в представлении Магнуса

Мы рассмотрим стандартную модель двухуровневого атома, взаимодействующего с полем возмущения. Гамильтониан системы записывается в следующем виде:

$$\hat{H}(t) = \frac{\varepsilon_0}{2} \hat{\sigma}_z + Vg(t) \hat{\sigma}_x, \quad (1)$$

где  $\varepsilon_0$  – частота атомного перехода,  $V$  описывает связь двухуровневого атома с полем, а  $\hat{\sigma}_x$  и  $\hat{\sigma}_z$  являются матрицами Паули. В этом случае состояние системы определяется как

$$|\Psi(t)\rangle = C_1(t)|1\rangle + C_2(t)|2\rangle, \quad (2)$$

где амплитуды  $C_1(t)$  и  $C_2(t)$  удовлетворяют следующим уравнениям:

$$i\dot{C}_1(t) = \frac{\varepsilon_0}{2} C_1(t) + Vg(t) C_2(t), \quad (3)$$

$$i\dot{C}_2(t) = -\frac{\varepsilon_0}{2} C_2(t) + Vg(t) C_1(t).$$

Вводя обозначения

$$C_1(t) = \tilde{C}_1(t) e^{-i\varepsilon_0 t/2}, \quad (4)$$

$$C_2(t) = \tilde{C}_2(t) e^{i\varepsilon_0 t/2},$$

можно записать эти уравнения в матричном виде

$$\begin{pmatrix} \tilde{C}_1(t+dt) \\ \tilde{C}_2(t+dt) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -iVg(t)e^{i\varepsilon_0 t} dt \\ -iVg(t)e^{-i\varepsilon_0 t} dt & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{C}_1(t) \\ \tilde{C}_2(t) \end{pmatrix}, \quad (5)$$

и далее представить временную эволюцию системы с помощью оператора эволюции в переменных Блоха

$$\begin{pmatrix} \tilde{C}_1(t+dt) \\ \tilde{C}_2(t+dt) \end{pmatrix} = \hat{U}(t, t+dt) \begin{pmatrix} \tilde{C}_1(t) \\ \tilde{C}_2(t) \end{pmatrix}. \quad (6)$$

Здесь оператор эволюции записывается как оператор вращения на сфере Блоха

$$\hat{U}(t, t+dt) = \hat{I} - i \frac{d\theta(t)}{2} (\mathbf{n}\hat{\sigma}), \quad (7)$$

а уравнения (6) в новых обозначениях записываются в виде

$$\begin{pmatrix} \tilde{C}_1(t+dt) \\ \tilde{C}_2(t+dt) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - in_z \frac{d\theta}{2} & (-in_x - n_y) \frac{d\theta}{2} \\ (-in_x + n_y) \frac{d\theta}{2} & 1 + in_z \frac{d\theta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{C}_1(t) \\ \tilde{C}_2(t) \end{pmatrix}, \quad (8)$$

где  $d\theta = 2Vg(t)dt$  и компоненты вектора  $n_x$ ,  $n_y$  и  $n_z$  равны:

$$n_x = \cos(\varepsilon_0 t), \quad n_y = -\sin(\varepsilon_0 t), \quad n_z = 0. \quad (9)$$

Таким образом, состояние системы можно представить как

$$|\Psi(t+dt)\rangle = \hat{U}(t, t+dt)|\Psi(t)\rangle, \quad (10)$$

и следуя стандартному подходу теории возмущений, временная эволюция квантового состояния по формуле разложения Дайсона представится как

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t, 0)|\Psi(0)\rangle = T \exp\left(-\frac{i}{2} \int_0^t (\mathbf{n}\hat{\sigma}) d\theta\right) |\Psi(0)\rangle, \quad (11)$$

где  $T$  показывает хронологическое упорядочение операторов. В настоящей работе используется другое, альтернативное разложение оператора эволюции в форме Магнуса, в котором отсутствует операция хронологического упорядочения

$$\hat{U}(t, 0) = \exp\left(\sum_{k=1}^{\infty} \hat{\Omega}_k(t)\right). \quad (12)$$

Здесь первые три члена разложения Магнуса имеют вид

$$\begin{aligned} \hat{\Omega}_1(t) &= -iV \int_0^t \hat{h}(t_1) dt_1, \\ \hat{\Omega}_2(t) &= -\frac{V^2}{2} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 [\hat{h}(t_1), \hat{h}(t_2)], \\ \hat{\Omega}_3(t) &= \frac{iV^3}{6} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_0^{t_2} dt_3 \left( [\hat{h}(t_1), [\hat{h}(t_2), \hat{h}(t_3)]] + [\hat{h}(t_3), [\hat{h}(t_2), \hat{h}(t_1)]] \right), \end{aligned} \quad (13)$$

и для случая гамильтониана (1) выражаются через матрицы Паули следующим образом:

$$\hat{h}(t) = g(t) [\cos(\varepsilon_0 t) \hat{\sigma}_x - \sin(\varepsilon_0 t) \hat{\sigma}_y]. \quad (14)$$

Вычисления приводят к выражениям

$$\begin{aligned}\hat{\Omega}_1(t) &= -iV(F_c(t)\hat{\sigma}_x - F_s(t)\hat{\sigma}_y), \\ \hat{\Omega}_2(t) &= iV^2\left(F_c(t)F_s(t) - 2\int_0^t F_c(t')dF_s(t')\right)\hat{\sigma}_z\end{aligned}\quad (15)$$

где

$$\begin{aligned}F_c(t) &= \int_0^t g(t')\cos(\varepsilon_0 t')dt', \\ F_s(t) &= \int_0^t g(t')\sin(\varepsilon_0 t')dt'.\end{aligned}\quad (16)$$

Легко заметить, что каждый член разложения Магнуса выражается через матрицы Паули. В рамках такого подхода оператор эволюции представляется в простой форме для всех членов разложения Магнуса (12)

$$\hat{U}(t,0) = \exp(i\mathbf{A}(t)\boldsymbol{\sigma}) = \mathbf{I}\cos(A(t)) + i(\boldsymbol{\rho}\hat{\boldsymbol{\sigma}})\sin(A(t)),\quad (17)$$

в которой  $A(t) = |\mathbf{A}(t)|$  и

$$\boldsymbol{\rho} = \mathbf{A}(t) / A(t).\quad (18)$$

В матричной форме для оператора эволюции получаем

$$\hat{U}(0,t) = \begin{pmatrix} \cos(A(t)) + i\rho_z \sin(A(t)) & (i\rho_x + \rho_y)\sin(A(t)) \\ (i\rho_x - \rho_y)\sin(A(t)) & \cos(A(t)) - i\rho_z \sin(A(t)) \end{pmatrix}.\quad (19)$$

Это приводит к следующим выражениям для амплитуд вектора состояния:

$$\begin{aligned}C_1(t) &= e^{-\frac{i\varepsilon_0 t}{2}} [\cos(A(t)) + i\rho_z \sin(A(t))]C_1(0) \\ &+ e^{-\frac{i\varepsilon_0 t}{2}} (i\rho_x + \rho_y)\sin(A(t))C_2(0), \\ C_2(t) &= e^{\frac{i\varepsilon_0 t}{2}} (i\rho_x - \rho_y)\sin(A(t))C_1(0) \\ &- e^{\frac{i\varepsilon_0 t}{2}} [\cos(A(t)) - i\rho_z \sin(A(t))]C_2(0).\end{aligned}\quad (20)$$

Таким образом, проблема сводится к вычислению функции  $A(t)$  в каждом порядке разложения Магнуса. Вычисления разложения вплоть до второго порядка приводят к следующим формулам:

$$\begin{aligned}A_x(t) &= -VF_c(t), \\ A_y(t) &= -VF_s(t), \\ A_z(t) &= -V^2\left(F_c(t)F_s(t) - 2\int_0^t F_c(t')dF_s(t')\right).\end{aligned}\quad (21)$$

### 3. Вероятности переходов и осцилляции Раби

Рассмотрим вероятность возбуждения двухуровневого атома, если при включении взаимодействия система находится в основном состоянии  $C_2(0) = 0$ . Из системы уравнений (20) получаем

$$P_2(t) = |C_2(t)|^2 = (1 - \rho_z^2) \sin^2(A(t)). \quad (22)$$

Если начальное состояние является суперпозиционным состоянием  $C_1(0) \neq 0$  и  $C_2(0) \neq 0$ , для вероятности возбуждения получаем

$$P_2(t) = |C_2(t)|^2 = [\rho_y \sin(A(t))C_1(0) + \cos(A(t))C_2(0)]^2 + [\rho_x C_1(0) + \rho_z C_2(0)]^2 \sin^2(A(t)). \quad (23)$$

Эти результаты имеют общий характер и описывают вероятности перехода системы из начального состояния при произвольном взаимодействии с внешним полем.

Рассмотрим важный случай взаимодействия системы с внешним полем в форме импульса  $g(t) = f(t) \sin(\omega t)$  с амплитудой  $f(t)$  и несущей частотой  $\omega$ . При наличии резонанса  $\omega = \varepsilon_0$  выражения (21) существенно упрощаются. Легко показать, что в этом случае  $A_x(t) = 0$ ,  $A_y(t) = \frac{1}{2} \int_0^t f(t') dt'$  и  $A_z(t) = 0$ . Таким образом, корреляторы операторов в выражениях (13) равны нулю и только низшие члены первого порядка разложения Магнуса отличны от нуля. Величина  $\rho_z = 0$ , поэтому для вероятности (22) получаем хорошо известный результат

$$P_2(t) = |C_2(t)|^2 = \sin^2 \left( \frac{1}{2} \int_0^t f(t') dt' \right). \quad (24)$$

Что касается вероятности (24), то в резонансном приближении она приобретает следующий вид

$$P_2(t) = \left\{ \sin \left( \frac{1}{2} \int_0^t f(t') dt' \right) C_1(0) + \cos \left( \frac{1}{2} \int_0^t f(t') dt' \right) C_2(0) \right\}^2. \quad (25)$$

Формулы (23) и (24) удобны также для вычислений вне рамок резонансного приближения. В частности, на их основе можно сформулировать итерационную процедуру для вычисления поправок к резонансному приближению по малому параметру – отношению матричного элемента перехода между состояниями атома к частоте поля возмущения. Ниже приведены результаты для двух случаев взаимодействия двухуровневого атома с монохроматическим полем и с гауссовыми импульсами.

Вначале рассмотрим случай нерезонансного взаимодействия атома с монохроматическим полем  $g(t) = \sin(\omega t)$  с частотой  $\omega$ , отличной от частоты

атомного перехода  $\varepsilon_0$ . Вероятность перехода  $P_2(t)$  для атома в основном состоянии вычисляется по формуле (22) с величинами  $A(t)$  (21) во втором порядке разложения Магнуса. Зависимость вероятности перехода от времени в безразмерных единицах представлена на рис.1 для двух значений частоты. Легко заметить, что вероятность нахождения системы в возбужденном состоянии при взаимодействии с полем с частотой  $\omega = 1.2\varepsilon_0$  достигает значения 0.5, в несколько раз превышающего максимум населенности этого состояния при взаимодействии с полем с частотой  $\omega = 1.5\varepsilon_0$ .

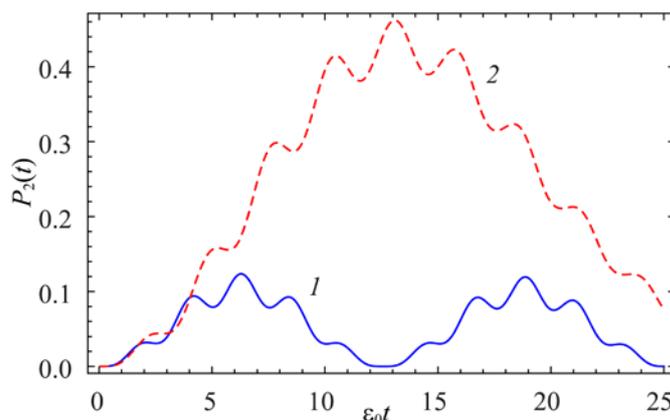


Рис.1. Зависимость вероятности  $P_2(t)$  нахождения атома в состоянии  $|2\rangle$  от времени при взаимодействии с внешним монохроматическим полем: кривая 1 –  $V = 0.375$ ,  $\omega = 1.5$  в единицах  $\varepsilon_0$ , кривая 2 –  $V = 0.375$ ,  $\omega = 1.2$ .

Рассмотрим теперь случай нерезонансного взаимодействия атома с импульсом, огибающая амплитуды которого является функцией Гаусса

$$g(t) = \exp\left(-\frac{(t-t_0)^2}{T^2}\right) \sin(\omega t). \quad (26)$$

Вычисления аналогичны предыдущему случаю с формулами (20)–(23). Результаты вычислений приведены на рис.2. Сравняется воздействие гауссовых импульсов с частотами  $\omega = 1.2\varepsilon_0$  и  $\omega = 1.5\varepsilon_0$ , но с одинаковыми амплитудами, и импульса с частотой  $\omega = 1.2\varepsilon_0$ , но с большой амплитудой  $V = 0.5$ .

Зависимость вероятности  $P_2(t)$  нахождения атома в состоянии  $|2\rangle$  от времени, приведенная на рис.2, для трех различных режимов иллюстрирует вполне предсказуемый результат. Гауссовый импульс с близкой к резонансу частотой, взаимодействуя с кубитом, приводит к инверсии населенности. А более высокая амплитуда импульса улучшает этот результат.

Автор выражает благодарность Г.Ю. Крючкяну за обсуждения. Работа выполнена в рамках проекта ГКН МОН РА (No.13-1C031).

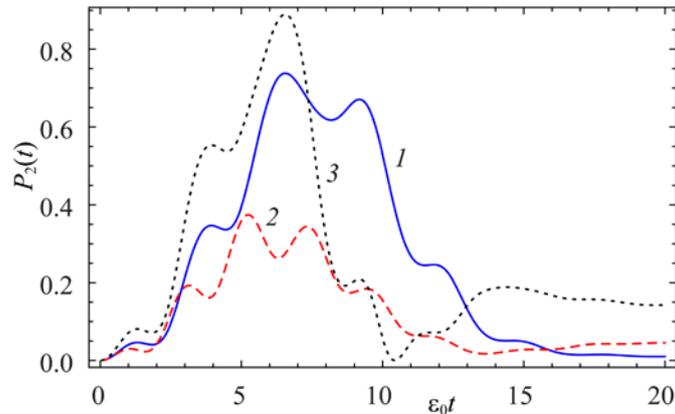


Рис.2. Зависимость вероятности  $P_2(t)$  нахождения атома в состоянии  $|2\rangle$  от времени при взаимодействии с внешним гауссовым импульсом с шириной  $T = 8$  и центром  $t_0 = 4$  в единицах  $1/\varepsilon_0$ : кривая 1 –  $V = 0.375$ ,  $\omega = 1.2$  в единицах  $\varepsilon_0$ , кривая 2 –  $V = 0.375$ ,  $\omega = 1.5$ , кривая 3 –  $V = 0.5$ ,  $\omega = 1.2$ .

#### ЛИТЕРАТУРА

1. **L. Allen, J.H. Eberly.** Optical Resonance and Two Level Atoms. New York, Dover, 1975.
2. **B.W. Shore.** The Theory of Coherent Atomic Excitation. New York, Wiley, 1990.
3. **P. Meystre, M. Sargent.** Elements of Quantum Optics. Berlin, Springer, Verlag, 2007.
4. **J. Bourassa, J.M. Gambetta, A.A. Abdumalikov Jr., O. Astafiev, Y. Nakamura, A. Blais.** Phys. Rev. A, **80**, 032109 (2009).
5. **T. Niemczyk, F. Deppe, H. Huebl, E. Menzel, F. Hocke, M.J. Schwarz, J.J. Garcia-Ripoll, D. Zueco, T. Hummer, E. Solano, A. Marx, R. Gross.** Nature Phys., **6**, 772 (2010).
6. **M.S. Shahriar, P. Pradhan, J. Morzinski.** Phys. Rev. A, **69**, 032308 (2004).
7. **E.K. Irish, J. Gea-Banacloche, I. Martin, K.C. Schwab.** Phys. Rev. B, **72**, 195410 (2005).
8. **S. Ashhab, F. Nori.** Phys. Rev. A, **81**, 042311 (2010).
9. **J. Hausinger, M. Grifoni.** Phys. Rev. A, **82**, 062320 (2010).
10. **J. Hausinger, M. Grifoni.** Phys. Rev. A, **83**, 030301 (2011).
11. **F. Beaudoin, J.M. Gambetta, A. Blais.** Phys. Rev. A, **84**, 043832 (2011).
12. **M. Bina, G. Romero, J. Casanova, J.J. Garcia-Ripoll, A. Lulli, E. Solano.** Eur. Phys. J. Special Topics, **203**, 207 (2012).
13. **G.Yu. Kryuchkov.** Opt. Commun., **54**, 19 (1985).
14. **H. Freedhoff, Z. Chen.** Phys. Rev. A, **41**, 6013 (1990); **46**, 7328 (1992).
15. **Г.Ю. Крючкян.** ЖЭТФ, **109**, 116 (1996).
16. **G.Yu. Kryuchkyan, M. Jakob, A.S. Sargsian.** Phys. Rev. A, **57**, 2091 (1998).
17. **M. Jakob, G.Yu. Kryuchkyan.** Phys. Rev. A, **58**, 767 (1998).
18. **M. Jakob, G.Yu. Kryuchkyan.** Phys. Rev. A, **57**, 1355 (1998).
19. **M. Jakob, G.Yu. Kryuchkyan.** Phys. Rev. A, **61**, 053823 (2000).
20. **G.A. Abovyan, G.Yu. Kryuchkyan.** Phys. Rev. A, **88**, 033811 (2013).

21. **R. Boyd.** Nonlinear Optics. Academic Press, 2008.
22. **Y.-R. Shen.** The Principles of Nonlinear Optics. Wiley-Interscience, 2002.
23. **G.A. Abovyan, G.P. Djotyan, G.Yu. Kryuchkyan.** Phys. Rev. A, **85**, 013846 (2012).
24. **T.J. Green, J. Sastrawan, H. Uys, M.J. Biercuk.** New J. Phys., **15**, 095004 (2013).
25. **G. Benenti, S. Siccardi, G. Strini, G. Benenti, S. Siccardi, G. Strini.** Phys. Rev. A, **88**, 033814 (2013).
26. **S. Blanes, F. Casas, J.A. Oteo, J. Ros.** The Magnus Expansion and Some of Its Applications. Berlin, Springer Verlag, 2008.

ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ԱՆՑՈՒՄՆԵՐԻ ԴԻՆԱՄԻԿԱՆ ՄԱԳՆՈՒՄԻ ՊԱՏԿԵՐԱՑՄԱՍԲ  
Գ.Ա. ԱԲՈՎՅԱՆ

Աշխատանքում քննարկված է էլեկտրամագնիսական դաշտում երկմակարդականի քվանտային համակարգի դինամիկան Բլոխի սֆերայի վրա Մագնուսի ներկայացմամբ: Այս մոտեցումը հնարավորություն է տալիս ստանալ ընդհանուր բանաձևեր քվանտային անցումների համար ռեզոնանսային մոտավորությունից դուրս: Ներկայացված են արդյունքներ քյուբիթի ինչպես մոնիթորմատիկ դաշտի, այնպես էլ Գաուսյան իմպուլսի հետ փոխազդեցության համար:

THE DYNAMICS OF QUANTUM TRANSITIONS  
IN MAGNUS REPRESENTATION

G.A. ABOVYAN

The dynamics of a two-level quantum system in the electromagnetic excitation field is investigated in Magnus representation on Bloch sphere. This approach leads to general expressions for probability of quantum transitions beyond the resonance approximation. Applications of the results for interaction of the qubit with a monochromatic field as well as with a Gaussian pulse are presented.

УДК 530.145

## ВОЗБУЖДЕНИЕ РИДБЕРГОВСКИХ СОСТОЯНИЙ АТОМОВ АДИАБАТИЧЕСКИМ ПЕРЕНОСОМ НАСЕЛЕННОСТЕЙ

Э.А. ГАЗАЗЯН\*, Г.Г. ГРИГОРЯН, В.О. ЧАЛТЫКЯН

Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак, Армения

\*e-mail: emilgazazyan@gmail.com

(Поступила в редакцию 19 февраля 2015 г.)

Рассмотрено адиабатическое взаимодействие пятиуровневой системы лестничного типа с четырьмя лазерными импульсами при условии равенства нулю всех трёх двухфотонных резонансов. Получены аналитические выражения для квазиэнергий рассматриваемой системы и условие адиабатичности взаимодействия. Проанализирован процесс эффективного адиабатического возбуждения системы, который может быть успешно применён для получения ридберговских атомов.

### 1. Введение

Ридберговские атомы привлекают в последние годы большое внимание исследователей в области квантовой и нелинейной оптики из-за характерного для них сильного взаимодействия [1]. При возбуждении атомов из основного состояния в ридберговское происходит явление, получившее название «дипольной блокады» [2–6]. Формируемый в объёме такой блокады «суператом» рассматривается как перспективный объект для реализации многих схем квантовой информатики [7–9]. В связи с этим актуальной становится задача эффективного возбуждения атомов в ридберговские состояния.

Одним из эффективных методов возбуждения атомных состояний является метод адиабатического переноса населённости, получивший в литературе название STIRAP (Stimulated Raman Adiabatic Passage) [10–13]. Перенос населённости в трёхуровневых системах осуществляется с помощью так называемой контринтуитивной последовательности лазерных импульсов, при которой первый импульс (стоксовый импульс) включается между незаселёнными уровнями, вызывая их штарковское смещение, а второй импульс (импульс накачки) включается на основном переходе с некоторой задержкой относительно первого.

Обобщение метода STIRAP на многоуровневые системы, теоретические и экспериментальные исследования особенностей этого метода, его преимуществ перед другими методами переноса населённости и многочисленные применения достаточно детально исследованы [14–17]. Однако во всех этих рабо-

тах за основу берётся адиабатическое состояние, соответствующее нулевому собственному состоянию гамильтониана взаимодействия.

В настоящей работе мы сосредоточимся на адиабатических состояниях, соответствующих отличным от нуля собственным значениям, и рассмотрим пятиуровневую систему лестничного типа, взаимодействующую с четырьмя адиабатическими лазерными импульсами (см. рис.1). Импульсы могут иметь различные длительности и различные последовательности включения и выключения. При этом длительности импульсов предполагаются намного короче всех времён релаксаций в системе. Основным ограничением на схему взаимодействия является требование равенства нулю всех двухфотонных отстроек от резонансов при отличных от нуля однофотонных отстройках. Равенство нулю двух из трёх двухфотонных отстроек приводит, как известно [10], к существованию нулевого собственного значения гамильтониана взаимодействия. Мы покажем, что при условии равенства нулю всех трёх двухфотонных отстроек от резонанса собственные состояния могут быть определены аналитически, и с помощью этих состояний возможно осуществить эффективный перенос атомных населённостей с меньшими потерями, чем в традиционной цепочке STIRAP-STIRAP [11,18].

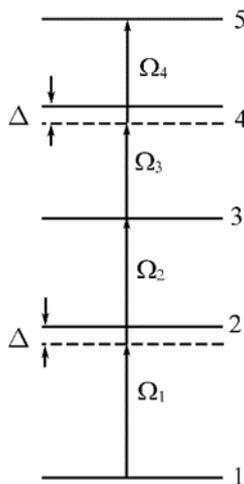


Рис.1. Схема уровней атома и соответствующие частоты Раби.

## 2. Формализм

Рассмотрим атомную систему из пяти уровней, приведённую на рис.1. Гамильтониан взаимодействия в резонансном приближении имеет следующий вид:

$$H = \sum_i \sigma_{i,i} \delta_{i-1} - \left( \sum_i \sigma_{i,i+1} \Omega_i + \text{h.c.} \right). \quad (1)$$

Здесь  $\sigma_{ij} = |i\rangle\langle j|$  – проекционные матрицы ( $|i\rangle$  – собственные состояния гамильтониана свободного атома),  $\Omega_i$  – частоты Раби на переходах  $i \rightarrow i+1$ ,  $\delta_{i-1}$  – многофотонные отстройки от резонанса,  $\delta_0 = 0$ . Частоты Раби предполагаются реальными и положительными, а их фазы, которые могут меняться при распространении в среде, включены в однофотонные отстройки от резонанса  $\Delta_i$ , определяемые следующим образом:

$$\begin{aligned}\Delta_i &= \omega_{i+1,i} - \omega_i + \dot{\phi}_i, \text{ если } \omega_{i+1,i} > 0, \\ \Delta_i &= \omega_{i,i+1} - \omega_i + \dot{\phi}_i, \text{ если } \omega_{i+1,i} < 0.\end{aligned}\quad (2)$$

Многофотонные отстройки от резонанса выражаются через однофотонные отстройки:

$$\delta_1 = \Delta_1, \quad \delta_2 = \Delta_1 + \Delta_2, \quad \delta_3 = \Delta_3 + \delta_2, \quad \delta_4 = \Delta_4 + \delta_3. \quad (3)$$

Условие равенства нулю всех трёх двухфотонных резонансов в системе означает, что

$$\delta_2 = 0, \quad \delta_3 - \delta_1 = 0, \quad \delta_4 - \delta_2 = 0. \quad (4)$$

Для рассматриваемой системы лестничного типа из этого следует, что

$$\Delta_1 = \Delta_3 = \Delta, \quad \Delta_2 = \Delta_4 = -\Delta. \quad (5)$$

Уравнение для собственных значений гамильтониана взаимодействия, то есть уравнение  $\det(H - \lambda I) = 0$ , при вышеприведённых условиях на отстройки от резонанса имеет следующий вид:

$$\lambda^2(\lambda - \Delta) \left[ \lambda(\lambda - \Delta) + \Omega_s^2 \right] + V^4 \lambda = 0. \quad (6)$$

Здесь введены обозначения

$$\begin{aligned}\Omega_s^2 &= \Omega_1^2 + \Omega_2^2 + \Omega_3^2 + \Omega_4^2, \\ V^4 &= \Omega_2^2 \Omega_4^2 + \Omega_1^2 \Omega_3^2 + \Omega_1^2 \Omega_4^2.\end{aligned}$$

Уравнение (6) может быть переписано в виде

$$\lambda \left[ x^2 - \Omega_s^2 x + V^4 \right] = 0, \quad (7)$$

где через  $x$  обозначена величина  $x = \lambda(\lambda - \Delta)$ . Решение уравнения (7) не представляет сложности, и для собственных значений гамильтониана взаимодействия получаем следующие выражения:

$$\begin{aligned}\lambda_0 &= 0, \\ \lambda_{3,1} &= \frac{1}{2} \left( \Delta \pm \left( \Delta^2 + 4x_1 \right)^{\frac{1}{2}} \right), \\ \lambda_{2,4} &= \frac{1}{2} \left( \Delta \pm \left( \Delta^2 + 4x_2 \right)^{\frac{1}{2}} \right).\end{aligned}\quad (8)$$

Здесь  $x_{2,1} = \frac{1}{2} \left[ \Omega_1^2 \pm (\Omega_s^4 - 4V^4)^{1/2} \right]$ . Отметим, что условие  $\Omega_s^4 \geq 4V^4$  всегда выполняется, и все полученные собственные значения действительны, как и следовало ожидать.

Условие адиабатичности взаимодействия на отдельном атоме, т. е.  $|\lambda_i - \lambda_j|T \gg 1$  для всех  $i \neq j$ , где  $T$  – время взаимодействия, приводит к следующим ограничениям на параметры импульсов:

$$\begin{aligned} \frac{(x_2 - x_1)T}{(\Delta^2 + 4x_2)^{\frac{1}{2}}} &\gg 1, \\ (\Delta^2 + 4x_1)^{\frac{1}{2}} T &\gg 1, \\ \frac{x_{1,2}T}{(\Delta^2 + 4x_2)^{\frac{1}{2}}} &\gg 1. \end{aligned} \quad (9)$$

Отметим, что последнее условие может выполняться только при  $V^4 \neq 0$ , что в свою очередь означает, что область перекрытия импульсов должна быть отлична от нуля.

Для упрощения расчётов рассмотрим частный случай, когда импульсы на переходах  $1 \rightarrow 2$  и  $4 \rightarrow 5$  имеют одинаковую временную огибающую, но могут отличаться по частоте, т.е. ограничимся случаем  $\Omega_1 = \Omega_4$ . При таком условии собственные значения гамильтониана (1) приобретают существенно более простой вид:

$$\begin{aligned} \lambda_0 = 0, \quad \lambda_{1,3} &= \frac{1}{2} \left( \Delta \mp \sqrt{\Delta^2 + 4\Omega_1^2} \right), \\ \lambda_{2,4} &= \frac{1}{2} \left( \Delta \mp \sqrt{\Delta^2 + 4(\Omega_1^2 + \Omega_2^2 + \Omega_3^2)} \right). \end{aligned} \quad (10)$$

Отметим, что при выключении полей  $\lambda_{1,2} \rightarrow 0$  и  $\lambda_{3,4} \rightarrow \Delta$ . Особенностью этих решений является то, что  $\lambda_{1,3}$  зависит теперь только от частоты Раби  $\Omega_1$  и совпадает с адиабатическими энергиями двухуровневой системы в поле импульса  $\Omega_1$ .

Чтобы вычислить собственные векторы, соответствующие этим собственным значениям, введём следующие обозначения:

$$\begin{aligned} \Omega^2 &= \Omega_1^2 + \Omega_2^2, \\ \tan \theta &= \frac{\Omega_2}{\Omega_3}, \quad \tan \Phi_1 = -\frac{\lambda_1}{\Omega_1}, \\ \tan \Phi_2 &= -\frac{\lambda_2}{\Omega_1}, \quad \tan \Phi = -\frac{\Omega}{\Omega_1} \cos \Phi_2. \end{aligned} \quad (11)$$

Тогда собственный вектор, соответствующий собственному значению  $\lambda_1$ , будет иметь вид

$$|\lambda_1\rangle = |\psi_1\rangle \cos \theta - |\psi_2\rangle \sin \theta. \quad (12)$$

Здесь  $|\psi_1\rangle$  и  $|\psi_2\rangle$  являются суперпозиционными состояниями двухуровневых систем соответственно  $1 \rightarrow 2$  и  $5 \rightarrow 4$ :

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= \cos \phi_1 |1\rangle - \sin \phi_1 |2\rangle, \\ |\psi_2\rangle &= \cos \phi_1 |5\rangle - \sin \phi_1 |4\rangle. \end{aligned} \quad (13)$$

Как видим, собственное состояние, соответствующее  $\lambda_1$ , не содержит атомного состояния  $|3\rangle$  и формально совпадает с «темным» состоянием в трёхуровневой  $\Lambda$ -системе [10] ( $|d\rangle = \cos \theta |1\rangle - \sin \theta |3\rangle$ ) при замене в последней нижних уровней  $|1\rangle$  и  $|3\rangle$  на суперпозиционные состояния  $|\psi_1\rangle$  и  $|\psi_2\rangle$ .

Аналогичным образом, собственное состояние, соответствующее собственному значению  $\lambda_2$ , имеет вид

$$|\lambda_2\rangle = |\psi'_1\rangle \cos \Phi \cos \theta - \sin \Phi |3\rangle + |\psi'_2\rangle \cos \Phi \sin \theta, \quad (14)$$

где  $|\psi'_1\rangle = \cos \Phi_2 |1\rangle - \sin \Phi_2 |2\rangle$  и  $|\psi'_2\rangle = \cos \Phi_2 |5\rangle - \sin \Phi_2 |4\rangle$ .

Как и в предыдущем случае, собственное состояние  $|\lambda_2\rangle$  совпадает со «светлым» состоянием в трёхуровневой  $\Lambda$ -системе [19] при замене нижних уровней в последней на суперпозиционные состояния  $|\psi'_1\rangle$  и  $|\psi'_2\rangle$ .

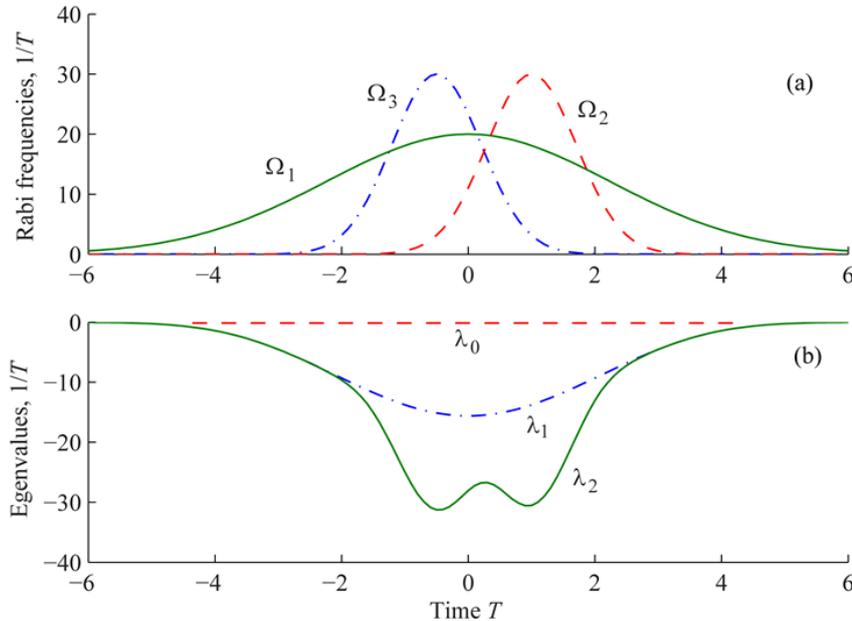


Рис.2. Зависимости от времени (а) частот Раби и (б) квазиэнергий при  $\Delta = 1/T$ . Форма импульсов выбрана гауссовской.

Зависимости собственных значений  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$  от времени приведены на рис.2. Как видно из рисунка, условие адиабатичности взаимодействия для выбранных параметров в области перекрытия импульсов хорошо выполняется.

### 3. Перенос населённостей

Как было показано в предыдущем разделе, при определённых условиях на отстройке и огибающие импульсов пятиуровневая система имитирует трёхуровневую  $\Lambda$ -систему, в которой перенос населённостей детально исследован. Таким образом, мы можем использовать состояние  $|\lambda_1\rangle$ , имитирующее «тёмное» состояние для переноса населённостей с нижнего уровня  $|1\rangle$  на верхний уровень  $|5\rangle$  процессом, подобным обычному STIRAP. На рис.3 приведена динамика населённостей атомных уровней и продемонстрирован полный перенос населённостей на верхний уровень. В отличие от обычной  $\Lambda$ -системы в процессе взаимодействия промежуточные уровни  $|2\rangle$  и  $|4\rangle$  частично заселяются, обращаясь в нуль в конце взаимодействия. Однако эти населённости могут быть уменьшены выбором большой однофотонной отстройки. В тоже время населённость промежуточного уровня  $|3\rangle$  остаётся равной нулю в течении всего процесса взаимодействия. Подчеркнём, что условие большой однофотонной отстройки не является критичным для переноса населённостей.

Для сравнения рассмотрим также известную в литературе цепочку STIRAP-STIRAP, осуществляющую перенос населённостей через состояние, соответствующее собственному значению  $\lambda = 0$ . Это собственное состояние не

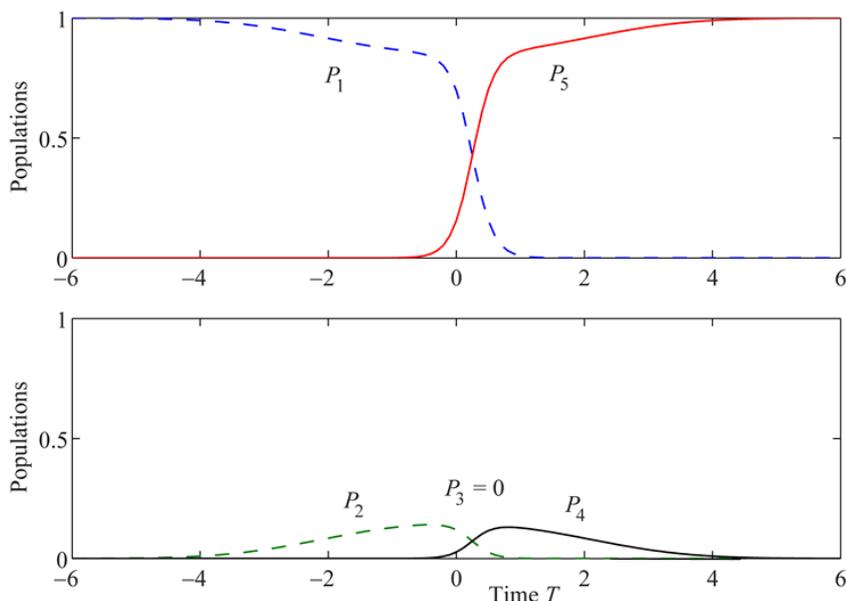


Рис.3. Динамика населённостей атомных уровней  $P_i$  в состоянии  $|\lambda_1\rangle$  при последовательности импульсов, приведённой на рис.2.

содержит промежуточных уровней  $|2\rangle$  и  $|4\rangle$ , но зато содержит уровень  $|3\rangle$  [20]:

$$|\lambda_0\rangle = \cos\theta_1\cos\theta_2|1\rangle - \sin\theta_1\cos\theta_2|3\rangle + \sin\theta_1\sin\theta_2|5\rangle. \quad (15)$$

Углы  $\theta_1$  и  $\theta_2$  определяются следующим образом:  $\tan\theta_1 = \Omega_2 / \Omega_1$  и  $\tan\theta_2 = \Omega_3 / \Omega_4$ .

Таким образом, при контринтуитивных последовательностях импульсов  $\Omega_1, \Omega_2$  и  $\Omega_3, \Omega_4$  углы  $\theta_1$  и  $\theta_2$  изменяются от 0 до  $\pi/2$ , и атом переходит с уровня  $|1\rangle$  на уровень  $|5\rangle$ . Однако населённость промежуточного уровня  $|3\rangle$  достигает значения 0.25 при любых значениях отстроек.

Состояние  $|\lambda_2\rangle$ , как отмечалось выше, является аналогом «светлого» состояния в  $\Lambda$ -системе, через которое можно осуществлять перенос населённостей методом b-STIRAP [18,19]. Следовательно, это состояние можно также использовать для переноса населённостей с нижнего уровня на верхний, используя процесс, аналогичный b-STIRAP. Перенос населённостей для этого случая приведен на рис.4. Контринтуитивная последовательность импульсов  $\Omega_2$  и  $\Omega_3$  должна быть заменена на интуитивную, т.е. импульс  $\Omega_2$  должен включаться раньше импульса  $\Omega_3$ . Действительно, если до взаимодействия с импульсами атом находился в состоянии  $|1\rangle$ , то для реализации состояния  $|\lambda_2\rangle$  необходимо, чтобы при  $t \rightarrow -\infty$  угол  $\Phi$  стремился к нулю, а угол  $\theta$  стремился к  $\pi/2$ , что может быть реализовано при последовательности импульсов, приведённой на рис.2 при перестановке импульсов  $\Omega_2$  и  $\Omega_3$  местами. Как и следовало ожидать, в процессе взаимодействия заселяются все три промежуточных

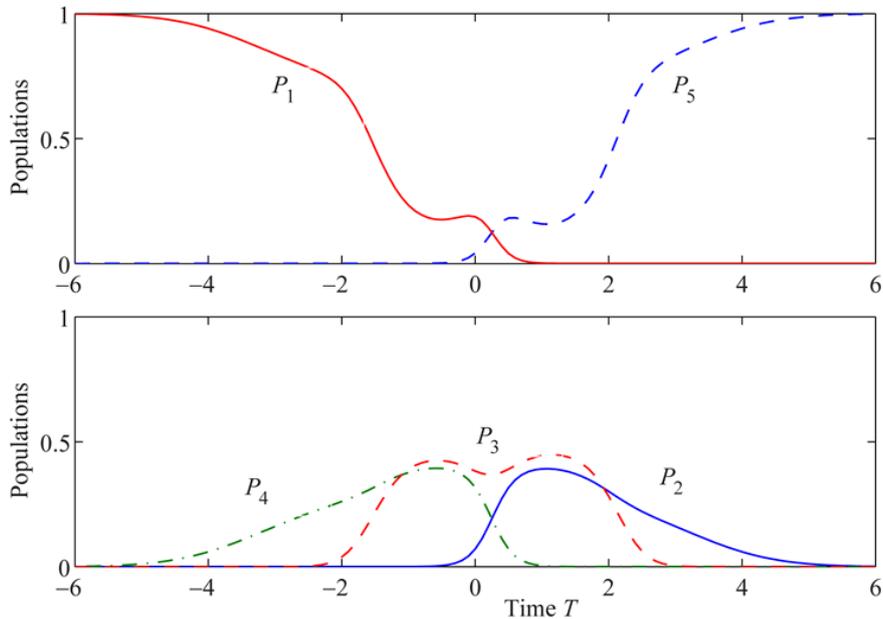


Рис.4. Динамика населённостей атомных уровней  $P_i$  в состоянии  $|\lambda_2\rangle$  при интуитивной последовательности импульсов.

уровня. Однако, как было показано в [19], в процессе b-STIRAP перенос населённости происходит быстрее, чем в процессе STIRAP, что может оказаться преимуществом этого метода в некоторых прикладных задачах.

#### 4. Заключение

В работе продемонстрирована возможность инвертирования пятиуровневой системы лестничного типа с помощью адиабатического переноса населённости. Рассмотренная схема взаимодействия может получить широкое применение для возбуждения высоколежащих ридберговских состояний. При условии равенства нулю всех трёх двухфотонных отстроек от резонансов получены аналитические выражения для собственных значений и собственных векторов гамильтониана взаимодействия, а также условие адиабатичности взаимодействия. Показано, что рассматриваемая пятиуровневая система может полностью имитировать трёхуровневую  $\Lambda$ -систему. «Одетые» состояния в пятиуровневой системе, соответствующие ненулевым собственным значениям, формально совпадают с собственными значениями трёхуровневой системы, если в последней основные состояния заменить на суперпозиционные состояния двухуровневой системы. Это позволяет осуществлять адиабатический перенос населённости в пятиуровневой системе методами, применяемыми для трёхуровневой системы. В работе аналитически и численно проанализирован перенос населённости как методом, подобным STIRAP с помощью контринтуитивной последовательности трёх импульсов, так и методом, подобным b-STIRAP с помощью интуитивной последовательности.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. **T.F. Gallagher.** Rydberg Atoms. Cambridge, Cambridge University Press, 1994.
2. **A. Gaëtan, Y. Miroshnychenko, T. Wilk, A. Chotia, M. Viteau, D. Comparat, P. Pillet, A. Browaeys, Ph. Grangier.** Nature Physics, **5**, 115 (2009).
3. **H. Weimer, R. Löw, T. Pfau, H.P. Büchler.** Phys. Rev. Lett., **101**, 250601 (2008).
4. **E. Urban, T.A. Johnson, T. Henage, L. Isenhower.** Nature Physics, **5**, 110 (2009).
5. **A.V. Gorshkov, J. Otterbach, M. Fleischhauer, T. Pohl.** Phys. Rev. Lett., **107**, 133602, (2011).
6. **D. Petrosyan, K. Mølmer.** Phys. Rev. A., **87**, 033416, (2013).
7. **D. Jaksch, J.I. Cirac, P. Zoller, S.L. Rolston, R. Côté, M.D. Lukin.** Phys. Rev. Lett., **85**, 2208 (2000).
8. **M.D. Lukin, M. Fleischhauer, R. Côté, L.M. Duan, D. Jaksch, J.I. Cirac, P. Zoller.** Phys. Rev. Lett., **87**, 037901 (2001).
9. **L. Li, Y.O. Dudin, A. Kuzmich.** Nature, **498**, 466 (2013).
10. **K. Bergman, H. Theuer, B. Shore.** Rev. Mod. Phys., **70**, 1003 (2004).
11. **N.V. Vitanov, B.W. Shore, K. Bergman.** Adv. Atom., Mol., Optical Physics, **46**, 55 (2001).
12. **P. Kral, I. Thanopoulos, M. Shapiro.** Rev. Mod. Phys., **79**, 53 (2007).
13. **D. Møller, L.B. Madsen, K. Mølmer.** Phys. Rev. Lett., **100**, 170504 (2008).

14. **D. Møller, J.L. Sørensen, J.B. Thomsen, M. Drewsen.** Phys. Rev. A, **76**, 062321 (2007).
15. **B.W. Shore, K. Bergmann, J. Oreg, S. Rosenwaks.** Phys. Rev A, **44**, 7442 (1991).
16. **F.T. Hioe, C.E. Carrol.** Phys. Rev. A, **37**, 3000 (1988).
17. **J. Appel, K.P. Marzlin, A.I. Lvovsky.** Phys. Rev. A, **73**, 013804 (2006).
18. **G.G. Grigoryan, G.V. Nikoghosyan, T. Halfmann, Y.T. Pashayan-Leroy, C. Leroy, S. Guerin.** Phys. Rev. A, **80**, 033402 (2009).
19. **J. Klein, F. Beil, Th. Halfmann.** Phys. Rev. Lett., **99**, 113003 (2007).
20. **V. Chaltykian, E. Gazazyan, G. Grigoryan, O. Tikhova.** Int. J. Laser Phys., **24**, 035301 (2014).

ԱՏՈՄՆԵՐԻ ՌԻԴԲԵՐԳՅԱՆ ՎԻՃԱԿՆԵՐԻ ԳՐԳՌՈՒՄԸ  
ԲՆԱԿԵՑՎԱԾՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԴԻԱԲԱՏ ՏԵՂԱՓՈԽՄԱՆ ՄԻՋՈՑՈՎ

Է.Ա. ԳԱԶԱԶՅԱՆ, Գ.Ն. ԳՐԻԳՈՐՅԱՆ, Վ.Օ. ՉԱԼՏԻԿՅԱՆ

Դիտարկված է աստիճանաձև հինգ մակարդականի համակարգի ադիաբատ փոխազդեցությունը չորս լազերային իմպուլսների հետ՝ այդ դեպքում երբ տվյալ համակարգում բոլոր երեք երկֆոտոնային ռեզոնանսները հավասար են գրոյի: Դիտարկվող համակարգի քվազիէներգիաների համար ստացված են անալիտիկ արտահայտություններ և ադիաբատիկության պայմանները: Վերլուծված է այդպիսի համակարգի ադիաբատ գրգռման էֆեկտիվ պրոցեսը, որը կարող է հաջողությամբ կիրառվել ռիդերգյան ատոմների ստացման համար:

EXCITATION OF RYDBERG STATES OF ATOMS  
VIA ADIABATIC TRANSFER OF POPULATION

E.A. GAZAZYAN, G.G. GRIGORYAN, V.O. CHALTYKYAN

We consider adiabatic interaction of five-level ladder system with four laser pulses under the condition of all two-photon detunings being zero. Analytical expressions for quasi-energy of the considered system and the condition of adiabatic interaction are derived. The process of effective adiabatic excitation of such system is analysed. This process can be successfully applied for the Rydberg atoms.

УДК 534.2

## **ПРИМЕНЕНИЕ АКСИАЛЬНО-СИММЕТРИЧНОЙ ФАЗОВОЙ И КРУГОВОЙ ДИФРАКЦИОННОЙ ВОЛНОВОЙ ПЛАСТИН В ОПТИЧЕСКИХ ПИНЦЕТАХ**

**В.К. АБРААМЯН**

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

e-mail: valeri.abrahamyan@ysu.am

(Поступила в редакцию 11 марта 2015 г.)

При разработке оптических пинцетов могут быть использованы как дифракционные оптические элементы для систем управления лазерным лучом, так и фазовые пластины, которые позволяют модулировать распределение интенсивности в лазерном пучке для манипуляции силами захвата. Рассмотрена система, состоящая из аксиально-симметричной фазовой пластины – стеклянной подложки, покрытой аксиально-симметрично ориентированным жидкокристаллическим (ЖК) полимером, и круговой дифракционной волновой пластины – стеклянной подложки, покрытой ЖК полимером с поляризационно-периодической ориентацией. На выходе системы получают дифрагированные пучки в  $\pm 1$  порядках, распределение интенсивности в которых определяется состоянием поляризации света на входе системы. Рассмотрена возможность использования данной системы для захвата, прокручивания и перемещения частиц микро- и нано-размеров путем модификации формы и интенсивности пучков на выходе системы.

### **1. Введение**

С помощью сильно сфокусированного светового пучка можно стабильно удерживать микроскопические частицы в трех измерениях. Первое описание оптических пинцетов приведено в работах [1,2]. Основными компонентами оптических пинцетов являются лазер, расширитель пучка, оптика для позиционирования пучка на образце, объектив микроскопа и конденсор для формирования ловушки на плоскости образца, датчик положения для измерения смещения пучка и источник света микроскопа, соединенный с ПЗС (прибор с зарядовой связью) камерой.

В тех случаях, когда диаметр захваченной частицы значительно больше, чем длина волны света, явление захвата можно объяснить с помощью геометрической оптики. Отдельные пучки света, излучаемого лазером, будут преломляться при прохождении через диэлектрическую частицу. В результате луч выходит в направлении, отличном от исходного. Поскольку свет имеет импульс, то изменение направления означает изменение импульса. Согласно третьему закону Ньютона, импульсы падающего и прошедшего через частицу света должны быть

равны по модулю и противоположны по знаку.

Большинство оптических ловушек работает на основе светового пучка с гауссовым распределением (TEM<sub>00</sub> мода) профиля интенсивности. В этом случае, если частица смещается от центра пучка, результирующая сила возвращает ее в центр ловушки, так как центральная область пучка с большей интенсивностью приводит к большему изменению импульса, чем менее интенсивные области вдали от центра ловушки.

Захват частиц можно осуществить также с использованием лазерных пучков высоких порядков, таких как пучки Эрмита–Гаусса (TEM<sub>xy</sub>), Лагерра–Гаусса (TEM<sub>pl</sub>) и Бесселя. Оптические пинцеты на основе пучка Лагерра–Гаусса способны равномерно захватывать оптически отражающие и поглощающие частицы. Пучки Эрмита–Гаусса обладают четко определенным орбитальным моментом, который может вращать частицы [3,4]. Бесселевы пучки нулевого и более высокого порядков также обладают способностью равномерного захвата [5].

В общем случае поляризационные вихревые пучки первого или более высоких порядков могут быть использованы для создания векторных бесселевых пучков. Одним из последних направлений исследований по применению бесселевых пучков является увеличение области захвата частиц и кинематика оптического пинцета. Уникальной особенностью этих полей является формирование пропеллерообразной диаграммы направленности по интенсивности, для которой число винтов и угол вращения пропеллера по отношению к анализатору зависят от состояния поляризации вихревого пучка, используемого для создания этих полей [6].

Настоящая работа посвящена разработке оптических элементов на основе ЖК, которые позволяют реализовать поляризационные вихревые пучки, используя аксиально-симметричную фазовую пластину (АСФП) и круговую дифракционную волновую пластину (КДВП). Предложен новый метод формирования различных видов вихревого пучка с использованием АСФП и КДВП. Полученные результаты могут быть использованы при разработке оптических пинцетов.

## **2. Теоретическая модель и результаты моделирования**

Вихревая фазовая пластина, быстрая оптическая ось которой вращается вокруг своего центра, представляет собой компоненту с равномерным смещением фазового фронта. КДВП [7,8] описываются как периодические профили пространственно изменяющейся оптической анизотропии. В отличие от обычных фазовых или амплитудных решеток, этот особый тип анизотропных дифракционных элементов локально изменяет состояние поляризации проходящего света. Указанные элементы недавно были изготовлены нами с использованием жидкокристаллических полимеров (ЖКП) – материалов, которые сочетают в себе двулучепреломление ЖК и механические свойства полимеров.

Функционирование АСФП и КДВП основано на пространственном круговом распределении молекул ЖК. АСФП – это пространственное распределение вращения молекул ЖК вокруг одной оси в двумерном пространстве, а КДВП – в

одномерном пространстве, когда молекулы ЖК периодически распределены по микронной шкале.

Два основных варианта аксиально-симметричного распределения – азимутальная и радиальная поляризации, а также периодически-поляризационно распределенная ориентация представлены на рис. 1.

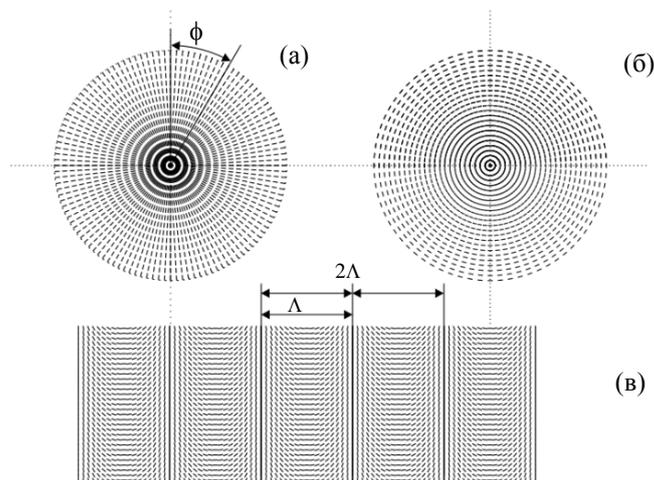


Рис. 1. Ориентация молекул ЖК: (а) – радиальная, (б) – азимутальная, (в) – периодически-поляризационно распределенная.

Обсудим перспективы применения этих элементов в оптических пинцетах. Рассмотрим теоретическую модель и некоторые экспериментальные результаты по изготовлению вихревых структур высокого порядка. Переход от радиально-симметричного к азимутальному распределению позволит получить аксиально-симметричный оптический элемент высокого порядка.

Такая структура может быть сформирована, если позиция быстрой оси фазовой пластины является функцией азимутального угла  $\phi$ :

$$\theta(\phi) = \alpha\phi + \delta, \quad (1)$$

где  $\alpha$  – число оборотов быстрой оси и  $\delta$  – угловая ориентация быстрой оси при  $\phi = 0$ .

Таким образом, вихревая структура первого порядка есть результат перехода от радиального к азимутальному распределению при одном повороте азимутального угла, когда быстрая ось совершает один полный оборот вокруг себя. Вихревые структуры более высоких порядков получают при многократных переходах, и порядок зависит от числа переходов.

Рассмотрим систему с последовательным использованием АСФП и КДВП. Для моделирования распределения электрического поля и распределения интенсивности света была использована матрица Джонса (рис. 2).

Преобразование света на АСФП и КДВП может быть представлено как

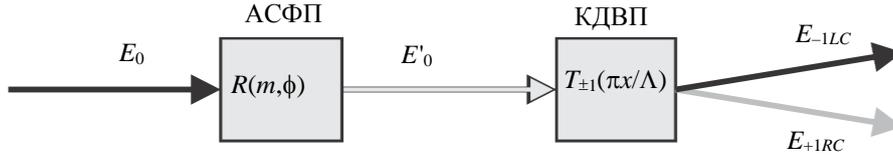


Рис.2. Матрица Джонса для случая последовательного применения АСФП и КДВП.

$$E_{\pm 1} = T_{\pm 1} \left( \frac{\pi x}{\Lambda} \right) E'_0, \quad (2)$$

$$E'_0 = R(m, \phi) E_0,$$

где  $E_0$ ,  $E'_0$  и  $E_{\pm 1}$  – электрические поля световых волн, соответственно входящей, выходящей из АСФП и выходящей из КДВП,  $\phi$  – полярный угол,  $m$  – порядок аксиально-симметричной волновой пластины,  $R(m, \phi)$  – двумерная матрица Джонса для АСФП и  $T(\pi x/\Lambda)$  – матрица Джонса для КДВП.

$$T_{\pm 1} = \frac{1}{\Lambda} \int_0^{\Lambda} T(x) e^{\mp j \frac{2\pi x}{\Lambda}} dx, \quad (3)$$

$$R(m, \phi) = \begin{pmatrix} \cos(m\phi) & \sin(m\phi) \\ \sin(m\phi) & -\cos(m\phi) \end{pmatrix}.$$

Представив  $E'_0$  как сумму световых пучков с левой  $L'_0$  и правой  $R'_0$  круговыми поляризациями

$$L'_0 = E'_{0x} - i E'_{0y},$$

$$R'_0 = E'_{0x} + i E'_{0y},$$

можно показать, что на выходе системы генерируются только  $\pm 1$  дифракционные порядки (толщина элементов должна удовлетворять условию полуволновой пластины) [9]

$$E_{-1RC} = iL'_0, \quad (4)$$

$$E_{+1LC} = iR'_0.$$

Вортекс структуры для 1, 2, 3 и 4 порядков показаны на рис.3а. Как видно из результатов моделирования, когда между скрещенными поляризаторами расположены вортекс структуры 1, 2, 3 и 4 порядков, соответственно возникают бесселевы пучки в виде 2, 4, 6 и 8 пропеллеров (рис.3б).

При последовательном использовании КДВП с вортексом, когда обеспечивается задержка  $\lambda/2$ , согласно уравнению (4), на выходе системы в  $\pm 1$  дифракционных порядках наблюдаются пучки с правой и левой круговыми

поляризациями. В этом случае пучки в дифракционных порядках имеют форму пропеллера с взаимно обратным распределением интенсивности (рис.3в). Именно этот способ формирования пучка предлагается использовать в оптических пинцетах.

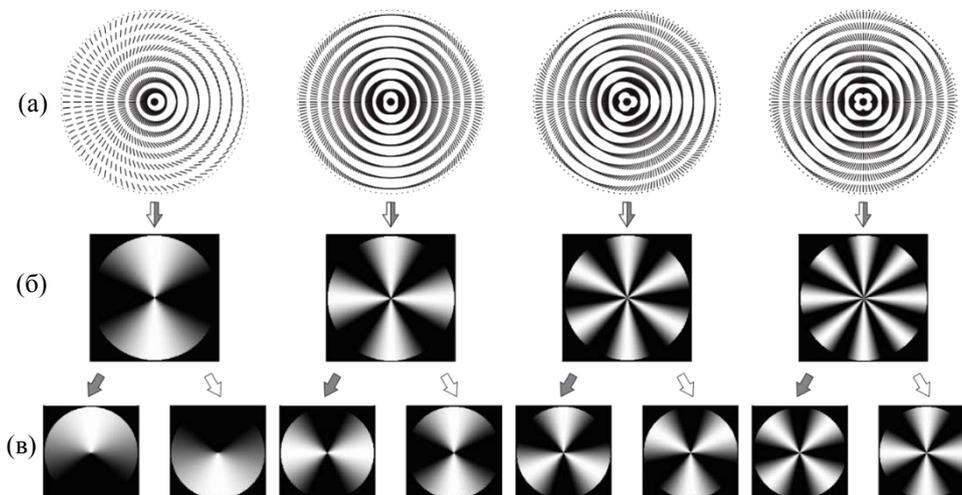


Рис.3. (а) – Вихрь структуры 1, 2, 3 и 4 порядков, (б) – результаты моделирования со скрещенными поляризаторами, (в) – на выходе КДВП.

### 3. Результаты эксперимента и их обсуждение

Для изготовления рассматриваемых структур на основе ЖКП с пространственным изменением ориентации [10,11] использован метод фотоориентирования. АСФП структуры записаны при непрерывном вращении плоскости поляризации падающего света, выходящего из узкой щели. КДВП записана по поляризационно голографическому методу [12,13]. Как правило, наноструктурированные ЖК объекты получают, используя эти два метода, т.к. в этом случае поворот директора ЖК осуществляется локально.

Слой фотоориентируемого полимера ROP 103/2CP (Rolic) был нанесен на подложку методом центрифугирования, просушен, после чего было проведено ориентирование при освещении линейно-поляризованным лучом УФ лазера. Использовался He–Cd лазер с длиной волны  $\lambda = 325$  нм, выходной мощностью 50 мВт и расширением пучка 25 мм. Ориентируемый слой экспонировался сквозь узкую щель, расположенную между подложкой и полуволновой пластиной  $\lambda/2$  (или поляризатором), как показано на рис.4а. Пластина  $\lambda/2$  и щель (или подложка) в течение процесса экспозиции постоянно вращались для создания непрерывного изменения ориентации по отношению к азимутальному положению на подложке.

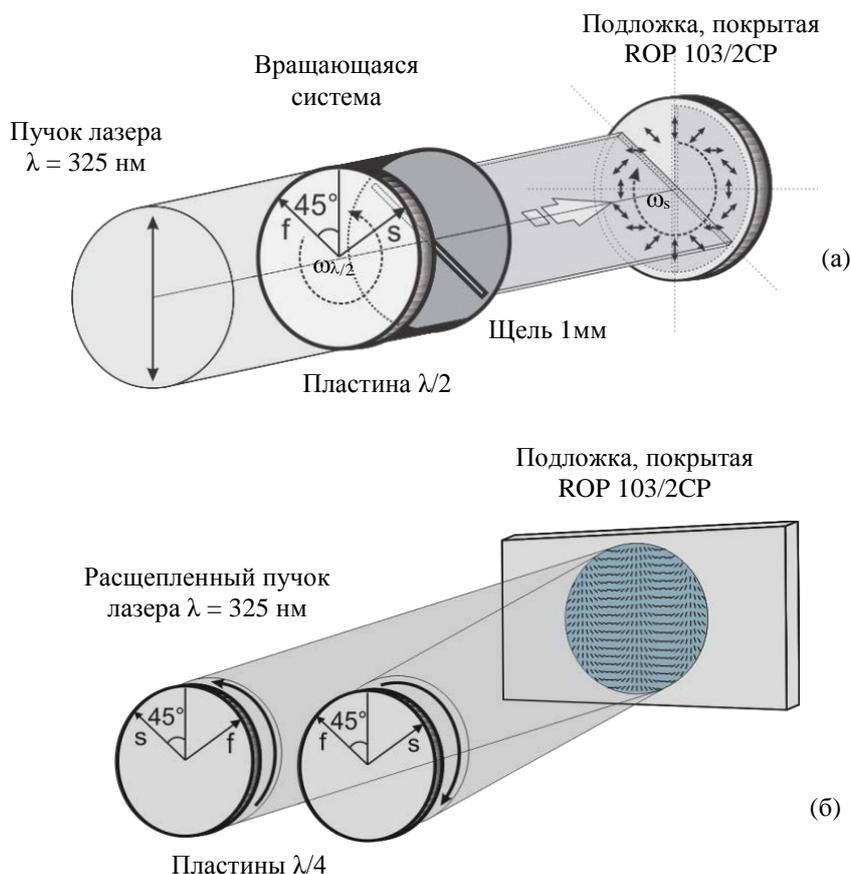


Рис.4. (а) – Установка для экспозиции аксиально-симметричной ориентации, (б) – голографическая установка для получения поляризационно распределенной ориентации.

Мода вихревая фазовой пластины определяется соотношением частоты вращения полуволновой пластины  $\omega_{\lambda/2}$  и щели  $\omega_s$ . При  $\omega_{\lambda/2} = 4\omega_s$ ,  $\omega_{\lambda/2} = 2\omega_s$ ,  $\omega_{\lambda/2} = (3/4)\omega_s$ ,  $\omega_{\lambda/2} = \omega_s$  формируются вихревые структуры 1, 2, 3 и 4 порядков, соответственно. На подложку методом центрифугирования был нанесен ЖК преполимер (ROF 5102, Rolic), который затем термически стабилизировался и был полимеризован под воздействием УФ излучения в среде азота. Образцы были изготовлены на стеклянных подложках (стекло марки В6) диаметром 25 мм. Процесс изготовления КДВП такой же, за исключением экспозиции, когда ориентирование производится интерференцией лазерных лучей с левой и правой круговыми поляризациями, полученными с помощью волновой пластины  $\lambda/4$ . Оптическая схема записи КДВП приведена на рис.4б. Были изготовлены АСФП с вихревыми структурами 2 и 4 порядков и КДВП.

На рис.5 приведена оптическая схема для исследования системы, состоящей из последовательно расположенных АСФП и КДВП. Объект исследования расположен между поляризатором и анализатором, входящий пучок – гауссова  $TEM_{00}$  мода. Поворотом анализатора получают изображения профилей пучка в  $\pm 1$  и 0 порядках (рис.6). Наличие нулевого порядка связано с неидеальностью

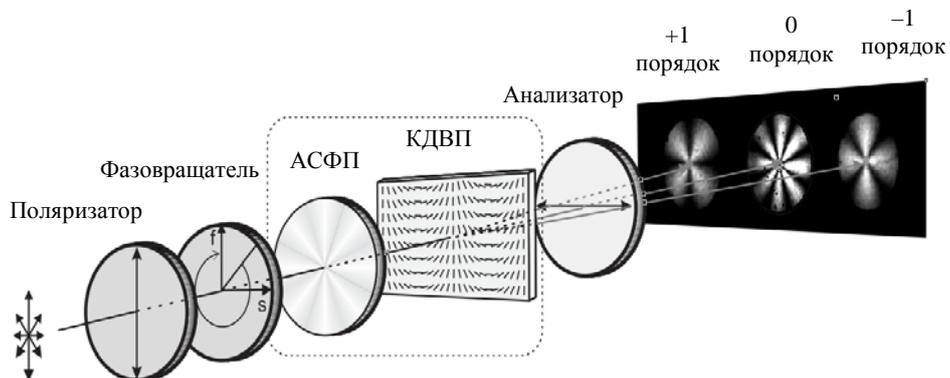


Рис.5. Оптическая схема использования АСФП и КДВП.

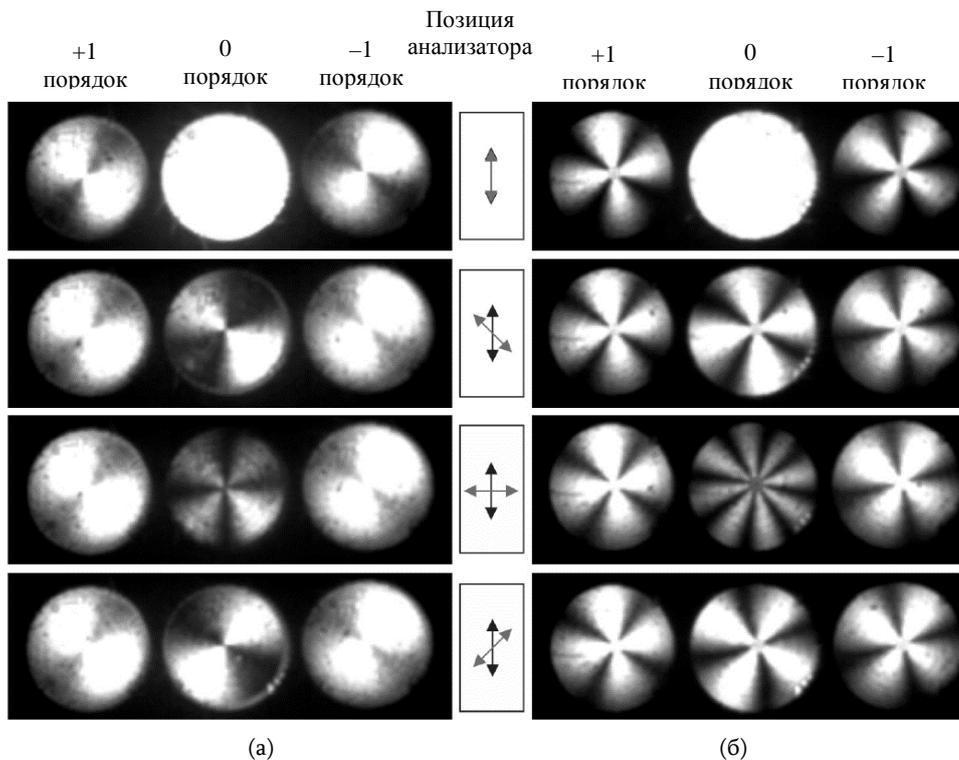


Рис.6. Пропеллерообразный выход системы АСФП и КДВП в зависимости от положения анализатора: (а) – вихревое поле 2-го порядка и КДВП, (б) – вихревое поле 4-го порядка и КДВП.

структуры КДВП, обусловленной процессом записи. Как видно из рисунка, когда анализатор расположен параллельно поляризации входящего пучка, нулевой порядок интенсивности не модулируется, так как поляризация света, проходящего через нулевой порядок КДВП, не меняется. КДВП селективна по отношению к левой и правой круговым поляризациям, происходит модуляция и в  $\pm 1$  дифракционных порядках КДВП наблюдаются пропеллеры.

Распределение интенсивности в  $\pm 1$  порядках в зависимости от угла анализатора не меняется. Это означает, что в процессе модуляции круговая поляризация сохраняется. В случае, когда анализатор расположен под углом  $\pm 45^\circ$ , в нулевом порядке наблюдаются линейные компоненты относительно главных осей АСФП. В случае скрещенных поляризаторов наблюдаются компоненты с круговыми поляризациями.

Поскольку на выходе АСФП–КДВП системы распределение интенсивности в полученных дифракционных порядках не зависит от позиции анализатора, то возможно создать систему без анализатора для применения в качестве пинцета.

Проведено также исследование системы с АСФП и КДВП без анализатора (рис.7). Когда входящий пучок линейно поляризован, дифракционные порядки

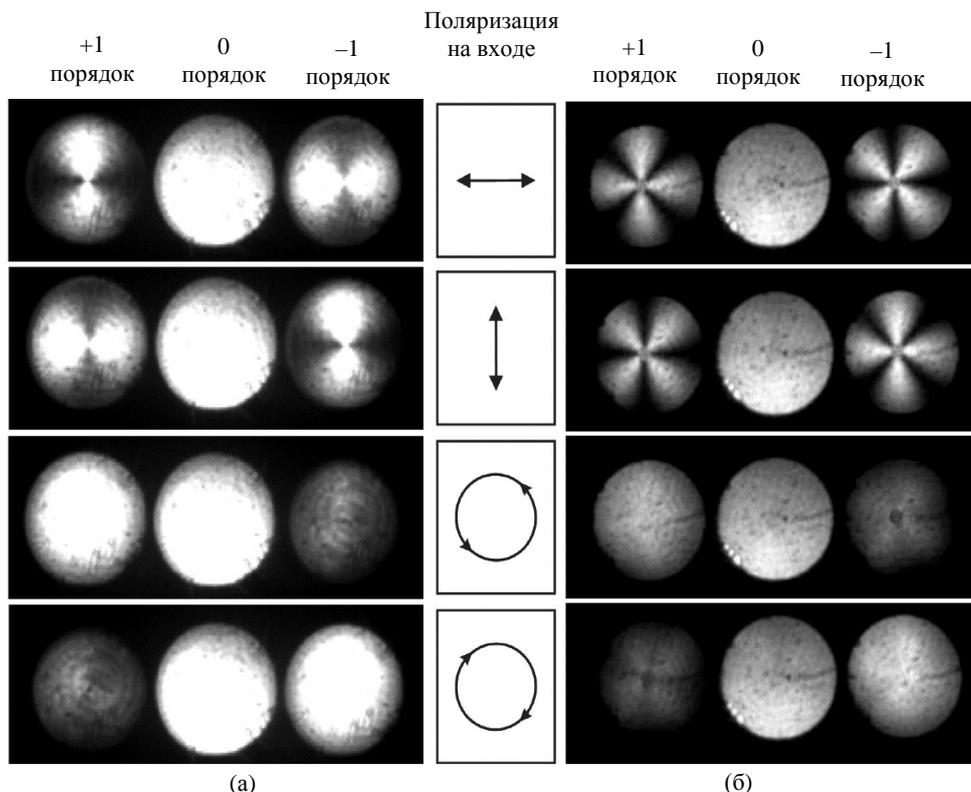


Рис.7. Зависимость изображения на выходе системы АСФП и КДВП без анализатора от поляризации входного пучка: (а) – вихрь 2-го порядка и КДВП, (б) – вихрь 4-го порядка и КДВП.

на выходе КДВП, за исключением 0 порядка, являются пропеллерообразными (число пропеллеров зависит от порядка АСФП).

Согласно предварительным теоретическим оценкам, распределения интенсивностей в  $\pm 1$  дифракционных порядках взаимно противоположны. При вращении поляризации входящего пучка света в  $\pm 1$  дифракционных порядках наблюдается непрерывное вращение пропеллеров. Если поляризация на входе меняется на круговую, то пропеллеры исчезают и в одном из  $\pm 1$  дифракционных порядков получается  $TEM_{00}$  гауссова мода.

В зависимости от левой или правой круговой поляризации входящего пучка получается дифракционный порядок с правой или левой круговой поляризацией, соответственно. Такое управление интенсивностью света дает возможность легко изменять момент силы захватывающего сфокусированного пучка.

#### 4. Заключение

Теоретически и экспериментально исследована система, состоящая из последовательно расположенных АСФП и КДВП. Полученные результаты могут быть использованы при разработке оптических пинцетов. Бесселевы пучки в форме пропеллера, получающиеся в дифракционных порядках на выходе КДВП, позволяют создать угловой момент для вращения частиц, захваченных пинцетом. Показано, что распределение интенсивности в форме пропеллера может быть преобразовано в гауссову  $TEM_{00}$  моду в зависимости от состояния поляризации входящего пучка.

Автор благодарит А. Маргаряна, Д. Оганесяна, Н. Акопян, Т. Саргсяна, П. Гаспаряна и А. Мовсесяна за полезные обсуждения и ценные замечания.

Работа выполнена в рамках проекта GIPP/ISTC A-1951.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. **A. Ashkin.** Phys. Rev. Lett., **24**, 156 (1970).
2. **A. Ashkin, J.M. Dziedzic, J.E. Bjorkholm, S. Chu.** Opt. Lett., **11**, 288 (1986).
3. **J.E. Curtis, D.G. Grier.** Phys. Rev. Lett., **90**, 133901 (2003).
4. **M. Padgett.** Proc. of SPIE, **3930**, 130 (2000).
5. **D. McGloin, V. Garces-Chavez, K. Dholakia.** Optics Letters, **28**, 657 (2003).
6. **A. Niv, G. Biener, V. Kleiner, E. Hasman.** Optics Letters, **29**, 238 (2004).
7. **L. Nikolova, T. Todorov.** Opt. Acta, **31**, 579 (1984).
8. **J. Tervo, J. Turunen.** Opt. Lett., **25**, 785 (2000).
9. **H. Sarkissian, B. Park, N. Tabirian, B. Zeldovich.** Mol. Cryst. Liq. Cryst., **451**, 1 (2006).
10. **A.K. Spilman, T.G. Brown.** Appl. Opt., **46**, 61 (2007).
11. **M. Schadt, H. Seiberle, A. Schuster, S.M. Kelly.** J. Appl. Phys., **34**, L764 (1995).
12. **S.R. Nersisyan, N.V. Tabiryan D.M. Steeves, B.R. Kimball.** Nonlinear Optical Physics & Materials, **18**, 1 (2009).
13. **H.L. Margaryan, V.M. Aroutiounian, D.L. Hovhannisyan, N.H. Hakobyan, V.K. Abrahamyan.** Mol. Cryst. Liq. Cryst., **559**, 214 (2012).

ԱՌԱՆՑՔԱՅԻՆ ՀԱՄԱՉԱՓՈՒԹՅԱՄԲ ՓՈՒԼԱՅԻՆ  
ԵՎ ՇՐՁԱՆԱՅԻՆ ԴԻՖՐԱԿՏԱՅԻՆ ԱԼԻՔԱՅԻՆ ԹԻԹԵՂՆԵՐԻ  
ԿԻՐԱՌՈՒԹՅՈՒՆԸ ՕՊՏԻԿԱԿԱՆ ՊԻՆՅԵՏՆԵՐՈՒՄ

Վ.Կ. ԱԲՐԱՀԱՄՅԱՆ

Օպտիկական պինջետներ պատրաստելիս կարող են օգտագործվել ինչպես դիֆրակցիոն օպտիկական տարրեր՝ որպես լազերային փնջի ուղղության դակավարման համակարգ, այնպես էլ փուլային թիթեղներ, որոնք հնարավորություն են տալիս մոդուլացնել լազերային փնջի ինտենսիվության բաշխվածությունը բռնիչ ուժերի փոփոխման համար: Դիտարկված է համակարգ, որը բաղկացած է առանցքային համաչափությամբ փուլային թիթեղից՝ ապեկե տակդիր, ծածկված հեղուկ բյուրեղ (ՀԲ) պոլիմերային թաղանթով, և պտտական դիֆրակցիոն ցանցից՝ ապակե տակդիր, ծածկված ՀԲ պոլիմերով՝ բևեռացումային պարբերական կողմնորոշմամբ: Համակարգի ելքում, ստացվում են դիֆրակցված փնջեր  $\pm 1$  կարգերում, որոնցում ինտենսիվության բաշխումը որոշվում է համակարգի մուտքում լույսի բևեռացման վիճակով: Դիտարկված է տվյալ համակարգի օգտագործման հնարավորությունը միկրո և նանո չափերի մասնիկների սևեռումը, պտտումը և տեղաշարժումը իրականացանելու համար, համակարգի ելքում լուսային փնջի ձևի և ինտենսիվության փոփոխության միջոցով:

APPLICATION OF AXIALLY SYMMETRIC PHASE PLATE  
AND CIRCULAR DIFFRACTION WAVEPLATE IN OPTICAL TWEEZERS

V.K. ABRAHAMYAN

Diffraction optical elements as laser beam steering systems and the phase plates, which allow to modulate the intensity distribution of the laser beam for manipulating trapping forces can be used for the development of the optical tweezers. The system, consisting of an axial symmetric phase plate – glass substrate coated by axially symmetric oriented liquid crystal (LC) polymer, and a circular diffraction waveplate – glass substrate, coated by LC polymer with polarization patterned orientation, is considered. Diffracted beams are obtained at the output of the system in  $\pm 1$  order, the intensity distribution in which is determined by the state of light polarization at the system input. The possibility of using this system for trapping, scrolling and moving the particles of micro- and nanosizes by modification of the shape and intensity of beams at the system output is considered.

УДК 532.783

**ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВРАЩЕНИЯ  
ПЛОСКОСТИ ПОЛЯРИЗАЦИИ СВЕТА  
В ОБОГАЩЕННОЙ НАНОЧАСТИЦАМИ  
ХОЛЕСТЕРИЧЕСКОЙ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ ЯЧЕЙКЕ  
С АНИЗОТРОПНЫМ ДЕФЕКТНЫМ СЛОЕМ**

Э.С. КАРАГУЛЯН

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

e-mail: herminegharagulyan@ysu.am

(Поступила в редакцию 16 апреля 2015 г.)

Экспериментально показано, что в обогащённых наночастицами холестерических жидкокристаллических ячейках селективным отражением в видимом диапазоне света можно индуцировать дефект, управляемый внешним электрическим полем, и контролировать вращение плоскости поляризации света с помощью индуцированного дефекта. Основным результатом эксперимента является тот факт, что вращение плоскости поляризации света имеет место при более низких напряжениях, когда холестерический жидкий кристалл обогащен наночастицами. Представлена новая конфигурация жидкокристаллического устройства, которое работает в качестве контролирующего линейного поляризатора как для поляризованного, так и неполяризованного света.

## 1. Введение

Холестерические жидкие кристаллы (ХЖК) представляют особый интерес в силу их спонтанного самоорганизующего свойства и того факта, что фотонную запрещенную зону можно контролировать в широком диапазоне частот. С точки зрения оптических свойств главной особенностью холестериков является спиральная структура оси директора. Такая спиральность вызывает селективное отражение и прохождение кругового поляризованного света [1–2]. Другая их особенность заключается в том, что ХЖК являются оптически активными структурами. Такие среды принадлежат к классу одномерных хиральных фотонных кристаллов (ХФК). Главное различие между ХФК и обычными фотонными кристаллами состоит в том, что в ХФК фотонная запрещенная зона существует лишь для одной круговой поляризации, которая совпадает со знаком спирали хиральной среды в случае нормального падения света. Исследования ХЖК показали, что в фотонной запрещенной зоне можно создавать локализованные дополнительные моды с помощью индуцирования дефекта в периодической структуре [3–6]. С этой точки зрения очень важно исследовать жидкокристаллические среды с учетом возможности их контролирования с помощью

внешних полей (в том числе оптических) [7].

В последнее время наблюдается большой интерес к ХЖК, обогащенным наночастицами (см. [8] и ссылки в ней). Наличие наночастиц (ферроэлектрических или ферромагнитных) в хиральной структуре приводит: к существенному повышению его локальной диэлектрической и магнитной анизотропии; к существенному изменению критической температуры фазового перехода «изотропная фаза – жидкий кристалл»; к значительному изменению фотонной запрещенной зоны (ширина и локализация частоты); изменению коэффициентов эластичности ХЖК; значительному увеличению возможности настройки ХЖК и так далее.

Целью настоящей работы является экспериментальное исследование поведения поляризации света в обогащённых наночастицами ХЖК средах в присутствии индуцированного планарного дефекта.

## 2. Подготовка образца

Для исследования вращения плоскости поляризации была подготовлена обогащенная наночастицами ХЖК ячейка, со смесью правовращающего пеларгоната ( $C_{36}H_{62}O_2$ ), левовращающего олеата ( $C_{45}H_{78}O_2$ ) и нематического жидкого кристалла E7 в весовом соотношении соответственно 30:60:10, а в качестве наночастиц был использован ферроэлектрик  $BaTiO_3$ , плотность которого в структуре составляет 1%. Параметры ХЖК:  $\epsilon_1 = 2.85$ ,  $\epsilon_2 = 2.47$ . Смесь имела зеленый цвет и освещалась лазерным излучением с длиной волны 530 нм. Толщина образца составляла 40 мкм. Сначала стеклянные подложки с ITO покрытием были тщательно очищены, затем внутренние стенки стеклянных подложек были покрыты тонкими полимерными слоями. Далее подложки были обработаны

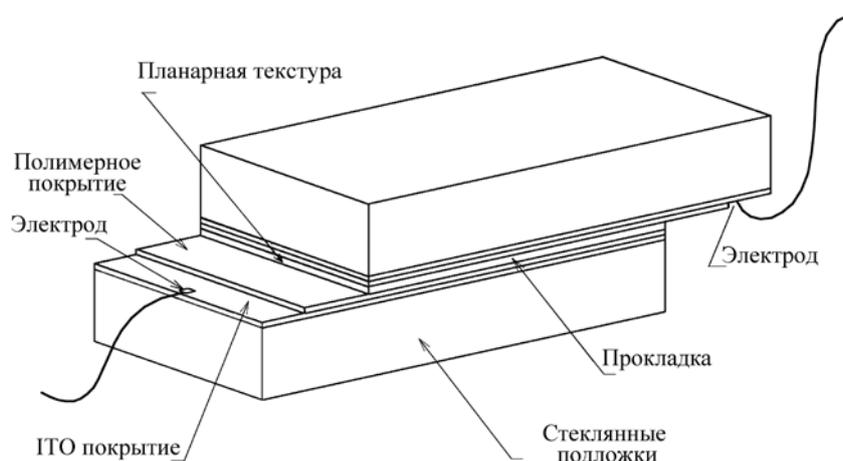


Рис.1. ХЖК ячейка типа «сэндвич». Лазерное излучение распространяется перпендикулярно поверхности ячейки ХЖК.

специальным материалом, в результате чего директор ХЖК был ориентирован в направлении, параллельном поверхностям стенок, а это указывает на то, что ось спирали перпендикулярна поверхности ячейки. Смесь вводилась в ячейку капиллярным методом. Электроды имели толщину 1 мкм, а расстояние между ними составляло 1 мм. На рис.1 показана используемая в эксперименте ХЖК ячейка типа «сэндвич».

### 3. Эксперимент

В эксперименте использовался ХФК с анизотропным дефектным слоем, являющимся планарным ХЖК, в котором дефект индуцировался внешним электрическим полем. Приложенное к ячейке ХЖК поле меняет направление ориентации молекул (направление директора). По нашим оценкам, нелокальность поля приводит к индуцированию дефекта с толщиной 2 мкм. Как показано на рис.2, наблюдались три случая индуцирования дефекта: вблизи входной стенки ячейки, в центре ячейки и вблизи выходной стенки ячейки. Прикладывая напряжение к специально установленным электродам, мы тем самым меняем расположение дефекта в жидкокристаллической системе. При некоторых значениях приложенного напряжения анизотропный слой действует как полуволновая пластина, которая меняет направление вращения поляризации [9]:

$$d \sim \frac{\lambda}{2(n_e - n_o)}, \quad (1)$$

где  $d$  – толщина слоя дефекта,  $\lambda$  – длина волны,  $n_o$  и  $n_e$  – соответственно показатели преломления обыкновенной и необыкновенной волны. Известно, что циркулярно поляризованный свет, отраженный от ячейки ХЖК, не меняет направление поляризации. Если дефект расположен в центре ячейки, то левая и правая поляризации отражаются. Если дефект расположен вблизи стенки, то одна из поляризаций проходит, а другая отражается.

Для исследования вращения плоскости поляризации вначале нами была выявлена зона селективного отражения и для этой зоны было исследовано

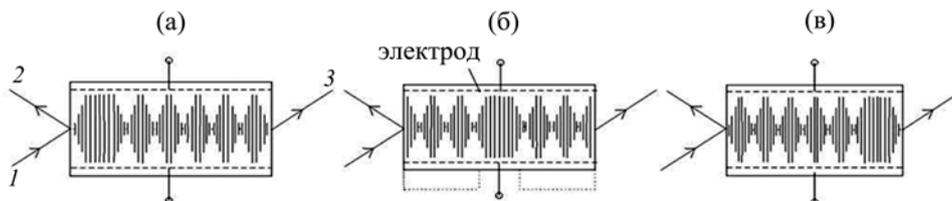


Рис.2. Схематическая диаграмма ячейки ХЖК с анизотропным дефектом, который индуцирован: (а) вблизи входной стенки ячейки ХЖК, (б) в середине, (в) вблизи выходной стенки ячейки ХЖК. 1, 2 и 3 – падающий, отраженный и проходящий лучи, соответственно.

вращение плоскости поляризации. Для исследуемого образца зона селективного отражения находилась в области 15–25°C. На рис.3 показана схема экспериментальной установки. В качестве источника света использовался непрерывный лазер с длиной волны 530 нм и с максимальной мощностью 30 мВт. Лазерное излучение, проходя через призму и поляризатор, становится линейно поляризованным, и после пластины  $\lambda/4$  становится циркулярно поляризованным (внешний модулятор использовался для прерывного режима работы лазера). Свет падает на микрохолодильник (температура микрохолодильника плавно меняется с помощью термоконтроллера) и распространяется через ячейку ХЖК, после чего проходит через второй поляризатор (поляризаторы скрещены), попадает на фотодиод и регистрируется осциллографом.

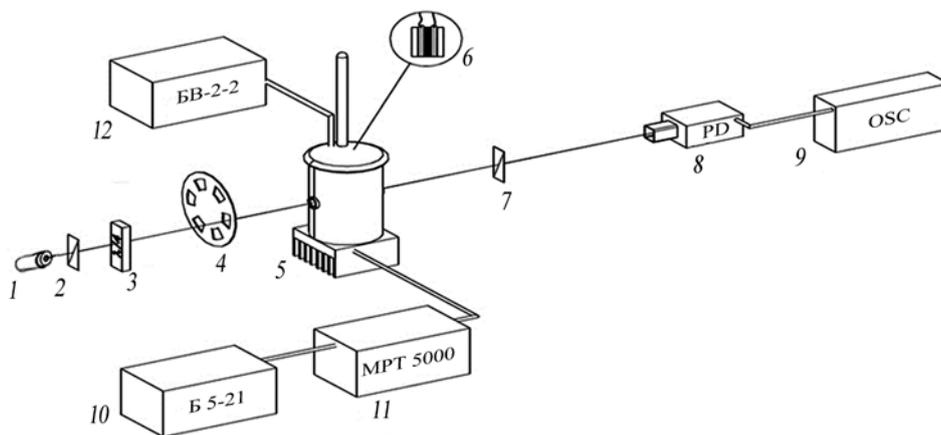


Рис.3. Схема экспериментальной установки: 1 – лазер, 2 – поляризатор, 3 – пластина  $\lambda/4$ , 4 – модулятор, 5 – микрохолодильник, 6 – ячейка ХЖК, обогащенная наночастицами, 7 – поляризатор, 8 – фотодиод, 9 – осциллограф, 10 – источник постоянного тока, 11 – термоконтроллер, 12 – источник постоянного напряжения.

#### 4. Результаты и их обсуждение

Предварительно, до изучения поворота плоскости поляризации света, были исследованы спектры отражения в ХЖК структурах, обогащенных наночастицами и без них. Результаты этих исследований приводятся на рис.4. Как видно из рисунка, при обогащении наночастицами ХЖК структур спектр отражения смещается в сторону коротковолновой области и расширяется.

Изменяя внешнее электрическое поле в интервале 500–950 В, измеряли угол вращения эллипса поляризации по отношению к начальному направлению. Для определения начального направления вращали выходной поляризатор на угол  $\pi/4$  от скрещенной позиции поляризаторов. На рис.5 представлена зави-

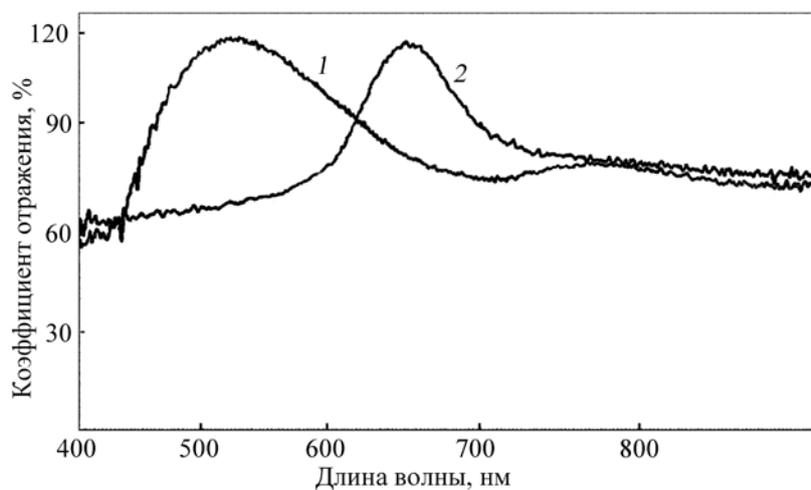


Рис.4. Спектры отражения в ХЖК структурах (обогащенные наночастицами (1) и без них (2)).

симось угла поворота плоскости поляризации от приложенного напряжения для ХЖК структур, обогащенных наночастицами и без них (дефект расположен в центре ячейки). Как видно из рис.5, в обогащенных наночастицами ХЖК ячейках плоскость поляризации света вращается при более низких напряжениях.

Проведенные исследования показывают, что когда дефект индуцируется вблизи входной стенки ячейки, плоскость поляризации вращается лишь на

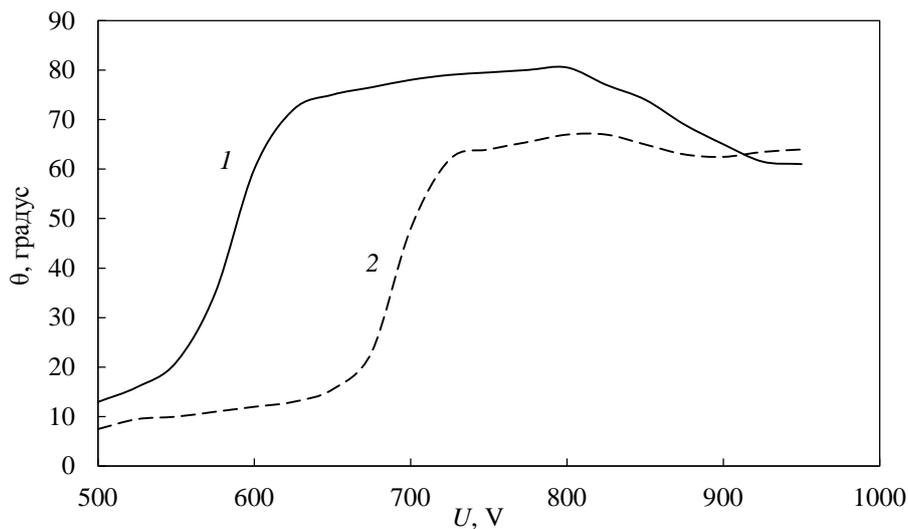


Рис.5. Зависимость угла поворота плоскости поляризации от приложенного напряжения для ХЖК структур, обогащенных наночастицами (1) и без них (2).

несколько градусов. При индуцировании дефекта в центре ячейки ХЖК вращение плоскости поляризации значительно и лишь при индуцировании дефекта вблизи выходной стенки ячейки вращение плоскости поляризации максимально [10]. Исследована также эллиптичность поляризации при нормальном падении света. Измерения были выполнены для различных температур в зоне селективного отражения исследуемого образца. При передвижении дефекта с одного конца ячейки к другому эллиптичность поляризации меняется.

## 5. Заключение

В работе экспериментально исследована возможность индуцирования дефекта в ячейке ХЖК, а также рассмотрено поведение поляризации света при индуцированном дефекте в ХЖК средах. Исследовано влияние положения дефектного слоя в ячейках ХЖК, а также показано, что с помощью индуцированного дефекта можно контролировать вращение плоскости поляризации света.

Важнейшим результатом проведенного эксперимента является тот факт, что плоскость поляризации света вращается при более низких напряжениях, когда ХЖК обогащен наночастицами. В результате эксперимента установлено, что вращение плоскости поляризации максимально, когда свет вначале распространяется через ХЖК фотонную структуру и затем падает на анизотропный слой.

Работа выполнена при финансовой поддержке ГКН МОН РА (грант 13–1с240) и Армянского национального фонда науки и образования (ANSEF опт–3517).

Автор благодарен Р.Б. Алавердяну за обсуждение результатов работы.

## ЛИТЕРАТУРА

1. **Yu. Kolomzarov, A. Kozachenko, B. Lev, V. Nazarenko, V. Sorokin.** Jpn. J. Appl. Phys., **38**, 814 (1999).
2. **P.G. de Gennes, J. Prost.** The Physics of Liquid Crystals. Oxford, Clarendon Press, 1993.
3. **P.R. Villeneuve, S. Fan, J.D. Joannopoulos.** Phys. Rev. B, **54**, 7837 (1996).
4. **E. Yablonovitch, T.J. Gmitter.** Phys. Rev. Lett, **67**, 3380 (1991).
5. **А.Н. Gevorgyan, M.Z. Harutyunyan.** J. Mod. Opt., **56**, 1163 (2009).
6. **A. Lakhtakia, V.C. Venugopal, M.W. McCall.** Opt. Commun, **177**, 57 (2000).
7. **F. Simoni.** NLO Properties of LC and PDLC. Singapore, World Scientific, 1997.
8. **S.-C. Jeng, S.-J. Hwang, Y.-H. Hung, S.-C. Chen.** Opt. Express, **18**, 22572 (2010).
9. **Р.Б. Алавердян, К.Р. Аллахвердян, А.А. Геворгян, А.Д. Чилингарян, Ю.С. Чилингарян.** ЖТФ, **80**, 85 (2010).
10. **R.B. Alaverdyan, A.H. Gevorgyan, H.S. Gharagulyan, H.H. Grigoryan.** Mol. Cryst. Liq. Cryst., **559**, 23 (2012).

ԼՈՒՅՄԻ ԲԵՎԵՌԱՅՄԱՆ ՀԱՐԹՈՒԹՅԱՆ ՊՏՈՒՅՏԻ  
ՓՈՐՁԱՐԱՐԱԿԱՆ ՀԵՏԱԶՈՏՈՒԹՅՈՒՆԸ ԱՆԻՉՈՏՐՈՊ ԱՐԱՏԱՅԻՆ ՇԵՐՏՈՎ  
ՆԱՆՈՄԱՍՆԻԿՆԵՐՈՎ ՀԱՐՍՏԱՅՎԱԾ ԽՈԼԵՍՏԵՐԻԿ  
ՀԵՂՈՒԿ-ԲՅՈՒՐԵՂԱՅԻՆ ԲԶՁՈՒՄ

Հ.Ս. ՂԱՐԱԳՈՒԼՅԱՆ

Փորձնականորեն ցույց է տրված, որ լույսի տեսանելի տիրույթում ընտրողաբար անդրադարձման հատկությամբ օժտված նանոմասնիկներով հարստացված խոլեստերիկ հեղուկ-բյուրեղային բջիջներում հնարավոր է մակածել արտաքին էլեկտրական դաշտով կառավարվող արատ և մակածված արատի միջոցով հնարավոր է կառավարել լույսի բևեռացման հարթության պտույտը: Փորձի հիմնական արդյունքն այն փաստն է, որ լույսի բևեռացման հարթության պտույտը տեղի ունի ավելի ցածր լարումների դեպքում, երբ խոլեստերիկ հեղուկ բյուրեղը հարստացված է նանոմասնիկներով: Մեր կողմից ներկայացված է հեղուկ-բյուրեղային սարքի նոր կոնֆիգուրացիա, որն աշխատում է որպես կառավարվող գծային բևեռացուցիչ ինչպես բևեռացած, այնպես էլ չբևեռացած լույսի համար:

EXPERIMENTAL INVESTIGATION OF POLARIZATION PLANE ROTATION  
OF LIGHT IN NANOPARTICLE-ENRICHED CHOLESTERIC  
LIQUID CRYSTAL CELL WITH AN ANISOTROPIC DEFECT LAYER

H.S. GHARAGULYAN

The possibility of defect induction controlled by external electric field in nanoparticle-enriched cholesteric liquid-crystalline cells with selective reflection in visible range of light and control the rotation of polarization plane of light by induced defect was experimentally demonstrated. The main result of the experiment is the fact that the rotation of the polarization plane of light occurs at lower voltages when the cholesteric liquid crystal is enriched by nanoparticles. A new configuration of liquid crystal device that performs as a tunable linear polarizer for both polarized and unpolarized lights is presented.

УДК 535.343.1

## ИССЛЕДОВАНИЕ СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КРИСТАЛЛА $\text{LiNbO}_3:\text{Ho}^{3+}$ В ПОЛОСЕ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ 1880–2130 нм

Г.Г. ДЕМИРХАНЫАН<sup>1,2</sup>, Э.П. КОКАНЯН<sup>1,2</sup>, А.Г. ДЕМИРХАНЫАН<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>Армянский государственный педагогический университет им. Х. Абовяна,  
Ереван, Армения

<sup>2</sup>Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак, Армения

\*e-mail: demirkhanyan\_hasmik@yahoo.com

(Поступила в редакцию 29 сентября 2014 г.)

Проведено теоретическое исследование спектроскопических свойств кристалла  $\text{LiNbO}_3:\text{Ho}^{3+}$  в области длин волн 1500–1800 нм с учетом штарковской структуры оптического спектра примесного иона. Определены волновые функции штарковских подуровней основного  $^5I_8$  и первого возбужденного  $^5I_7$  мультиплетов иона  $\text{Ho}^{3+}$ , вычислены силы линий, индуцированных косвенными электродипольными и магнито-дипольными межштарковскими переходами, и на их основе рассчитаны основные спектроскопические характеристики.

### 1. Введение

Кристаллы ниобата лития, легированные трехвалентными ионами редких земель (НЛ:РЗ<sup>3+</sup>), по сей день являются перспективным материалом для малогабаритных многофункциональных лазеров в инфракрасной и видимой областях спектра. Это прежде всего связано с нелинейно-, акусто- и электро-оптическими свойствами кристалла НЛ, позволяющими в одном элементе получить лазерное излучение с самоудвоением частоты [1–4]. Кроме того, кристаллы НЛ:РЗ<sup>3+</sup> (РЗ =  $\text{Yb}^{3+}$ ,  $\text{Nd}^{3+}$ ,  $\text{Er}^{3+}$ ,  $\text{Ho}^{3+}$ ,  $\text{Tm}^{3+}$ ) могут служить хорошим материалом для создания как оптических охлаждающих систем, так и лазеров с самоохлаждением [5,6].

Оптические спектры примесного поглощения и излучения кристалла НЛ: $\text{Ho}^{3+}$  исследованы в [7–10]. В частности, в [8] построена энергетическая схема штарковских уровней низколежащих мультиплетов ( $^5I_8$ ,  $^5I_7$ ,  $^5I_6$ ,  $^5I_5$ ), проведен стандартный анализ Джадда–Офельта спектров поглощения с основного мультиплета ( $^5I_8 \rightarrow ^5I_6$ ,  $^5I_5$ ,  $^5F_5$ , ...) и определены параметры интенсивности:  $\Omega_2 = 4.3 \times 10^{-20} \text{ см}^2$ ,  $\Omega_4 = 5.11 \times 10^{-20} \text{ см}^2$ ,  $\Omega_6 = 1.89 \times 10^{-20} \text{ см}^2$ . В то же время спектры поглощения и излучения кристалла НЛ: $\text{Ho}^{3+}$  в диапазоне длин волн 1500–1800 нм, индуцированные межштарковскими переходами с основного  $^5I_8$  и первого возбужденного  $^5I_7$  мультиплетов, недостаточно изучены. Между тем эти переходы могут быть перспективными для создания оптических охлаждающих систем на основе

кристалла НЛ:Но<sup>3+</sup> [11].

В настоящей работе проводится теоретическое исследование спектроскопических свойств кристалла НЛ:Но<sup>3+</sup> в диапазоне длин волн 1500–1800 нм с учетом штарковской структуры оптического спектра: определены волновые функции штарковских подуровней основного <sup>5</sup>I<sub>8</sub> и первого возбужденного <sup>5</sup>I<sub>7</sub> мультиплетов иона Но<sup>3+</sup>, вычислены основные спектроскопические характеристики (силы линий, вероятности переходов и т.п.).

## 2. Волновые функции штарковских уровней мультиплетов <sup>5</sup>I<sub>8</sub> и <sup>5</sup>I<sub>7</sub>

В кристаллическом поле (КП) 17-кратно и 14-кратно вырожденные мультиплетные состояния <sup>5</sup>I<sub>8</sub> и <sup>5</sup>I<sub>7</sub> свободного иона Но<sup>3+</sup> расщепляются соответственно на 11 и 10 штарковских состояний, волновые функции которых в приближении слабого КП (*LSJM* представление) строятся в виде линейной комбинации

$$|v\rangle = \sum_M a_{JM}^{(v)} |LSJM\rangle, \quad (1)$$

где  $L$  и  $S$  – угловой и спиновый моменты,  $M$  – проекция полного углового момента  $J$ ,  $a_{JM}^{(v)}$  – численные коэффициенты, значения которых в нулевом порядке теории возмущений определяются внутримultipлетной диагонализацией потенциала КП на основе базисных функций неприводимых представлений соответствующей точечной группы симметрии.

Известно, что в матрице НЛ конгруэнтного состава примесные PЗ<sup>3+</sup> ионы в основном замещают литиевые позиции с точечной симметрией C<sub>3v</sub> [12]. В рамках приближения точечных зарядов потенциал КП, инвариантный относительно преобразований группы C<sub>3v</sub>, в представлении эквивалентных операторов Стивенса имеет вид [13]:

$$V_{\text{cr}} = \alpha_J A_{20} O_2^0 + \beta_J A_{40} O_4^0 + \gamma_J A_{60} O_6^0 + \beta_J A_{43} O_4^3 + \gamma_J A_{63} O_6^3 + \gamma_J A_{66} O_6^6, \quad (2)$$

где  $\alpha_J$ ,  $\beta_J$ ,  $\gamma_J$  – постоянные Стивенса, соответствующие полному угловому моменту  $J$ ,  $A_{kq}$  – параметры КП, численные значения которых определяются из условия наилучшего согласия расчетных и экспериментальных значений энергий штарковских подуровней рассматриваемого мультиплетета,  $O_k^q$  – эквивалентные операторы, матричные элементы которых приведены в [13].

Численные значения постоянных Стивенса для мультиплетов <sup>5</sup>I<sub>8</sub> и <sup>5</sup>I<sub>7</sub> приведены в [13,14]:  $\alpha_8 = -1/2 \times 3^2 \times 5^2$ ,  $\beta_8 = -1/2 \times 3 \times 5 \times 7 \times 11 \times 13$ ,  $\gamma_8 = -5/3^3 \times 7 \times 11^2 \times 13^2$ ,  $\alpha_7 = -1/2 \times 3 \times 5 \times 13$ ,  $\beta_7 = -1/2 \times 3^2 \times 11^2 \times 13$ ,  $\gamma_7 = -5/3^4 \times 7 \times 11^2 \times 13^2$ . Базисные функции неприводимых представлений точечной группы C<sub>3v</sub> для  $J = 8$  и  $J = 7$  имеют вид [15]:

$$D^{(8)} = 3\Gamma_1 + 2\Gamma_2 + 6\Gamma_3,$$

$$\begin{aligned}\Gamma_1: \psi_1 &= Y_{80}; \psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}Y_{86} + \frac{1}{\sqrt{2}}Y_{8-6}; \psi_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}Y_{83} - \frac{1}{\sqrt{2}}Y_{8-3}; \\ \Gamma_2: \psi_4 &= \frac{1}{\sqrt{2}}Y_{86} - \frac{1}{\sqrt{2}}Y_{8-6}; \psi_5 = -\frac{1}{\sqrt{2}}Y_{83} - \frac{1}{\sqrt{2}}Y_{8-3};\end{aligned}\quad (3)$$

$$\Gamma_3: \psi_6 = \pm Y_{8\pm 1}; \psi_7 = \pm Y_{8\mp 5}; \psi_8 = \pm Y_{8\pm 7}; \psi_9 = Y_{8\mp 2}; \psi_{10} = Y_{8\pm 4}; \psi_{11} = Y_{8\mp 8};$$

$$D^{(7)} = 2\Gamma_1 + 3\Gamma_2 + 5\Gamma_3,$$

$$\begin{aligned}\Gamma_1: \psi_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}}Y_{76} - \frac{1}{\sqrt{2}}Y_{7-6}; \psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}Y_{73} + \frac{1}{\sqrt{2}}Y_{7-3}; \\ \Gamma_2: \psi_3 &= Y_{70}; \psi_4 = -\frac{1}{\sqrt{2}}Y_{73} + \frac{1}{\sqrt{2}}Y_{7-3}; \psi_5 = \frac{1}{\sqrt{2}}Y_{76} + \frac{1}{\sqrt{2}}Y_{7-6}; \\ \Gamma_3: \psi_6 &= Y_{7\pm 1}; \psi_7 = Y_{7\mp 5}; \psi_8 = Y_{7\pm 7}; \psi_9 = \mp Y_{7\mp 2}; \psi_{10} = \mp Y_{7\pm 4};\end{aligned}\quad (4)$$

где  $Y_{kq}$  – сферические функции ( $Y_{k-q} = (-1)^q Y_{kq}$ ).

Параметры КП определены из условия наилучшего согласия рассчитанных и экспериментальных [8] значений энергии штарковских подуровней мультиплетов  ${}^5I_8$  и  ${}^5I_7$ :  $A_{2,0} = -206.56$ ,  $A_{4,0} = 92.79$ ,  $A_{6,0} = 260.52$ ,  $A_{4,3} = -2196.78$ ,  $A_{6,3} = -1048.59$ ,  $A_{6,6} = 1988.26$  (в  $\text{см}^{-1}$ ). Используя эти значения параметров КП для волновых функций штарковских состояний, получим для мультиплета  ${}^5I_8$  –

$$\begin{aligned}|v_1\rangle &= -0.13128|8, -6\rangle - 0.6948|8, -3\rangle - 0.6948|8, 3\rangle + 0.1312|8, 6\rangle, \\ |v_2\rangle &= \mp 0.2946|8, \mp 5\rangle \mp 0.0092|8, \pm 1\rangle + 0.1278|8, \pm 7\rangle - 0.5561|8, \mp 2\rangle \\ &\quad - 0.3936|8, \mp 8\rangle - 0.6578|8, \pm 4\rangle, \\ |v_3\rangle &= \pm 0.43488|8, \mp 5\rangle \pm 0.2982|8, \pm 1\rangle \pm 0.1343|8, \pm 7\rangle - 0.0939|8, \mp 2\rangle \\ &\quad + 0.6710|8, \mp 8\rangle - 0.4949|8, \pm 4\rangle, \\ |v_4\rangle &= -0.29877|8, -6\rangle - 0.5497|8, -3\rangle - 0.4660|8, 0\rangle + 0.5497|8, 3\rangle \\ &\quad - 0.2987|8, 6\rangle, \\ |v_5\rangle &= \mp 0.4044|8, \mp 5\rangle \mp 0.5932|8, \pm 1\rangle \mp 0.1112|8, \pm 7\rangle - 0.3460|8, \mp 2\rangle \\ &\quad + 0.5824|8, \mp 8\rangle + 0.1126|8, \pm 4\rangle, \\ |v_6\rangle &= \pm 0.2103|8, \mp 5\rangle \pm 0.3894|8, \pm 1\rangle \mp 0.1311|8, \pm 7\rangle - 0.7312|8, \mp 2\rangle \\ &\quad - 0.0151|8, \mp 8\rangle + 0.5021|8, \pm 4\rangle, \\ |v_7\rangle &= 0.1389|8, -6\rangle - 0.4104|8, -3\rangle + 0.7903|8, 0\rangle + 0.4104|8, 3\rangle \\ &\quad + 0.1389|8, 6\rangle,\end{aligned}\quad (5)$$

$$\begin{aligned}
|v_8\rangle &= \pm 0.7164|8, \mp 5\rangle \mp 0.6230|8, \pm 1\rangle \mp 0.1279|8, \pm 7\rangle - 0.1472|8, \mp 2\rangle \\
&\quad - 0.2354|8, \mp 8\rangle - 0.0717|8, \pm 4\rangle, \\
|v_9\rangle &= -0.6948|8, -6\rangle + 0.1312|8, -3\rangle + 0.1312|8, 3\rangle + 0.6948|8, 6\rangle, \\
|v_{10}\rangle &= -0.6257|8, -6\rangle + 0.1713|8, -3\rangle + 0.3979|8, 0\rangle - 0.1713|8, 3\rangle \\
&\quad - 0.6257|8, 6\rangle, \\
|v_{11}\rangle &= \pm 0.0558|8, \mp 5\rangle \mp 0.1392|8, \pm 1\rangle \pm 0.9590|8, \pm 7\rangle - 0.0726|8, \mp 2\rangle \\
&\quad - 0.0074|8, \mp 8\rangle + 0.2291|8, \pm 4\rangle;
\end{aligned}$$

для мультиплета  ${}^5I_7$  –

$$\begin{aligned}
|\mu_1\rangle &= -0.1544|7, -6\rangle - 0.3923|7, -3\rangle - 0.8028|7, 0\rangle \\
&\quad + 0.3923|7, 3\rangle - 0.1544|7, 6\rangle, \\
|\mu_2\rangle &= \mp 0.0523|7, \mp 2\rangle \pm 0.4682|7, \pm 4\rangle - 0.0922|7, \mp 5\rangle \\
&\quad - 0.8294|7, \pm 1\rangle - 0.2856|7, \pm 7\rangle, \\
|\mu_3\rangle &= 0.2208|7, -6\rangle + 0.6717|7, -3\rangle + 0.6717|7, 3\rangle - 0.2208|7, 6\rangle, \\
|\mu_4\rangle &= \pm 0.7209|7, \mp 2\rangle \pm 0.3522|7, \pm 4\rangle + 0.3822|7, \mp 5\rangle \\
&\quad + 0.2445|7, \pm 1\rangle - 0.3880|7, \pm 7\rangle, \\
|\mu_5\rangle &= \mp 0.4817|7, \mp 2\rangle \pm 0.1790|7, \pm 4\rangle - 0.2426|7, \mp 5\rangle \\
&\quad + 0.4050|7, \pm 1\rangle - 0.7163|7, \pm 7\rangle, \\
|\mu_6\rangle &= -0.2213|7, -6\rangle - 0.5229|7, -3\rangle + 0.5961|7, 0\rangle \\
&\quad + 0.5229|7, 3\rangle - 0.2213|7, 6\rangle, \\
|\mu_7\rangle &= \pm 0.1178|7, \mp 2\rangle \mp 0.7833|7, \pm 4\rangle + 0.1786|7, \mp 5\rangle \\
&\quad - 0.2963|7, \pm 1\rangle - 0.5030|7, \pm 7\rangle, \\
|\mu_8\rangle &= \pm 0.4814|7, \mp 2\rangle \mp 0.1058|7, \pm 4\rangle - 0.8687|7, \mp 5\rangle \\
&\quad + 0.0216|7, \pm 1\rangle - 0.0437|7, \pm 7\rangle, \\
|\mu_9\rangle &= -0.6717|7, -6\rangle + 0.2208|7, -3\rangle + 0.2208|7, 3\rangle + 0.6717|7, 6\rangle, \\
|\mu_{10}\rangle &= 0.6536|7, -6\rangle - 0.2697|7, -3\rangle + 0.0121|7, 0\rangle \\
&\quad + 0.2697|7, 3\rangle + 0.6536|7, 6\rangle.
\end{aligned} \tag{6}$$

Здесь нумерация штарковских состояний проведена с нижайшего подуровня соответствующего мультиплета. Видно, что вырождение мультиплетов снимается не полностью: шесть уровней мультиплета  ${}^5I_8$  и пять уровней мультиплета  ${}^5I_7$  остаются двукратно вырожденными.

### 3. Вычисление спектроскопических характеристик кристалла LN:Ho<sup>3+</sup> с учетом штарковской структуры спектра

При теоретическом исследовании спектроскопических свойств примесных кристаллов наиболее удобной величиной является сила линии (СЛ)  $S_{if}$  перехода  $i \rightarrow f$  [16]:

$$S_{if} = \left| \langle f | \hat{T} | i \rangle \right|^2, \quad (7)$$

где  $\hat{T}$  – оператор, индуцирующий переход  $i \rightarrow f$ . Зная СЛ, можно по известным формулам вычислить основные спектроскопические характеристики примесных кристаллов:

интегральный коэффициент поглощения на переходе  $i \rightarrow f$

$$\alpha_{if} = \frac{1}{N} \int k(\lambda) d\lambda = \frac{8\pi^3 e^2 \lambda_{if}}{3ch n^2} \times \frac{1}{g_i} S_{if}, \quad (8)$$

вероятность спонтанного перехода  $i \rightarrow f$

$$A_{if} = \frac{64\pi^4 e^2}{3h\lambda_{i \rightarrow f}^3} \times \frac{1}{g_i} S_{if}, \quad (9)$$

радиационное время жизни  $j$ -ого уровня

$$\tau_j = \left( \sum_m A_{j \rightarrow m} \exp\left(\frac{\varepsilon_j - \varepsilon_m}{kT}\right) \right)^{-1}, \quad (10)$$

коэффициент ветвления люминесценции

$$\beta(i \rightarrow f) = A_{i \rightarrow f} \exp\left(\frac{\varepsilon_i - \varepsilon_f}{kT}\right) / \sum_{j,m} A_{jm} \exp\left(\frac{\varepsilon_j - \varepsilon_m}{kT}\right). \quad (11)$$

В формулах (8)–(11) введены следующие обозначения:  $g_i$  – кратность вырождения начального состояния,  $e$  – заряд электрона,  $h$  – постоянная Планка,  $c$  – скорость света,  $n$  – коэффициент преломления на длине волны перехода,  $N$  – концентрация примесных ионов в кристалле,  $\varepsilon_j$  – энергия  $j$ -ого штарковского состояния начального мультиплета,  $k$  – постоянная Больцмана и  $T$  – температура.

Как известно, интенсивные линии в спектрах примесного поглощения и излучения кристаллов, легированных R<sup>3+</sup> ионами, обусловлены косвенными электро-дипольными (КЭД) и магнито-дипольными (МД) переходами [16]. Поэтому с учетом поправок локального поля ( $\chi$ ) СЛ неполяризованного излучения, индуцированного переходом  $i \rightarrow f$ , можно записать в виде [17,18]

$$S_{if} = \chi^{(ed)} \sum_{t=2,4,6} \Omega_t A_t^{(ied)}(i \rightarrow f) \left| \langle J_f || U_i || J_i \rangle \right|^2 + \chi^{(md)} A^{(md)}(i \rightarrow f) S^{(md)}, \quad (12)$$

где первое слагаемое определяет вклад КЭД, а второе – МД переходов. Для оптически изотропных сред  $\chi^{(ed)} = n(n^2 + 2)^2 / 9$  и  $\chi^{(md)} = n^3$ ,  $\Omega_t$  – параметры

Джадда–Офельта,  $\langle J_f || U_t || J_i \rangle$  – приведенный матричный элемент неприводимого единичного тензорного оператора  $U_t$  ранга  $t$ , явное выражение которого приведено в [19]. Используя значения генеалогических коэффициентов для иона  $\text{Ho}^{3+}$  (электронная конфигурация  $4f^{10}$ ) [11], для приведенных матричных элементов перехода  ${}^5I_7 \rightarrow {}^5I_8$  получим:  $\langle {}^5I_7 || U_2 || {}^5I_8 \rangle = -0.1477$ ,  $\langle {}^5I_7 || U_4 || {}^5I_8 \rangle = 0.3338$ ,  $\langle {}^5I_7 || U_6 || {}^5I_8 \rangle = -1.2852$ . Выражение для СЛ межмультиплетного МД перехода  $S^{(md)}$  приведено в [16]. Для МД перехода  ${}^5I_7 \rightarrow {}^5I_8$  имеем:  $S^{(md)} = 51\mu^2 / e^2$  ( $\mu$  – магнетон Бора).

Коэффициенты  $A_t^{(ied)}$  и  $A^{(md)}$  определяются выражениями [17,18]:

$$A_t^{(ied)}(i \rightarrow f) = \sum_{m=-t}^t \left| \sum_{M_i, M_f} (-1)^{J_f - M_f} a_{J_f M_f}^{*(f)} a_{J_i M_i}^{*(i)} \begin{pmatrix} J_f & t & J_i \\ -M_f & m & M_i \end{pmatrix} \right|^2, \quad (13)$$

$$A^{(md)}(i \rightarrow f) = \sum_{m=-1}^1 \left| \sum_{M_i, M_f} (-1)^{J_f - M_f} a_{J_f M_f}^{*(f)} a_{J_i M_i}^{*(i)} \begin{pmatrix} J_f & 1 & J_i \\ -M_f & m & M_i \end{pmatrix} \right|^2, \quad (14)$$

где  $\begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}$  –  $3j$  символы.

Результаты расчетов СЛ межштарковских МД и КЭД переходов в полосе люминесценции 1880–2130 нм кристалла НЛ:Ho<sup>3+</sup> приведены в табл.1 и 2. В табл.3 и 4 приведены расчетные значения основных спектроскопических характеристик примесного излучения и поглощения, соответственно. Примечательно, что наибольшие значения коэффициентов ветвления люминесценции приходятся на долю переходов с возбужденных штарковских состояний (табл.3):  $\mu_8 \rightarrow \nu_2$  (1.0%),  $\mu_8 \rightarrow \nu_3$  (1.5%),  $\mu_8 \rightarrow \nu_5$  (1.0%),  $\mu_8 \rightarrow \nu_8$  (0.9%),  $\mu_9 \rightarrow \nu_3$  (1.5%),  $\mu_9 \rightarrow \nu_5$  (0.6%),  $\mu_9 \rightarrow \nu_1$  (1.5%) и т.д. Это обстоятельство может играть существенную роль при исследовании возможностей кристалла НЛ:Ho<sup>3+</sup> в качестве материала для систем оптического охлаждения и лазеров с самоохлаждением.

Что касается процессов поглощения, то, как и следовало ожидать, наиболее интенсивно они протекают с первых трех штарковских подуровней ( $\nu_1, \nu_2, \nu_3$ ) основного мультиплета. Так наличие интенсивного поглощения  $\nu_1 \rightarrow \mu_{10}$  (1.5%) и  $\nu_2 \rightarrow \mu_{10}$  (3.2%) позволяет предположить возможность генерации лазерного излучения по следующей квази-четырёхуровневой схеме  $\nu_1, \nu_2 \rightarrow$

$\mu_{10} \xrightarrow{21 \text{ см}^{-1}} \mu_9 \xrightarrow{1905 \text{ нм}} \nu_3$  или  $\nu_1, \nu_2 \rightarrow \mu_{10} \xrightarrow{21 \text{ см}^{-1}} \mu_9 \xrightarrow{2054 \text{ нм}} \nu_{11}$ . Возможны процессы генера-

ции по следующим схемам:  $\nu_3 \xrightarrow{-42 \text{ см}^{-1}} \mu_{10} \xrightarrow{21 \text{ см}^{-1}} \mu_9 \xrightarrow{1893 \text{ нм}} \nu_2 \xrightarrow{8 \text{ см}^{-1}} \nu_1$  и  $\nu_3 \xrightarrow{-42 \text{ см}^{-1}}$

$\mu_{10} \xrightarrow{21 \text{ см}^{-1}} \mu_9 \xrightarrow{1890 \text{ нм}} \nu_1$ , сопровождающимся охлаждением кристалла. На рис.1 и 2 приведены температурные зависимости коэффициентов ветвления люминесценции и поглощения актуальных переходов.

Очевидно, что для выявления лазерных (в том числе с самоохлаждением) возможностей кристалла НЛ:Но<sup>3+</sup> необходимы более детальные экспериментальные и теоретические исследования спектроскопических и кинетических характеристик (ширин и сдвигов спектральных линий, факторов Дебая–Валлера, вероятностей безызлучательных переходов и т. д.) этого материала, их температурных и концентрационных зависимостей.

Табл.1. Силы линий межштарковских МД переходов в полосе  ${}^5I_7 \rightarrow {}^5I_8$ .

Мультиплет	Штарковские подуровни	${}^5I_7, 10^{-22} \text{ см}^2$									
		$\mu_1$ $g_1 = 1$	$\mu_2$ $g_2 = 2$	$\mu_3$ $g_3 = 1$	$\mu_4$ $g_4 = 2$	$\mu_5$ $g_5 = 2$	$\mu_6$ $g_6 = 1$	$\mu_7$ $g_7 = 2$	$\mu_8$ $g_8 = 2$	$\mu_9$ $g_9 = 1$	$\mu_{10}$ $g_{10} = 1$
${}^5I_8$	$v_1$	0	0.2162	2.4339	1.1724	0.2460	0.0044	0.0317	0.0628	0.0840	0
	$v_2$	0.1649	0.1869	2.7544	1.5278	0.3526	0.2845	0.3347	0.0544	0.0174	0.0107
	$v_3$	0.9533	0.8358	0.8850	1.5746	1.2913	0.0684	0.2458	0.2792	0.0282	0.0170
	$v_4$	2.0778	0.0209	0	0.7092	0.2216	0.1940	0.1006	0.0035	0	0.0004
	$v_5$	1.5108	0.6665	0.0033	0.6110	1.8281	0.0832	1.1422	0.0466	0.0142	0.0378
	$v_6$	0.0905	2.0712	0.1374	0.4078	1.1310	2.3474	1.0978	0.9664	0.0707	0.1461
	$v_7$	0.3956	0.7726	0	0.0032	0.4111	2.2501	0.2789	0.3303	0	0.3343
	$v_8$	0.8422	1.4326	0.0041	0.0169	0.2888	0.4948	2.5420	1.1596	0.3610	0.0008
	$v_9$	0	0.0144	0.0046	0.1780	0.0239	0.1233	0.1416	1.7800	1.3425	0
	$v_{10}$	0.2979	0.2163	0	0.0297	0.1938	0.0151	0.0299	1.6208	0	1.1524
	$v_{11}$	$\approx 0$	0.0938	0.1100	0.1023	0.3450	0.4679	0.3879	0.0030	4.4150	4.6336

Табл.2. Силы линий межштарковских ЭДП переходов в полосе  ${}^5I_7 \rightarrow {}^5I_8$ .

Мультиплет	Штарковские подуровни	${}^5I_7, 10^{-22} \text{ см}^2$									
		$\mu_1$ $g_1 = 1$	$\mu_2$ $g_2 = 2$	$\mu_3$ $g_3 = 1$	$\mu_4$ $g_4 = 2$	$\mu_5$ $g_5 = 2$	$\mu_6$ $g_6 = 1$	$\mu_7$ $g_7 = 2$	$\mu_8$ $g_8 = 2$	$\mu_9$ $g_9 = 1$	$\mu_{10}$ $g_{10} = 1$
${}^5I_8$	$v_1$	0.7712	1.7243	1.8820	1.1826	1.8009	2.4379	1.2586	0.5051	1.9984	2.2311
	$v_2$	4.3255	0.8987	1.6621	2.8583	3.2858	3.2699	3.5104	3.6585	1.7534	5.0923
	$v_3$	1.7077	2.2907	2.4301	2.0214	2.5611	2.0002	2.9173	5.4091	6.4378	1.5520
	$v_4$	0.1855	2.2373	1.5096	0.9379	0.3844	1.9702	1.9914	1.4930	2.2582	2.2519
	$v_5$	1.6050	1.8674	3.8998	2.9543	2.3483	2.1026	3.9333	4.1962	2.7665	3.5546
	$v_6$	4.1050	3.4157	3.2064	3.8808	1.9553	4.0833	2.7515	1.9853	2.2187	2.9363
	$v_7$	1.6308	2.8319	2.7126	0.9322	0.7776	1.6940	1.6020	1.5173	0.4968	0.4072
	$v_8$	3.4873	3.8133	1.1687	4.0937	3.8085	2.6505	2.5968	2.6777	1.4754	1.7652
	$v_9$	3.0380	1.9554	0.9766	1.7097	1.5478	1.5284	1.7781	0.5185	0.0744	1.6270
	$v_{10}$	2.1583	2.1167	2.1964	0.5536	2.8340	0.7299	1.0799	1.0220	1.7473	0.2189
	$v_{11}$	2.2176	2.0805	3.5876	4.1075	3.8292	2.7650	1.8126	2.2491	4.0051	3.5953

Табл.3. Основные параметры спектра излучения кристалла LN:Ho<sup>3+</sup> в области 1880–2130 нм с учетом штарковской структуры спектра.

$i \rightarrow f$	$\lambda$ , нм	$A$ , с <sup>-1</sup>	$\tau_{\text{rad}}$ , мс $T = 300\text{K}$	$\beta$ , % $T = 300\text{K}$	$i \rightarrow f$	$\lambda$ , нм	$A$ , с <sup>-1</sup>	$\tau_{\text{rad}}$ , мс $T = 300\text{K}$	$\beta$ , % $T = 300\text{K}$
$\mu_1 \rightarrow v_1$	1957.1	9.0925	3.1	0.4	$\mu_4 \rightarrow v_1$	1937	27.4554	3.8	0.9
$\rightarrow v_2$	1960	52.5468		2.3	$\rightarrow v_2$	1940	51.5567		1.7
$\rightarrow v_3$	1974	29.6652		1.3	$\rightarrow v_3$	1953	41.1138		1.4
$\rightarrow v_4$	1984	23.6616		1.0	$\rightarrow v_4$	1963	18.5569		0.6
$\rightarrow v_5$	2035	31.3609		1.4	$\rightarrow v_5$	2013	38.08		1.3
$\rightarrow v_6$	2053	42.7754		1.9	$\rightarrow v_6$	2030	44.9512		1.5
$\rightarrow v_7$	2067	19.9509		0.9	$\rightarrow v_7$	2044	9.67802		0.3
$\rightarrow v_8$	2081	41.774		1.8	$\rightarrow v_8$	2058	41.6655		1.4
$\rightarrow v_9$	2098	29.0755		1.3	$\rightarrow v_9$	2075	18.5277		0.6
$\rightarrow v_{10}$	2118	22.6176		1.0	$\rightarrow v_{10}$	2094	5.59085		0.2
$\rightarrow v_{11}$	2134	20.1677		0.9	$\rightarrow v_{11}$	2110	39.5269		1.3
$\mu_2 \rightarrow v_1$	1948	22.9862	3.4	0.9	$\mu_5 \rightarrow v_1$	1933	24.7971	4.1	0.8
$\rightarrow v_2$	1951	12.7351		0.5	$\rightarrow v_2$	1936	43.9584		1.4
$\rightarrow v_3$	1964	35.665		1.4	$\rightarrow v_3$	1949	44.709		1.4
$\rightarrow v_4$	1974	25.9264		1.0	$\rightarrow v_4$	1959	6.90775		0.2
$\rightarrow v_5$	2025	26.3804		1.0	$\rightarrow v_5$	2008	43.933		1.4
$\rightarrow v_6$	2042	55.1681		2.1	$\rightarrow v_6$	2026	31.8022		1.0
$\rightarrow v_7$	2056	36.0026		1.4	$\rightarrow v_7$	2039	12.0372		0.4
$\rightarrow v_8$	2070	51.0864		2.0	$\rightarrow v_8$	2053	41.6042		1.3
$\rightarrow v_9$	2087	19.1402		0.7	$\rightarrow v_9$	2070	15.641		0.5
$\rightarrow v_{10}$	2107	21.8736		0.8	$\rightarrow v_{10}$	2089	29.198		0.9
$\rightarrow v_{11}$	2122	20.0392		0.8	$\rightarrow v_{11}$	2104	39.337		1.3
$\mu_3 \rightarrow v_1$	1944	49.4897	3.5	1.8	$\mu_6 \rightarrow v_1$	1929	30.0672	4.2	0.9
$\rightarrow v_2$	1947	50.1473		1.8	$\rightarrow v_2$	1932	43.2718		1.3
$\rightarrow v_3$	1960	38.0496		1.4	$\rightarrow v_3$	1944	24.817		0.8
$\rightarrow v_4$	1970	17.4509		0.6	$\rightarrow v_4$	1955	25.4079		0.8
$\rightarrow v_5$	2020	41.8486		1.5	$\rightarrow v_5$	2004	23.9275		0.7
$\rightarrow v_6$	2037	34.8448		1.3	$\rightarrow v_6$	2021	66.7652		2.0
$\rightarrow v_7$	2051	27.7872		1.0	$\rightarrow v_7$	2035	39.4038		1.2
$\rightarrow v_8$	2065	11.7677		0.4	$\rightarrow v_8$	2048	31.9388		1.0
$\rightarrow v_9$	2082	9.60509		0.4	$\rightarrow v_9$	2065	16.475		0.5
$\rightarrow v_{10}$	2102	20.9011		0.8	$\rightarrow v_{10}$	2084	7.26252		0.2
$\rightarrow v_{11}$	2117	34.3589		1.3	$\rightarrow v_{11}$	2100	30.4818		0.9

Табл.3 (продолжение).

$i \rightarrow f$	$\lambda$ , нм	$A$ , $\text{с}^{-1}$	$\tau_{\text{рад, MC}}$ $T = 300\text{K}$	$\beta$ , % $T = 300\text{K}$	$i \rightarrow f$	$\lambda$ , нм	$A$ , $\text{с}^{-1}$	$\tau_{\text{рад, MC}}$ $T = 300\text{K}$	$\beta$ , % $T = 300\text{K}$
$\mu_7 \rightarrow \nu_1$	1911	16.3071	5.1	0.4	$\mu_9 \rightarrow \nu_1$	1890	27.1692	2.8	0.5
$\rightarrow \nu_2$	1914	48.1158		1.4	$\rightarrow \nu_2$	1893	23.0525		0.4
$\rightarrow \nu_3$	1927	38.8161		0.9	$\rightarrow \nu_3$	1905	82.6321		1.5
$\rightarrow \nu_4$	1937	25.3391		0.6	$\rightarrow \nu_4$	1915	28.4192		0.5
$\rightarrow \nu_5$	1985	56.2811		1.4	$\rightarrow \nu_5$	1962	32.5258		0.6
$\rightarrow \nu_6$	2002	41.3941		1.0	$\rightarrow \nu_6$	1979	26.039		0.5
$\rightarrow \nu_7$	2015	20.0686		0.5	$\rightarrow \nu_7$	1992	5.55481		0.1
$\rightarrow \nu_8$	2029	52.1386		1.3	$\rightarrow \nu_8$	2005	19.8077		0.4
$\rightarrow \nu_9$	2045	19.717		0.5	$\rightarrow \nu_9$	2021	13.9771		0.3
$\rightarrow \nu_{10}$	2064	11.1301		0.3	$\rightarrow \nu_{10}$	2039	18.2168		0.3
$\rightarrow \nu_{11}$	2079	21.3261		0.5	$\rightarrow \nu_{11}$	2054	82.1378		1.5
$\mu_8 \rightarrow \nu_1$	1902	7.22754	2.8	0.2	$\mu_{10} \rightarrow \nu_1$	1883	29.5341	7.3	0.5
$\rightarrow \nu_2$	1904	47.4831		1.0	$\rightarrow \nu_2$	1885	67.3242		1.1
$\rightarrow \nu_3$	1917	71.072		1.5	$\rightarrow \nu_3$	1898	20.2628		0.3
$\rightarrow \nu_4$	1927	18.48		0.4	$\rightarrow \nu_4$	1907	28.7027		0.5
$\rightarrow \nu_5$	1975	48.6307		1.0	$\rightarrow \nu_5$	1954	42.5194		0.7
$\rightarrow \nu_6$	1991	32.1548		0.7	$\rightarrow \nu_6$	1970	35.4922		0.6
$\rightarrow \nu_7$	2004	19.9883		0.4	$\rightarrow \nu_7$	1983	8.08969		0.1
$\rightarrow \nu_8$	2018	40.2331		0.9	$\rightarrow \nu_8$	1996	19.6267		0.3
$\rightarrow \nu_9$	2034	22.5886		0.5	$\rightarrow \nu_9$	2012	17.6546		0.3
$\rightarrow \nu_{10}$	2053	25.6188		0.5	$\rightarrow \nu_{10}$	2030	13.477		0.2
$\rightarrow \nu_{11}$	2067	22.5358		0.5	$\rightarrow \nu_{11}$	2045	81.0636		1.3

Табл.4. Основные параметры спектра поглощения кристалла  $\text{LN}:\text{Ho}^{3+}$  в области 1880–2130 нм с учетом штарковской структуры спектра.

$i \rightarrow f$	$\lambda_{i \rightarrow f}$ , нм	$S_{i \rightarrow f}$ , $10^{-21} \text{ см}^2$	$\alpha_{i \rightarrow f}$ , $10^{-26}$ $T = 300\text{K}$	$\beta$ , % $T = 300\text{K}$	$i \rightarrow f$	$\lambda_{i \rightarrow f}$ , нм	$S_{i \rightarrow f}$ , $10^{-21} \text{ см}^2$	$\alpha_{i \rightarrow f}$ , $10^{-26}$ $T = 300\text{K}$	$\beta$ , % $T = 300\text{K}$
$\nu_1 \rightarrow \mu_1$	1957.1	0.94526	0.3526	0.5	$\nu_4 \rightarrow \mu_1$	1984	2.56269	0.9691	1.0
$\rightarrow \mu_2$	1948	2.35646	0.8749	1.3	$\rightarrow \mu_2$	1974	2.76574	1.0406	1.1
$\rightarrow \mu_3$	1944	5.04232	1.8683	2.8	$\rightarrow \mu_3$	1970	1.85031	0.6947	0.7
$\rightarrow \mu_4$	1937	2.76722	1.0216	1.5	$\rightarrow \mu_4$	1963	1.94668	0.7283	0.8
$\rightarrow \mu_5$	1933	2.48385	0.9151	1.4	$\rightarrow \mu_5$	1959	0.72022	0.2689	0.3
$\rightarrow \mu_6$	1929	2.99307	1.1004	1.6	$\rightarrow \mu_6$	1955	2.63291	0.9811	1.0
$\rightarrow \mu_7$	1911	1.57829	0.5749	0.9	$\rightarrow \mu_7$	1937	2.55392	0.9429	1.0
$\rightarrow \mu_8$	1902	0.68968	0.2500	0.4	$\rightarrow \mu_8$	1927	1.8339	0.6736	0.7
$\rightarrow \mu_9$	1890	2.54384	0.9164	1.4	$\rightarrow \mu_9$	1915	2.76787	1.0103	1.1
$\rightarrow \mu_{10}$	1883	2.73465	0.9814	1.5	$\rightarrow \mu_{10}$	1907	2.76059	1.0034	1.1
$\nu_2 \rightarrow \mu_1$	1960	5.48709	2.0498	2.9	$\nu_5 \rightarrow \mu_1$	2035	3.66529	1.4216	0.8
$\rightarrow \mu_2$	1951	1.3116	0.4877	0.7	$\rightarrow \mu_2$	2025	3.03797	1.1725	0.7

Табл.4 (продолжение).

$i \rightarrow f$	$\lambda_{i \rightarrow f}$ , нм	$S_{i \rightarrow f}$ , $10^{-21}$ см <sup>2</sup>	$\alpha_{i \rightarrow f} \cdot 10^{-26}$ $T = 300\text{K}$	$\beta$ , % $T = 300\text{K}$	$i \rightarrow f$	$\lambda_{i \rightarrow f}$ , нм	$S_{i \rightarrow f}$ , $10^{-21}$ см <sup>2</sup>	$\alpha_{i \rightarrow f} \cdot 10^{-26}$ $T = 300\text{K}$	$\beta$ , % $T = 300\text{K}$
$\rightarrow\mu_3$	1947	5.13302	1.9048	2.7	$\rightarrow\mu_3$	2020	4.78368	1.8417	1.1
$\rightarrow\mu_4$	1940	5.22057	1.9303	2.8	$\rightarrow\mu_4$	2013	4.3078	1.6528	1.0
$\rightarrow\mu_5$	1936	4.42369	1.6323	2.3	$\rightarrow\mu_5$	2008	4.93298	1.8879	1.1
$\rightarrow\mu_6$	1932	4.32766	1.5936	2.3	$\rightarrow\mu_6$	2004	2.67066	1.0201	0.6
$\rightarrow\mu_7$	1914	4.67887	1.7069	2.4	$\rightarrow\mu_7$	1985	6.1048	2.3097	1.3
$\rightarrow\mu_8$	1904	4.54535	1.6495	2.4	$\rightarrow\mu_8$	1975	5.19564	1.9558	1.1
$\rightarrow\mu_9$	1893	2.16869	0.7825	1.1	$\rightarrow\mu_9$	1962	3.40685	1.2740	0.7
$\rightarrow\mu_{10}$	1885	6.25364	2.2468	3.2	$\rightarrow\mu_{10}$	1954	4.39934	1.6384	0.9
$\nu_3 \rightarrow \mu_1$	1974	3.16458	1.1906	1.4	$\nu_6 \rightarrow \mu_1$	2053	5.1332	2.0086	1.0
$\rightarrow\mu_2$	1964	3.74709	1.4027	1.7	$\rightarrow\mu_2$	2042	6.51452	2.5354	1.2
$\rightarrow\mu_3$	1960	3.97325	1.4843	1.8	$\rightarrow\mu_3$	2037	4.0845	1.5858	0.8
$\rightarrow\mu_4$	1953	4.24738	1.5810	1.9	$\rightarrow\mu_4$	2030	5.21502	2.0177	1.0
$\rightarrow\mu_5$	1949	4.59048	1.7052	2.1	$\rightarrow\mu_5$	2026	3.66778	1.4163	0.7
$\rightarrow\mu_6$	1944	2.52851	0.9369	1.1	$\rightarrow\mu_6$	2021	7.64323	2.9441	1.4
$\rightarrow\mu_7$	1927	3.85199	1.4148	1.7	$\rightarrow\mu_7$	2002	4.60637	1.7577	0.8
$\rightarrow\mu_8$	1917	6.94372	2.5371	3.1	$\rightarrow\mu_8$	1991	3.51955	1.3356	0.6
$\rightarrow\mu_9$	1905	7.92248	2.8766	3.5	$\rightarrow\mu_9$	1979	2.79891	1.0557	0.5
$\rightarrow\mu_{10}$	1898	1.92139	0.6951	0.8	$\rightarrow\mu_{10}$	1970	3.76322	1.413	0.7
$\nu_7 \rightarrow \mu_1$	2067	2.4435	0.9626	0.4	$\nu_7 \rightarrow \mu_6$	2035	4.60531	1.7862	0.7
$\rightarrow\mu_2$	2056	4.33941	1.7005	0.7	$\rightarrow\mu_7$	2015	2.27703	0.8745	0.4
$\rightarrow\mu_3$	2051	3.32482	1.2997	0.5	$\rightarrow\mu_8$	2004	2.23099	0.8521	0.3
$\rightarrow\mu_4$	2044	1.14619	0.4465	0.2	$\rightarrow\mu_9$	1992	0.60893	0.2312	0.1
$\rightarrow\mu_5$	2039	1.41515	0.5499	0.2	$\rightarrow\mu_{10}$	1983	0.87484	0.3306	0.1
$\nu_8 \rightarrow \mu_1$	2081	5.22095	2.0708	0.7	$\nu_{10} \rightarrow \mu_1$	2118	2.98024	1.2031	0.3
$\rightarrow\mu_2$	2070	6.28411	2.4793	0.9	$\rightarrow\mu_2$	2107	2.83754	1.1395	0.3
$\rightarrow\mu_3$	2065	1.43708	0.5656	0.2	$\rightarrow\mu_3$	2102	2.69212	1.0786	0.3
$\rightarrow\mu_4$	2058	5.03663	1.9756	0.7	$\rightarrow\mu_4$	2094	0.71193	0.2841	0.1
$\rightarrow\mu_5$	2053	4.99266	1.9536	0.7	$\rightarrow\mu_5$	2089	3.69144	1.4698	0.3
$\rightarrow\mu_6$	2048	3.80483	1.4852	0.5	$\rightarrow\mu_6$	2084	0.91161	0.3621	0.1
$\rightarrow\mu_7$	2029	6.03995	2.3358	0.8	$\rightarrow\mu_7$	2064	1.35723	0.5339	0.1
$\rightarrow\mu_8$	2018	4.58537	1.7636	0.6	$\rightarrow\mu_8$	2053	3.07435	1.2030	0.3
$\rightarrow\mu_9$	2005	2.21413	0.8461	0.3	$\rightarrow\mu_9$	2039	2.14166	0.8323	0.2
$\rightarrow\mu_{10}$	1996	2.1645	0.8234	0.3	$\rightarrow\mu_{10}$	2030	1.56354	0.6049	0.1
$\nu_9 \rightarrow \mu_1$	2098	3.72366	1.4890	0.4	$\nu_{11} \rightarrow \mu_1$	2134	2.7181	1.1055	0.2
$\rightarrow\mu_2$	2087	2.41291	0.9598	0.3	$\rightarrow\mu_2$	2122	2.65549	1.074	0.2
$\rightarrow\mu_3$	2082	1.20218	0.4771	0.1	$\rightarrow\mu_3$	2117	4.52094	1.8242	0.4
$\rightarrow\mu_4$	2075	2.29563	0.9079	0.3	$\rightarrow\mu_4$	2110	5.14953	2.0709	0.4
$\rightarrow\mu_5$	2070	1.92399	0.7591	0.2	$\rightarrow\mu_5$	2104	5.08119	2.0376	0.4
$\rightarrow\mu_6$	2065	2.01194	0.7919	0.2	$\rightarrow\mu_6$	2100	3.91494	1.5669	0.3
$\rightarrow\mu_7$	2045	2.33856	0.9115	0.3	$\rightarrow\mu_7$	2079	2.65767	1.0531	0.2
$\rightarrow\mu_8$	2034	2.63614	1.0220	0.3	$\rightarrow\mu_8$	2067	2.76008	1.0874	0.2
$\rightarrow\mu_9$	2021	1.60008	0.6164	0.2	$\rightarrow\mu_9$	2054	9.87124	3.8645	0.8
$\rightarrow\mu_{10}$	2012	1.99421	0.7647	0.2	$\rightarrow\mu_{10}$	2045	9.61464	3.7475	0.7

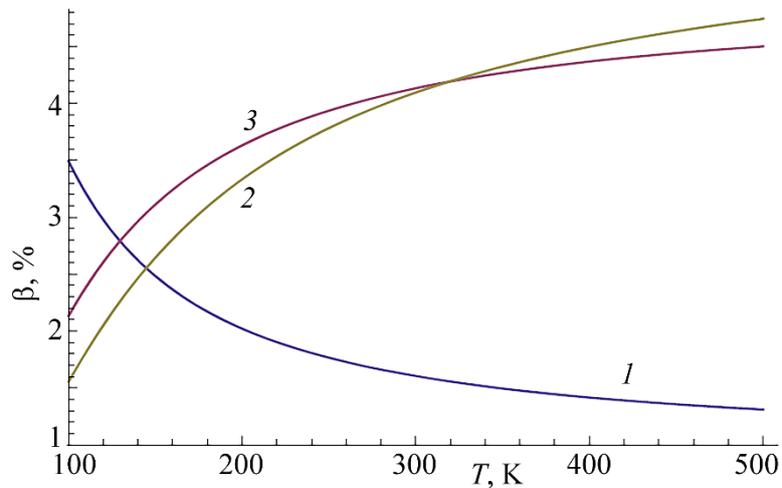


Рис.1. Температурная зависимость коэффициентов ветвления люминесценции переходов: (1) –  $\mu_1 \rightarrow \nu_2$  (1960 нм), (2) –  $\mu_9 \rightarrow \nu_3$  (1905 нм), (3) –  $\mu_8 \rightarrow \nu_3$  (1917 нм).

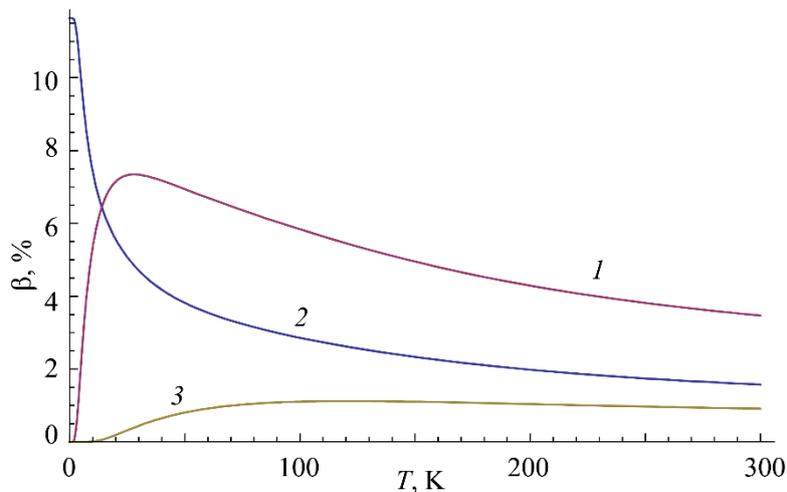


Рис.2. Температурная зависимость коэффициента ветвления поглощения переходов: (1) –  $\nu_2 \rightarrow \mu_{10}$  (1885 нм), (2) –  $\nu_1 \rightarrow \mu_{10}$  (1883 нм), (3) –  $\nu_3 \rightarrow \mu_{10}$  (1898 нм).

#### 4. Заключение

Проведенные нами теоретические исследования спектроскопических свойств кристалла НЛ:Но<sup>3+</sup> являются основой для дальнейших детальных теоретических и экспериментальных исследований с целью выявления лазерных (в том числе с самоохлаждением) возможностей этого материала на длинах волн в диапазоне 1880–2130 нм, а также его применения в системах оптического охлаждения.

## ЛИТЕРАТУРА

1. **L.F. Johnson, A.A. Ballman.** J. Appl. Phys., **40**, 297 (1969).
2. **A. Cordova-Plaza, M. Digonnet, H.J. Shaw.** IEEE J. Quantum Electron., **23**, 262 (1987).
3. **E. Lallier, J.P. Pocholle, M. Papuchon, M. de Micheli, et al.** Opt. Lett., **15**, 682 (1990).
4. **W. Jinhao, Z. Yueping, X. Haiping, et al.** Bulletin of Materials Science, **32**, 183 (2009).
5. **X.L. Ruan, M. Kaviany.** Phys. Rev. B, **73**, 155422 (2008).
6. **A.J. Garcia-Adeva, R. Balda, J. Fernandez.** Phys. Rev. B, **79**, 033110 (2009).
7. **A. Lorenzo, J.A. Sanz Garcia, J. Garcia Solé.** J. Phys.: Condens. Matter, **6**, 1065 (1994).
8. **A. Lorenzo, L. Bausa', J.A. Sanz Garcia, J. Garcia Solé.** J. Phys.: Condens. Matter, **8**, 5781 (1996).
9. **Ai-Hua, Zhi-Ren Zheng, Qiang Lü, et al.** J. Appl. Phys., **104**, 063526 (2008).
10. **R. Wang, Q. Guo, Y.N. Qian, et al.** Chinese J. Struct. Chem., **30**, 1597 (2011).
11. **Г.Г. Демирханян, Э.П. Коканян, Дж. Грубер, Д. Сардар, М. Похрел.** Труды конференции посвященной 90-летию АрмГПУ, Ереван, Элит Принт, 2014, с. 384.
12. **Ю.С. Кузьминов.** Ниобат и танталат лития. Материалы для нелинейной оптики. Москва, Наука, 1975.
13. **А. Абрагам, Б. Блини.** Электронный парамагнитный резонанс переходных ионов. Москва, Мир, 1972.
14. **A. Badalyan, A. Mkrtchyan, H. Demirkhanyan.** Scientific News of ASPU (to be published).
15. **А.М. Леушин.** Таблицы функций, преобразующихся по неприводимым представлениям кристаллографических точечных групп. Москва, Наука, 1968.
16. **Д.Т. Свиридов, Ю.Ф. Смирнов.** Теория оптических спектров ионов переходных металлов. Москва, Наука, 1977.
17. **G.G. Demirkhanyan, R.B. Kostanyan.** Inter. Conf. on Laser Physics 2010, Proc. of SPIE, **7998**, 799805 (2011).
18. **G.G. Demirkhanyan, V.G. Babajanyan, E.P. Kokanyan, et al.** Opt. Materials, **29**, 1107 (2007).
19. **А.П. Юцис, А.Ю. Санукина.** Математические основы теории атома. Вильнюс, Минтис, 1973.

### STUDY OF SPECTROSCOPIC PROPERTIES OF $\text{LiNbO}_3:\text{Ho}^{3+}$ CRYSTAL IN 1880–2130 nm LUMINESCENCE BAND

G.G. DEMIRKHANYAN, E.P. KOKANYAN, H.G. DEMIRKHANYAN

Theoretical study of spectroscopic properties of  $\text{LiNbO}_3:\text{Ho}^{3+}$  crystal in the wavelength range of 1500–1800 nm was carried out taking into account the Stark structure of optical spectrum of the impurity ion. Wave functions of the Stark sublevels of the ground ( $^5I_8$ ) and first excited ( $^5I_7$ ) multiplets of the  $\text{Ho}^{3+}$  ion were defined, line strengths induced by indirect electric-dipole and magnetic-dipole inter-Stark transitions were calculated, and on their basis the main spectroscopic characteristics were determined.

УДК 539.3

## ВЛИЯНИЕ ВЛАЖНОСТИ НА ЗАПРЕЩЕННУЮ ЗОНУ ГРАФЕНА

А.А. ЗАКАРЯН\*, В.М. АРУТЮНЯН

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

\*e-mail: zhayk91@gmail.com

(Поступила в редакцию 21 ноября 2014 г.)

Исследовано влияние влажности на свойства графена и проведено сравнение графеновых и полимерных датчиков влажности. Показано, что графеновые датчики имеют более высокий отклик по сравнению с полимерными мембранами. Сопротивление последних составляет 150 ГОм и понижается в 7.5 раз при 60% относительной влажности. Сопротивление графена от 100 кОм уменьшается в 4 раза. Показано, что это связано с расширением запрещенной зоны графена. Причиной является адсорбированная вода, которая может создавать дефекты в решетке или передавать заряд, знак которого зависит от относительного расположения НОМО и LUMO воды и точки Дирака графена.

### 1. Введение

Датчики влажности необходимы в промышленности, для метеорологической службы и при мониторинге окружающей среды. Работа сенсоров основана на изменении электрических свойств (проводимости или диэлектрической проницаемости). Адсорбированная молекула воды может обмениваться электронами и изменять кристаллическую решетку, влияя на электрическое сопротивление материала. Новыми материалами, которые используются для улучшения параметров сенсоров, являются углеродные нанотрубки и графен [1,2].

Двумерный материал графен, представляет собой слой атомов углерода толщиной в один атом, находящихся в  $sp^2$ -гибридизации. Обычно запрещенная зона графена равна нулю, что является основной преградой для их использования в микросхемах [3]. Эксперименты показывают, что адсорбированные молекулы воды могут расширить эту зону.

### 2. Анализ экспериментальных результатов

Результаты, полученные в работе [4], свидетельствуют о том, что адсорбирование молекул воды на графене имеет место в специальной камере, в которой с большой точностью можно проконтролировать величину абсолютной влажности. Ширина запрещенной зоны графена достигает величины 0.206 эВ, если образец поместить в камеру с коэффициентом абсолютной влажности  $\sim 0.31$

кг/кг (т.е. 0.31 кг воды на 1 кг сухого воздуха). Данный эффект обратим, и ширина запрещенной зоны сводится к величине  $\sim 0.029$  эВ в вакууме. Заметим, что в вакууме ширина запрещенной зоны графена также не равна нулю, если он нанесен на подложку  $\text{SiO}_2$ . Образцы графена синтезировались в [4] методом химического осаждения из газовой фазы на медь (Cu).

Первоначально эксперименты на образце из графена были осуществлены в вакууме для определения сопротивления. Было измерено сопротивление образца при различных значениях абсолютной влажности внутри камеры (0.022, 0.065, 0.312 и 0.152 кг воды на 1 кг воздуха). Для каждого значения влажности имеет место зависимость удельного сопротивления пленки от времени (рис.1). Как следует из рисунка, адсорбция воды на поверхности графена является относительно медленным процессом. Он занимает несколько часов. Необходимо, чтобы сопротивление насыщалось при каждом уровне влажности.

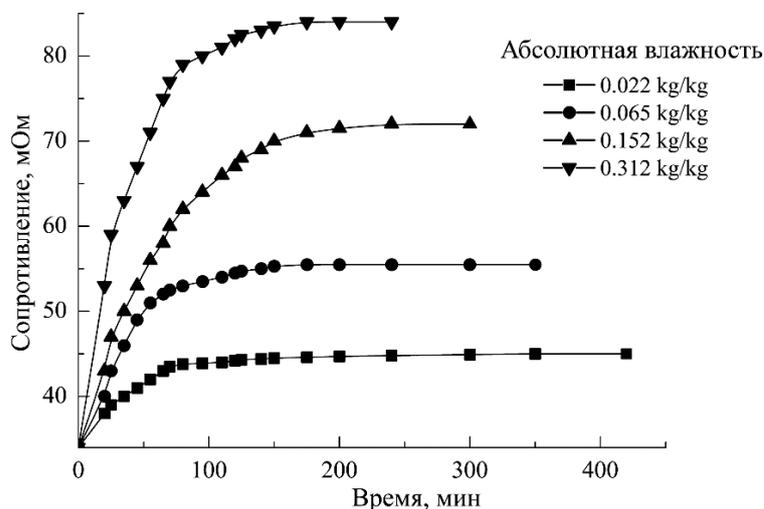


Рис.1. Сопротивление графена при различных значениях абсолютной влажности [4].

На рис.2 показана зависимость насыщенного сопротивления от абсолютной влажности и времени, необходимого для достижения 90% насыщения. Сопротивление графена нелинейно зависит от абсолютной влажности  $H$ , согласно эксперименту оно увеличивается как  $H^{0.25}$ . Время достижения 90% насыщения сопротивления уменьшается с увеличением влажности как  $H^{0.25}$ .

Насыщение объясняется тем, что при увеличении абсолютной влажности увеличивается и количество молекул на поверхности графена. Следует отметить, что абсолютное изменение сопротивления может достигать 150% при 0.312 кг водяного пара на 1 кг сухого воздуха.

Чтобы убедиться в том, что увеличение запрещенной зоны обусловлено адсорбцией молекул воды, изменялась температура в камере и сохранялась влажность. Таким образом определяется энергия активации, из которой и получается

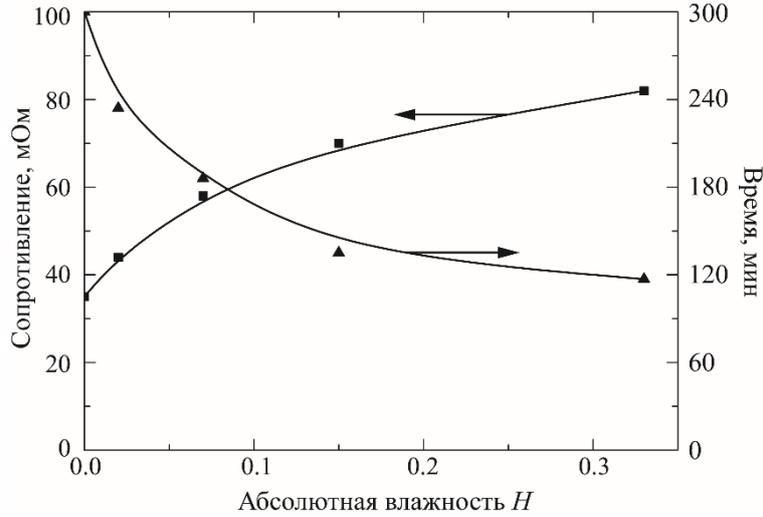


Рис.2. Зависимость насыщенного сопротивления графена от абсолютной влажности и времени [4].

величина ширины запрещенной зоны. При нулевой влажности ширина запрещенной зоны составляет  $\sim 0.029$  эВ. С увеличением абсолютной влажности ширина запрещенной зоны резко возрастает до значения  $E_g \approx 0.33$  эВ, достигая насыщения  $E_g \approx 0.206$  эВ при уровне влажности  $\sim 0.312$  кг/кг (рис.3). Этот эффект обратим. Если уровень влажности уменьшить до нуля, ширина запрещенной зоны вновь снизится до  $\sim 0.029$  эВ. Эти эксперименты были осуществлены для различных образцов графена.

Используя полученные результаты и программу Wolfram Mathematica, мы определили, что зависимость величины запрещенной зоны от сопротивления  $R$  имеет вид  $E_g = a + bR^{1.32}$ , где  $a$  и  $b$  некоторые постоянные (рис.4). Из рис.4 следует, что запрещенная зона расширяется при увеличении сопротивления.

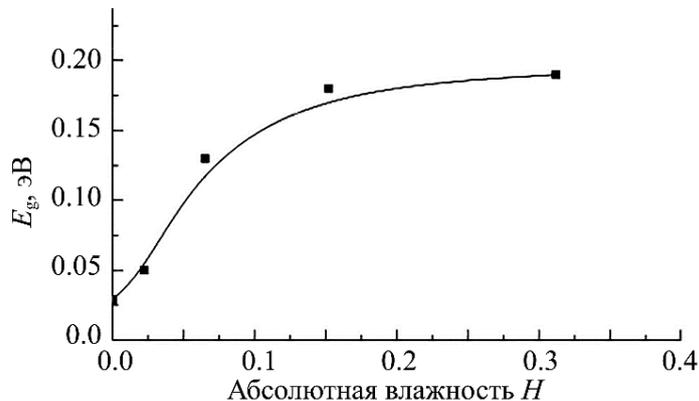


Рис.3. Зависимость запрещенной зоны графена от абсолютной влажности [4].

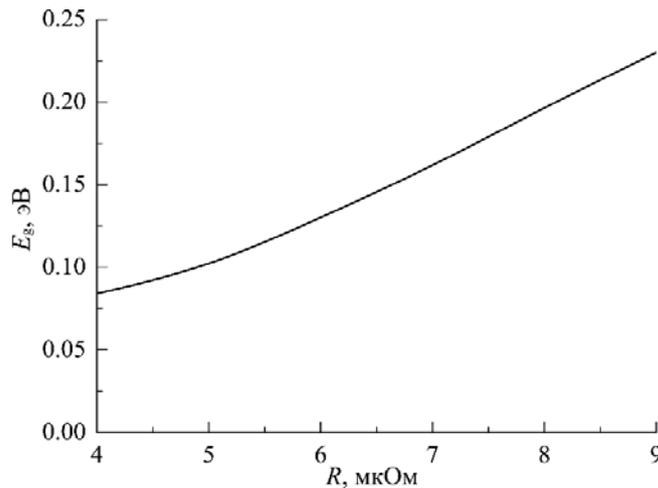


Рис.4. Зависимость запрещенной зоны графена от сопротивления.

## 2.1. Сравнение откликов

В эксперименте использовалась величина абсолютной влажности. Между тем в промышленности используется относительная влажность. Поэтому мы сконвертируем относительную влажность в абсолютную влажность, согласно [5]. Абсолютная влажность (масса водяного пара, деленая на массу сухого газа) рассчитывается по формуле

$$X = B \times P_w / (P_{\text{tot}} - P_w) \text{ [г/кг]}, \quad (1)$$

Величина  $B$  зависит от типа газа. Для воздуха она равна 621.9907 г/кг и может быть рассчитана с использованием формулы

$$B = M(\text{H}_2\text{O}) / M(\text{газ}) \times 1000 \text{ [г/кг]}. \quad (2)$$

Здесь  $P_w$  – давление водяного пара, которое рассчитывается по формуле

$$RH = P_w / P_{\text{ws}} \times 100\%, \quad (3)$$

где  $P_{\text{ws}}$  – давление насыщенного водяного пара.

Существует много способов определения отклика. Мы использовали самый распространенный

$$S = (R_h - R_d) \times 100 / R_d,$$

где  $S$  – отклик,  $R_d$  – сопротивление при нулевой влажности и  $R_h$  – сопротивление при определенном уровне влажности в камере. Мы сравнили отклики однослойного графена с двухслойным [6], результаты приведены на рис.5. Из рисунка видно, что однослойный графен показывает более высокий отклик и абсолютное изменение сопротивления составляет 150%. Можно сравнить эти данные с пара-

метрами известных сенсоров. Например, сопротивление нанопористых полимерных мембран, равное 150 ГОм при 40% влажности, уменьшается в 7.5 раз при 60% влажности [7] (рис.6).

Ситуация практически та же для гигроскопического полимера.

## 2.2. Образование ненулевой запрещенной зоны

Два эффекта могут привести к образованию ненулевой запрещенной зоны в графене. Первый из них – нарушение симметрии решетки [8]. Оно имеет место, когда молекулярные орбитали воды (НОМО/LUMO) и графена гибридизируются, что и приводит к асимметрии решетки. Такая асимметрия зависит от того, где адсорбируется молекула на элементарной ячейке графена. Согласно

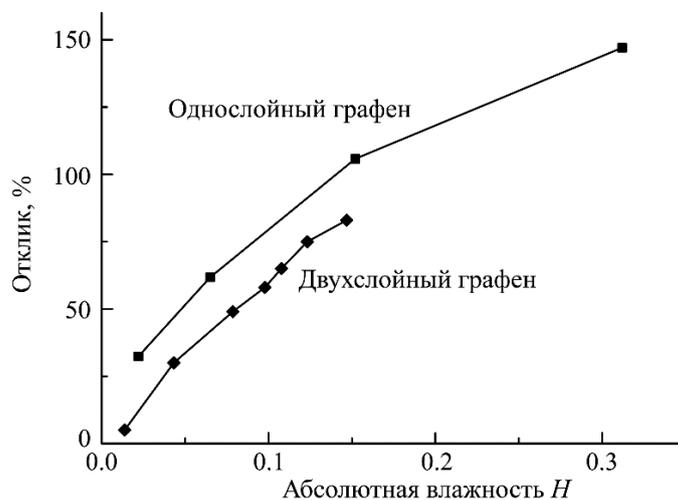


Рис.5. Отклики однослойного и двухслойного графена.

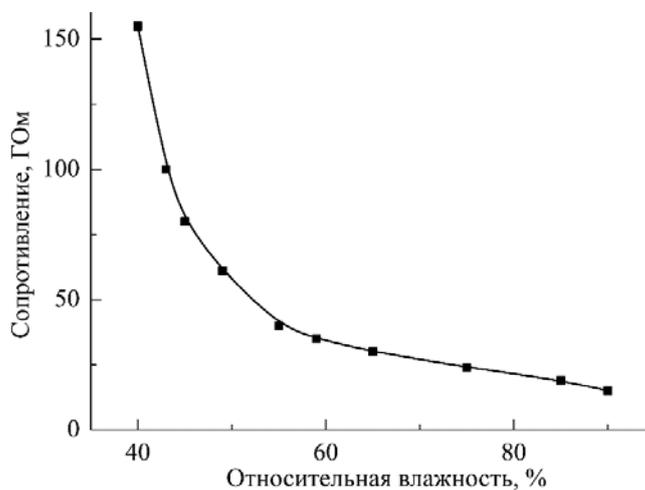


Рис.6. Зависимость сопротивления нанопористой полимерной мембраны от влажности [7].

теории сильно связанных электронов, закон дисперсии имеет вид:

$$E^{\pm}(\mathbf{k}) = \varepsilon_{2p} \mp \gamma f(\mathbf{k}), \quad (4)$$

где

$$f(\mathbf{k}) = \sqrt{1 + 4\cos\frac{\sqrt{3}k_x a}{2} \cos\frac{k_y a}{2} + 4\cos^2\frac{k_x a}{2}}, \quad (5)$$

$$\gamma = \langle \varphi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_A) | H | \varphi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_A - \mathbf{R}_{1,i}) \rangle, \quad (i = 1, 2, 3). \quad (6)$$

Здесь  $a$  – постоянная решетки,  $\gamma$  – интеграл перекрытия и  $\varepsilon_{2p}$  – энергия углерода для  $2p_z$  орбитали. Из вышеприведенного уравнения следует, что запрещенная зона увеличивается при разрушении симметрии кристаллической решетки.

Второй, более важный эффект – перенос заряда [9–11], который имеет место за счет местоположения энергетических зон графена и воды относительно друг друга. Если НОМО (высшая оккупированная молекулярная орбиталь) находится над уровнем Ферми графена (точка Дирака), то заряд переходит от молекулы к графену. Если LUMO (низшая неоккупированная молекулярная орбиталь) находится ниже, чем точка Дирака, то заряд переходит от графена к молекуле. У молекулы воды НОМО, в основном, располагается на атоме водорода и находится ниже ( $-4$  эВ), а LUMO находится выше ( $2$  эВ). Поэтому вода может иметь как акцепторные, так и донорные свойства в зависимости от того, вода с какой ориентацией адсорбируется к графену. Если она адсорбируется по НОМО орбиталам, то к графену переходит очень мало заряда. Если адсорбируется с помощью LUMO, тогда значительно больше электронов переходит к молекуле, т.е. вода проявляет акцепторные свойства.

### 3. Заключение

Отклик графена резко возрастает с открытием его запрещенной зоны. Могут быть две причины расширения зоны. Первая – расширение симметрии решетки графена при адсорбции молекулы воды, а вторая – перенос заряда. Показано, что однослойный графен имеет более высокий отклик по сравнению с двухслойным графеном и другими типами датчиков.

### ЛИТЕРАТУРА

1. **F. Schedin, K.S. Novoselov, S.V. Morozov, P. Blake, D. Jiang, E.H. Hill, A.K. Geim.** Nature Materials, **6**, 652 (2007).
2. **R. Jaknis, O.K. Tan (eds.).** Semiconductor Gas Sensors. WP Publishing, 2013.
3. **V.M. Aroutiounian.** Armenian J. Phys., **6**, 141 (2013).
4. **F. Yaiari.** Small, **6**, 2535 (2010).
5. **W. Wagner, A. Pru.** J. Phys. Chem. Reference Data, **31**, 387 (2002).

6. **A. Ghosh, D.J. Late.** arXiv:0905.2852 (2009).
7. **B. Yang.** Sensors and Actuators B, **114**, 254 (2006).
8. **G. Gui, J. Li, J. Zhong.** Phys. Rev. B, **78**, 075435 (2008).
9. **K. Nakada, A. Ishii.** Graphene Simulation. InTech, 2011.
10. **H.S. Wahab.** Intern. J. Basic & Applied Sciences, **12**, 234 (2012).
11. **O. Leenaerts.** arXiv:0710.1757v1 (2007).

**ԽՈՆԱՎՈՒԹՅԱՆ ԱԶԴԵՅՈՒԹՅՈՒՆԸ ԳՐԱՖԵՆԻ ԱՐԳԵԼՎԱԾ ԳՈՏՈՒ ՎՐԱ  
Հ.Ա. ԶԱԲԱՐՅԱՆ, Վ.Մ. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ**

Ուսումնասիրված է խոնավության ազդեցությունը գրաֆենի հատկությունների վրա և կատարված է համեմատություն գրաֆենային և պոլիմերային խոնավության տվիչների միջև: Ցույց է տրված, որ գրաֆենային տվիչները ցուցաբերում են ավելի բարձր քան պոլիմերային տվիչները: Այս տվիչների դիմադրությունը կազմում է 150 ԳՕհմ և նվազում է 7.5 անգամ 60% հարաբերաան խոնավության պայմաններում: Գրաֆենի դիմադրությունը նվազում է 100 կՕհմ-ից 4 անգամ: Այս երևույթը պայմանաորված է գրաֆենի արգելված գոտու լայնացմամբ, որի պատճառը ադսորբացված ջրի մոլեկուլներն են, որոնք առաջացնում են դեֆեկտներ գրաֆենի ցանցում կամ փոխանցում են լիցք, որի նշանը կախված է ջրի HOMO և LUMO-ի և գրաֆենի Դիրակի կետի փոխադասավորվածությունից:

**INFLUENCE OF HUMIDITY ON THE GRAPHENE BAND GAP  
H.A. ZAKARYAN, V.M. AROUTIOUNIAN**

Influences of the humidity on graphene properties are studied and comparisons of graphene and polymer humidity sensors are carried out. Graphene sensors have remarkable response compare to nanoporous polymer membranes. The resistance of polymer sensors is 150 GOhm and decreases in 7.5 times at 60% of the relative humidity. For graphene, resistance drops 4 times starting from ~100 kOhm. This is connected with the extension of graphene band gap. The reason of this is adsorbed water, which can create defects in the lattice or can transfer charge which depends on relative position of HOMO/LUMO of water and Dirac point of graphene

УДК 621.315

## **ВЫЧИСЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИХ МУЛЬТИПОЛЕЙ ЭЛЕКТРОНА, ЛОКАЛИЗОВАННОГО В УЗКОЗОННОМ СФЕРИЧЕСКОМ НАНОСЛОЕ InSb**

С.М. АМИРХАНЯН<sup>1,2</sup>, Э.М. КАЗАРЯН<sup>1</sup>, А.А. САРКИСЯН<sup>1,3\*</sup>

<sup>1</sup>Российско-Армянский (Славянский) университет, Ереван, Армения

<sup>2</sup>Национальная научная лаборатория им. А.И. Алиханяна, Ереван, Армения

<sup>3</sup>Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

e-mail: shayk@ysu.am

(Поступила в редакцию 29 апреля 2015 г.)

Рассмотрены одноэлектронные состояния в узкозонном сферическом нанослое из InSb. Закон дисперсии электрона описывается в рамках двухзонной модели Кейна, когда поведение электронов и легких дырок описывается аналогом уравнения Клейна–Гордона. На основе полученных выражений для одночастичных волновых функций определены дипольные и квадрупольные моменты электрона в указанной системе. Показано, что среднее значение дипольного момента равно нулю, а для определения среднего значения тензора квадрупольного момента достаточно вычислить среднее значение диагональной  $z$ -компоненты данного тензора. Определены также электростатические потенциалы и напряженности полей, создаваемых электроном в различных квантовых состояниях.

### **1. Введение**

Реализация слоистых наноструктур является важным этапом в развитии современных нанотехнологий. Эти объекты позволяют, с одной стороны, экспериментально проверять фундаментальные законы квантовой физики, а с другой – являются перспективными системами, рассматриваемыми в качестве элементной базы полупроводниковых приборов нового поколения [1–4]. С этой точки зрения сферические и цилиндрические нанослои являются очень удобными системами для контролируемой манипуляции энергетическими уровнями носителей заряда, находящихся в них. В частности, в отличие от сферической квантовой точки, где единственным геометрическим параметром является радиус КТ, в случае сферического нанослоя уровни энергии электрона можно изменять за счёт изменения как внутреннего, так и внешнего радиусов системы [5–7]. Данное обстоятельство непосредственно отражается на характере последовательностей кривых поглощения в сферических нанослоях [7]. Уникальность сферических и цилиндрических нанослоев заключается также и в том, что при малой толщине слоя эти системы можно рассматривать в качестве реальных моделей сферического и плоского ротаторов [8,9].

Указанная выше возможность гибкой манипуляции энергетическими уровнями носителей заряда в слоистых наноструктурах позволяет применять их в различных устройствах полупроводниковой наноэлектроники. Одним из наиболее интенсивно исследуемых устройств современной наноэлектроники являются одноэлектронные транзисторы, иначе одноэлектронные переключатели [10–14]. Работа этого прибора основана на эффекте кулоновской блокады электрона путём введения в пространство между эмиттером и коллектором КТ, содержащей один или несколько электронов. Находящийся внутри КТ электрон создаёт репульсивное кулоновское поле, которое блокирует проникновение внешнего электрона внутрь КТ, что и называют эффективной кулоновской блокадой. Последнее обстоятельство позволяет на технологическом уровне реализовать одночастичный переход через КТ, содержащую один или несколько электронов. Задача взаимодействия электрона, локализованного внутри КТ, с внешним электроном сводится к проблеме взаимодействия электрона, ограниченного в сферической квантовой яме, с внешним электроном. Если учесть то обстоятельство, что область локализации электрона в КТ является величиной порядка его эффективной дебройлевской длины волны, то рассмотрение такого электрона в качестве точечного заряда при определённых условиях может быть уже неприемлемым [15]. Возникает необходимость учёта вероятности пространственного распределения электрона, локализованного внутри узкозонного сферического нанослоя InSb. Это обстоятельство, в свою очередь, приводит к необходимости учёта вклада электростатических мультиполей в выражении для потенциала поля.

Целью данной работы является исследование дипольного и квадрупольного вклада в потенциал, создаваемый электроном, локализованным внутри узкозонного сферического нанослоя InSb. При этом нами учитывается, что закон дисперсии электрона является непараболическим и описывается в рамках двухзонной зеркальной модели Кейна, когда зависимость энергии от импульса аналогична по форме релятивистской [16]:

$$E = \sqrt{P^2 s^2 + \mu^2 s^4} - \mu s^2, \quad (1)$$

где  $s$  – параметр непараболичности ( $s = 10^8$  см/с),  $\mu$  – эффективная масса электрона ( $\mu = 0.018m_0$ ).

## 2. Сферический нанослой

Рассмотрим сферический нанослой (core/shell/shell) из InSb (со значением боровского радиуса электрона, равным  $a_0 = 530$  Å) с ограничивающим потенциалом

$$U_{\text{conf}}(r) = \begin{cases} 0, & R_1 \leq r \leq R_2 \\ \infty, & r < R_1, r > R_2 \end{cases}, \quad (2)$$

где  $R_1$  и  $R_2$  – соответственно внутренний и внешний радиусы изучаемой струк-

туры. С учётом (1) поведение электрона в данной структуре будет описываться стационарным уравнением Клейна–Гордона, которое после определённых преобразований [16] сводится к шрёдингеровскому виду:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\Psi = \mathcal{E}\Psi, \quad (3)$$

где  $\mathcal{E} = \left[ (E + \mu s^2)^2 - \mu^2 s^4 \right] / (2\mu s^2)$ . Учитывая сферическую симметрию задачи, волновую функцию электрона можно представить как произведение

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{r} \chi_l(r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (4)$$

где

$$\chi_l(r) = \sqrt{\frac{\pi kr}{2}} (C_1 J_{l+1/2}(kr) + C_2 J_{-(l+1/2)}(kr)), \quad (5)$$

$Y_{lm}(\theta, \varphi)$  – нормированные сферические гармоники [15],  $k = \sqrt{2\mu\mathcal{E}/\hbar^2}$ ,  $J_\nu(kr)$  – функция Бесселя первого рода,  $C_1$  и  $C_2$  – нормировочные константы [15].

Энергетический спектр системы определяется из условия равенства нулю радиальных волновых функций при  $r = R_1$  и  $r = R_2$ . При этом  $\chi(R_1) = \chi(R_2) = 0$ . Для того, чтобы  $C_1$  и  $C_2$  не были равны нулю, необходимо равенство нулю детерминанта [17]

$$\begin{vmatrix} J_{l+1/2}(kR_1) & J_{-(l+1/2)}(kR_1) \\ J_{l+1/2}(kR_2) & J_{-(l+1/2)}(kR_2) \end{vmatrix} = 0. \quad (6)$$

Коэффициенты  $C_1$  и  $C_2$  могут быть определены из условия  $\chi(R_1) = 0$ , а также условия нормировки  $\int |\chi(r)|^2 dr = 1$ . Окончательно для  $C_1$  и  $C_2$  получаются следующие выражения [17]:

$$C_1 = -C_2 \frac{J_{-(l+1/2)}(kR_1)}{J_{l+1/2}(kR_1)}, \quad (7)$$

$$C_2^2 = \frac{2}{\pi k} \left\{ \int_{R_1}^{R_2} \left( J_{-(l+1/2)}(kr) - \frac{J_{-(l+1/2)}(kR_1)}{J_{l+1/2}(kR_1)} J_{-(l+1/2)}(kr) \right)^2 r dr \right\}^{-1}.$$

На рис.1 показана зависимость волновой функции электрона от радиальной координаты для состояния  $l=1$ , полученная с учётом вышеприведённых результатов.

Обратимся теперь к проблеме определения электростатического поля, создаваемого электроном, локализованным в данной структуре. Задачу будем решать в предположении неизменности величины диэлектрической проницае-

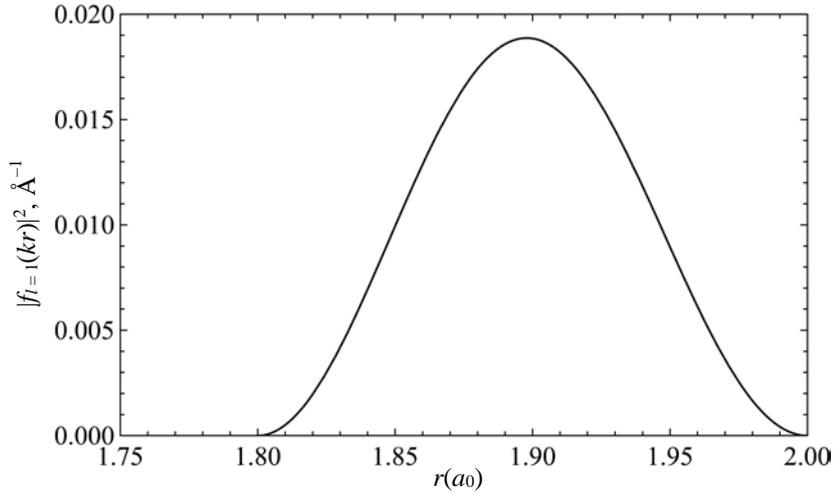


Рис.1. Зависимость квадрата волновой функции электрона от радиальной координаты для состояния  $n = 1, l = 1$  в сферическом нанослое при  $R_1 = 1.8a_0$  и  $R_2 = 2a_0$ .

мости во всём окружающем электрон пространстве. Согласно общей теории, для потенциала, создаваемого зарядом с плотностью  $\rho(r)$  имеем [18]

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\varepsilon} \int \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}', \quad (8)$$

где  $\varepsilon = 18$  – диэлектрическая проницаемость окружающей нанослой среды (поляризационные эффекты на границе КТ – окружающая среда в рамках данной статьи не учитываются). В связи с тем, что плотность электронного заряда в рассматриваемой системе равна  $\rho(r) = |\Psi|^2 e$ , после стандартной процедуры разложения интеграла (8) по электростатическим мультиполям задача сведётся к определению средних дипольного и квадрупольного моментов электрона в системе core/shell/shell. Рассмотрим сначала дипольный момент.

Средние значения компонент вектора дипольного момента определяются из выражения

$$\langle P_i \rangle = \int \Psi^* P_i \Psi dV, \quad (9)$$

где  $i = 1, 2, 3$ . С учётом того, что  $P_i = ex_i$ , средние значения компонент дипольного момента в сферической системе координат можно записать в следующем представлении:

$$\begin{aligned} \langle P_x \rangle &= \int \Psi^* \{ r \sin \theta \cos \varphi \} \Psi dV, \\ \langle P_y \rangle &= \int \Psi^* \{ r \sin \theta \sin \varphi \} \Psi dV, \\ \langle P_z \rangle &= \int \Psi^* \{ r \cos \theta \} \Psi dV. \end{aligned} \quad (10)$$

Подстановкой соответствующих выражений для сферических гармоник и интегрированием по всему объёму, приходящемуся на область слоя, можно показать, что все три величины в выражении (10) равны нулю:

$$\langle P_x \rangle = \langle P_y \rangle = \langle P_z \rangle = 0. \quad (11)$$

Рассмотрим теперь квадрупольный момент. Общее выражение для компонент квадрупольного момента имеет вид [18]

$$Q_{ik} = 3x_i x_k - r^2 \delta_{ik}. \quad (12)$$

При этом его след равен нулю

$$\text{Sp} Q_{ik} = 0. \quad (13)$$

Представив  $Q_{ik}$  в сферических координатах и проведя усреднение по волновым функциям (4) и (5), можно убедиться, что после усреднения недиагональные компоненты  $Q_{ik}$  обращаются в нуль [15]:

$$\langle Q_{xy} \rangle = \langle Q_{yz} \rangle = \langle Q_{zx} \rangle = 0. \quad (14)$$

А для диагональных компонент

$$\begin{aligned} Q_{xx} &= r^2 (3 \sin^2 \theta \cos^2 \varphi - 1), \\ Q_{yy} &= r^2 (3 \sin^2 \theta \sin^2 \varphi - 1), \\ Q_{zz} &= r^2 (3 \cos^2 \theta - 1) \end{aligned} \quad (15)$$

имеет место соотношение

$$\langle Q_{xx} \rangle = \langle Q_{yy} \rangle = -\frac{1}{2} \langle Q_{zz} \rangle. \quad (16)$$

Таким образом, средние значения компонент тензора квадрупольного момента можно представить в виде

$$\langle Q_{x_i x_k} \rangle = \langle Q_{zz} \rangle \begin{pmatrix} -1/2 & 0 & 0 \\ 0 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (17)$$

Иначе говоря, задача определения квадрупольного момента сводится к вычислению компоненты  $\langle Q_{zz} \rangle$ . Используя (4) и (5), для  $\langle Q_{zz} \rangle$  можем написать

$$\langle Q_{zz} \rangle = \int_{R_1}^{R_2} |\chi_l(r)|^2 dr \oint Q_{zz} |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 d\Omega. \quad (18)$$

Угловой интеграл в выражении (18) известен и равен [15]

$$\oint (3 \cos^2 \theta - 1) |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 d\Omega = \frac{2l(l+1) - 6m^2}{(2l-1)(2l+3)}. \quad (19)$$

Тогда для  $\langle Q_{zz} \rangle$  окончательно получим [15]

$$\langle Q_{zz}(R_1, R_2) \rangle = \frac{2l(l+1) - 6m^2}{(2l-1)(2l+3)} \times \int_{R_1}^{R_2} \left\{ C_1 \left( \frac{\sin(kr)}{kr} - \cos(kr) \right) - C_2 \left( \frac{\cos(kr)}{kr} + \sin(kr) \right) \right\}^2 r^2 dr. \quad (20)$$

На рис.2,3 приведены зависимости квадрупольного момента электрона от значений внешнего и внутреннего радиусов соответственно при фиксированных значениях внутреннего и внешнего радиусов для состояния  $l=1, m=0$ . Как следует из приведённых рисунков с ростом как  $R_1$ , так и  $R_2$  квадрупольный момент системы увеличивается. Аналогично, с ростом  $R_2$  (при фиксированном значении  $R_1$ ) максимум локализации электрона смещается от геометрического центра КТ и несферичность распределения зарядов проявляется сильнее. Это обусловлено тем, что с ростом  $R_1$  (при фиксированном  $R_2$ ) наиболее вероятная область локализации электрона отдаляется от геометрического центра системы и степень несферичности углового распределения электрона проявляется сильнее. Это приводит к росту квадрупольного момента системы в обоих случаях. Отметим также, что для указанного состояния  $l=1, m=0$  электронная оболочка имеет форму вытянутого эллипсоида вращения. Реализуется так называемая конфигурация вытянутого эллипсоида, т. к. в этом случае, по аналогии с теорией атомного ядра, квадрупольный момент положителен ( $\langle Q_{zz} \rangle > 0$ ), поскольку коэффициент перед интегралом в выражении (20) равен  $4/5$ . Иначе говоря, для

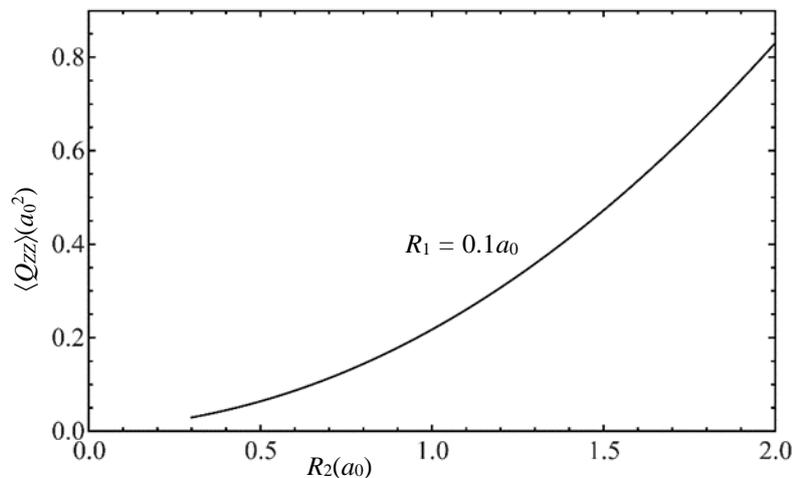


Рис.2. Зависимость квадрупольного момента электрона от внешнего радиуса при постоянном значении внутреннего радиуса  $R_1 = 0.1a_0$  для состояния  $n = 1, l = 1, m = 0$ .

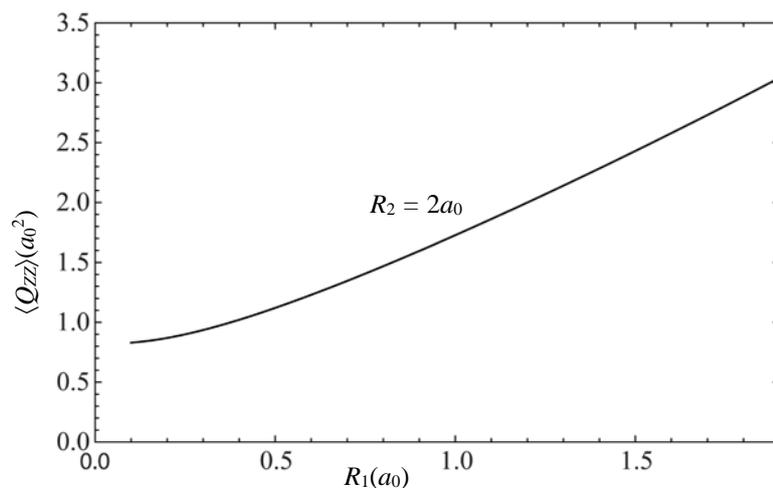


Рис.3. Зависимость квадрупольного момента электрона от внутреннего радиуса при постоянном значении внешнего радиуса  $R_2 = 2a_0$  для состояния  $n = 1, l = 1, m = 0$ .

такого состояния зенитное распределение электронной волновой функции, характеризуемое орбитальным квантовым числом  $l = 1$ , преобладает над азимутальным, характеризуемым магнитным квантовым числом  $m = 0$ .

Обратимся к случаю, когда  $l = 1, m = \pm 1$ . Здесь также с ростом  $R_1$  и  $R_2$  квадрупольный момент становится более ярко выраженным, однако теперь уже для электронной оболочки реализуется конфигурация сплюснутого эллипсоида и квадрупольный момент системы становится отрицательным (коэффициент в

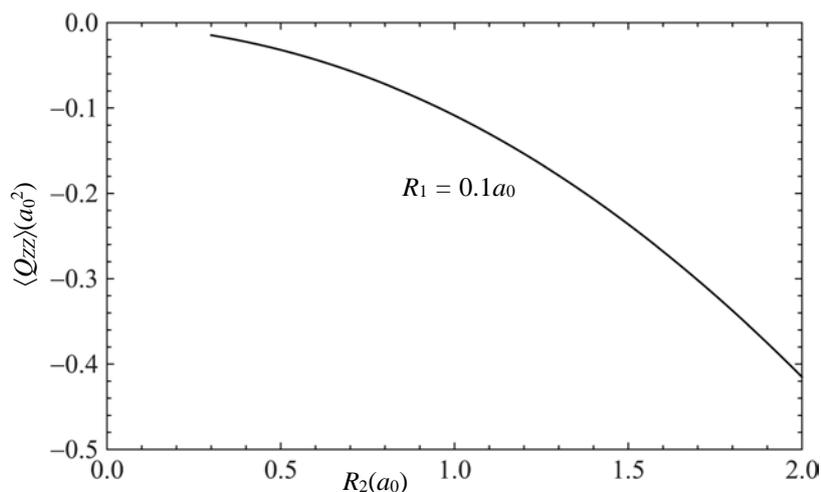


Рис.4. Зависимость квадрупольного момента электрона от внешнего радиуса при постоянном значении внутреннего радиуса  $R_1 = 0.1a_0$  для состояния  $n = 1, l = 1, m = \pm 1$ .

выражении (20) теперь уже равен  $-2/3$ ). Соответствующие зависимости квадрупольного момента от внешнего и внутреннего радиусов приведены на рис.4,5. Здесь также, как и в предыдущем случае с увеличением радиусов степень несферичности углового распределения электрона проявляется существеннее, в связи с чем происходит монотонное увеличение абсолютного значения квадрупольного момента.

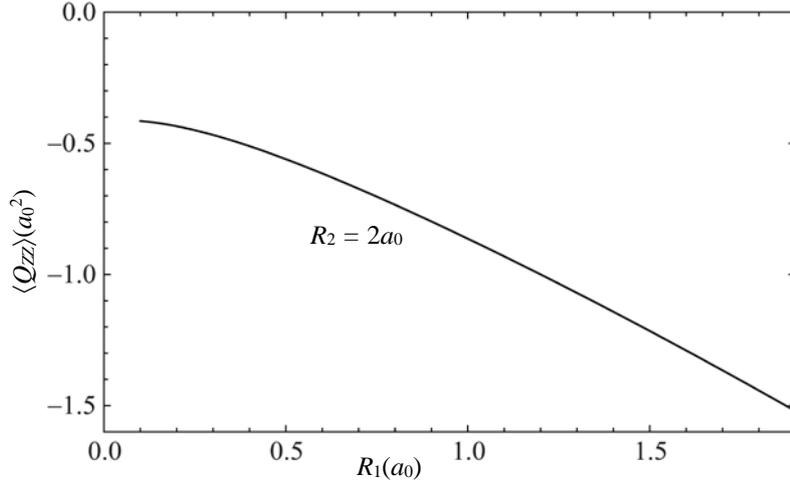


Рис.5. Зависимость квадрупольного момента электрона от внутреннего радиуса при постоянном значении внешнего радиуса  $R_2 = 2a_0$  для состояния  $n = 1, l = 1, m = \pm 1$ .

Для расчёта электростатического потенциала  $\varphi(r)$  с учётом только первых двух членов в разложении (8) необходимо использовать выражение

$$\varphi(r) = \frac{q}{\epsilon r} + \frac{q}{2\epsilon r^5} \left\{ \sum_i \sum_k Q_{x_i x_k} x_i x_k \right\}. \quad (21)$$

С учётом (17) и (21) из (22) окончательно получаем

$$\begin{aligned} \varphi(r) = & \frac{q}{\epsilon r} + \frac{q}{2\epsilon r^3} \frac{2l(l+1) - 6m^2}{(2l-1)(2l+3)} (3\cos^2 \vartheta - 1) \\ & \times \int_{R_1}^{R_2} \left\{ C_1 \left( \frac{\sin(kr)}{kr} - \cos(kr) \right) - C_2 \left( \frac{\cos(kr)}{kr} + \sin(kr) \right) \right\}^2 r^2 dr, \end{aligned} \quad (22)$$

где  $\vartheta$  – угол между радиус-вектором  $\mathbf{r}$  и осью  $z$ . Зависимость (22) приведена на рис.6.

Зная вид электростатического потенциала электрона в этой структуре, на основе выражения  $\mathbf{E}(r) = -\nabla\varphi(r)$  при фиксированном значении  $\vartheta$  можно

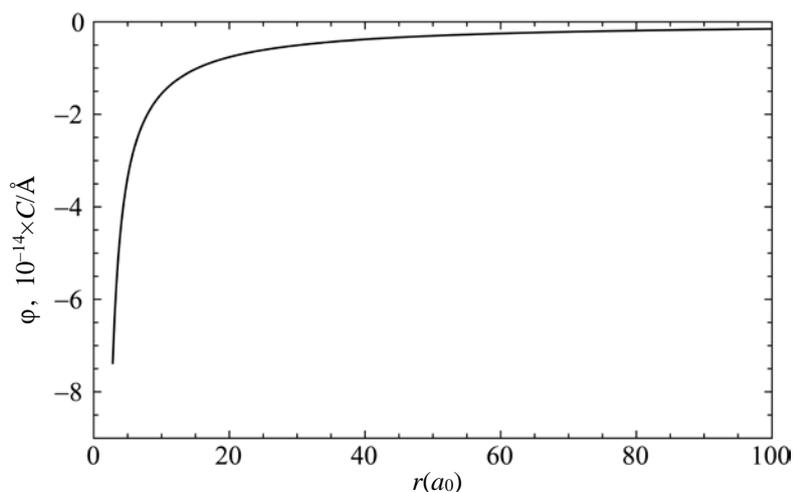


Рис.6. Зависимость электростатического потенциала электрона для состояния  $n = 1, l = 1, m = \pm 1$  при  $\vartheta = 0$  от радиальной координаты при  $R_1 = 1.8a_0$  и  $R_2 = 2a_0$ .

рассчитать напряжённость электрического поля  $\mathbf{E}(r)$ , создаваемого электроном. Соответствующая зависимость показана на рис.7. Наконец отметим, что в зависимости от состояния электрона могут быть реализованы как конфигурация сплюснутого эллипсоида, так и вытянутого. Поэтому вклад от квадрупольного момента может быть как положительным, так и отрицательным, что позволяет проводить гибкую манипуляцию поля, создаваемого ограниченным в нанослое электроном.

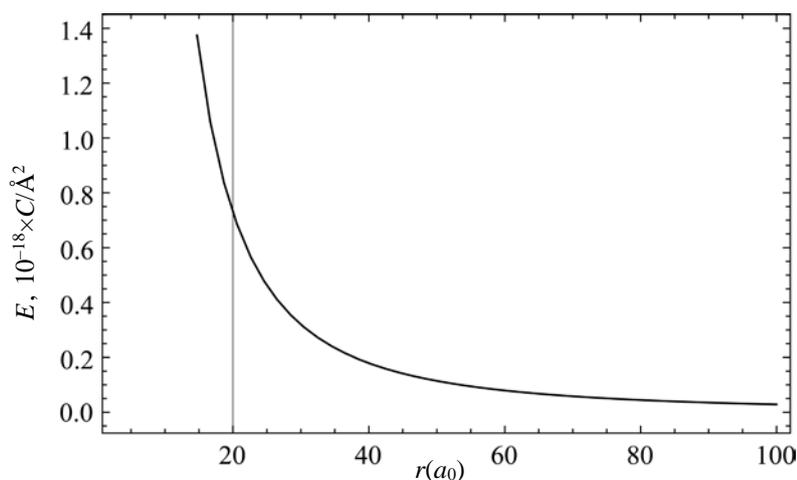


Рис.7. Зависимость напряжённости электрического поля электрона в сферическом нанослое для состояния  $n = 1, l = 1, m = \pm 1$  от радиальной координаты при  $R_1 = 1.8a_0$  и  $R_2 = 2a_0$ .

### 3. Сферическая КТ

Приведённые выше результаты могут быть перенесены на случай узкозонной сферической КТ из InSb с потенциалом ограничения

$$U_{conf}(r) = \begin{cases} 0, & r < R, \\ \infty, & r \geq R. \end{cases} \quad (23)$$

Для этого достаточно совершить переход  $R_1 \rightarrow 0$  и оставить только одно из решений уравнения Шрёдингера (3), а именно

$$\chi_l(r) = C \sqrt{\frac{\pi kr}{2}} J_{l+1/2}(kr). \quad (24)$$

В этом случае зависимость  $\langle Q_{zz} \rangle$  от радиуса КТ будет иметь следующий вид:

$$\langle Q_{zz}(R) \rangle = \frac{2l(l+1) - 6m^2}{(2l-1)(2l+3)} \times \int_0^R \left( \frac{\sin(kr)}{kr} - \cos(kr) \right)^2 r^2 dr. \quad (25)$$

В свою очередь, электростатический потенциал будет определяться выражением

$$\varphi(r) = \frac{q}{\epsilon r} + \frac{q}{2\epsilon r^3} \frac{2l(l+1) - 6m^2}{(2l-1)(2l+3)} (3 \cos^2 \vartheta - 1) \times \int_0^R \left( \frac{\sin(kr)}{kr} - \cos(kr) \right)^2 r^2 dr. \quad (26)$$

В частности, на рис.8 приведена зависимость квадрупольного момента электрона от радиуса сферической КТ. Отметим, что в этом случае значение квадрупольного момента начинается с нуля, когда электрон локализован в непосредственной близости от центра КТ.

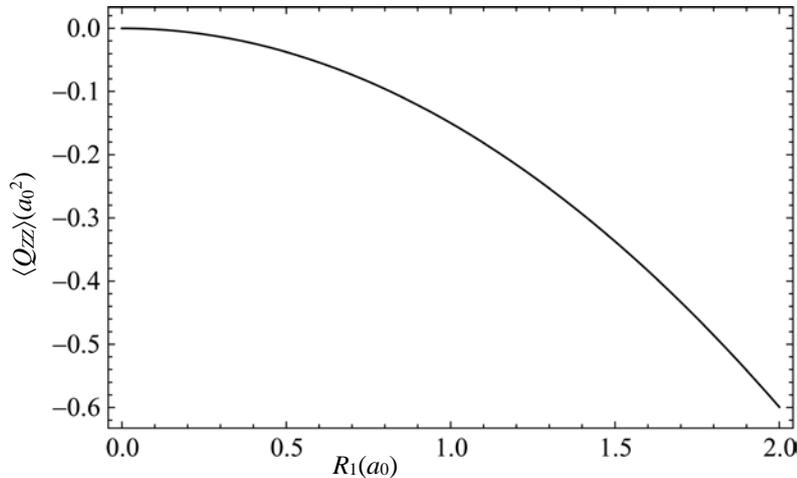


Рис.8. Зависимость квадрупольного момента электрона для состояния  $n = 1, l = 1, m = \pm 1$  от радиуса сферической КТ.

#### 4. Заключение

Нами рассмотрено поведение электрона в двух квантовых наноструктурах: сферическом нанослое и сферической КТ. Приведены зависимости волновых функций от радиальных координат системы. Показаны зависимости квадрупольных моментов от геометрических параметров наноструктур. Получены и проиллюстрированы пространственные распределения электростатического потенциала и напряжённости электрического поля, создаваемых электроном в нанослоях.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. **V.M. Fomin.** Physics of Quantum Rings. Springer, 2014.
2. **A. Lorke, et al.** Phys. Rev. Lett., **84**, 2223 (2000).
3. **S. Kim, et al.** Small, **7**, 70 (2011).
4. **K. Song, S. Lee.** Current Applied Physics, **1**, 169 (2001).
5. **G. Qin, S. Ren.** J. Appl. Phys., **89**, 6037 (2001).
6. **V.A. Harutyunyan.** Physica E, **39**, 37 (2007).
7. **Е.М. Kazaryan, А.А. Kirakosyan, V.N. Mughnetsyan, H.A. Sarkisyan.** Semicon. Sci. Techn., **27**, 085003 (2012).
8. **P. Pietilainen, T. Chakraborty.** Solid State Comm., **87**, 809 (1993).
9. **Э.М. Казарян, А.А. Костянян, А.А. Саркисян.** Известия НАН Армении, Физика, **42**, 218 (2007).
10. **H. Goan.** Phys. Rev. B, **70**, 075305 (2004).
11. **D.V. Averin, J.P. Pekola.** Phys. Rev. Lett., **101**, 066801 (2008).
12. **N. Lebedeva, A. Varpula, S. Novikov, P. Kuivalainen.** Phys. Rev. B, **81**, 235307 (2010).
13. **N. Ubbelohde, et al.** Nature Commun., **3**, 612 (2012).
14. **M. Miralaie, M. Leilaieoun, K. Abbasian, M. Hasani.** J. Comp. Theor. Nanosc., **11**, 15 (2014).
15. **З. Флюгге.** Задачи по квантовой механике. Москва, Мир, 1974.
16. **И.М. Цидильковский.** Электроны и дырки в полупроводниках: Энергетический спектр и динамика. Москва, Наука, 1972.
17. **M. Zoheir, A.Kh. Manaselyan, H.A. Sarkisyan.** Physica E, **40**, 2945 (2008).
18. **М.М. Бредов, В.В. Румянцев, И.Н. Топтыгин.** Классическая электродинамика. Москва, Наука, 1985.

#### CALCULATION OF ELECTROSTATIC MULTIPOLES OF ELECTRON LOCALIZED IN NARROW-BAND InSb SPHERICAL NANOLAYER

S.M. AMIRKHANYAN, E.M. KAZARYAN, H.A. SARKISYAN

Behavior of electron in narrow-gap spherical nanolayer of InSb is considered. Dispersion law of electron is described within the double-gap Kane model, when arises a necessity for considering of Klein–Gordon equation for description of behavior of electrons and light holes. Dipole and quadrupole momentums of electron in specified systems are defined on the base of the obtained expressions. It's shown, that average value of dipole momentum equals to zero and that for definition of average value of tensor of quadrupole momentum it's enough to calculate the average value of diagonal  $z$ -component of this tensor. Electrostatic potentials and tensions of fields created by electron located in different quantum states are defined.

УДК 535.215.9

## МЕМРИСТОРЫ НА ОСНОВЕ ЛЕГИРОВАННЫХ ЛИТИЕМ ПЛЕНОК ZnO

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

Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак, Армения

\*e-mail: ruben.ovsepyan@mail.ru

(Поступила в редакцию 20 января 2015 г.)

Разработан и изучен мемристорный элемент памяти ReRAM. Разработанная структура состоит из диода Шоттки (1D) на основе гетероструктуры ZnO:Ga/ZnO:Li/ZnO и мемристора (1R) на основе гетероструктуры Pt/ZnO/ZnO:Li/Al. Тем самым получен униполярный мемристорный элемент памяти типа 1D1R. При создании гетероструктур использовался метод вакуумного электронно-лучевого напыления. Изготовлены лабораторные образцы элемента памяти и проведены исследования характеристик.

### 1. Введение

Одним из основных компонентов вычислительной техники являются твердотельные энергонезависимые перезаписываемые элементы памяти. Большие перспективы в этой области имеет подход, основанный на использовании мемристорного эффекта [1–3]. Мемристорные элементы памяти получили название ReRAM (resistive random-access memory). Мемристоры – это электронные устройства резистивного типа, которые имеют гистерезисные нелинейные вольт–амперные характеристики (ВАХ). ReRAM имеет размеры функциональной области ~5 нм, что существенно меньше размеров современных кремниевых транзисторных устройств. Кроме хранения информации мемристоры могут осуществлять и ее обработку. В отличие от обычных элементов мемристоры могут функционировать как в бистабильном, так и в аналоговом режиме записи и считывания информации [4,5].

Переключательные свойства оксидных пленок  $TiO_{2-x}$  и  $ZnO_{1-x}$  обусловлены миграцией кислородных вакансий под действием электрического поля [6]. Большую роль в функционировании мемристоров играют металлические контакты к оксиду. Мемристорный эффект может возникать благодаря изменению характеристик барьера Шоттки на границе металл-полупроводник; это изменение обусловлено миграцией в электрическом поле заряженных кислородных вакансий к межфазной границе [7]. В литературе обсуждаются и другие механизмы, которые определяют гистерезис и нелинейность ВАХ мемристоров, но

все они, так или иначе, связаны с нестехиометрией оксидного материала и подвижностью ионов. Надо отметить, что оксиды металлов давно привлекали внимание своими необычными электрическими свойствами, которые особенно проявлялись после электрического формирования образца импульсом тока. Основываясь на вышесказанном, можно заключить, что нестехиометрические пленки оксида цинка являются перспективными для создания прозрачных мемристоров.

Внедрению прозрачных мемристоров в микро- и наноэлектронику препятствует несколько нерешенных проблем. Одна из них заключается в необходимости снизить энергопотребление соответствующего бита памяти, вторая – в создании барьеров Шоттки с использованием прозрачных электродов, т.е. без использования металлических пленок. При выборе материалов для мемристоров важными остаются вопросы выделения тепла при записи и считывании. Этот вопрос для структуры Pt/TiO<sub>2</sub>/Pt был подробно исследован в работе [8].

В настоящей работе получены и исследованы мемристорные гетероструктуры 1D1R с малым энергопотреблением, состоящие из диода Шоттки Pt/ZnO:Li/ZnO/Pt и униполярного мемристора Pt/ZnO:Li/ZnO/ZnO. Проведены измерения процессов переключения сопротивления в бистабильном и аналоговом режимах на постоянном токе и на частоте 200 Гц.

## 2. Эксперимент

Существуют многочисленные структуры мемристорного элемента памяти типа 1D1R, в которых для подавления перекрестных помех используются один диод 1D и один резистор 1R. При использовании пленок ZnO:Li оптимальными структурами для мемристоров являются однополярные схемы. Предлагаемая в настоящей работе структурная схема такого элемента памяти

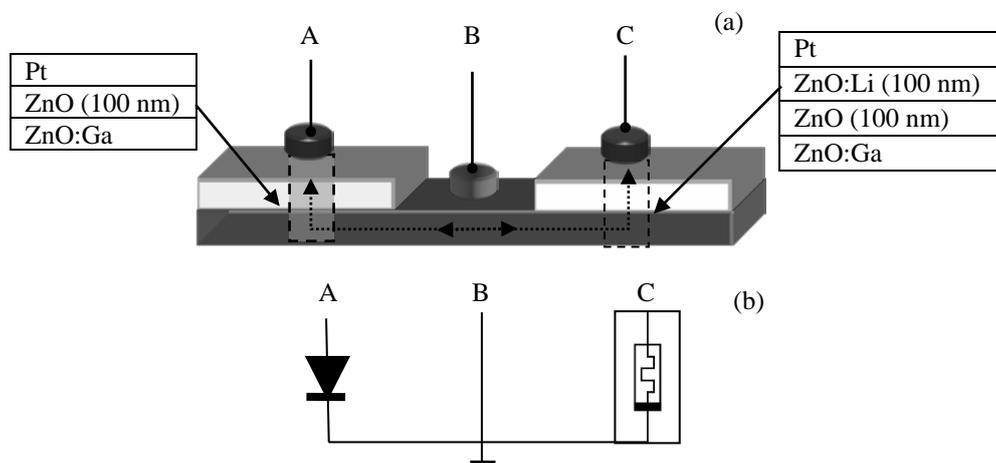


Рис.1. Структурная (а) и эквивалентная (б) схемы предлагаемой структуры. А, В и С – контакты.

(1D1R) представлена на рис.1. Гетероструктуры Pt/ZnO:Li/ZnO/ZnO:Ga и Pt/ZnO:Li/ZnO/Pt были изготовлены с использованием технологии вакуумного напыления. Был разработан и изготовлен диод Шоттки (1D) на основе гетероструктуры ZnO:Ga (40 nm)/ZnO:Li (100 nm)/ZnO (40 nm) и мемристор (1R) на основе гетероструктуры Pt/ZnO (100 nm)/ZnO:Li (100 nm)/Al, а также униполярный мемристорный элемент памяти 1D1R. На этих тестовых структурах были проведены измерения электрических характеристик диодов 1D, мемристоров 1R и униполярного мемристорного элемента памяти 1D1R.

Пленки ZnO были получены методом вакуумного электронно-лучевого напыления на подложках из сапфира, покрытых металлическим слоем Pt [9]. Платиновые электроды получены методом высокочастотного катодного напыления. В качестве мишеней для напыления использовались синтезированные керамические таблетки из порошка ZnO, ZnO:Li (1 вес%), ZnO:Li (8 вес%) и ZnO:Ga (2 вес%) [6]. Все образцы были изготовлены в одинаковых условиях: энергия электронов была ~6 кэВ, температура подложки поддерживалась при  $250 \pm 1^\circ\text{C}$  и скорость роста составляла  $1.45 \text{ \AA}/\text{с}$ .

Используемый метод обеспечивает получение пленок с дефицитом кислорода; в результате получены компенсированные полупроводники, содержащие как донорные (кислородные вакансии), так и акцепторные ( $\text{Li}^+$ ) центры [10]. Отжиг на воздухе приводил к изменению их соотношения, т.е. к изменению степени компенсации.

Кристаллическое качество и ориентация пленок оценивались методом рентгеновской дифракции. Для исключения фотохимических процессов на поверхности пленок их покрывали защитным слоем  $\text{MgF}_2$  [11].

### 3. Результаты и обсуждение

На рис.2 показаны ВАХ полученных структур. Измерение осуществлялось синусоидальным сигналом с частотой  $f = 200$  Гц. Полученные ВАХ аппроксимированы формулой

$$j = j_{s0} [\exp(U/nU_{th}) - 1], \quad (1)$$

где  $j_{s0}$  – плотность тока насыщения,  $n$  – коэффициент неидеальности, который обычно принимает значения между 1 и 2 (для диффузионного тока) и выше 2-х (для рекомбинационного тока),  $U_{th} = k_B T/q$  – тепловое напряжение (thermal voltage), которое при температуре 290К равно  $25 \times 10^{-3}$  В. Структуры имеют низкий ток утечки и почти симметричные кривые ВАХ в положительной и отрицательной областях смещения. Это связано с барьером Шоттки на Pt/ZnO переходе, блокирующем инжекцию электронов. Напротив, большой ток утечки и линейная ВАХ наблюдаются в Pt/ZnO:Ga/Pt структурах, что связано с омическим характером контактов на Pt/ZnO:Ga.

Для пленок ZnO:Ga уровень Ферми находится близко к зоне проводимости, из-за этого наблюдается высокая концентрация носителей заряда, что в свою

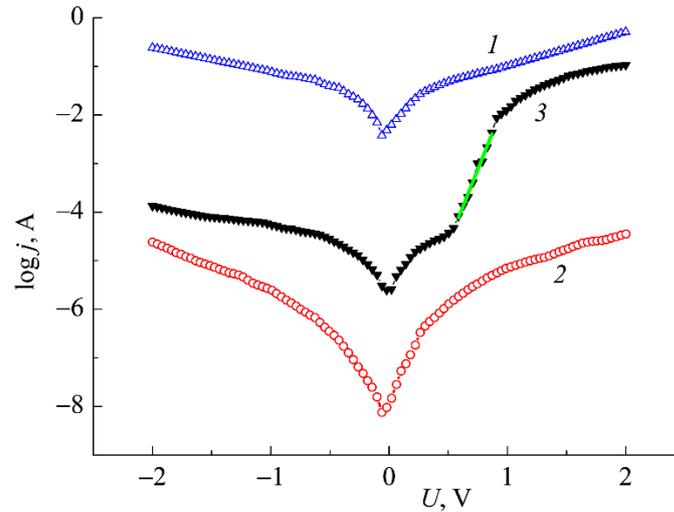


Рис.2. ВАХ структур Pt/ZnO:Ga/Al (кривая 1), Pt/ZnO:Li/Pt (кривая 2) и 1D структуры Pt/ZnO:Ga/ZnO:Li/Pt (кривая 3) с нелинейной ВАХ и коэффициентом неидеальности  $n = 2.7$ .

очередь приводит к сужению ширины барьера Шоттки на переходе Pt/ZnO:Ga. Вследствие этого электроны могут легко проходить через Pt/ZnO:Ga барьеры Шоттки из-за туннельного механизма. Поэтому барьер Pt/ZnO:Ga имеет омическую ВАХ, а переходы Pt/ZnO являются барьером Шоттки с нелинейной ВАХ. Структура Pt/ZnO:Ga/ZnO:Li/Pt имеет нелинейную асимметричную ВАХ; токи при прямом и обратном напряжениях смещения отличаются приблизительно в  $10^3$  раз при напряжении смещения  $\pm 2$  В, напряжении прямого падения  $U = 0.9-1$  В и коэффициенте неидеальности  $n \sim 2.7$ .

На рис.3 приведены типичные кривые ВАХ униполярного резистивного переключателя (мемристора) 1R на основе Pt/ZnO/ZnO:Li/Pt. Одной из целей данной работы было создание униполярных устройств, в которых двузначность характеристик возникала бы только при одной полярности напряжения. После изготовления проводился процесс электрического формирования гетероструктуры при напряжениях, превышающих рабочие напряжения. После процесса электрического формирования переключение между состоянием высокого сопротивления  $R_{HRS}$  (high resistance state – HRS) и состоянием низкого сопротивления  $R_{LRS}$  (low resistance state – LRS) осуществлялось синусоидальным сигналом с частотой  $f = 200$  Гц. Напряжение переключения из состояния HRS ( $U_{set}$ ) в LRS ( $U_{reset}$ ) составляло  $\pm 1.5$  В и обратно  $\pm 0.5$  В. Отношение сопротивлений ячейки в этих состояниях  $R_{HRS}/R_{LRS} \approx 100$ . На рис.3 стрелками показана кинетика изменения пропускаемого через контакт тока для структуры 1R.

На рис.4 показаны типичные ВАХ для интегрированного устройства 1D1R, последовательно подключенных мемристора 1R и диода 1D. Это устройство также проходит первоначальный процесс электрического формирования. Операции переключения в отрицательных областях смещения заблокированы

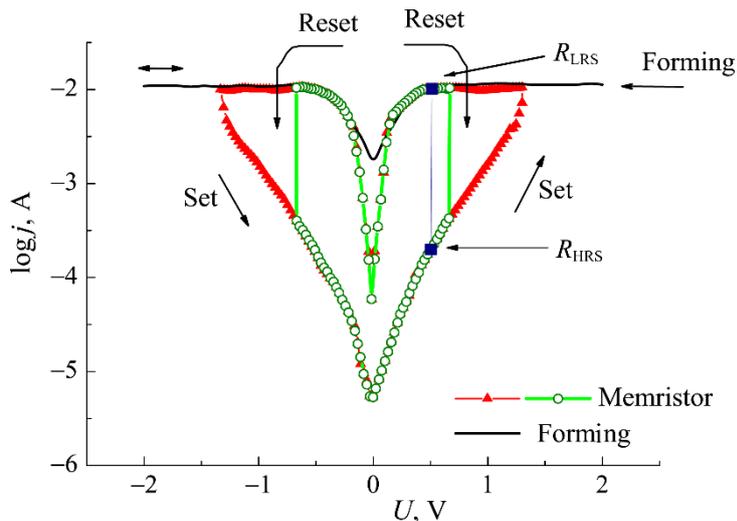


Рис.3. ВАХ униполярного мемристора 1R на основе Pt/ZnO/ZnO:Li/Al.

диодом с обратным смещением. Устройство 1D1R переключалось только при положительной полярности напряжения,  $U_{\text{set}}$  и  $U_{\text{reset}}$  составляли 2.5 и 1.7 В, соответственно. Сравнивая рис.3 и 4, можно сказать, что рабочие напряжения записи  $U_{\text{HRS}}$  и  $U_{\text{LRS}}$  для 1D1R устройств выше, чем для 1R структуры из-за напряжения смещения между диодом и мемристором в устройстве 1D1R. На вставке рис.4 показано, что соотношение  $R(\text{ON}/\text{OFF})$  устройства 1D1R при считывании информации имеет максимальное значение  $\sim 80$  при напряжении смещения 1В. Таким образом, сопротивления  $R_{\text{HRS}}$  и  $R_{\text{LRS}}$  можно считать напряжением смещения 1В, что не приводит к потере информации во время считывания и резко увеличивает количество циклов считывания.

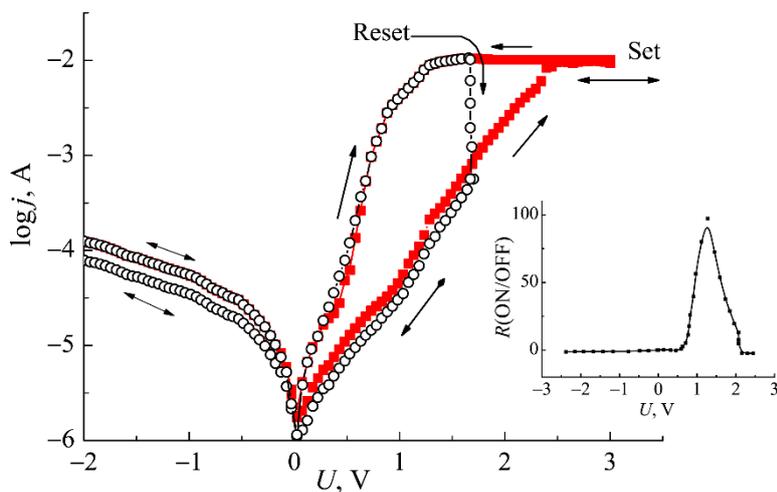


Рис.4. ВАХ интегрированного униполярного резистивного мемристора 1D1R структуры

На рис.5а представлены зависимости токов устройства 1D1R в состоянии с высоким HRS и низким LRS сопротивлениями в циклическом режиме запись–считывание. Как видно из рисунка, устройство позволяет  $10^4$ -кратную перезапись информации без существенного ухудшения параметров. На рис.5б представлены те же зависимости от времени считывания однократно записанной информации в состояниях HRS или LRS. Как видно из рисунка, устройство без существенного ухудшения электрических параметров позволяет считывать записанную информацию в течении  $10^4$  сек, если предположить время однократного считывания  $10^{-6}$  сек, что означает  $10^{10}$ -кратное считывание информации без ухудшения параметров.

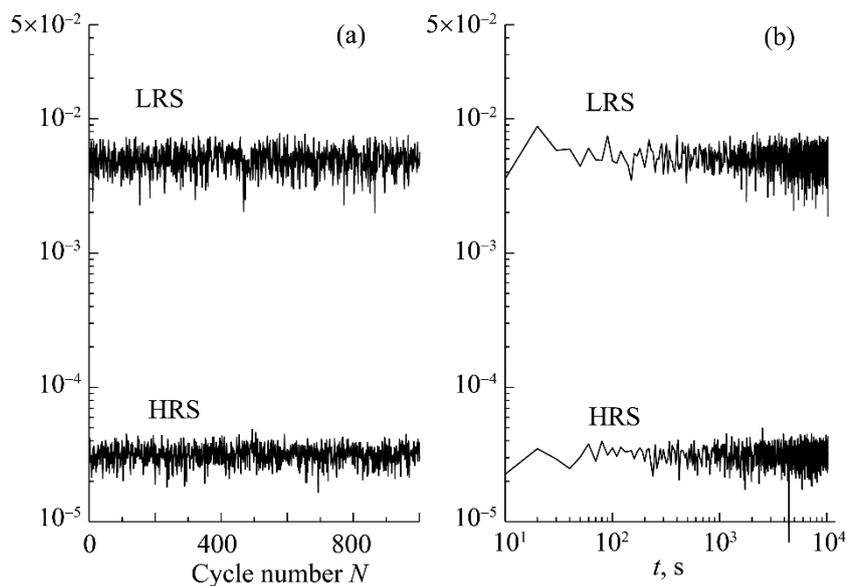


Рис.5. Тестирование устройства 1D1R (а) в циклическом режиме запись–считывание и (б) в режиме считывания однократно записанной информации в состоянии HRS и LRS при напряжении считывания 1В.

#### 4. Заключение

Разработан новый мемристорный элемент памяти, основанный на структуре 1D1R (диод Шоттки 1D и мемристорный элемент 1R). Элемент памяти 1D1R переключается из состояния  $R_{HRS}$  в  $R_{LRS}$  и обратно с использованием импульсов положительной полярности напряжения, т.е. является униполярным запоминающим элементом. Предлагаемое устройство обладает большой стабильностью и выдерживает  $10^4$  циклов переключения в режиме запись–считывание и  $10^{10}$ -кратное считывание однократно записанной информации без существенного ухудшения параметров.

Работа выполнена в рамках государственного финансирования Республики Армения и частичной финансовой поддержки ANSEF (грант № 3635).

## ЛИТЕРАТУРА

1. **M.J. Lee, S. Seo, D.C. Kim, et.al.** Adv. Mater., **19**, 73 (2007).
2. **J.W. Seo, S.J. Baik, S.J. Kang, et.al.** Appl. Phys. Lett., **98**, 233505 (2011).
3. **Y.C. Shin, J.W. Song, K.M. Kim, et.al.** Appl. Phys. Lett., **92**, 162904 (2008).
4. **S.H. Jo, T.C.I. Ebong, B. Bhadviya, et.al.** Nano Lett., **10**, 1297 (2010).
5. **T. Chang, S.-H. Jo, W. Lu.** ACS Nano, **5**, 7669 (2011).
6. **N.R. Aghamalyan, R.K. Hovsepyan, A.R. Poghosyan, B. von Roedern, E.S. Vardanyan.** J. Optoelect. Advan. Materials, **9**, 1418 (2007).
7. **W.J. Song, Y. Zhang, C. Xu, et al.** Nano Lett., **11**, 2829 (2011).
8. **S.N. Truong, K.S. Min.** J. Semicond. Technol. Scien., **14**, 357 (2014).
9. **N.R. Aghamalyan, E.A. Kafadaryan, R.K. Hovsepyan.** Trends in Semiconductor Science. New York, Nova Science Publishers, pp.81-110, 2005.
10. **Н.Р. Агамалян, Р.К. Овсепян, С.И. Петросян.** Изв. НАН Армении, Физика, **45**, 407 (2010).
11. **Н.Р. Агамалян, Р.К. Овсепян, С.И. Петросян.** Изв. НАН Армении, Физика, **43**, 143 (2008).

### ԼԻԹԻՈՒՄՈՎ ԼԵԳԻՐՎԱԾ ZnO ԹԱՂԱՆԹՆԵՐԻ ՀԻՄՔԻ ՎՐԱ ՄԵՍՐԻՍՏՈՐՆԵՐ

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

Մշակված և հետազոտված է օպերատիվ հիշողության սարքի մեմրիստորային տարր (resistance random access memory – ReRAM): Մշակված կառուցվածքը բաղկացած է Շոտկի դիոդից (1D) հիմնված ZnO:Ga/ZnO:Li/ZnO հետերոկառուցվածքի վրա և մեմրիստորից (1R) հիմնված Pt/ZnO/ZnO:Li/Al հետերոկառուցվածքի վրա: Այդպես ստացված է միաբևեռ մեմրիստորային հիշողության տարր 1D1R տիպի: Հետերոկառուցվածքների ստեղծման ժամանակ օգտագործվել է էլեկտրոնաճառագայթային վակուումային փոշեպատումը: Պատրաստված են հիշողության տարրի լաբորատոր նմուշներ և հետազոտված են նրանց բնութագրերը:

### MEMRISTORS BASED ON LITHIUM DOPED ZnO FILMS

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

The memristor memory cell ReRAM has been developed and studied. The developed structure consists of a Schottky diode (1D) based on ZnO:Ga/ZnO:Li/ZnO heterostructure and memristor (1R) based on Pt/ZnO/ZnO:Li/Al heterostructure. Thus the unipolar memristor memory cell of 1D1R type was obtained. The heterostructures were created by the vacuum electron-beam evaporation method. The laboratory samples of the memory cells were prepared and their characteristics were studied.

УДК 537.9

## ЗАВИСИМОЕ ОТ ТОЛЩИНЫ МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЕ НАНОПЛАСТИН $Sb_2Te_3$ И ЭФФЕКТ СЛАБОЙ АНТИЛОКАЛИЗАЦИИ

С.Р. АРУТЮНЯН

Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак, Армения

e-mail: sergeyhar56@gmail.com

(Поступила в редакцию 11 марта 2015 г.)

Исследовано магнитосопротивление нанопластин различной толщины соединения  $Sb_2Te_3$ , принадлежащего к классу топологических изоляторов. Измерения, проведенные в магнитных полях до 9 Т и при температурах 2К и 300К, показали, что магнитосопротивление сильно зависит от толщины нанопластин и их температуры. Такое поведение магнетосопротивления нанопластин приписывается поведению подвижности носителей заряда, которая в свою очередь зависит от толщины нанопластин и их температуры. На кривой магнитосопротивления наиболее тонкого образца с толщиной 25 нм выявлена аномалия слабой антилокализации, присущая топологическим изоляторам и являющаяся вкладом поверхностных состояний в электронный транспорт. Осцилляции Шубникова–де Гааза выявлены на кривой магнитосопротивления наиболее толстого образца с толщиной 450 нм, которые являются откликом объемных состояний на приложенное магнитное поле.

### 1. Введение

Соединение теллурида сурьмы ( $Sb_2Te_3$ ) известно как термоэлектрический полупроводник *p*-типа, а его модификации с висмутом (Bi) и селеном (Se) широко используются для термоэлектрической конверсии при температурах около 300К [1]. С недавних пор это соединение вызывает возрожденный интерес, так как было предсказано, а затем и подтверждено, что  $Sb_2Te_3$  является 3D топологическим изолятором [2,3]. Топологический изолятор представляет собой новое квантовое состояние материи, где запрещенная зона энергетических уровней объема сосуществует со спин-поляризованной дираковской зонной структурой металлических состояний поверхности без запрещенной зоны. Таким образом, материал, номинально являющийся изолятором в объеме, способен проводить по поверхности. Эти уникальные поверхностные состояния являются следствием сильного спин-орбитального взаимодействия, характерного для этих материалов [4]. Поверхностные состояния защищены симметрией обращения времени от рассеяния на дефектах, то есть электроны в этих состояниях могут двигаться

вдоль поверхности объемного материала почти без потери энергии. Существование этих поверхностных состояний со спин-поляризованной природой и управление ими рассматривается как идеальная база для спинтроники, квантовых вычислений и для других применений [5,6].

Поверхностные состояния для ряда топологических изоляторов, в том числе для  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$ , были исследованы и подтверждены экспериментально с помощью фотоэмиссионной спектроскопии углового разрешения [3]. Однако наблюдение эффектов, связанных с поверхностными состояниями, методами транспорта зарядов на образцах макроскопических размеров затруднено из-за неизбежного влияния на результаты объемной проводимости. Поэтому, для выявления вклада поверхностных состояний, необходимо исследовать ультратонкие образцы, в которых следует ожидать существенного увеличения вклада поверхностной проводимости по сравнению с объемной. К настоящему времени накоплен значительный объем данных по транспортным свойствам топологических изоляторов при исследовании соединений на основе селенидов висмута  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ . В частности, такие эффекты, как осцилляции сопротивления Шубникова–де Гааза и слабой антилокализации, позволили выявить вклад поверхностных состояний в электронный транспорт [7–12]. Недавние исследования посредством туннельной микроскопии в тонких пленках  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$  выявили четко выраженную линейную дисперсию энергии поверхностных состояний как дираковскую фермионную 2D систему с нулевой массой [13]. Эти результаты указывают на возможность наблюдения характерных признаков поверхностных состояний посредством измерения электронного транспорта.

В настоящей работе представлены результаты по выращиванию совершенных монокристаллов в виде нанопластин соединения  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$  различной толщины и исследованию их электронной проводимости в магнитных полях.

## 2. Приготовление образцов

Монокристаллические нанопластины  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$  различной толщины и формы были выращены из паровой фазы на  $\text{SiO}_2/\text{Si}$  подложках с использованием в качестве источника поликристаллического соединения  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$  [14]. Монокристаллическость нанопластин подтверждена результатами исследований полученных образцов сканирующим электронным микроскопом (SEM) и просвечивающим электронным микроскопом (ТЕМ), представленных на рис.1.

Свободно стоящие и вертикально ориентированные нанопластины подходящей толщины переносились на стандартный, с 16 клеммами, чип механическим микроманипулятором для последующего нанесения электрических контактов и подводящих проводов, а также структурирования методом электронной литографии. Для измерений были выбраны образцы с толщинами  $d = 450$  нм, 50 нм и 25 нм. Энергорассеивающий рентгеновский анализ показал идентичное соотношение  $\text{Sb/Te} = (41 \pm 1)/(59 \pm 1)$  для всех трех образцов. Измерения электронной

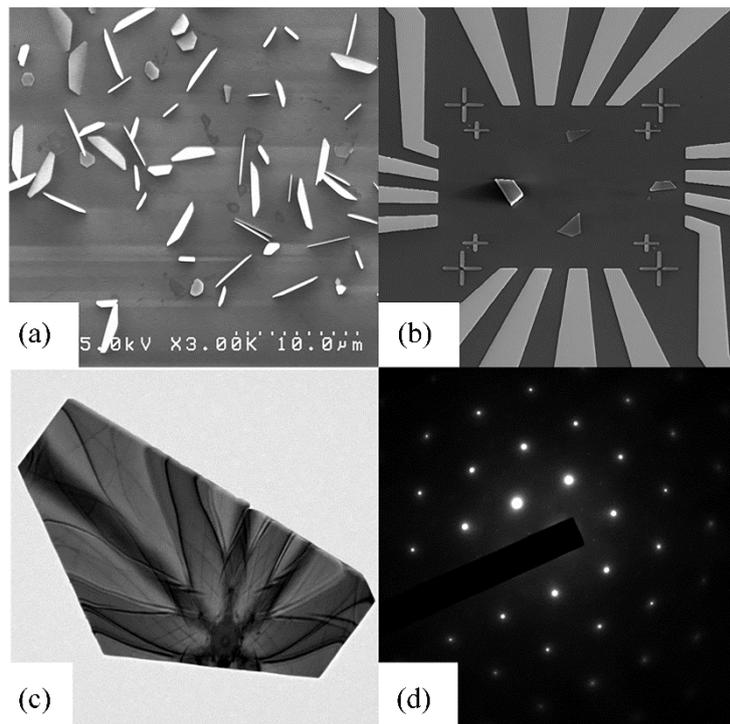


Рис.1. (a) SEM изображение выращенных нанопластин. (b) Некоторые нанопластины, перенесенные на стандартный чип. (c) TEM изображение произвольной нанопластины. (d) TEM дифрактограмма нанопластины.

проводимости образцов проводилось на коммерческой установке измерения физических свойств (PPMS) стандартным четырехзондовым методом в магнитных полях до 9 Т и при температурах от 2К до 300К. Магнитосопротивление определялось как  $MR = (100\%) \times (R_B - R_0)/R_0$ , где  $R_B$  сопротивление образца в магнитном поле, а  $R_0$  сопротивление образца без приложения магнитного поля. Магнитосопротивление образца с толщиной 450 нм было измерено как при поперечном, так и при продольном направлении магнитного поля  $B$ , в то время как для остальных образцов измерение  $MR$  проводилось только в поперечном магнитном поле.

### 3. Результаты измерений и их обсуждение

Сначала были измерены сопротивления нанопластин без приложения магнитного поля в диапазоне температур 2–300К. Результаты в виде нормированного сопротивления  $R_T/R_{300}$ , приведенные на рис.2, указывают на металлический ход температурной зависимости сопротивления нанопластин. Отметим, что величина  $R_T/R_{300}$  нанопластины с толщиной 450 нм повторяет, практически в точности, поведение объемного образца (макроскопического, с размерами 3мм×2мм×1мм, вырезанного из мишени). Однако можно заметить, что угол наклона

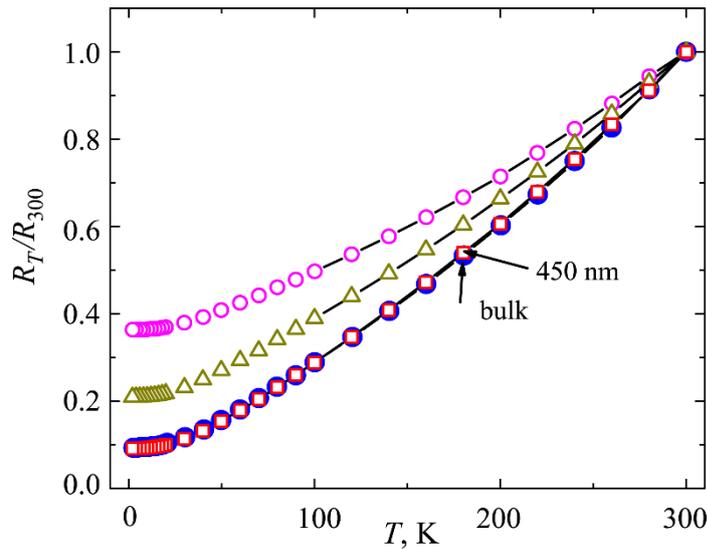


Рис.2. Температурные зависимости нормированного сопротивления объемного образца и нанопластин различной толщины: ● – для объемного образца, □ – для нанопластины с толщиной 450 нм, △ – для нанопластины с толщиной 50 нм, ○ – для нанопластины с толщиной 25 нм.

кривых  $R_T/R_{300}$  уменьшается, а остаточное удельное сопротивление растет при дальнейшем уменьшении толщины образцов. Можно сказать, что соединение  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$  до толщин  $\sim 450$  нм ведет себя как объемный материал. Увеличение сопротивления означает увеличение степени беспорядка в образцах из-за уменьшения их толщины, следствием чего является увеличение интенсивности рассеяния носителей заряда и подавление их подвижности. Измерение холловского сопротивления на образцах с толщинами 450 нм и 25 нм позволило получить величину подвижности  $\mu$  и концентрации  $p$  носителей заряда в этих образцах. При вычислениях использовались соотношения  $\mu = R_{\text{Hall}}/\rho$  и  $p = 1/(R_{\text{Hall}} q)$ , где  $\rho$  – удельное сопротивление,  $R_{\text{Hall}} = (R_{xy} d)/B$  – коэффициент Холла,  $R_{xy}$  – поперечное сопротивление и  $q$  – элементарный заряд. Для образца с толщиной 25 нм имеем:  $\mu = 0.0145$  м<sup>2</sup>/Вс,  $p = 3 \times 10^{26}$  м<sup>-3</sup> при 2К и  $\mu = 0.0075$  м<sup>2</sup>/Вс,  $p = 2 \times 10^{26}$  м<sup>-3</sup> при 300К. Для образца с толщиной 450 нм имеем:  $\mu = 0.43$  м<sup>2</sup>/Вс,  $p = 7.6 \times 10^{25}$  м<sup>-3</sup> при 2К и  $\mu = 0.052$  м<sup>2</sup>/Вс,  $p = 5.7 \times 10^{25}$  м<sup>-3</sup> при 300К. Необходимо отметить, что эти результаты получены при измерениях в магнитных полях ниже 0.5 Т. В более сильных магнитных полях холловское сопротивление, в частности образца с толщиной 450 нм, показывает нелинейную зависимость от магнитного поля. Причиной такого поведения является сосуществование в этом материале дырок с высокой и малой подвижностью [15].

Полученные величины  $\mu$  подтверждают результаты измерения температурной зависимости сопротивления образцов. Единственным источником увеличения беспорядка в монокристаллических нанопластинах с уменьшением их

толщины является увеличение количества дефектов в них. Это предположение подкрепляется также данными по концентрации носителей заряда, полученными посредством измерения холловского сопротивления. Дело в том, что источником носителей заряда в соединении  $Sb_2Te_3$  являются внутренние дефекты, такие как вакансии сурьмы  $Sb$  и антиструктурные дефекты типа  $Sb_{Te}$ . Таким образом, увеличение количества носителей заряда прямо указывает на увеличение количества структурных дефектов. Зависимость концентрации носителей заряда от толщины нанопластин, по-видимому, является следствием того, что поверхность и приповерхностная область образцов насыщена дефектами, а уменьшение толщины приводит к увеличению относительного вклада поверхности и приповерхностной области в транспорт зарядов в образце. Подобная зависимость концентрации носителей заряда от толщины наблюдалась в работе [16].

Полученные результаты по измерению магнитосопротивления нанопластин при 2К и 300К приведены на рис.3. Величина и форма кривых магнитосопротивления образцов демонстрируют сильную зависимость от толщины и температуры нанопластин. Обычное положительное магнитосопротивление, которое должно наблюдаться в данном случае, вызывается силой Лоренца, действующей на заряды, отклоняющей их от первоначальной траектории и вынуждающей их совершать движение по циклотронным орбитам. Это магнитосопротивление зависит квадратично от магнитного поля и подвижности носителей заряда, т.е.  $MR \sim 1 + (\mu B)^2$ . Выявленная сильная зависимость подвижности носителей заряда от толщины нанопластин отражена также на полученных кривых  $MR$ . При высоких температурах подвижность дополнительно подавляется интенсивным рассеянием носителей заряда на фонах. Поэтому у всех нанопластин  $MR$  значительно уменьшается при комнатной температуре по сравнению с величиной

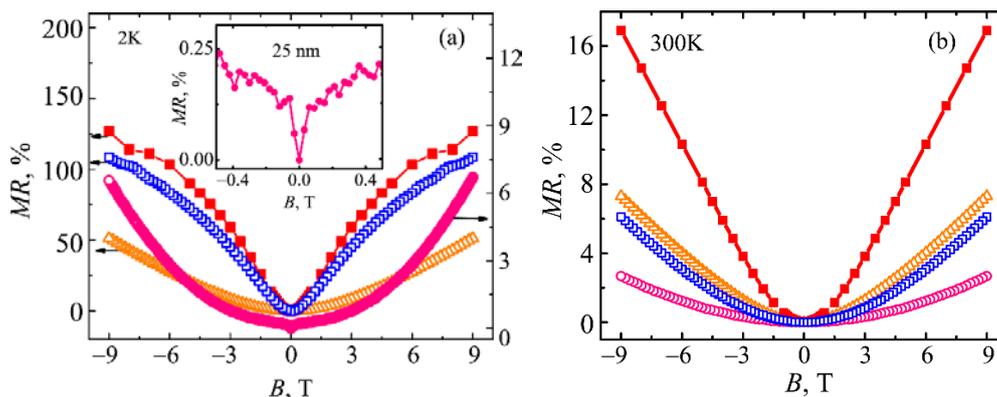


Рис.3. (а) Магнитосопротивление нанопластин при 2К. Вставка показывает аномалию слабой антилокализации. (б) Магнитосопротивление нанопластин при 300К.  $\blacksquare$  – для нанопластины с толщиной 450 нм в поперечном магнитном поле,  $\square$  – для нанопластины с толщиной 450 нм в продольном магнитном поле,  $\Delta$  – для нанопластины с толщиной 50 нм,  $\circ$  – для нанопластины с толщиной 25 нм.

при 2К. Значительная анизотропия магнитосопротивления (зависимость величины  $MR$  от направления магнитного поля) у образца с толщиной 450 нм, вероятно, обусловлена анизотропией эффективной массы ( $m^*$ ) носителей заряда в соединении  $Sb_2Te_3$  [17]. Самая тонкая из исследованных нанопластин демонстрирует аномалию на кривой  $MR$  вблизи нулевого магнитного поля. Эта аномалия является проявлением эффекта антилокализации, присущего топологическим изоляторам, и отражает вклад поверхностных состояний в электронную проводимость [18]. Для поверхностных состояний при сильном спин-орбитальном взаимодействии, когда направление импульса и спина взаимно сильно связаны и защищены симметрией обращения времени, рассеяние запрещено. Включение магнитного поля приводит к ослаблению спин-орбитального взаимодействия и нарушению симметрии. Вследствие этого рассеяние становится разрешенным, что вызывает резкое увеличение сопротивления с ростом магнитного поля. Антилокализационная аномалия четко проявляемая при 2К, постепенно уменьшается с увеличением температуры из-за сокращения фазовой длины когерентности и не наблюдается при 300К [14]. Поскольку этот эффект у более толстых образцов не проявляется, то можно с большой вероятностью предположить, что он обусловлен именно вкладом поверхностных состояний.

На рис.4 приведены значения производной сопротивления нанопластин по магнитному полю  $dMR/dB$  в зависимости от приложенного магнитного поля  $B$ . Эти кривые позволяют прояснить функциональную зависимость  $MR$  от магнитного поля и выявить некоторые характерные особенности ее поведения. Под действием магнитного поля носители заряда пытаются совершать движение по циклотронным орбитам. Как правило магнитосопротивление насыщается или ведет себя  $\sim B^2$  в зависимости от того, соответственно замкнуты или открыты циклотронные орбиты. Условие замкнутости орбит дается неравенством  $\omega_c \tau > 1$ , где  $\omega_c = qB/m^*$  – циклотронная частота и  $\tau$  – время релаксации. В нашем случае ни одна из кривых  $MR$  не показывает насыщение, указывая на то, что циклотронные орбиты в интервале приложенных магнитных полей незамкнуты. Радиус орбиты  $r = \hbar k_F / qB$ , где волновой вектор у поверхности Ферми  $k_F = (3\pi^2 p)^{1/3}$ , для образца с толщиной 450 нм при 2К соответствует величине  $\sim 220$  нм в магнитном поле 4 Т. Таким образом, в магнитных полях  $> 4$  Т орбита носителей заряда уже целиком может лежать в образце с толщиной 450 нм, однако для других образцов она превышает их толщину во всем диапазоне приложенных магнитных полей.

Как видно из рис.4,  $MR$  тонкого образца показывает зависимость  $\sim B^2$  (производная линейна) как при 2К, так и при 300К. Это указывает на то, что рассеяние (вызванное ограниченными размерами, дефектами и фононами), ограничивающее подвижность носителей заряда, достаточно интенсивное и качественно не меняется во всем диапазоне температур и магнитных полей.  $MR$  образца с толщиной 450 нм показывает зависимость  $\sim B^2$  при 2К и 300К в полях  $< 2$  Т. В таких полях орбита носителей заряда сильно превышает размеры образца и качественно не влияет на процессы рассеяния, и условия похожи на те, которые существуют в образце с толщиной 25 нм. В более сильных магнитных полях, когда

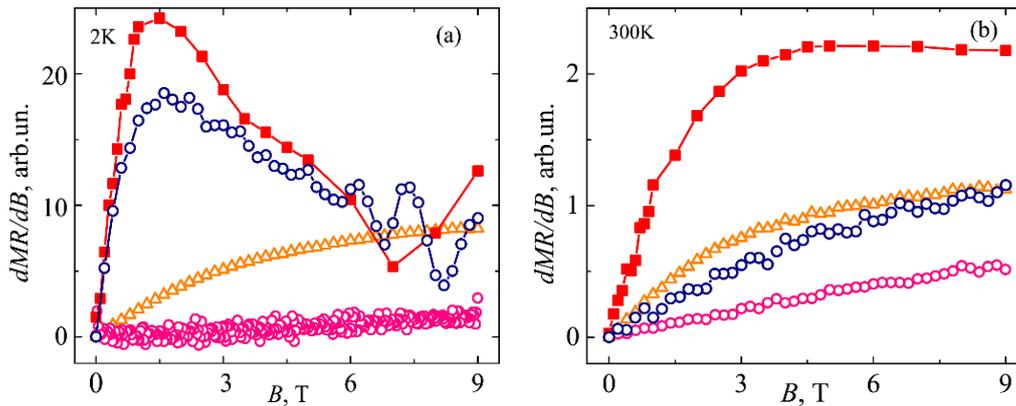


Рис.4. Производные магнитосопротивления по полю. (а) при 2К. (б) при 300К. ■ – для нанопластины с толщиной 450 нм в поперечном магнитном поле, □ – для нанопластины с толщиной 450 нм в продольном магнитном поле, Δ – для нанопластины с толщиной 50 нм, ○ – для нанопластины с толщиной 25 нм.

радиус орбиты носителей заряда сравнивается или становится меньше толщины образца, происходит качественное изменение рассеяния, что и отражается на зависимости  $MR$  от магнитного поля. Вероятно, играет роль присутствие в образце с толщиной 450 нм носителей с высокой и низкой подвижностями. Такое разделение по подвижностям в образце с толщиной 25 нм отсутствует из-за сильного рассеяния, которое нивелирует разницу в подвижностях носителей заряда [15]. Что касается поведения  $MR$  у образца с толщиной 50 нм, то оно демонстрирует что-то промежуточное между двумя крайними случаями, как можно увидеть из рис.4.

Зависимости  $dMR/dB$  от магнитного поля образца с толщиной 450 нм позволили выявить при 2К осцилляции, возрастающие с увеличением магнитного поля (см. рис.4а) и идентифицированные как осцилляции Шубникова–де Гааза. Осцилляции периодичны по обратному полю ( $1/B$ ) с частотой  $F = 36$  Т. Поскольку эти осцилляции у исследуемого образца наблюдаются как в поперечном, так и в продольном магнитном поле, то они скорее всего относятся к объемным состояниям, т.к. поверхностные состояния не должны давать отклик в продольном магнитном поле.

#### 4. Заключение

Таким образом, измерено магнитосопротивление нанопластин различной толщины соединения  $Sb_2Te_3$ , принадлежащего к классу топологических изоляторов, в магнитных полях до 9 Т и при температурах 2К и 300К. Сильная зависимость магнитосопротивления от толщины нанопластин и их температуры припи-

сывается поведению подвижности носителей заряда, которая в свою очередь зависит от толщины нанопластин и их температуры. На магнитосопротивлении наиболее тонкого образца с толщиной 25 нм выявлена аномалия слабой антилокализации, присущая топологическим изоляторам и являющаяся вкладом поверхностных состояний в электронный транспорт. Осцилляции Шубникова–де Гааза выявлены на кривых магнитосопротивления наиболее толстого образца с толщиной 450 нм, которые являются откликом объемных состояний на приложенное магнитное поле.

Автор выражает благодарность профессору Янг Юан Чену за предоставленную возможность проведения измерений в Лаборатории низких температур и наноматериалов Института Физики (Тайбей, Тайвань).

#### ЛИТЕРАТУРА

1. **C. Wood.** Rep. Prog. Phys., **51**, 459 (1988).
2. **H. Zhang, Ch.-H. Liu, X.-L. Qi, X. Dai, Zh. Fang, Sh.-Ch. Zhang.** Nat. Phys., **5**, 438 (2009).
3. **J. Zhang, C.-Z. Chang, Z. Zhang, J. Wen, X. Feng, K. Li, M. Liu, K. He, L. Wang, X. Chen, Q.-K. Xue, X. Ma, Y. Wang.** Nat. Comm., **2**, 574 (2011).
4. **M.Z. Hasan, C.L. Kane.** Rev. Modern. Phys., **82**, 3045 (2011).
5. **J.E. Moore.** Nature, **464**, 194 (2010).
6. **Y. Ando, S.-C. Zhang.** Physics, **1**, 6 (2008).
7. **J.G. Analytis, R.D. McDonald, S.C. Riggs, J.H. Chu, G.S. Boebinger, I.R. Fisher.** Nat. Phys., **6**, 960 (2011).
8. **H. Steinberg, D.R. Gardner, Y.S. Lee, P. Jarillo-Herrero.** Nano Lett., **10**, 5032 (2010).
9. **J. Lee, J. Park, J.-H. Lee, J.S. Kim, H.-J. Lee.** Phys. Rev. B, **86**, 245321 (2012).
10. **S.S. Hong, J.J. Cha, D. Kong, Y. Cui.** Nat. Commun., **3**, 756 (2012).
11. **S. Matsuo, T. Koyama, K. Shimamura, T. Arakawa, Y. Nashihara, D. Chiba, K. Koboyashi, T. Ono, C.-Z. Chang, K. He, X.-C. Ma, Q.-K. Xue.** Phys. Rev. B, **85**, 075440 (2012).
12. **L. Bao, L. He, N. Meyer, X. Kou, P. Zhang, Z.-G. Chen, A.V. Fedorov, J. Zou, T.M. Riedemann, T.A. Lograsso, K.L. Wang, G. Tuttle, F. Xiu.** Nat. Commun, **2**, 726 (2012).
13. **Y. Jiang, Y. Wang, M. Chen, Z. Li, C. Song, K. He, L. Wang, X. Chen, X. Ma, Q.-K. Xue.** Phys. Rev. Lett., **108**, 016401 (2012).
14. **Y.-C. Huang, P.C. Lee, C.H. Chien, F.Y. Chiu, Y.Y. Chen, S.R. Harutyunyan.** Physica B, **452**, 108 (2014).
15. **P.C. Lee, Y.-Ch. Huang, C.H. Chien, F.Y. Chiu, Y.Y. Chen, S.R. Harutyunyan.** Physica B, **459**, 12 (2015).
16. **Y.S. Kim, M. Brahlek, N. Bansal, E. Edrey, G.A. Kapilevich, K. Iida, M. Tanimura, Y. Horibe, S.W. Cheong, S. Oh.** Phys. Rev. B, **84**, 073109 (2011).
17. **V.A. Kulbachinskii, Z.M. Dashevskii, M. Inoue, M. Sasaki, H. Negishi, W.X. Gao, P. Lostak, J. Horak.** Phys. Rev. B, **52**, 10915 (1995).
18. **J.H. Bardarson, J.E. Moore.** Rep. Prog. Phys., **76**, 056501 (2013).

**Sb<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> ՆԱՆՈԹԻԹԵՂՆԵՐԻ ՀԱՍՏՈՒԹՅՈՒՆԻՑ ԿԱԽՎԱԾ  
ՄԱԳՆԻՍԱԴԻՄԱԴՐՈՒԹՅՈՒՆԸ ԵՎ ԹՈՒՅԼ ԱՆՏԻԼՈԿԱԼԻԶԱՑՄԱՆ ԵՐԵՎՈՒՅԹԸ  
Ս.Ր. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ**

Հետազոտված են տարբեր հաստության Sb<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> միաբյուրեղ նանոթիթեղների (որոնք պատկանում են տոպոլոգիական մեկուսիչների դասին) մագնիսադիմադրությունը: Չափումները, որոնք կատարվել են 2 Կ և 300 Կ ջերմաստիճաններում և մինչև 9 Տ մագնիսական դաշտերում ցույց են տալիս, որ մագնիսադիմադրությունները ուժեղ կախված են նանոթիթեղների հաստությունից և ջերմաստիճանից: Մագնիսադիմադրության այդպիսի վարքը պայմանավորված է լիցքակիրների շարժունակության վարքով, որը իր հերթին կախված է նանոթիթեղների հաստությունից և ջերմաստիճանից: Ամենաբարակ՝ 25 նմ հաստություն ունեցող նմուշի մագնիսադիմադրության կորը ցուցադրում է վառ արտահայտված թույլ անտիլոկալիզացման երևույթը, որը հատուկ է տոպոլոգիական մեկուսիչներին և ցույց է տալիս մակերևութային վիճակների ներդրումը էլեկտրոնային փոխադրումների մեջ: Շուբնիկովի–դե Հասսի տատանումները ցուցաբերվել են ամենահաստ նմուշի (450 նմ հաստությամբ) մագնիսադիմադրության կորի վրա որը հանդիսանում է ծավալային վիճակների պատասխանը մագնիսական դաշտի կիրառմանը:

**THICKNESS-DEPENDENT MAGNETORESISTANCE OF Sb<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> NANOFILAKES  
AND WEAK ANTILOCALIZATION EFFECT**

S.R. HARUTYUNYAN

Magnetoresistance of single crystalline Sb<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> topological insulator nanoflakes of different thickness has been studied in magnetic fields up to 9 T at temperatures of 2K and 300K. The obtained values of magnetoresistance demonstrate strong dependence on thickness of the nanoflakes. The behavior of the magnetoresistance was attributed to the behavior of the mobility of charge carriers which in its turn depends on thickness and temperature of the nanoflakes. The magnetoresistance of the sample with the thickness of 25 nm shows pronounced weak antilocalization effect (inherent for topological insulators) which is the contribution of surface states to the electronic transport. Shubnikov–de Haas oscillations were revealed on the magnetoresistance of the thickest sample (with the thickness of 450 nm) which is a response of the bulk states on applied magnetic field.

УДК 537.86

## ГАММА-СКАНЕР ДЛЯ КОНТРОЛЯ РАДИОХИМИЧЕСКОЙ ЧИСТОТЫ МЕДИЦИНСКИХ ИЗОТОПОВ

Г.С. АРУТЮНЯН

Национальная научная лаборатория им. А.И. Алиханяна, Ереван, Армения

e-mail: gevharut@mail.yerphi.am

(Поступила в редакцию 20 февраля 2015 г.)

Разработан и испытан гамма-сканер для измерения радиохимической чистоты радиоактивных изотопов. Осуществлено измерение радиологической чистоты пертехнетата натрия. Результаты измерения подтвердили возможность использования устройства при производстве медицинских изотопов.

### 1. Введение

В Национальной научной лаборатории им. А.И. Алиханяна (ННЛА) разработана методика получения  $^{99}\text{Mo}/^{99\text{m}}\text{Tc}$  на пучке вторичных гамма-квантов от линейного ускорителя электронов ЛУЭ50 [1–3]. Осуществлены экспериментальные исследования по измерению удельной активности выхода  $^{99}\text{Mo}/^{99\text{m}}\text{Tc}$  [4–6], показана принципиальная возможность получения указанного медицинского изотопа высокой чистоты альтернативным нереакторным методом.

При производстве медицинских изотопов необходима проверка радиоизотопной и радиохимической чистоты. Общепринятым способом определения радиохимической чистоты радиоизотопа является метод восходящей бумажной хроматографии [7]. Многие производители для контроля радиохимической чистоты изотопов, например  $^{99\text{m}}\text{Tc}$ , применяют сложные дорогостоящие гамма-анализаторы и сканеры, используя только небольшую часть потенциальных возможностей таких приборов. Необходимые для такого анализа функции вполне можно осуществить намного более простым прибором.

Целью настоящей работы являлась разработка и создание опытного экземпляра такого устройства.

### 2. Радиохимическая чистота и методика измерения

Радиохимической чистотой называется отношение активности радионуклида, который присутствует в препарате в устойчивой химической форме основного вещества, к общей активности радионуклида в этом препарате, выраженное в процентах [8].

Параметр радиохимической чистоты целесообразно рассмотреть на

примере радиоактивного изотопа технеция  $^{99m}\text{Tc}$ , широко применяемого в радиологии при сканировании методом однофотонной компьютерной томографии (ОФКТ) [9].

Независимо от метода получения этого изотопа в конечном продукте присутствует как атомарный Tc, так и ионы пертехнетата натрия  $\text{NaTcO}_4$  в виде  $[\text{TcO}_4]^-$ . Атомарный технеций не участвует в процессах метаболизма живого организма. Главным компонентом радиофармпрепарата на основе пертехнетата натрия являются ионы  $[\text{TcO}_4]^-$ .

В фармакопейной статье (нормативно-технический документ, устанавливающий требования к качеству лекарственного препарата) по пертехнетату натрия имеется требование к процентному содержанию атомарного Tc – не более 5% от общего количества радиоактивных атомов.

### **2.1. Метод бумажной хроматографии**

В бумажной хроматографии вещества различаются по их относительному положению на бумаге после того, как растворитель пройдет определённое расстояние. Небольшое количество раствора смеси (10–20 мкл), которую нужно разделить, наносят в отмеченную точку на бумаге и высушивают. Полученное пятно называют стартовым. Затем бумагу помещают в герметичную камеру и один её конец погружают в растворитель, который является подвижной фазой. Под действием капиллярных сил растворитель движется по бумаге, растворяя и увлекая за собой компоненты образца. До начала движения образец должен полностью раствориться, поэтому скорость растворения компонентов в подвижной фазе является одним из факторов, определяющих эффективность разделения. После того, как растворитель пройдет определённое расстояние, лист вынимают и сушат. Затем образовавшиеся пятна, которые могут быть как видимыми, так и невидимыми, обнаруживают и отмечают.

### **2.2. Измерение радиохимической чистоты методом бумажной хроматографии**

Поскольку и атомарный Tc, и ионный  $[\text{TcO}_4]^-$  являются одинаково радиоактивными, возможно измерение пропорции активностей  $\text{Tc}/[\text{TcO}_4]^-$  методом тонкослойной (бумажной) хроматографии. Для этого на один конец тонкой полоски хроматографической бумаги наносят микрокаплю пертехнетата натрия и затем проявляют ее элюатом – метиловым спиртом. Ионная компонента продвигается к противоположному краю хроматографической полоски, а атомарная остается на месте. После этого измерение активности вдоль полоски бумаги дает информацию о соотношении  $\text{Tc}/[\text{TcO}_4]^-$ .

## **3. Устройство сканера и принцип его работы**

Для измерения радиологической чистоты медицинских изотопов в ННЛА был разработан гамма-сканер для измерения радиологической чистоты

медицинских изотопов.

Блок-схема этого гамма-сканера изображена на рис.1. Гамма-сканер состоит из блока управления, в который входят электронные платы для счета импульсов (5) и для управления шаговым двигателем (7), блока высоковольтного питания, дискриминатора (4), усилителя входного сигнала (3), механизма с шаговым двигателем (8) и сцинтилляционного счетчика (2).

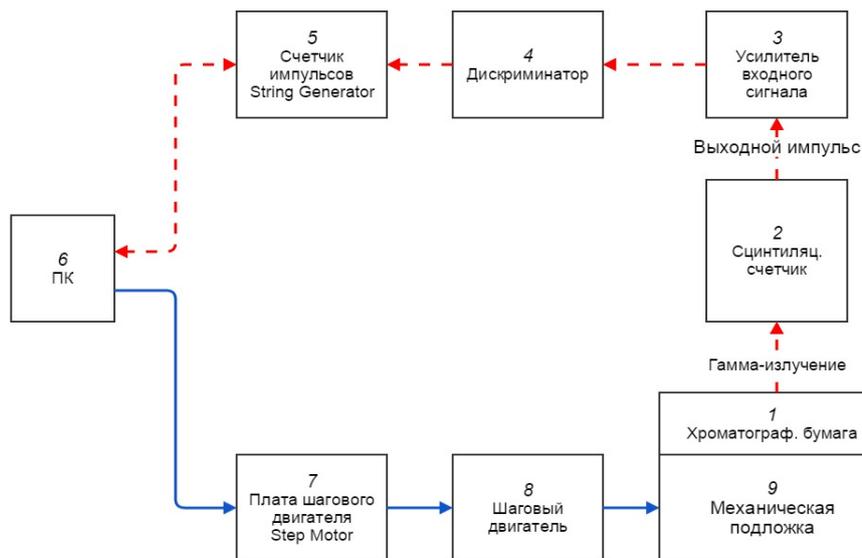


Рис.1. Блок-схема гамма-сканера.

Для осуществления сканирования обработанная хроматографическая бумага (1) ставится на механическую подложку (9). Сцинтилляционный счетчик (2) регистрирует гамма-излучение с данной позиции хроматографической бумаги. Выходной импульс проходит через усилитель (3). Дискриминатор (4) преобразует аналоговые импульсы с детектора в цифровой импульс, который подается на счетчик импульсов (5). Данные отправляются на персональный компьютер ПК (6) через интерфейс RS232. Программное обеспечение суммирует количество импульсов со счетчика в заданном промежутке времени. По окончании заданного промежутка времени счет импульсов на данной позиции хроматографической бумаги заканчивается. ПК отправляет сигнал на плату шагового двигателя (7). Шаговый двигатель перемещает подложку с хроматографической бумагой на следующую позицию. Цикл счета повторяется до последней позиции хроматографической бумаги.

После измерения строится график распределения активности вдоль хроматографической бумаги и измеряется соотношение  $Tc/[TcO_4]^-$ .

Общий вид гамма-сканера представлен на рис.2.

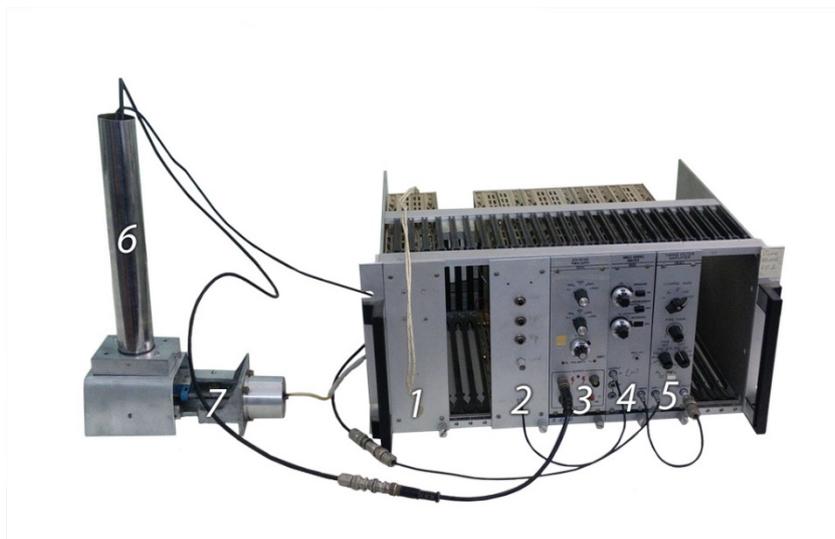


Рис.2. Общий вид гамма-сканнера: 1 – источник питания, 2 – блок управления, 3 – источник высоковольтного питания, 4 – дискриминатор, 5 – усилитель, 6 – сцинтилляционный счетчик, 7 – шаговый двигатель с подложкой для хроматографической бумаги.

Сцинтилляционный счетчик состоит из коллиматора с диаметром отверстия 5 мм, сцинтилляционного кристалла NaI(Tl) с диаметром 22 мм и высотой 35 мм и фотоэлектронного умножителя ФЭУ-87.

Блок управления состоит из двух модулей: электронная плата String Generator, которая осуществляет обработку и счет входных импульсов с сцинтилляционного счетчика, и электронная плата Step Motor, которая осуществляет управление шаговым двигателем. Сцинтилляционный счетчик подключен к источнику высоковольтного питания, а выходной импульс с него усиливается с помощью усилителя, проходит через дискриминатор и подается с него на плату String Generator.

Коммуникация с компьютером осуществляется с помощью порта RS232. На платах String Generator и Step Motor установлены микроконтроллеры PIC, запрограммированные на ассемблере. Программное обеспечение ПК написано в среде Visual Basic 6.

Программное обеспечение позволяет устанавливать следующие параметры сканирования: длину шага, время сканирования каждого шага, количество шагов. После сканирования данные сохраняются в формате DAT-файлов и обрабатываются в Microsoft Office Excel.

#### **4. Измерение радиохимической чистоты пертехнетата натрия**

Для осуществления сканирования измеряется активность вдоль хроматографической бумаги и строится график распределения активности соответствующей спектральной линии измеряемого изотопа.

Осуществлено исследование чистоты пертехнетата натрия со следующими параметрами сканирования: шаг сканирования 3мм, время сканирования каждого шага 300 с, количество шагов 13. Результаты сканирования приведены на рис.3.

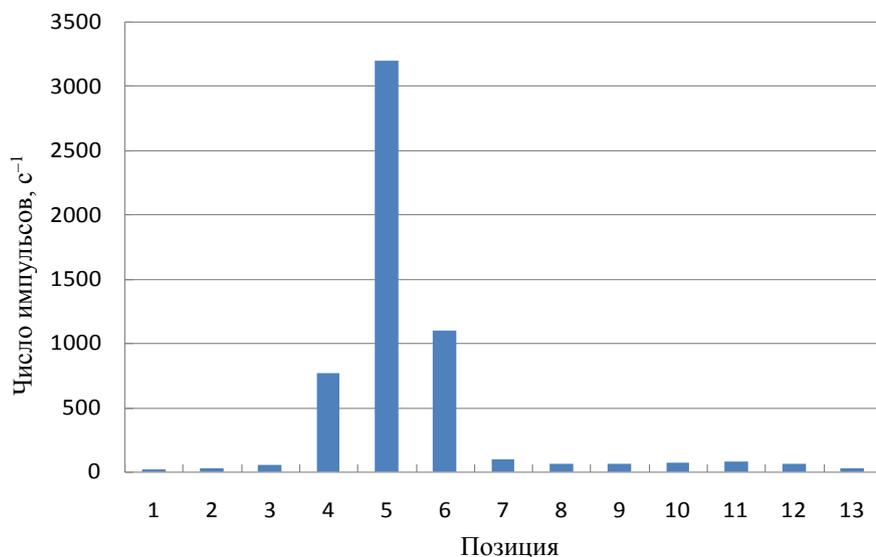


Рис.3. Результаты сканирования пертехнетата натрия.

По произведенному сканированию видно, что ионная часть пертехнетата скопилась в 5-ой позиции хроматографической бумаги. Атомарная составляющая относительно мала по сравнению с ионной частью и наблюдается в позициях 10 и 11 хроматографической бумаги при логарифмическом масштабе.

## 5. Заключение

Разработано, изготовлено и испытано устройство для измерения радиохимической чистоты радиоактивных изотопов для медицины. Использовался метод восходящей тонкослойной бумажной хроматографии. В качестве детектора использован сцинтилляционный кристалл NaI(Tl). Устройство выводит данные в компьютер и является автономным прибором. Контрольные измерения радиохимической чистоты радиоизотопа технеция  $^{99m}\text{Tc}$  показали полное соответствие требованиям, предъявляемым фармакопейной статьей.

Работа выполнена за счет бюджетного финансирования РА, Программы поддержки инновационных проектов ННЛА (ЕрФИ), а также гранта МАГАТЭ - IAEA CRP-18029(R0).

Автор благодарит А.Э. Аветисяна и Н.М. Оганесяна за поддержку в работе, С.Г. Арутюняна за помощь при проведении экспериментов.

## ЛИТЕРАТУРА

1. **Р.О. Авакян, А.Э. Аветисян, А.З. Бабаян и др.** Изв. НАН Армении, Физика, **45**, 69 (2010).
2. **А.Э. Аветисян, С.Г. Арутюнян, И.Е. Васинюк и др.** Изв. НАН Армении, Физика, **46**, 389 (2011).
3. **Р.О. Авакян, А.Э. Аветисян и др.** Изв. НАН Армении, Физика, **47**, 9 (2012).
4. **R.H. Avakian, A.E. Avetisyan, R.K. Dallakyan, I.A. Kerobyan.** Armenian Journal of Physics, **6**, 35 (2013).
5. **A.E. Avetisyan.** Proc. Conf. Radiation Safety Challenges in the 21st Century, Yerevan, Armenia, 20–21 June 2012, p.13;  
[http://www.istc.ru/istc/istc.nsf/va\\_WebPages/RadiationSafetyArmeniaEng](http://www.istc.ru/istc/istc.nsf/va_WebPages/RadiationSafetyArmeniaEng)
6. **R.H. Avagyan, A.E. Avetisyan, I.A. Kerobyan, R.K. Dallakyan.** Nuclear Medicine and Biology, **41**, 705 (2014).
7. **И.В. Целищев, Ю.П. Савочкин, М.И. Мельник, Т.Ф. Трепалина.** Радиохимия, **49**, 159 (2007).
8. Национальный Стандарт Российской Федерации (ГОСТ Р). Ядерная медицина. стр. 9, пункт 72; [www.nuclearmedicine.ru/images/files/standart/06.pdf](http://www.nuclearmedicine.ru/images/files/standart/06.pdf)
9. **H. Targholizadeh, G. Raisali, A.R. Jalilian et al.** Nukleonika, **55**, 113 (2010).

ԲԺՇԿԱԿԱՆ ԻԶՈՏՈՊՆԵՐԻ ՌԱԴԻՈԼՈԳԻԱԿԱՆ  
ՄԱՔՐՈՒԹՅԱՆ ՍՏՈՒԳՄԱՆ ՀԱՄԱՐ ԳԱՄՄԱ-ՍՔԱՆԵՐ

Գ.Ս. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ

Նախագծված, ստեղծված և փորձարկված է զամմա-սքաներ՝ ռադիոակտիվ իզոտոպների ռադիոքիմիական մաքրության չափման համար: Կատարված է նատրիումի պերտեխնետի ռադիոքիմիական մաքրության չափում: Չափման արդյունքները հաստատել են, որ ստեղծված սարքը հնարավոր է կիրառել բժշկական իզոտոպների արտադրության ժամանակ:

GAMMA-SCANNER FOR RADIOCHEMICAL  
PURITY CONTROL OF MEDICAL ISOTOPEs

G.S. HARUTYUNYAN

A gamma-scanner for radiochemical purity measurement of medical isotopes was designed and tested. The measurements of radiochemical purity of sodium pertechnetate were done. Results of measurements showed a possibility of device application for medical isotopes production.

УДК 535.412

## **РЕНТГЕНОВСКИЙ ИНТЕРФЕРОМЕТР В РЕЖИМЕ ДЕЛЕНИЯ АМПЛИТУДЫ НА ОСНОВЕ ДВУХУРОВНЕВЫХ ФРЕНЕЛЕВСКИХ ЗОННЫХ ПЛАСТИН**

Л.А. АРУТЮНЯН

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

e-mail: levon.har@gmail.com

(Поступила в редакцию 11 декабря 2015 г.)

Рассмотрен рентгеновский интерферометр, состоящий из трех френелевских зонных пластин с общей оптической осью. Интерферометр работает в режиме деления амплитуды и не накладывает жесткие требования к когерентным характеристикам исходного излучения. Он является модификацией ранее рассмотренного аналогичного интерферометра с тем основным различием, что трудоемкие в изготовлении многоуровневые зонные пластины заменены обычными – двухуровневыми. Методом численного моделирования рассмотрены продольно- и поперечно-дефокусированные разновидности интерферометра.

### **1. Введение**

В настоящее время одним из основных методов фокусировки жесткого рентгеновского излучения является использование френелевских зонных пластин (ФЗП) [1–3]. Основным недостатком такого подхода является наличие разных порядков фокусировки [4]. Это уменьшает эффективность фокусировки, а также заставляет использовать различные устройства (устройство отбора порядка, ножей и диафрагм) для блокировки нежелательных порядков дифракции. С другой стороны, эта же особенность позволяет использовать ФЗП в рентгеновской интерферометрии в качестве делителей и анализаторов. Такой подход очень важен, так как позволяет получать увеличенное изображение интерференционной картины.

В настоящее время уже реализованы рентгеновские интерферометры, состоящие из двух ФЗП, расположенных как на общей подложке [5], так и смещенных друг относительно друга вдоль оптической оси [6,7]. Показана также их пригодность для отображения фазового контраста слабопоглощающих объектов. Указанные интерферометры работают в режиме деления волнового фронта и предъявляют жесткие требования к когерентным характеристикам используемого излучения. Поэтому они используют синхротронные источники жесткого рентгеновского излучения третьего поколения.

Нами уже был рассмотрен рентгеновский интерферометр из трех ФЗП с общей оптической осью, работающий в режиме деления амплитуды [8]. Показана

возможность его применения для отображения фазового контраста [9]. Для подавления нежелательных каналов дифракции в этом интерферометре используются не обычные – двухуровневые, а многоуровневые зонные пластины [10], изготовление которых – трудоемкая задача.

В настоящей работе рассматривается модификация этого интерферометра с целью замены вышеуказанных многоуровневых ФЗП на обычные – двухуровневые. При этом эффективность фокусировки последних может быть существенно ниже теоретического предела эффективности двухуровневых ФЗП. Подавление влияния нежелательных каналов дифракции на интерференционную картину осуществляется двумя ножами, расположенными на первой и третьей ФЗП, и достаточным удалением детектора интерференционной картины от интерферометра. Рассмотрены также продольно- и поперечно-дефокусированные разновидности предложенного интерферометра.

## 2. Схема и принцип работы интерферометра

Рассмотрим интерферометр, состоящий из трех ФЗП с общей главной оптической осью и удаленных друг от друга на  $2F$ , где  $F$  – фокусное расстояние ФЗП. Исходная плоская волна жесткого рентгеновского излучения падает на первую ФЗП параллельно главной оптической оси, как показано на рис.1. Обозначим через  $(i, j, k)$  волновой пакет, дифрагированный в  $i, j$  и  $k$  порядки соответственно на первой, второй и третьей ФЗП. С учетом только 0, +1 и –1 порядков дифракций в интерферометре образуются 27 каналов распространения. Предполагается регистрировать интерференцию между каналами  $(0,1,1)$  и  $(1,1,0)$ . Для исключения влияния остальных каналов на интерференционную картину используются два ножа, расположенных на первой и третьей ФЗП. Построением хода лучей в рамках геометрической оптики можно показать, что остальные 25 каналов не будут пересекаться регистрируемой интерференционной картиной, если расстояние от третьей ФЗП до детектора удовлетворяет условию

$$f > \max(5/3, R/d - 1)F, \quad (1)$$

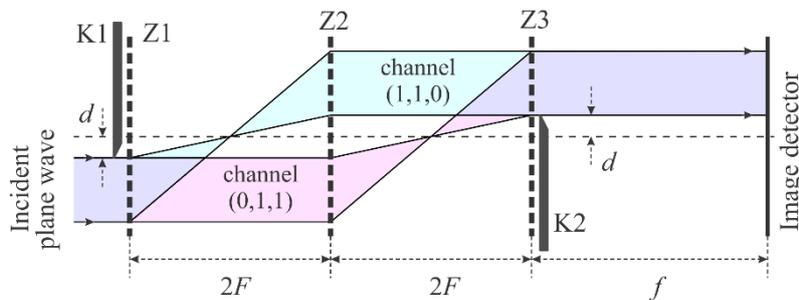


Рис.1. Схематическая картина интерферометра. Z1, Z2, Z3 – соответственно делитель, зеркало и анализатор, K1 и K2 – ножи.

где  $R$  – радиусы ФЗП и  $d$  – расстояние краев ножей от оптической оси.

Как видно из приведенного на рис.1 хода лучей интерферирующих пучков, первый блок интерферометра (первая ФЗП) действует как делитель, второй – как зеркала и третий – анализатор. Интерферометр работает в режиме деления амплитуды и с равными длинами траекторий в обоих каналах распространения. Это снижает требования к пространственной и временной когерентности используемого излучения.

Представленный интерферометр можно рассматривать как аналог ставшего уже классическим трехблочного рентгеновского интерферометра с лауевской геометрией дифракции (ЛЛЛ-интерферометр) [11,12]. Если работа последнего основана на существовании разных порядков брэгговской дифракции жесткого рентгеновского излучения в кристаллах, то в предложенном интерферометре используются различные порядки дифракции на ФЗП. Отметим, что ЛЛЛ-интерферометр был экспериментально реализован еще в 60-ых годах прошлого столетия, когда основными источниками жесткого рентгеновского излучения были лабораторные рентгеновские трубки.

### 3. Продольная дефокусировка интерферометра

Если анализатор сместить вдоль оптической оси на расстояние  $\Delta f \ll F$ , то канал дифракции (0,1,1) от плоской волны преобразится в сходящийся или расходящийся пучок в зависимости от направления смещения. В результате фазовое распределение канала (0,1,1) на детекторе представится в виде

$$\exp\left(\mp \frac{\pi}{\lambda p} r^2\right), \quad (2)$$

где  $r$  – расстояние рассматриваемой точки от оптической оси,  $p = L \mp f$ ,  $L = F(F \pm \Delta f)/\Delta f$  – расстояние от анализатора до точки фокусировки (мнимого источника) при смещении анализатора вправо (влево). В приведенных выражениях верхний знак соответствует смещению анализатора вправо, нижний – влево. Интерференция этой волны с плоской волной канала распространения (1,1,0) приведет к образованию интерференционной картины на детекторе в виде концентрических полуколец с центром на оптической оси и радиусами

$$r_n = \sqrt{2\lambda p n} \quad (n = 1, 2, \dots), \quad (3)$$

что представляет френелевскую зонную структуру.

Схематическая картина хода лучей дефокусированного интерферометра при смещении анализатора влево приведена на рис.2а. На рис.2б приведена численно смоделированная интерференционная картина. Моделирование распространения рентгеновских лучей в интерферометре проведено на основе интегрирования уравнения Гельмгольца методом двумерного Фурье-преобразования [13]. При этом ФЗП считается плоским объектом с соответствующим комплекс-

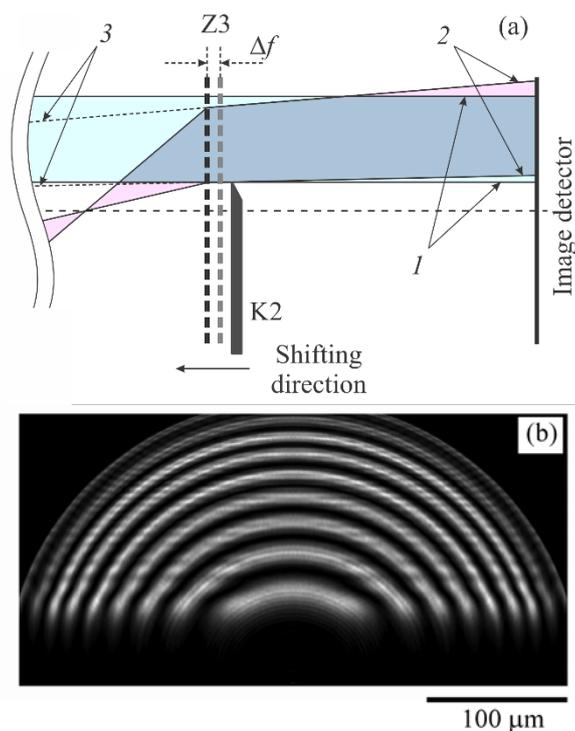


Рис.2. Продольно-дефокусированный интерферометр при смещении анализатора влево: (а) ход лучей, (б) численно смоделированная интерференционная картина.  $I$  – канал дифракции  $(1,1,0)$ ,  $2$  – канал дифракции  $(0,1,1)$ ,  $3$  – продолжение лучей канала  $(0,1,1)$ , пересекающихся на мнимом источнике. Величина смещения анализатора  $\Delta f = 5$  см.

ным коэффициентом прохождения, являющимся функцией двух пространственных координат. Такой упрощенный подход оправдан из-за слишком малого углового расхождения рентгеновских лучей в интерферометре и малого отличия показателя преломления от единицы [14,15]. При моделировании использованы следующие значения основных параметров. Длина волны рентгеновского излучения  $\lambda = 0.1$  нм, фокусное расстояние ФЗП  $F = 1$  м, число френелевских зон  $n = 380$ . Соответственно, внешний радиус ФЗП составляет  $r_n = 195$  мкм, ширина последней зоны  $\Delta r_n = 257$  нм. Глубина рельефа кремневых ФЗП была выбрана  $h = 6.32$  мкм, что приводит к эффективности фокусировки первого порядка 13.8% (без учета поглощения на подложке ФЗП). Расстояние краев ножей от оптической оси составляет  $d = 0.2r_n = 39$  мкм, расстояние анализатор – детектор  $f = 4$  м, смещение анализатора от положения, соответствующего не дефокусированному интерферометру, составляет  $\Delta f = 5$  см.

Кроме концентрических полуколец на интерференционной картине заметны горизонтальные линии, которые, вероятнее всего, являются результатом дифракции рентгеновских лучей на краях ножей.

#### 4. Поперечная дефокусировка интерферометра

Если анализатор сместить перпендикулярно оптической оси на расстояние  $\tau \ll r_n$ , то канал дифракции (0,1,1), являющийся отображением точки фокусировки S, наклонится в сторону смещения на угол  $\varphi = \tau/F$ . В результате на детекторе образуется интерференционная картина в виде параллельных полос, перпендикулярных направлению смещения, с периодом  $T = \lambda F/\tau = r_1^2/\tau$ , где  $r_1 = \sqrt{\lambda F}$  – радиус первой френелевской зоны ФЗП.

На рис.3а,б приведены схема хода лучей и численно смоделированная интерференционная картина, соответственно, поперечно-дефокусированного интерферометра. Автор надеется, что полученную интерференционную картину можно использовать в задачах отображения фазового контраста в качестве базовых интерференционных полос для восстановления разности фаз интерферирующих пучков по методу Фурье-преобразования [16].

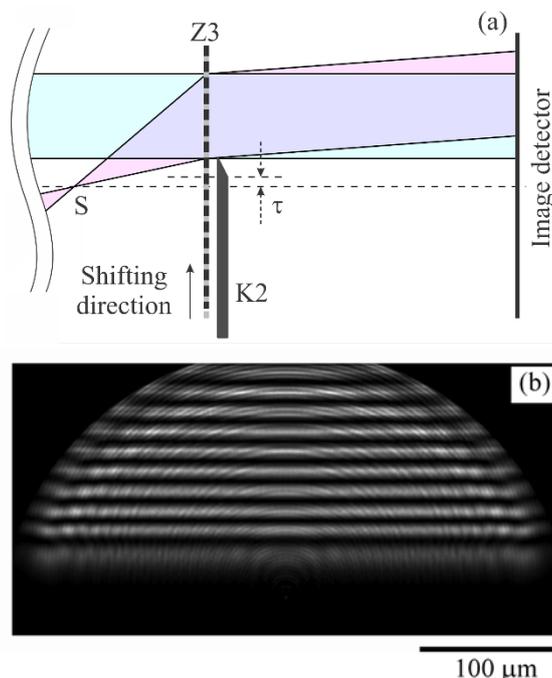


Рис.3. Поперечно-дефокусированный интерферометр: (а) ход лучей, (б) численно смоделированная интерференционная картина. Величина смещения анализатора  $\tau = 7$  мкм.

#### 5. Заключение

Предложен трехблочный интерферометр жесткого рентгеновского излучения, состоящий из двухуровневых ФЗП. Первый блок интерферометра действует как делитель, второй и третий – как зеркала и анализатор, соответственно. Интерферометр работает в режиме деления амплитуды и с равными длинами

траекторий в двух каналах распространения. Это снижает требования к пространственной и временной когерентности используемого излучения. Методом 3D моделирования рассмотрены продольно- и поперечно-дефокусированные разновидности этого интерферометра.

Автор надеется, что рассмотренный интерферометр можно использовать в задачах отображения фазового контраста в режиме оптического увеличения.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. **A.V. Baez.** *J. Opt. Soc. Am.*, **42**, 756 (1952).
2. **W. Yun, B. Lai, Z. Cai, et al.** *Rev. Sci. Instrum.*, **70**, 2238 (1999).
3. **B. Lai, W.B. Yun, D. Legnini, Y. Xiao, J. Chrzas, et al.** *Appl. Phys. Lett.*, **61**, 1877 (1992).
4. **A.G. Michette.** *Optical Systems for Soft X-Rays.* New York, Plenum Press, 1986.
5. **Т. Койама, А. Саикубо, К. Шимосе, К. Хаяши, А. Накагава, et al.** *IPAP Conf. Ser., Proc. 8th Int. Conf. X-ray Microscopy*, **7**, 389 (2006).
6. **Т. Вилейн, В. Кавлич, Ж. Сусини.** *Opt. Commun.*, **193**, 19 (2001).
7. **Т. Койама, Т. Тсуji, К. Йосида, Н. Такано, Y. Tsusaka, Y. Kagoshima.** *Jpn. J. Appl. Phys.*, **45**, L1159 (2006).
8. **L.A. Haroutunyan, K.G. Trouni, A.V. Kuyumchyan.** *AIP Conf. Proc.*, **1365**, 243 (2011).
9. **Л.А. Арутюнян, К.Г. Труни, Г.М. Оганесян.** *Известия НАН Армении, Физика*, **46**, 368 (2011).
10. **E. Di Fabrizio, F. Romanato, M. Gentili, et al.** *Nature*, **401**, 895 (1999).
11. **U. Bonse, M. Hart.** *Appl. Phys. Lett.*, **6**, 155 (1965).
12. **U. Bonse, M. Hart.** *Z. Physik.*, **188**, 154 (1965).
13. **J.W. Goodman.** *Introduction to Fourier Optics.* New York, McGraw-Hill, 1996.
14. **V.G. Kohn, I.I. Snigireva, A. Snigirev.** *Crystallogr. Reports*, **51**, S4 (2006).
15. **В.Г. Кон, М.А. Орлов.** *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*, **11**, 76 (2010).
16. **M. Takeda, H. Ina, S. Kobayashi.** *J. Opt. Soc. Am.*, **72**, 156 (1982).

#### AMPLITUDE-DIVISION TYPE X-RAY INTERFEROMETER BASED ON BI-LEVEL FRESNEL ZONE PLATES

L.A. HAROUTUNYAN

X-ray interferometer consisting of three Fresnel zone plates with a common optical axis was considered. Interferometer operates in the amplitude-division regime and does not impose strong requirements to the coherency of initial radiation. The presented interferometer is a modification of already considered one with such main difference, that laborious in fabrication the multilevel Fresnel zone plates replaced by ordinary bi-level ones. The longitudinal and transverse defocussed modifications of interferometer were considered by numerical simulation method.

ԲՈՎԱՆԴԱԿՈՒԹՅՈՒՆ

<b>Տ.Ա. Շահվերդյան, Տ.Ա.Իշխանյան, Ա.Ե.Գրիգորյան, Ա.Մ.Իշխանյան.</b> Քվանտային երկմակարդակ խնդրի վերլուծական լուծումները երկակի, երկ- և եռակոն- ֆլուենտ Հոյնի ֆունկցիաներով.....	283
<b>Գ.Ա. Աբովյան.</b> Քվանտային անցումների դինամիկական Մագնուսի պատկերաց- մամբ.....	304
<b>Է.Ա. Գազազյան, Գ.Հ. Գրիգորյան, Վ.Օ. Չալտիկյան.</b> Ատոմների ռիդերգյան վիճակների գրգռումը բնակեցվածությունների ադիաբատ տեղափոխման միջոցով.....	312
<b>Վ.Կ. Աբրահամյան.</b> Առանցքային համաչափությամբ փուլային և շրջանային դիֆ- րակտային ալիքային թիթեղների կիրառությունը օպտիկական պինդետ- ներում.....	321
<b>Հ.Ս. Ղարազուլյան.</b> Լույսի բնեռացման հարթության պտույտի փորձարարական հետազոտությունը անիզոտրոպ արատային շերտով նանոմասնիկներով հարստացված խոլեստերիկ հեղուկ-բյուրեղային բջջում.....	331
<b>Գ.Գ. Դեմիրխանյան, Է.Պ. Կոկանյան, Հ.Գ. Դեմիրխանյան.</b> $\text{LiNbO}_3:\text{Ho}^{3+}$ բյուրեղի սպեկտրադիտական հատկությունների հետազոտումը 1880–2130 նմ լյու- մինեսցենցիայի տիրույթում.....	338
<b>Հ.Ա. Զաքարյան, Վ.Մ. Հարությունյան.</b> Խոնավության ազդեցությունը գրաֆենի արգելված գոտու վրա.....	350
<b>Ս.Մ. Ամիրխանյան, Է.Մ. Ղազարյան, Հ.Ա. Սարգսյան.</b> Նեղ արգելված գոտիով $\text{InSb}$ գնդային նանոշերտում տեղայնացված էլեկտրոնի էլեկտրոստատիկ մուլտիպոլների հաշվարկը.....	357
<b>Է.Ե. Էլբակյան, Ռ.Կ. Հովսեփյան, Ա.Ռ. Պողոսյան.</b> Լիթիումով լեզիրված $\text{ZnO}$ թա- դանթների հիմքի վրա մեմրիստորներ.....	368
<b>Ս.Ռ. Հարությունյան.</b> $\text{Sb}_2\text{Te}_3$ նանոթիթեղների հաստությունից կախված մագնի- սադիմադրությունը և թույլ անտիլոկալիզացման երևույթը.....	375
<b>Գ.Ս. Հարությունյան.</b> Բժշկական իզոտոպների ռադիոլոգիական մաքրության ստուգման համար գամմա-սքաներ.....	384
<b>Լ.Ա. Հարությունյան.</b> Լայնույթի բաժանման եղանակով աշխատող, երկմա- կարդակ ֆրենեյան գոտիական թիթեղներից բաղկացած ռենտգենյան ինտերֆերաչափ.....	390

## CONTENTS

<b>T.A. Shahverdyan, T.A. Ishkhanyan, A.E. Grigoryan, A.M. Ishkhanyan.</b> Analytic Solutions of the Quantum Two-State Problem in Terms of the Double, Bi- and Triconfluent Heun Functions .....	283
<b>G.A. Abovyan.</b> The Dynamics of Quantum Transitions in Magnus Representation .	304
<b>E.A. Gazazyan, G.G. Grigoryan, V.O. Chaltykyan.</b> Excitation of Rydberg States of Atoms via Adiabatic Transfer of Population .....	312
<b>V.K. Abrahamyan.</b> Application of Axially Symmetric Phase Plate and Circular Diffraction Waveplate in Optical Tweezers .....	321
<b>H.S. Gharagulyan.</b> Experimental Investigation of Polarization Plane Rotation of Light in Nanoparticle-Enriched Cholesteric Liquid Crystal Cell with an Anisotropic Defect Layer .....	331
<b>G.G. Demirkhanyan, E.P. Kokanyan, H.G. Demirkhanyan.</b> Study of Spectroscopic Properties of $\text{LiNbO}_3:\text{Ho}^{3+}$ Crystal in 1880–2130 nm Luminescence Band .....	338
<b>H.A. Zakaryan, V.M. Aroutiounian.</b> Influence of Humidity on the Graphene Band Gap.....	350
<b>S.M. Amirkhanyan, E.M. Kazaryan, H.A. Sarkisyan.</b> Calculation of Electrostatic Multipoles of Electron Localized in Narrow-Band InSb Spherical Nanolayer .....	357
<b>E.Y. Elbakyan, R.K. Hovsepyan, A.R. Poghosyan.</b> Memristors Based on Lithium Doped ZnO Films .....	368
<b>S.R. Harutyunyan.</b> Thickness-Dependent Magnetoresistance of $\text{Sb}_2\text{Te}_3$ Nanoflakes and Weak Antilocalization Effect .....	375
<b>G.S. Harutyunyan.</b> Gamma-Scanner for Radiochemical Purity Control of Medical Isotopes .....	384
<b>L.A. Haroutunyan.</b> Amplitude-Division Type X-Ray Interferometer Based on Bi- Level Fresnel Zone Plates .....	390

## СОДЕРЖАНИЕ

<b>Т.А. Шахвердян, Т.А. Ишханян, А.Е. Григорян, А.М. Ишханян.</b> Аналитические решения квантовой двухуровневой задачи в дважды, би- и триконфлюэнтных функциях Гойна.....	283
<b>Г.А. Абовян.</b> Динамика квантовых переходов в представлении Магнуса.....	304
<b>Э.А. Газазян, Г.Г. Григорян, В.О. Чалтыкян.</b> Возбуждение ридберговских состояний атомов адиабатическим переносом населенностей.....	312
<b>В.К. Абрамян.</b> Применение аксиально-симметричной фазовой и круговой дифракционной волновой пластин в оптических пинцетах.....	321
<b>Э.С. Карагулян.</b> Экспериментальное исследование вращения плоскости поляризации света в обогащенной наночастицами холестерической жидкокристаллической ячейке с анизотропным дефектным слоем.....	331
<b>Г.Г. Демирханян, Э.П. Коканян, А.Г. Демирханян.</b> Исследование спектроскопических свойств кристалла $\text{LiNbO}_3:\text{Ho}^{3+}$ в полосе люминесценции 1880–2130 нм .....	338
<b>А.А. Закарян, В.М. Арутюнян.</b> Влияние влажности на запрещенную зону графена .....	350
<b>С.М. Амирханян, Э.М. Казарян, А.А. Саркисян.</b> Вычисление электростатических мультиполей электрона, локализованного в узкозонном сферическом нанослое InSb.....	357
<b>Э.Е. Элбакян, Р.К. Овсепян, А.Р. Погосян.</b> Мемристоры на основе легированных литием пленок ZnO .....	368
<b>С.Р. Арутюнян.</b> Зависимое от толщины магнитосопротивление нанопластин $\text{Sb}_2\text{Te}_3$ и эффект слабой антилокализации .....	375
<b>Г.С. Арутюнян.</b> Гамма-сканер для контроля радиохимической чистоты медицинских изотопов.....	384
<b>Л.А. Арутюнян.</b> Рентгеновский интерферометр в режиме деления амплитуды на основе двухуровневых френелевских зонных пластин.....	390

Заказ № 595

Тираж 150. Сдано в набор 11.06.2014.

Подписано к печати 18.06.2015. Печ. л. 7.5.

Бумага офсетная. Цена договорная.

Типография НАН РА. Ереван, пр. Маршала Баграмяна, 24.