ISSN 0002-3035

ФИЗИКА · ՖԻԶԻԿԱ · PHYSICS

ИЗВЕСТИЯ
НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК АРМЕНИИ

ՏԵՂԵԿԱԳԻՐ
ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԶԳԱՅԻՆ ԱԿԱԴԵՄԻԱՅԻ

PROCEEDINGS
OF NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF ARMENIA

51, № 4, 2016

ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ՀԱՆՐԱՊԵՏՈՒԹՅԱՆ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԶԳԱՅԻՆ ԱԿԱԴԵՄԻԱ

НАЦИОНАЛЬНАЯ АКАДЕМИЯ НАУК РЕСПУБЛИКИ АРМЕНИЯ

ՏԵՂԵԿԱԳԻՐ ИЗВЕСТИЯ

ՖԻԶԻԿԱ ФИЗИКА

ՀԱՏՈՐ ТОМ

51

№ 4

ՀՀ ԳԱԱ "ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆ" ՀՐԱՏԱՐԱԿՉՈՒԹՅՈՒՆ

ИЗДАТЕЛЬСТВО "ГИТУТЮН" НАН РА

ԵՐԵՎԱՆ ЕРЕВАН

2016

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.

Известия НАН Армении, Физика, т.51, №4, с.407-416 (2016)

УДК 539.1

ИДЕНТИФИКАЦИЯ МЕЧЕНЫХ СТРУЙ В ПРОЦЕССЕ СЛИЯНИЯ ВЕКТОРНЫХ БОЗОНОВ С ПОСЛЕДУЮЩИМ РАСПАДОМ НА τ-ЛЕПТОНЫ В ЭКСПЕРИМЕНТЕ КОМПАКТНОГО МЮОННОГО СОЛЕНОИДА НА БОЛЬШОМ АДРОННОМ КОЛЛАЙДЕРЕ ПРИ БОЛЬШОМ КОЛИЧЕСТВЕ ДОПОЛНИТЕЛЬНО НАКЛАДЫВАЕМЫХ *pp*-ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ

А.М. СИРУНЯН*, А.Р. ТУМАСЯН, В.А. ХАЧАТРЯН, А.Г. ПЕТРОСЯН

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

*e-mail: sirunian@yerphi.am

(Поступила в редакцию 8 июня 2016 г.)

Приведена процедура идентификации меченых струй в процессе рождения бозона Хиггса через механизм слияния векторных бозонов с последующим распадом на τ-лептоны (VBF $H \to \tau^- \tau^+$) в торцевой части модернизированного адронного калориметра компактного мюонного соленоида (CMS) в условиях большого количества (140) дополнительно накладываемых *pp*-взаимодействий. Оценены эффективность и чистота отборов меченых струй в торцевой части детектора CMS.

1. Введение

Компактный мюонный соленоид (CMS) [1] на Большом адронном коллайдере (БАК) [2] – детектор общего назначения, разработанный как для проверки и уточнения известных параметров Стандартной модели, так и для поиска новых явлений в физике высоких энергий и элементарных частиц. Физическая программа CMS на БАК включает такие важные задачи современной физики высоких энергий, как открытие и исследование свойств бозона Хиггса, поиск суперсимметричных частиц и дополнительных измерений, исследование дифракционной физики, изучение b-физики, исследование нарушения CP-четности и т. д. Для достижения поставленных целей планируются несколько этапов модернизации БАК и его детекторов. В 2023 г. планируется третья долгая остановка БАК, во время которой будет выполнена вторая фаза модернизации детектора CMS. Этот этап модернизации будет самым крупномасштабным в проекте CMS [3], во время которого будут модернизированы все подсистемы CMS, а торцевые части калориметрической системы (электромагнитная и адронная) будут заменены калориметром с высокой гранулярностью (HGCal) и задним адронным калориметром (BH). Планируемая светимость БАК будет составлять 5–10 × 10^{34} см$^{-2}$с$^{-1}$, энергия столкновения протонов – 13–14 ТэВ, частота столкновений протонных пучков – 25 нс$^{-1}$, а количество *pp*-взаимодействий при каждом соударении протонных пучков достигнет 140–200.

В 2012 г. в экспериментах CMS и ATLAS было сделано самое значимое открытие в физике высоких энергий за последние десятилетия – экспериментальное открытие бозона Хиггса [4]. В физической программе CMS особое внимание уделяется исследованиям свойств хиггсовского бозона – спина, четности, связи с другими частицами и т. д. Рождение хиггсовской частицы через механизм слияния векторных бозонов (VBF) является одним из основных процессов для исследования связей бозона Хиггса с другими элементарными частицами, в частности, с фермионами. Наиболее перспективным является процесс VBF рождения бозона Хиггса с последующим его распадом на два τ-лептона, при исследовании которого (в частности, для отбора таких событий) широко используются так называемые меченые адронные струи, «сопровождающие» бозон Хиггса.

Настоящая работа посвящена проблеме идентификации меченых струй в торцевой части модернизированного детектора CMS в условиях большого количества (140) дополнительно накладываемых (фоновых) *pp*-взаимодействий, соответствующих режиму работы БАК при высоких светимостях. Для расчетов использовались данные процесса VBF $H \to \tau^-\tau^+$, смоделированные с помощью генераторов Монте-Карло Powheg и Pythia_6. Моделирование и реконструкцию событий, а также анализ выполнялись с помощью программного пакета CMSSW.

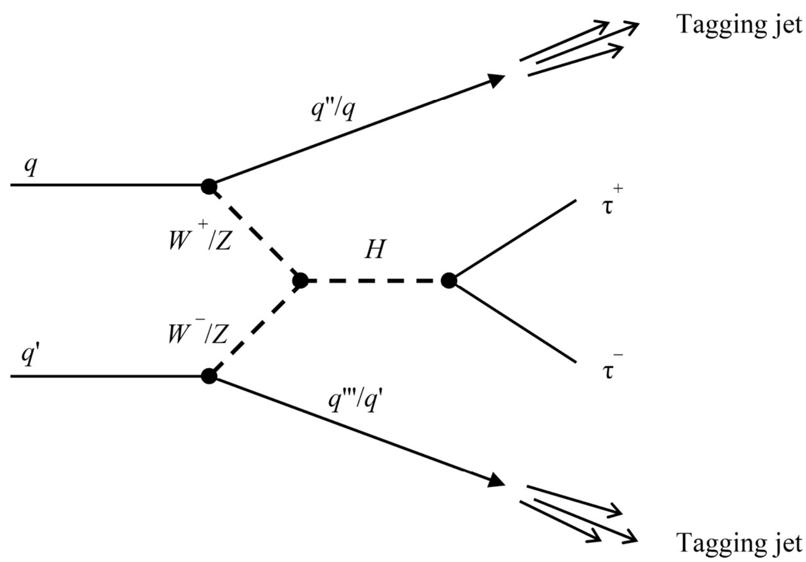

Рис.1. Процесс VBF $H \to \tau^-\tau^+$.

2. Характеристики меченых струй в процессе VBF $H \to \tau^- \tau^+$

Процесс VBF рождения хиггсовского бозона с последующим распадом на два τ-лептона представлен на рис.1. Как уже отмечалось, это один из самых перспективных каналов по исследованию свойств бозона Хиггса [5–6]. Преимущество данного процесса над инклюзивным процессом рождения бозона Хиггса заключается в обязательном наличии двух дополнительных адронных струй, так называемых меченых струй, рождаемых от рассеянных кварков. Эти меченые струи имеют определенную корреляцию между собой: антипараллельны по z-компоненте импульса в исследуемой области псевдобыстрот, покрываемой калориметрами HGCal + BH ($1.5 < |\eta| < 3$). Эти струи находят широкое применение при отборе событий данного процесса и позволяют с достаточной чистотой выделять нужный канал.

В расчетах использовались Particle-Flow CHS струи, реконструированные кластерным алгоритмом Anti-Kt поиска струи [7] с радиусным параметром 0.4. Particle-Flow – основной алгоритм реконструкции в CMS [8], с помощью которого с высокой точностью восстанавливаются заряженные адроны, электроны, мюоны, фотоны, нейтральные адроны, недостающая поперечная энергия для P_T-баланса, а также адронные струи. CHS – дополнение к алгоритму Particle-Flow при реконструкции струй для исключения заряженных адронов от фоновых *pp*-взаимодействий, которые Anti-Kt-алгоритм ошибочно включил при реконструкции. В расчетах к струям также применялась калибровка энергии струи: L1 + L2L3 [9–10], где L1 – коррекция энергии струи на составляющую от фоновых *pp*-взаимодействий, а L2L3 – коррекция расчетов Монте-Карло к энергии реконструированной струи. Распределения меченых струй по поперечному импульсу и по псевдобыстроте показаны на рис.2.

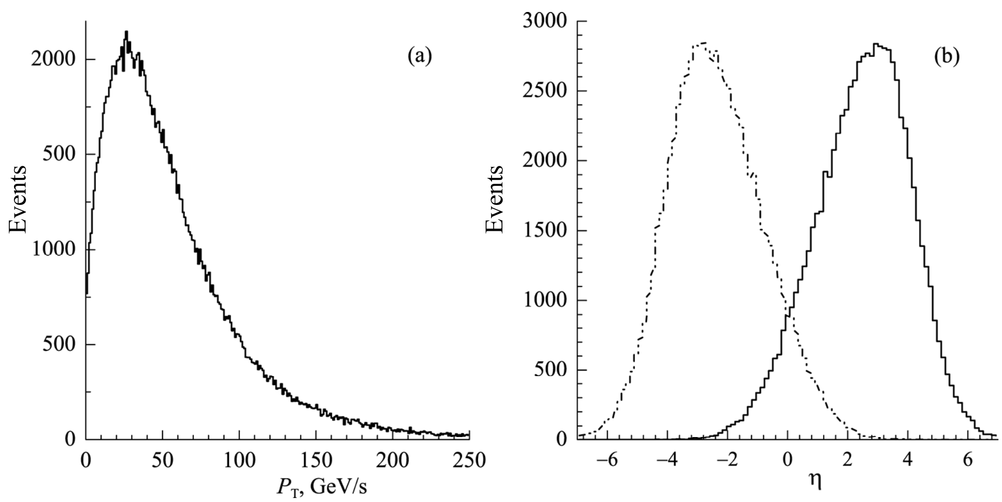

Рис.2. Распределения меченых струй по поперечному импульсу (a) и по псевдобыстроте (b), где сплошная линия соответствует струе с большей псевдобыстротой, а пунктирная – с меньшей.

3. Проблема идентификации меченых струй при наличии 140 фоновых *pp*-взаимодействий

Основной проблемой прецизионных измерений и анализа данных в режиме работы БАК при высоких светимостях являются фоновые *pp*-взаимодействия. При этом разделяют их две компоненты: «вне времени» – относящаяся к остаточному энерговыделению от предшествующего столкновения протонных пучков и «во время» – к наложению разных *pp*-взаимодействий во время одного акта столкновения пучков. Из-за хорошего временного разрешения детектора CMS вклад компоненты «вне времени» незначительный и фоновые *pp*-взаимодействия ассоциируются с его «во время» компонентой. При столкновении протонных пучков количество *pp*-взаимодействий в среднем будет равно 140. Эти взаимодействия в подавляющем большинстве случаев – процессы с маленькими поперечными энергиями и не представляют научного интереса в рамках таких задач, как поиск и исследование свойств бозона Хиггса, суперсимметричных частиц и т. д. Для исследования таких задач из ~140 *pp*-взаимодействий выбирается то, у которого величина суммы квадратов поперечных импульсов всех заряженных частиц $\sum P_{\mathrm{T}}^2$ имеет максимальное значение. Это взаимодействие называется основным, а остальные ~139 – дополнительно наложенными (фоновыми) взаимодействиями. В результате наложения возникает необходимость выделения продуктов основного взаимодействия из общего.

Для заряженных частиц такое выделение осуществляется достаточно эффективно благодаря хорошему трекерному разрешению CMS: отбираются те частицы, которые вылетают из вершины основного взаимодействия. Однако для такого сложного объекта как струя нужна более сложная процедура.

Сами по себе отдельные струи от фоновых взаимодействий (в дальнейшем фоновые струи) имеют маленькие энергии по сравнению со струями от основного процесса взаимодействия (в дальнейшем основные струи), и от фоновых струй можно было бы элементарно избавиться наложением ограничения на поперечную компоненту импульса (P_{T}) струи. Однако из-за большого количества фоновых взаимодействий фоновые струи часто накладываются друг на друга, образуя одну высокоэнергичную струю, P_{T} которой больше, чем у основной струи.

На рис.3 представлены распределения множественностей струй в процессе VBF $\mathrm{H}\rightarrow\tau^-\tau^+$ с $P_{\mathrm{T}} > 20$ ГэВ/с в области псевдобыстрот $1.5 < |\eta| < 3$. Представлены распределения при отсутствии фоновых взаимодействий и при наличии 140 фоновых взаимодействий.

Очевидно, что с учетом добавления фоновых взаимодействий в среднем количество струй в событиях увеличивается втрое, и для отбора основных струй (в нашем случае это меченые струи) нужна дополнительная процедура.

Строго говоря, в процессе VBF $\mathrm{H}\rightarrow\tau^-\tau^+$ помимо меченых струй могут присутствовать и другие адронные струи, в основном, от распадов τ-лептонов, но для идентификации таких струй используется другой алгоритм [11], а в данной работе рассматривается проблема идентификации именно меченых струй при наличии дополнительных струй от фоновых *pp*-взаимодействий.

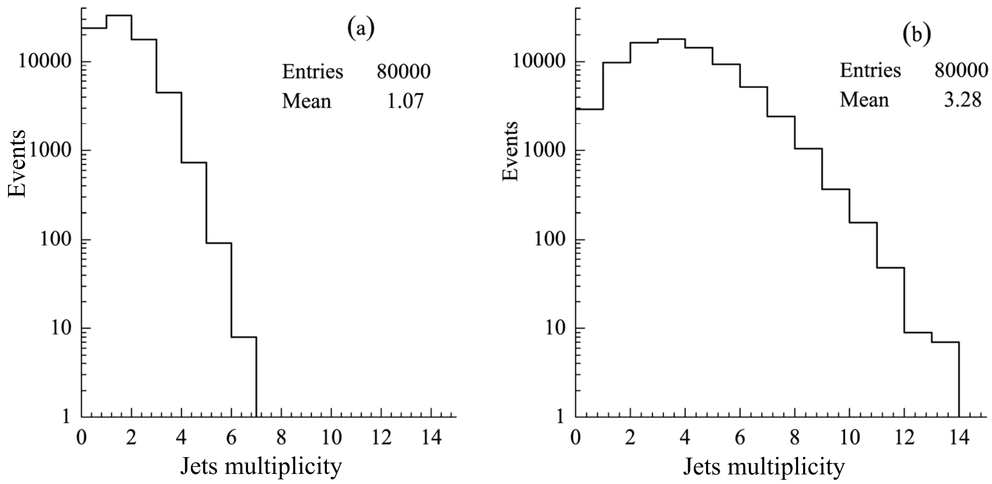

Рис.3. Множественность струй с P_T > 20 ГэВ/с и 1.5 < |η| < 3 (a) при отсутствии фоновых *pp*-взаимодействий и (b) при наличии 140 фоновых *pp*-взаимодействий.

4. Алгоритм идентификации основных струй

Однако имеются довольно существенные отличия между фоновыми струями и основными струями. Во-первых, заряженные частицы в составе основной струи рождаются в основной вершине, в то время как для фоновых струй такие частицы относятся к различным вершинам взаимодействия. Во-вторых, различается плотность распределения энергии в струе, а также форма струи в η-φ-пространстве и т. д. На основе таких различий между основными струями и фоновыми струями был создан алгоритм многомерного анализа PileUpJetId [12], в котором учитываются все различия между характеристиками основных струй и фоновых струй. Этот алгоритм для каждой индивидуальной струи рассчитывает величину так называемого Pile-Up-дискриминатора, который несет вероятностную информацию того, является ли рассматриваемая струя основной или же фоновой струей. Для основных струй значение Pile-Up-дискриминатора близко к 1, а для фоновых струй к −1.

На рис.4 представлены распределения Pile-Up-дискриминатора меченых струй и фоновых струй с P_T > 20 ГэВ/с в различных интервалах по псевдобыстротам. Видно, что алгоритм PileUpJetId позволяет достаточно хорошо разделять основные струи от фоновых. Исключение составляет последний интервал по псевдобыстроте: 2.75–3. Это связано с тем, что струи реконструированные в этом интервале, частично выходят за пределы трекера и HGCal + BH, где алгоритм PileUpJetId плохо работает. Влияние этого эффекта частично проявляется и для интервала 2.35 < |η| < 2.75 (напомним, что радиусный параметр алгоритма реконструкции струй 0.4, а это означает, что струи, реконструированные в области |η| > 2.6, могут включать составляющие с |η| > 3).

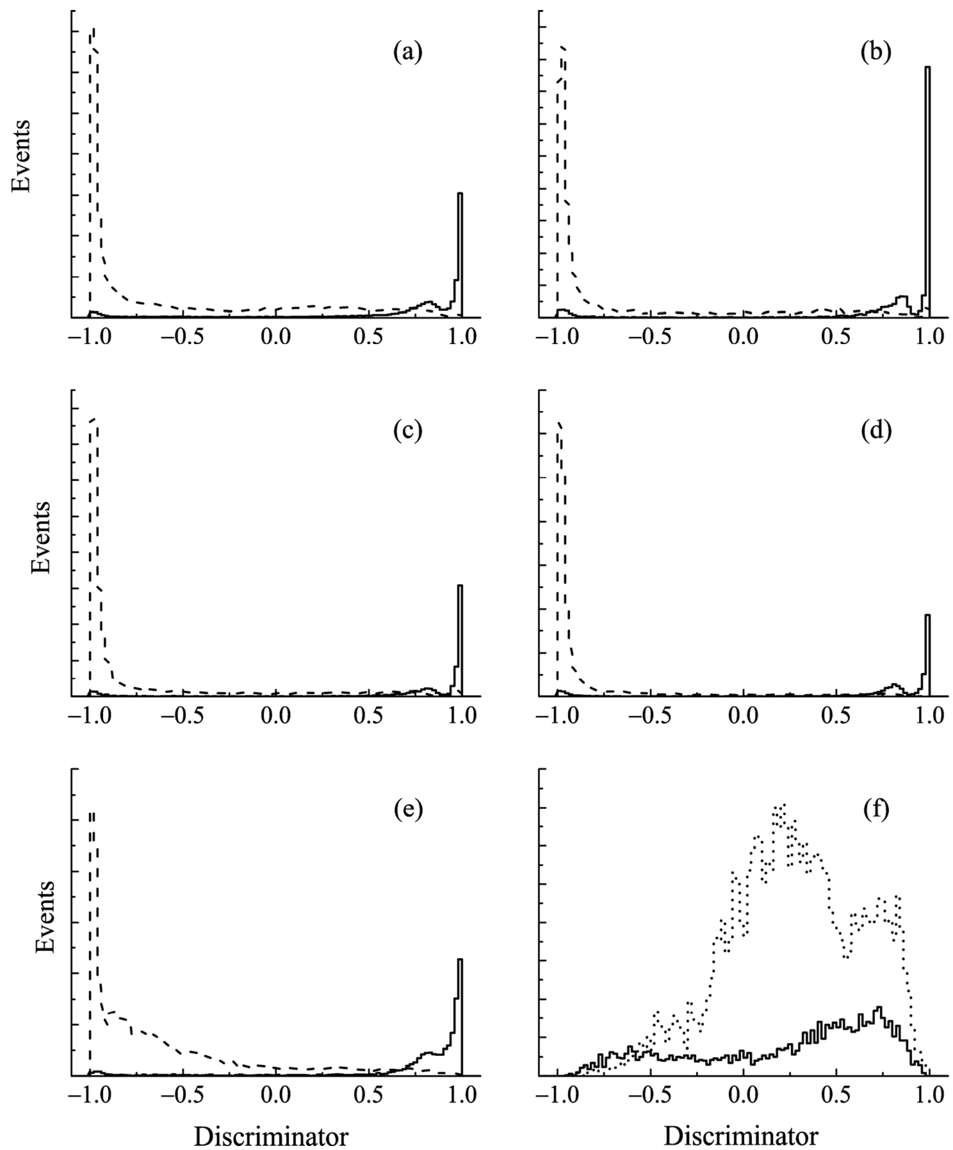

Рис.4. Распределение Pile-Up-дискриминатора меченых струй (сплошная линия) и фоновых струй (пунктирная линия) в различных интервалах по псевдобыстротам: (a) 1.5–3, (b) 1.5–1.75, (c) 1.75–2, (d) 2–2.35, (e) 2.35–2.75 и (f) 2.75–3.

5. Оптимизация ограничения на Pile-Up-дискриминатор струй

Рис.4 показывает, что разделение меченых струй от фоновых можно осуществить с использованием ограничения на Pile-Up-дискриминатор струй. При этом необходим критерий для определения оптимального ограничения на Pile-Up-дискриминатор струй.

Для начала опишем критерии отбора меченых струй в торцевой части детектора CMS в процессе VBF $H \to \tau^-\tau^+$ при наличии дополнительных струй. В каждой части торцевого детектора CMS ($1.5 < \eta < 3$ и $-3 < \eta < -1.5$) отбирается струя с максимальным поперечным импульсом (причем, с условием $P_T > 20$ ГэВ/с), Pile-Up-дискриминатор которой больше установленного ограничения. Эффективность и чистота отбора струй определяются следующим образом:

$$\text{Эффективность} = \frac{\text{Количество отобранных меченых струй}}{\text{Общее количество меченых струй}},$$

$$\text{Чистота} = \frac{\text{Количество отобранных меченых струй}}{\text{Общее количество отобранных струй}},$$

а критерием для оптимизации ограничения на Pile-Up-дискриминатор будет максимальность произведения эффективности и чистоты, что, в конечном счете, соответствует условию минимальности статистической ошибки измерения. На рис.5 представлена зависимость произведения эффективности и чистоты от ограничения на дискриминатор.

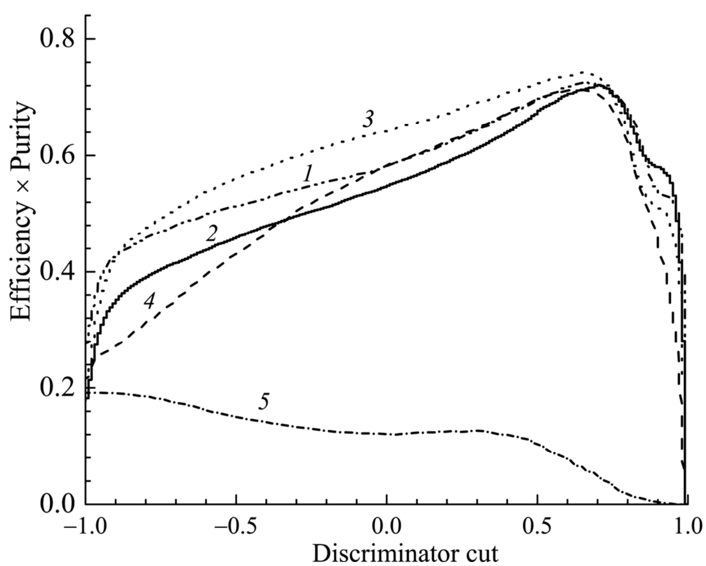

Рис.5. Зависимость произведения эффективности и чистоты от ограничения на дискриминатор в различных интервалах по псевдобыстротам: *1* – ($1.5 < |\eta| < 1.75$), *2* – ($1.75 < |\eta| < 2$), *3* – ($2 < |\eta| < 2.35$), *4* – ($2.35 < |\eta| < 2.75$), *5* – ($2.75 < |\eta| < 3$).

В результате этой процедуры были оценены оптимальные ограничения на Pile-Up-дискриминатор (рабочие точки) струй в различных интервалах по псевдобыстроте. На рис.6 показаны значения рабочих точек в зависимости от псевдобыстроты, из которого видно, что в интервале псевдобыстрот $|\eta| < 2.7$ зависимость рабочих точек от псевдобыстроты слабая. Значение рабочих точек в этом интервале колеблется от 0.6 до 0.75. В области $|\eta| > 2.75$ рабочие точки принимают значение −1. Это связано с тем, что алгоритм PileUpJetId плохо работает в этом интервале, а чистота отборов практически не зависит от ограничения на Pile-Up-дискриминатор. Однако эффективность отборов уменьшается с ростом ограничения на Pile-Up-дискриминатор, поэтому рабочие точки, соответствующие максимуму произведения эффективности и чистоты, принимают значение −1.

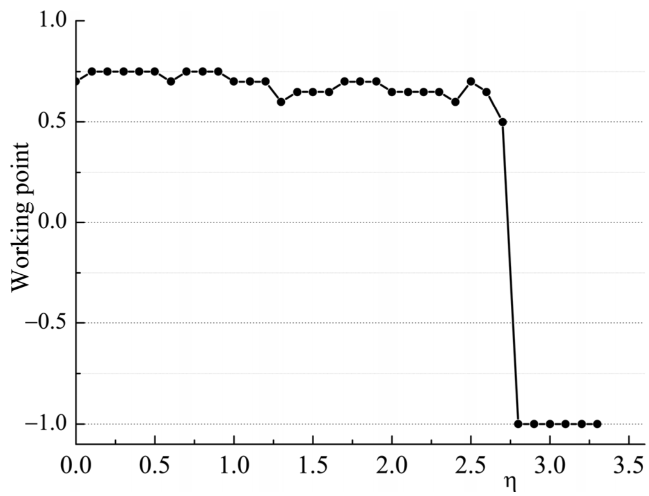

Рис.6. Зависимость оптимального ограничения на Pile-Up-дискриминатор (рабочие точки) струй от псевдобыстроты.

6. Расчет эффективности и чистоты отбора меченых струй

Имея значения рабочих точек, можно осуществлять отбор меченых струй в процессе VBF $H\rightarrow\tau^-\tau^+$ в соответствии со следующими условиями: отбираются две струи в области $1.5 < |\eta| < 3$ с наибольшими поперечными импульсами (причем с условием P_T > установленного порога) и с Pile-Up-дискриминатором больше, чем рабочая точка для данного интервала по η, которые удовлетворяют условию коррелирования меченых струй $\eta_1^{jet} \times \eta_2^{jet} < 0$ (требование вылета струй в направлении вперед–назад).

В табл.1 представлены результаты расчетов рабочих точек для пяти рассмотренных интервалов по η, а также эффективность и чистота отбора меченых струй и их произведение при различных ограничениях на P_T-струи.

Табл.1. Рабочие точки для пяти интервалов по η, эффективность и чистота отбора меченых струй и их произведение со статистическими ошибками при различных ограничениях на P_T-струи

	Рабочие точки (η1,η2,η3,η4,η5)	Эффективность, %	Чистота, %	Эффективность × Чистота × 100
$P_T > 20$	(0.65, 0.65, 0.60, 0.55, 1.00)	4.6	82.6	3.77 ± 0.07
$P_T > 25$	(0.65, 0.60, 0.60, 0.50, 1.00)	4.3	84.0	3.60 ± 0.07
$P_T > 30$	(0.50, 0.60, 0.55, 0.40, −1.00)	5.4	67.5	3.65 ± 0.07
$P_T > 35$	(0.65, 0.65, 0.55, 0.45, −1.00)	4.8	73.0	3.49 ± 0.07
$P_T > 40$	(0.65, 0.70, 0.70, 0.40, −1.00)	4.1	78.0	3.20 ± 0.06
$P_T > 45$	(0.65, 0.70, 0.70, 0.40, −1.00)	3.6	78.5	2.83 ± 0.06
$P_T > 50$	(0.80, 0.70, 0.70, 0.40, −1.00)	3.1	79.7	2.42 ± 0.06

7. Заключение

Описана процедура идентификации меченых струй в процессе VBF $H\to\tau^-\tau^+$ в торцевой части модернизированного детектора CMS в условиях большого количества (140) дополнительно накладываемых *pp*-взаимодействий. Отбор меченых струй выполнялся с использованием ограничений на кинематические характеристики струй и на Pile-Up-дискриминатор струй, рассчитанный алгоритмом многомерного анализа PileUpJetId. Рассчитаны оптимальные ограничения на Pile-Up-дискриминатор струй, а также эффективность и чистота отборов меченых струй при различных ограничениях на поперечный импульс струй.

Отметим, что конструкция ВН-калориметра пока еще в стадии разработки, и основная задача состоит в определении оптимальной поперечной сегментации ВН. Работа алгоритма PileUpJetId, следовательно, идентификация меченых струй в процессе VBF $H\to\tau^-\tau^+$ и в целом идентификация процесса VBF

$H \rightarrow \tau^-\tau^+$ зависит от поперечной сегментации ВН. Можно использовать эту зависимость и с помощью изложенного в настоящей работе метода идентификации меченых струй решить проблему оптимизации поперечной сегментации ВН-калориметра.

Работа выполнена при финансовой поддержке ГК МОН Армении в рамках научного проекта № 15T-C085.

ЛИТЕРАТУРА

1. **S. Chatrchyan, V. Khachatryan, A.M. Sirunyan, et al. (CMS Collaboration).** J. Instrumentation, **3**, S08004 (2008).
2. **S. Chatrchyan, V. Khachatryan, A.M. Sirunyan, et al. (CMS Collaboration).** J. Phys. G: Nucl. Part. Phys., **34**, 995 (2007).
3. **V. Khachatryan, A.M. Sirunyan, A. Tumasyan, et al. (CMS Collaboration).** CERN-LHCC-2015-010/LHCC-P-008, 2015.
4. **S. Chatrchyan, V. Khachatryan, A.M. Sirunyan, et al. (CMS Collaboration).** Phys. Lett. B, **716**, 30 (2012).
5. **V. Khachatryan, A.M. Sirunyan, A. Tumasyan, et al. (CMS Collaboration).** J. of High Energy Phys., **05**, 104 (2014).
6. **V. Khachatryan, A.M. Sirunyan, A. Tumasyan, et al. (CMS Collaboration).** European Phys. J. C, **75**, 212 (2015).
7. **M. Cacciari, G.P. Salam, G. Soyez.** J. High Energy Phys., **04**, 063 (2008).
8. **S. Chatrchyan, V. Khachatryan, A.M. Sirunyan, et al. (CMS Collaboration).** CMS Physics Analysis Summary, PFT-09-001, CERN, 2009.
9. **А.Р. Тумасян**. Известия НАН Армении, Физика, **47**, 4 (2012).
10. **S. Chatrchyan, V. Khachatryan, A.M. Sirunyan, et al. (CMS Collaboration).** J. Instrumentation, **6**, P11002 (2011).
11. **S. Chatrchyan, V. Khachatryan, A.M. Sirunyan, et al. (CMS Collaboration).** J. Instrumentation, **7**, P01001 (2012).
12. **S. Chatrchyan, V. Khachatryan, A.M. Sirunyan, et al. (CMS Collaboration).** CMS Physics Analysis Summary, JME-13-005, 2013.

IDENTIFICATION OF TAGGING JETS IN VBF $H \rightarrow \tau^-\tau^+$ PROCESS WITH CMS EXPERIMENT ON LARGE HADRON COLLIDER AT LARGE AMOUNT OF ADDITIONALLY IMPOSED *pp*-INTERACTIONS

A.M. SIRUNYAN, A.R. TUMASYAN, V.A. KHACHATRYAN, A.G. PETROSYAN

Identification procedure of tagging jets in the Higgs boson production process with following decay of the Higgs boson to τ-leptons (VBF $H \rightarrow \tau^-\tau^+$) for endcup region of upgraded CMS detector at large amount (140) of additionally imposed *pp*-interactions is given. Efficiency and purity of tagging jets selection in CMS endcup region are estimated.

Известия НАН Армении, Физика, т.51, №4, с.417-423 (2016)

УДК 533.9

МАТЕРИАЛЫ С ОТРИЦАТЕЛЬНОЙ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТЬЮ ДЛЯ ДИФФУЗИОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

К.Б. ОГАНЕСЯН

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

e-mail: bsk@yerphi.am

(Поступила в редакцию 23 мая 2016 г.)

Рассмотрена генерация диффузионного излучения в ИК области заряженной частицы, проходящей через случайную стопку пластин. Диффузионное излучение возникает за счет многократного рассеяния псевдофотонов на пластинах. Для повышения интенсивности излучения необходимо сделать рассеяние более эффективным, и для этой цели предлагается использовать материалы с отрицательной диэлектрической проницаемостью.

1. Введение

Создание компактных недорогих источников излучения, эффективно работающих в видимом, ультрафиолетовом или мягком рентгеновском диапазоне является одним из наиболее важных направлений в разработке и исследовании лазеров на свободных электронах (ЛСЭ). Коротковолновое излучение может быть получено с помощью ЛСЭ с использованием либо электронных пучков высокой энергии, либо ондуляторов с коротким периодом. Один из способов получения короткого периода ондулятора связан с использованием сред с периодической модуляцией показателя преломления [1–3]. Такие среды можно рассматривать как разновидность объемной дифракционной решетки. Следующие два типа сред с периодической модуляцией показателя преломления могут быть реализованы, во-первых, в газоплазменной среде с периодически изменяющейся плотностью или степенью ионизации [1] и, во-вторых, в пространственно-периодической твердотельной сверхрешетке, которая может состоять, например, из последовательности слоев различных материалов с разными показателями преломления (см. [2] и ссылки в ней). Следует отметить, что эффект вынужденного переходного излучения был обнаружен экспериментально [4] в схеме, аналогичной предложенной в работах [1,2], но без модуляции среды. Можно использовать также ЛСЭ и строфотроны [5–25] в качестве широко перестраиваемых и очень мощных источников инфракрасного излучения. Недостатком таких электронных устройств является то, что, как правило, они имеют большие размеры (3 м и более).

В настоящей работе обсуждается возможность получения ИК излучения с использованием диффузионного механизма излучения [26,27]. Основная физическая идея состоит в том, что можно сделать довольно маленькой среднюю диэлектрическую проницаемость случайного пакета пластин, изготовленных из материала с отрицательной диэлектрической постоянной, и вакуумных промежутков между ними. Импульс псевдофотона $k = \omega\sqrt{\varepsilon} / c$, где ε − средняя диэлектрическая постоянная системы, будет тоже соответственно малым. В такой системе псевдофотоны будут рассеиваться на неоднородностях более эффективно. Поэтому интенсивность диффузионного излучения, вызванного многократным рассеянием псевдофотонов, будет увеличиваться в такой системе. Следует отметить, что системы с близкой к нулю диэлектрической проницаемостью имеют много других интересных свойств [28–30].

2. Интенсивность излучения

Заряженная частица, проходящая через стопку пластин, помещенных в однородную среду, как известно, излучает электромагнитные волны. Излучение происходит из-за рассеяния электромагнитного поля на пластинах. Ранее теоретически было показано [26,27], что спектральная интенсивность углового излучения может быть представлена в виде суммы двух вкладов

$$I = I_0 + I_{\mathrm{D}}, \tag{1}$$

где

$$I_0(\theta,\omega) = \frac{e^2}{2c} \frac{B\left(\left|k_0 - k\cos\theta\right|\right)\sin^2\theta}{\left(\gamma^{-2} + \sin^2\theta \times k^2 / k_0^2\right)} \frac{\omega^2}{k_0^4 c^2}, \tag{2}$$

а диффузионный вклад определяется как

$$I_{\mathrm{D}}(\theta,\omega) = \frac{5e^2\gamma^2}{2\varepsilon c} \frac{l_{\mathrm{in}}{}^2(\omega)}{l^2(\omega)} \sin^2\theta \times \exp\left[-\left(\frac{l}{l_{\mathrm{in}}}\right)^{1/2} \frac{1}{\left|\cos\theta\right|}\right]. \tag{3}$$

Здесь θ – угол наблюдения, $k_0 = \omega/v$, v − скорость частицы, $k = \omega\sqrt{\varepsilon} / c$, B − корреляционная функция случайной диэлектрической проницаемости поля, создаваемого случайно расположенными пластинами. Предполагая, что параллельные пластины с равной вероятностью могут занимать любую точку на оси z, можно найти корреляционную функцию

$$B(q_z) = \frac{4(b-\varepsilon)^2 n \sin^2\left(q_z a / 2\right)}{q_z^2} \frac{\omega^4}{c^4}, \tag{4}$$

где $n = N / L_z$ − концентрация пластин в системе, a и b – толщина и диэлектрическая проницаемость пластин, соответственно, и ε − средняя диэлектрическая проницаемость системы.

В уравнении (3) l и l_{in} – средние упругая и неупругая длины свободного пробега фотона в среде, соответственно. Неупругая длина свободного пробега в основном связана с поглощением электромагнитного поля в среде, а упругая длина свободного пробега – с преломлением фотонов в пластинах. Последняя зависит от угла падения фотонов на пластинах. В случае нормально падающих фотонов упругая длина свободного пробега определяется как

$$l = \frac{4k^2}{B(0) + B(2k)}. \tag{5}$$

Следует отметить, что именно эта величина входит в спектрально-угловое распределение интенсивности (3). Уравнения (3) и (5) справедливы в пределе слабого рассеяния $\lambda / l << 1$ и для углов наблюдения $\theta = \pi / 2 - \delta$, $\delta >> \left(1 / k\, l\right)^{1/3}$. Последнее ограничение по углам появляется из-за того, что, когда $\theta = \pi / 2$, псевдофотоны движутся параллельно пластинам и $l = 0$, следовательно, условие слабого рассеяния не выполняется. При выполнении условий многократного рассеяния электромагнитного поля диффузионный вклад в уравнение интенсивности излучения (3) является основным, так как $I_{\text{D}} / I_0 \sim l_{\text{in}} / l$. Как видно из формулы (3), интенсивность излучения определяется упругой и неупругой длинами свободного пробега фотона в среде. Из уравнения (4) следует, что, когда $ka >> 1$, $B(2k) / B(0) \sim 1 / (ka)^2 << 1$. Поэтому длина свободного пробега фотона [27]

$$l \approx \begin{cases} 4k^2 / B(0), & ka >> 1 \\ 2k^2 / B(0), & ka << 1. \end{cases}$$

В обоих случаях, когда $ka >> 1$ и $ka << 1$, длина свободного пробега фотонов имеет вид

$$l \sim \frac{k^2}{B(0)}, \tag{6}$$

где $B(0) = k^4 (b - \varepsilon)^2 na^2 / \varepsilon^2$. Подставляя это выражение в уравнение (6) и принимая во внимание, что $k = \omega\sqrt{\varepsilon} / c$, имеем

$$l \sim \frac{\varepsilon}{\frac{\omega^2}{c^2}(b - \varepsilon)^2 na^2}. \tag{7}$$

Подставляя (7) в уравнение (3), можно убедиться, что $I_{\text{D}} \sim \varepsilon^{-3}(\omega)$. Поэтому интенсивность излучения усиливается в области длин волн, где $\varepsilon(\omega) << 1$. Средняя диэлектрическая проницаемость ε для слоистой стопки имеет вид

$$\varepsilon(\omega) = nab(\omega) + (1 - na)\varepsilon_0(\omega).$$

Здесь ε_0 – диэлектрическая проницаемость однородной среды, в которую пластины с диэлектрической проницаемостью $b(\omega)$ и толщиной a случайным образом вложены. Если однородная среда – вакуум, тогда $\varepsilon_0 \equiv 1$. Выбирая материалы для пластин с $b(\omega) < 0$, можно сделать среднюю диэлектрическую проницаемость системы весьма малой $(\varepsilon << 1)$. Соответственно упругая длина свободного пробега фотона будет мала и интенсивность излучения будет велика в такой системе.

3. Результаты и обсуждение

Рассмотрим теперь несколько конкретных примеров. Для диэлектрической проницаемости обычных металлов можно использовать формулу $b(\omega) = 1 - \omega_p^2 / \omega^2$, где ω_p – плазменная частота. Поэтому для частот $\omega < \omega_p$ диэлектрическая проницаемость будет отрицательной. Плазменная частота для простых металлов порядка ~20–100 эВ, поэтому область, где диэлектрическая проницаемость отрицательна, простирается от крайней УФ до дальней ИК области. Для реализации диффузионного механизма излучения поглощение должно быть слабым. Это означает, что пластины должны быть очень тонкими, т. е. меньше, чем глубина скин-слоя металлов с тем, чтобы фотоны могли проходить через них. В оптической области скин–слой металлов порядка нескольких сотен ангстрем. Поэтому сделать стопку с такими тонкими пластинами с вакуумом между ними будет очень трудно. С другой стороны такая ситуация может быть реализована, когда заряженные частицы скользят по неровной металлической поверхности [31–35]. Тогда случайным образом расположенные холмы и долины будут служить в качестве пластин с вакуумными промежутками между ними. Энергия заряженных частиц должна быть достаточной для проникновения в систему с несущественными потерями своей энергии. Энергия электронов в несколько МэВ достаточна для проникновения в материал толщиной 1 мм. Оценим число излучаемых ИК фотонов для стопки из 50 пластин со средней толщиной 20 мкм и со средним расстоянием между пластинами 200 мкм.

В щелочно-галоидных кристаллах и в таких полупроводниках, как GaP и InSb, диэлектрическая проницаемость отрицательна в области между частотами поперечных и продольных оптических фононов [36]. Для MgO в области частот 550–650 $см^{-1}$, лежащей в далеком ИК диапазоне, действительная часть диэлектрической проницаемости принимает значения в интервале от –6 до –2 и мнимая часть в интервале от 0.6 до 0.2. Выше упомянутый интервал лежит в далекой ИК области. Из уравнения (7) следует, что в случае $2\pi a \leq \lambda$, минимум средней длины свободного пробега и, следовательно, максимум интенсивности излучения достигается при средней толщине пластины $a \sim \lambda / 2\pi$. Для указанной выше области частот она составляет около 20 мкм. Выбирая такие значения для средней толщины пластин, можно достичь предела локализации $\lambda/2\pi$ [37,38] для средней длины свободного пробега фотона. Следует отметить, что уравнение (3) корректно в режиме слабого диффузионного рассеянии $l >> \lambda/2\pi$. Напомним, что электромагнитная волна локализуется при условии $l \le \lambda/2\pi$. Значение 20 мкм для толщины пластины вполне осуществимо, и можно сделать стопку из таких пластин, которая могла бы служить хорошим источником дальнего ИК излучения. Чтобы оценить число излучаемых фотонов по формуле (3), необходимо знать l_{in}.

Неупругую длину свободного пробега фотона в случайной стопке можно оценить следующим образом:

$$l_{\mathrm{in}} \sim \frac{\lambda\sqrt{\varepsilon}}{\pi f\,\mathrm{Im}\,b(\omega)}, \tag{8}$$

где f – доля пластин в системе. Принимая $f \sim 0.1$, $\mathrm{Im}b \sim 0.4$ и $\varepsilon \sim 0.5$, получаем $l_{\mathrm{in}} \sim 557$ мкм.

Используя уравнение (3), можно оценить интегрированное по всем углам число испускаемых фотонов в интервале $\Delta\omega$

$$N_{\mathrm{ph}} \sim \frac{20}{3}\alpha\left(\frac{l_{\mathrm{in}}}{l}\right)^2\frac{\Delta\omega}{\omega}, \tag{9}$$

где α – постоянная тонкой структуры. Поскольку при $l << l_{\mathrm{in}}$ экспоненциальный множитель в формуле (3) играет важную роль только при очень больших углах $\theta \approx \pi/2$, то мы пренебрегли им при оценке общего количества излучаемых фотонов. Подставляя $l_{\mathrm{in}} \sim 562$ мкм и $l \sim \lambda/2\pi \sim 17$ мкм в уравнение (8) и принимая $\Delta\omega \sim \omega$, имеем $N_{\mathrm{ph}} \sim 167$ ИК-фотонов на один электрон. Это означает, что с использованием коммерчески доступных линейных ускорителей с такими параметрами, как энергия 5–6 МэВ и ток пучка ~1 мА, можно получить общую выходную мощность излучения 2.4 мВт (10^{18} фотон/сек).

4. Заключение

Изучена генерация диффузионного излучения в ИК области заряженной частицы, проходящей через случайную стопку пластин. Показано, что для повышения интенсивности излучения нужно сделать более эффективным многократное рассеяние псевдофотонов на пластинах. Для этой цели предлагается использовать материалы с отрицательной диэлектрической проницаемостью. Оценена выходная мощность излучения и показано, что с использованием коммерчески доступных линейных ускорителей может быть получена общая выходная мощность ~2.4 мВт (10^{18} фотон/сек.).

ЛИТЕРАТУРА

1. **A.I. Artemyev, M.V. Fedorov, J.K. Mclver, E.A. Shapiro**. IEEE J. Q. Electr., **34,** 24 (1998).
2. **V.V. Apollonov, A.I. Artemyev, M.V. Fedorov, E.A. Shapiro, J.K. McIver**. Optics Express, **3,** 162 (1998).
3. **G.A. Amatuni, A.S. Gevorkyan, S.G. Gevorkian, A.A. Hakobyan, K.B. Oganesyan, V.A. Saakyan, E.M. Sarkisyan.** Laser Phys., **18**, 608 (2008).
4. **H.C. Lihn, P. Kung, C. Settakron, H. Wiedemann, D. Bocek, M. Hernandez.** Phys. Rev. Lett., **76**, 4163 (1996).
5. **A.I. Artemyev, M.V. Fedorov, A.S. Gevorkyan, N.Sh. Izmailyan, R.V. Karapetyan, A.A. Akopyan, K.B. Oganesyan, Yu.V. Rostovtsev, M.O. Scully, G. Kuritzki**. J. Mod. Optics, **56**, 2148 (2009).
6. **M. Abo-Bakr, J. Feikes, K. Holldack, G. Wuestefeld, H.-W. Huebers**. Phys. Rev. Lett., **88**, 254801 (2002).
7. **G.P. Williams**. Rev. Sci. Instrum., **73**, 1461 (2002).
8. **M.V. Fedorov.** Atomic and Free Electrons in a Strong Light Field. Singapore, World Scientific, 1997.
9. **Д.Ф. Зарецкий, Э.А. Нерсесов, К.Б. Оганесян, М.В. Федоров.** Квантовая электроника, **13**, 685 (1986).
10. **Э.А. Нерсесов, К.Б. Оганесян, М.В. Федоров.** ЖТФ, **56**, 2402 (1986).
11. **К.Б. Оганесян, М.В. Федоров.** ЖТФ, **57**, 2105 (1987).
12. **К.Б. Оганесян, А.М. Прохоров, М.В. Федоров.** ЖЭТФ, **94**, 80 (1988).
13. **М.Л. Петросян, Л.А. Габриелян, Ю.Р. Назарян, Г.Х. Товмасян, К.Б. Оганесян**. Изв. НАН Армении, Физика, **42**, 57 (2007).
14. **К.Б. Оганесян.** Изв. НАН Армении, Физика**, 50**, 169 (2015).
15. **К.Б. Оганесян.** Изв. НАН Армении, Физика**, 50**, 422 (2015).
16. **К.Б. Оганесян.** Изв. НАН Армении, Физика**, 51**, 15 (2016).
17. **M.V. Fedorov, K.B. Oganesyan.** IEEE J. Quantum. Electron., **21**, 1059 (1985).
18. **E.M. Sarkisyan, K.G. Petrosyan, K.B. Oganesyan, V.A. Saakyan, N.Sh. Izmailyan, C.K. Hu.** Laser Phys., **18,** 621 (2008).
19. **M.V. Fedorov, K.B. Oganesyan, A.M. Prokhorov.** Appl. Phys. Lett., **53**, 353 (1988).
20. **M.L. Petrosyan, L.A. Gabrielyan, Yu.R. Nazaryan, G.Kh. Tovmasyan, K.B. Oganesyan.** Laser Phys., **17,** 1077 (2007).
21. **A.H. Gevorgyan, K.B. Oganesyan, R.V. Karapetyan, M.S. Rafaelyan.** Laser Phys. Letters, **10**, 125802 (2013).
22. **K. B. Oganesyan.** Nucl. Instrum. Methods A, **812,** 33 (2016).
23. **K.B. Oganesyan**. J. Modern Optics, **61,** 763 (2014).
24. **K.B. Oganesyan**. J. Modern Optics, **61,** 1398 (2014).
25. **K.B. Oganesyan**. J. Modern Optics, **62,** 933 (2015).
26. **Zh.S. Gevorkian**. Phys. Rev. E, **57**, 2338 (1998).
27. **Zh.S. Gevorkian**. Phys. Rev. Lett., **145**, 185 (2006).
28. **R.W. Ziolkowski**. Phys. Rev. E, **70**, 046608 (2004).
29. **M. Silveirinha, N. Engheta**. Phys. Rev. Lett., **97,** 157403 (2006).
30. **A. Alu, M. Silveirinha, A. Salandrino, N. Engheta**. Phys. Rev. B, **75**, 155410 (2007).
31. **J. Urata, M. Goldstein, M.F. Kimmitt, A. Naumov, C. Platt, and J. E. Walsh.** Phys. Rev. Lett., **80**, 516 (1998).

32. **Zh.S. Gevorkyan**. Phys. Rev. ST AB, **13,** 070705 (2010).
33. **D.N. Klochkov, A.I. Artemiev, K.B. Oganesyan, Y.V. Rostovtsev, C.K. Hu.** J. Modern Optics, **57**, 2060 (2010).
34. **D.N. Klochkov, A.I. Artemiev, K.B. Oganesyan, Y.V. Rostovtsev, M.O. Scully, C.K. Hu.** Physica Scripta, **T140,** 014049 (2010).
35. **K.B. Oganesyan.** Laser Physics Letters, **12**, 116002 (2015).
36. **В.М. Агранович, А.А. Марадудин**. Поверхностные Поляритоны: Электромагнитные волны на поверхности. Москва, Наука, 1985.
37. **P.W. Anderson**. Phil. Mag., **B52**, 505 (1985).
38. **K. Arya, Z.B. Su, Joseph L.Birman.** Phys. Rev. Lett., **57**, 2725 (1986).

ԲԱՑԱՍԱԿԱՆ ԴԻԷԼԵԿՏՐԻԱԿԱՆ ԹԱՓԱՆՑԵԼԻՈՒԹՅԱՄԲ ՆՅՈՒԹԵՐ ԴԻՖՈՒԶ ՃԱՌԱԳԱՅԹՄԱՆ ՀԱՄԱՐ

Կ.Բ. ՀՈՎՀԱՆՆԻՍՅԱՆ

Քննարկված է թիթեղների պատահական խրձի միջով անցնող լիցքավորված մասնիկների դիֆուզ ճառագայթման առաջացումը ինֆրակարմիր տիրույթում: Դիֆուզ ճառագայթումը առաջանում է թիթեղների վրա կեղծ ֆոտոնների բազմակի ցրումների շնորհիվ: Ճառագայթման ինտենսիվությունը բարձրացնելու համար պետք է ցրումը ավելի արդյունավետ դարձնել: Այդ նպատակի համար առաջարկված է օգտագործել բացասական դիէլեկտրական թափանցելիությամբ նյութեր:

MATERIALS WITH NEGATIVE PERMITTIVITY FOR DIFFUSION RADIATION

K.B. OGANESYAN

The generation of diffusive radiation in the IR region by a charged particle passing through a random stack of plates is considered. Diffusive radiation originates due to multiple scattering of pseudophotons on the plates. To enhance the radiation intensity one needs to make the scattering more effective. For this goal we suggest to use materials with negative dielectric constant.

Известия НАН Армении, Физика, т.51, №4, с.424-436 (2016)

УДК 535.343

ЧАСТОТНЫЙ РЕПЕР ДЛЯ АТОМНЫХ ПЕРЕХОДОВ D_2-ЛИНИИ РУБИДИЯ НА ОСНОВЕ ЭФФЕКТА СЕЛЕКТИВНОГО ОТРАЖЕНИЯ

А.Д. САРГСЯН[1*], Г.Т. АХУМЯН[1], А.С. САРКИСЯН[1], А.О. АМИРЯН[1,2], Д.Г. САРКИСЯН[1]

[1]Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак, Армения
[2]Laboratoire Interdisciplinaire Carnot de Bourgogne, Universit'e de Bourgogne, Dijon, France

[*]e-mail: sarmeno@mail.ru

(Поступила в редакцию 18 июля 2016 г.)

На примере D_2-линии атомов Rb продемонстрирована работа частотного репера атомных переходов, основанного на применении спектра селективного отражения (SR) от границы паров атомов при использовании наноячейки (НЯ) с толщиной $L \sim \lambda/2$, где $\lambda = 780$ нм – длина волны лазерного излучения. Показано, что при изменении толщины вблизи $L \sim \lambda/2$ происходит инверсия знака наклона профиля линии SR: при $L > \lambda/2$ производная отрицательная, а при $L < \lambda/2$ производная положительная. Продемонстрировано, что в случае, когда лазерное излучение направлено близко к нормали к поверхности НЯ, то в реальном времени возможно формирование производной SR, которая представляет собою пик, расположенный на атомном переходе, со спектральной шириной 35 МГц. Продемонстрирован эффект осцилляции знака наклона спектра SR при изменении толщины L в интервале от $\sim\lambda/2$ до $\sim 3/2\lambda$. Отмечено практическое применение SR.

1. Введение

Спектроскопические ячейки сантиметровой длины, которые содержат пары атомов щелочных металлов, широко используются для изучения оптических- и магнито-оптических процессов в лазерной атомной спектроскопии [1]. Однако атомные переходы между нижними и верхними уровнями сверхтонкой структуры (имеются ввиду переходы в оптическом диапазоне 500–900 нм) в спектрах резонансного поглощения и флуоресценции, как правило, спектрально не разрешены. Это происходит по причине большого доплеровского уширения основных атомных переходов $D_{1,2}$-линий, спектральная ширина которых при комнатной температуре ячейки составляет 400, 500 и 800 МГц для атомов цезия, рубидия и калия, соответственно [2,3]. Частотные расстояния между атомными переходами находятся в интервале 10–300 МГц, что меньше доплеровской ширины, поэтому атомные переходы частотно перекрываются и становятся «скрытыми» под общим доплеровским профилем [2]. В то же время в экспериментах на атомах необходимо точное знание частотного положения отдельного атомного перехода, т. е. необходим частотный репер атомных переходов. В настоящее время наиболее используемым методом, позволяющим спектрально разрешить атомные переходы, является метод насыщенного поглощения (НП) (saturation absorption) [2]. Насыщение поглощения реализуется для выделенной группы атомов, в результате чего формируется узкий оптический резонанс. Для реализации НП исходный лазерный пучок с помощью полупрозрачного зеркала делится на две части: мощный пучок накачки (несколько мВт) и более слабый пробный пучок (на порядок меньшей мощности), которые направляются навстречу друг другу и перекрываются в ячейке с атомарными парами (регистрируется спектр пробного пучка). Вследствие эффекта Доплера только выделенная группа атомов, которая распространяется в ячейке перпендикулярно к накачке и пробному излучению, испытывает оптическую накачку сильным полем (приводящую к уменьшению населенности уровня, с которого происходит поглощение), что и регистрирует пробное излучение. При этом формируются узкие оптические резонансы, селективные по атомным скоростям (ОРСС), со спектральной шириной близкой к естественной ширине (5–6 МГц). Недостатком метода НП является формирование больших по амплитуде «кроссовер» резонансов, которые сильно усложняют спектр и затрудняют применение «полезных» ОРСС. К недостаткам метода НП следует отнести также и то, что амплитуды ОРСС не соответствуют вероятностям атомных переходов. Отметим также метод когерентного пленения населенности, с помошью которого можно формировать сверхузкие оптические резонансы на атомных переходах [4], однако для его реализации необходимо использовать два лазерных пучка на разных частотах. Заметим, что при использовании атомного пучка также реализуется бездоплеровское разрешение, однако эта техника сложна в эксплуатации [2].

Таким образом, наличие простого метода формирования узких оптических резонансов, которые раположены точно на частотах атомных переходов, продолжает оставаться актуальной задачей. В настоящей работе представлен новый и сравнительно простой метод, основанный на процессе селективного отражения (SR) от границы паров атомов Rb D_2-линии при использовании НЯ с толщиной $L \sim \lambda/2$, где λ = 780 нм – длина волны резонансного лазерного излучения.

2. Экспериментальные результаты

2.1. Наноячейка, заполненная рубидием

Была использована НЯ, заполненная натуральной смесью рубидия (72% изотопа ^{85}Rb и 28% изотопа ^{87}Rb), с клиновидной толщиной зазора L в интервале

20–900 нм, конструкция которой описана в работе [5]. Окна НЯ изготовлены из хорошо отполированного кристаллического сапфира с размерами 20 × 30 × 1.2 мм^3. Для обеспечения клиновидности зазора между окнами (в нижней части) до склейки помещались две платиновые полоски с толщиной 900 нм и размерами 1 × 1 мм^2. Для минимизации двулучепреломления окна изготавливались таким образом, чтобы *C*-ось была перпендикулярна поверхности окна. НЯ имеет Т-образную форму: к нижней части окон приклеивается тонкий сапфировый отросток, который заполнен металлическим Rb. В эксперименте температура отростка НЯ поддерживалась в интервале 120–130°C. Это обеспечивает концентрацию атомов $N \geq 2\times10^{13}$ см$^{-3}$. На окнах НЯ температура была выше на 20 градусов для предотвращения конденсации паров (дополнительные детали конструкции НЯ приведены в работе [5]).

2.2. Экспериментальная установка

На рис.1 приведена экспериментальная схема. Использовалось излучение непрерывного диодного лазера с внешним резонатором ECDL (extended cavity diode laser) с λ = 780 нм и шириной линии ~1 МГц. Для формирования частотного репера часть лазерного излучения направлялась на заполненную Rb ячейку длиной 6 см, в которой формировался спектр НП по известной схеме [2]. Оптическое излучение регистрировалось фотодиодами ФД-24К (*2*), сигналы с которых усиливались и подавались на цифровой осциллограф Siglent. Для селекции

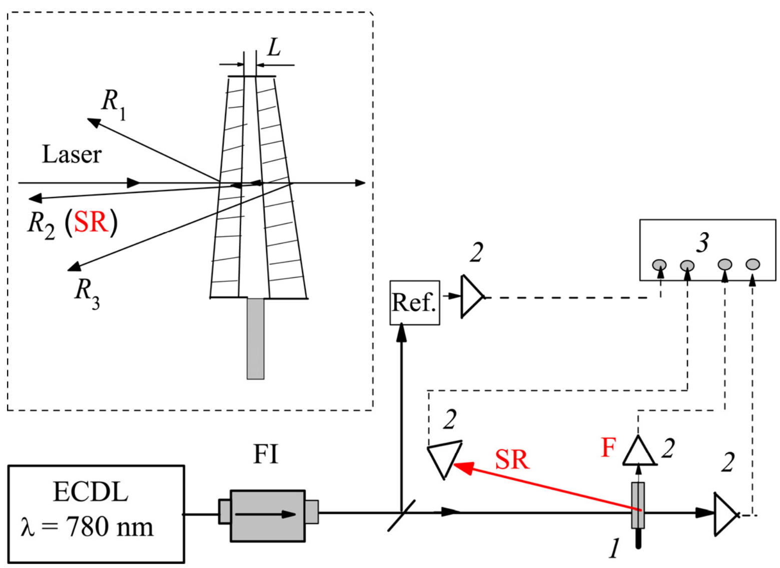

Рис.1. Схема эксперимента: ECDL – непрерывный лазер, FI – фарадеевский изолятор, *1* – НЯ с Rb внутри печки, *2* – фотоприемник, Ref. – узел для формирования частотного спектра, *3* – осциллограф марки Siglent. На вставке показана геометрия трех отраженных от НЯ пучков, где пучок SR отмечен как R_2.

сигнала SR использовался интерференционный фильтр на длине волны λ = 780 нм с шириной пропускания 10 нм. С помощью фотодиода F одновременно с SR регистрировался спектр флуоресценции от НЯ в боковом направлении. Для формирования пучка с диаметром 1 мм, равным размеру области $L \sim \lambda/2$, использовалась диафрагма. На вставке приведена геометрия трех отраженных от НЯ пучков, показан пучок SR, отраженный от границы окно НЯ–пары атомов Rb. Пучок SR распространяется в направлении R_2 и регистрируется фотодиодом (*2*). Для формирования SR с малой спектральной шириной необходимо направлять лазерное излучение близко к нормали к поверхности окон НЯ. Оба окна НЯ изготовлены клиновидными, чтобы отраженные пучки пространственно разделялись.

На рис.2 приведены диаграммы атомных переходов D_2-линии ^{85}Rb и ^{87}Rb с относительными вероятностями переходов. Отмечены также величины сверхтонкого расщепления для нижних и верхних уровней. В работе [6] отмечалось, что НЯ ведет себя как низкодобротный эталон Фабри–Перо (ФП), и отношение отраженных пучков R_2/R_1 описывается выражениями для ФП. Так, при толщине

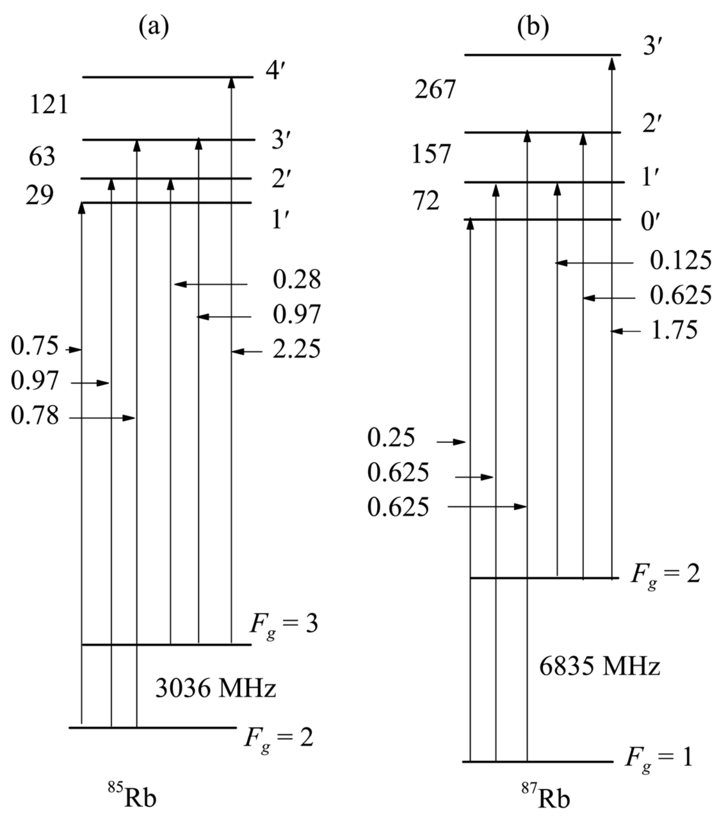

Рис.2. Диаграммы атомных переходов D_2-линии для атомов (a) ^{85}Rb и (b) ^{87}Rb. Стрелками указаны относительные вероятности переходов.

$L = \lambda/2$, а также при $L = \lambda$, отношение $R_2/R_1 = 0$, поэтому при таких толщинах SR очень слабое. Однако при отходе от толщины $L = \lambda/2$ отношение быстро возрастает и достигает максимума $R_2/R_1 \sim 2.9$ при $L = \lambda/4$ или $3\lambda/4$.

На рис.3 показаны экспериментальные спектры сигналов SR для $L > \lambda/2 = 420$ нм (кривая *1*) и для $L < \lambda/2 = 360$ нм (кривая *2*, обозначенная SR) для переходов ^{85}Rb $3 \rightarrow 2'$, $3'$, $4'$ (см. рис.2а). Осциллограф Siglent позволяет in situ формировать под каждым спектром SR его производную D которая для $L > \lambda/2$ отрицательная и для $L < \lambda/2$ положительная. Такое поведение спектров SR теоретически предсказано в работе [6] и экспериментально продемонстрировано в [7]. Спектальная ширина производных (D-пиков) на полувысоте составляет 35 МГц, что более, чем в 15 раз меньше доплеровской ширины паров Rb при температуре ячейки 120°C. Нетрудно увидеть, что амплитуды D-пиков хорошо соответствуют приведенным на диаграмме относительным вероятностям атомных переходов $3 \rightarrow 2'$, $3'$, $4'$. Кривая *4* (SA) показывает спектр НП, полученный с помощью рубидиевой ячейки длиной 6 см, из которой видно, что в спектре присутствуют три ОРСС, расположенных на переходах ^{85}Rb $3 \rightarrow 2'$, $3'$, $4'$ и три кроссовер резонанса C-O (см. рис.4, спектр НП). Видно, что C-O резонансы сильно усложняют спектр и затрудняют применение «полезных» ОРСС. Заметим, что амплитуды ОРСС не соответствуют вероятностям атомных переходов. Например, отношение амплитуд ОРСС ($3 \rightarrow 4'$) / ОРСС ($3 \rightarrow 3'$) из диаграммы на рис.2 должно быть 2.3, а из спектра НП оно равно 1.

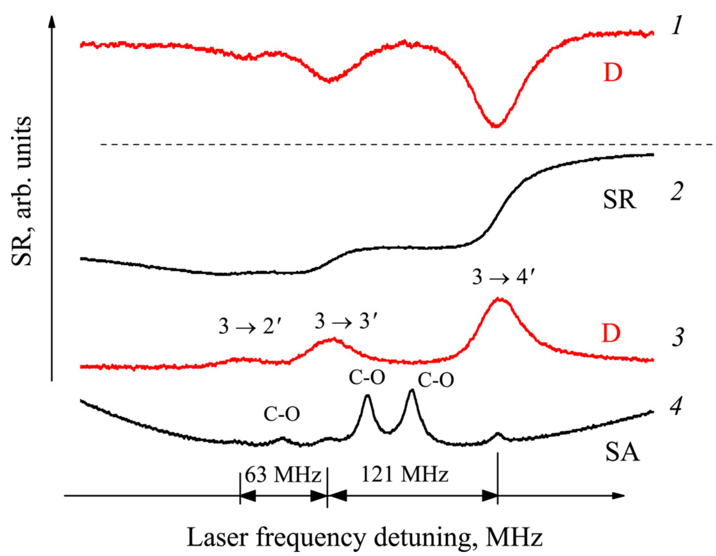

Рис.3. Спектры ^{85}Rb, D_2-линия, переходы $3 \rightarrow 2'$, $3'$, $4'$: кривая *1* – производная SR (D-пик), толщина НЯ $L = \lambda/2 + 30$ нм ≈ 420 нм. Ниже пунктирной области $L = \lambda/2 - 30$ нм ≈ 360 нм, кривая *2* – спектр SR, его производная D-пик (кривая *3*). Кривая *4* – реперный спектр НП (SA), на котором формируются три ОРСС и три C-O резонанса.

Ранее было показано, что спектр флуоресценции от НЯ с толщиной $L \sim \lambda/2$, где λ = 780 нм – длина волны резонансного лазерного излучения, спектрально в 2 раза уже спектра поглощения [8–11]. Это позволило успешно использовать спектр флуоресценции для исследования расщепления атомных переходов на большое количество новых переходов и их частотные сдвиги в сильных магнитных полях [12]. С целью выяснения какой из методов (флуоресценция или SR) обеспечивает лучшее спектральное разрешение проводилась их одновременная регистрация (спектр флуоресценции регистрировался фотоприемником F (*2*) (рис.1).

На рис.4 кривая *1* показывает спектр флуоресценции от НЯ с $L = \lambda/2$ – 30 нм ≈ 360 нм (регистрация производится в направлении, перпендикулярном к направлению лазерного пучка), кривая *2* – спектр D-пиков, полученных с помощью SR при L = 360 нм (кривая *3* – спектр НП). Из сравнения кривых следует, что спектральная ширина D-пиков примерно в 2 раза уже спектральных ширин атомных переходов, полученных с помощью флуоресценции. Кроме того, спектральные крылья атомных переходов в спектре флуоресценции спадают медленно, что приводит к сильному частотному перекрытию. Поэтому для нахождения правильных величин амплитуд переходов необходимо фитирование,

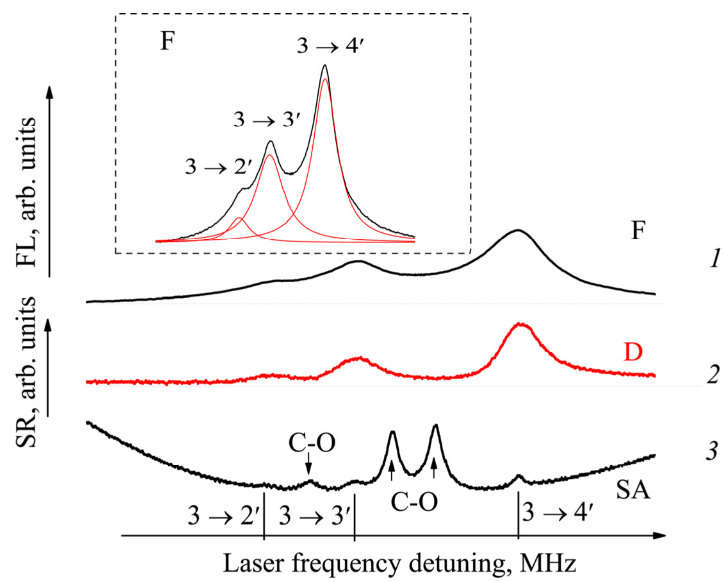

Рис.4. Спектры ^{85}Rb, D_2-линия, переходы 3 → 2′, 3′, 4′: кривая *1* – спектр флуоресценции, $L = \lambda/2 - 30$ нм ≈ 360 нм, кривая *2* – производная SR (D-пик), $L = \lambda/2$ –30 нм ≈ 360 нм (кривая отмечена как D), кривая *3* – спектр НП (SA), в котором видны три ОРСС и три C-O резонансы (отмечены стрелками). На вставке F показаны результаты разложения огибающей спектра флуоресценции на три лоренцевские функции.

т. е. разложение исходной кривой на составляющие кривые. На вставке рис.4 показаны результаты разложения огибающей на три кривые с помощью лоренцевских функций. Заметим, что правильная величина амплитуды перехода $3 \rightarrow 2'$ в 2 раза меньше той, что видна на исходной огибающей. Поскольку крылья атомных переходов в спектре SR спадают быстро, то нет необходимости такого фитирования. Отметим и другие преимущества метода SR по сравнению с флуоресцентным методом. Необходимая мощность для реализации метода SR (20–30 мкВт) примерно на два порядка меньше той, что необходима для реализации флуоресценции (2–3 мВт). Более того, для регистрации флуоресценции необходимо использование чувствительной аппаратуры, поскольку сигнал флуоресценции достаточно слабый, в то время как сигнал SR регистрируется очень легко простыми фотоприемниками, поскольку его расходимость повторяет расходимость используемого лазерного излучения, а мощность составляет несколько процентов от его мощности.

Спектр флуоресценции (кривая *1*) от НЯ при L = 360 нм и спектр D-пиков, полученных с помощью SR при L = 360 нм (кривая *2*) для переходов ^{87}Rb $2 \rightarrow 1'$, $2'$, $3'$ показан на рис.5 (кривая *3* – спектр НП). Из сравнения спектров следует, что спектральная ширина D-пиков примерно в 2 раза уже спектральных ширин

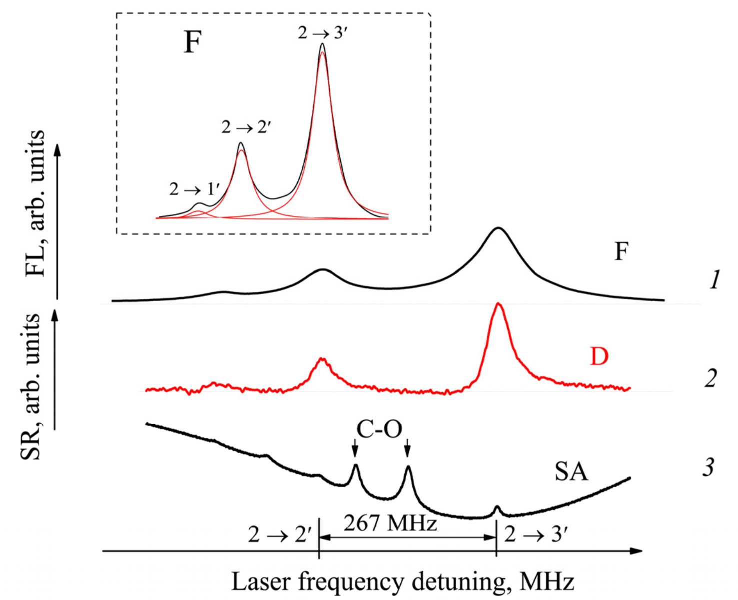

Рис.5. Спектры ^{87}Rb, D_2-линия, переходы $2 \rightarrow 1'$, $2'$, $3'$: кривая *1* – спектр флуоресценции при $L = \lambda/2 - 30$ нм ≈ 360 нм, кривая *2* – производная SR (D-пик) при $L = \lambda/2 - 30$ нм ≈ 360 нм (кривая D), кривая *3* – спектр НП (SA), в котором видны три ОРСС и три C-O резонансы (отмечены стрелками). На вставке F показаны результаты разложения огибающей спектра флуоресценции на три лоренцевские функции.

атомных переходов, полученных с помощью флуоресценции. Как отмечалось выше, крылья атомных переходов в спектре флуоресценции спадают медленно, поэтому для нахождения правильных величин амплитуд переходов необходимо фитирование исходной огибающей кривой спектра на три кривые, показанные на вставке рис.5. Видно, что правильная величина амплитуды перехода $2 \rightarrow 1'$ в 2 раза меньше той, что видна на исходной огибающей.

На рис.6 приведены спектры атомных переходов ^{87}Rb $1 \rightarrow 0', 1', 2'$. Кривая *1* показывает спектр флуоресценции от НЯ для $L = 360$ нм, кривая *2* – спектр D-пиков, полученных с помощью SR $L = 360$ нм (кривая *3* – спектр НП). Из сравнения спектров следует, что спектральная ширина D-пиков примерно в 2 раза уже спектральных ширин атомных переходов, полученных с помощью флуоресценции. Для нахождения правильных величин амплитуд переходов проведено фитирование исходной огибающей кривой спектра на три кривые (см. вставку на рис.6). Видно, что правильная величина амплитуды перехода $1 \rightarrow 0'$ почти в 2 раза меньше той, что видна на исходной огибающей.

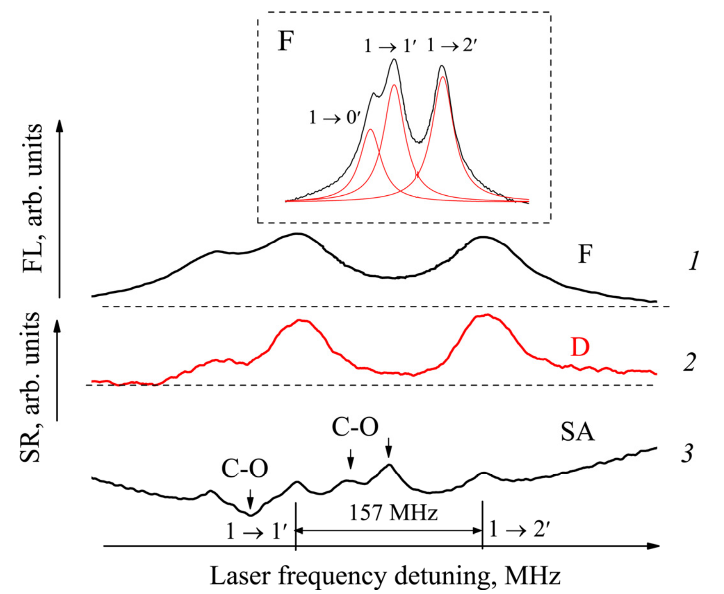

Рис.6. Спектры для ^{87}Rb, D_2-линия, переходы $1 \rightarrow 0', 1', 2'$: кривая *1* – спектр флуоресценции, $L = \lambda/2 - 30$ нм ≈ 360 нм, кривая *2* – производная SR (D-пик), $L = \lambda/2 - 30$ нм ≈ 360 нм (кривая D), кривая *3* реперный спектр – НП, кривая *3* – спектр НП (SA), в котором видны три ОРСС и три C-O резонансы (отмечены стрелками). На вставке F показаны результаты разложения огибающей спектра флуоресценции на три лоренцевские функции.

Для получения узких D-пиков необходимым условием является малость угла θ между нормалью к поверхности окна и направлением лазерного излучения (рис.7). Кривая *1* показывает спектр D-пиков при $\theta = 0°$, а уширенные примерно в 3-раза D-пики на кривой *2* получены при угле $\theta = 6°$. Такое уширение происходит по следующей причине: при $\theta = 0°$ в формировании D-пиков участвуют атомы, которые распространяются параллельно окнам с тепловой скоростью V перпендикулярно направлению лазерного излучения, т. е. атомы заключенные в зазоре НЯ ведут себя как двумерный атомный пучок и поэтому доплеровское уширение отсутствует [2]; при $\theta = 6°$ возникает z-компонента тепловой скорости $V_z = V \sin\theta$, что приводит к дополнительному доплеровскому уширению. Такая же картина наблюдается и для спектра флуоресценции – при наличии $\theta \neq 0°$ происходит уширение спектра флуоресценции [8].

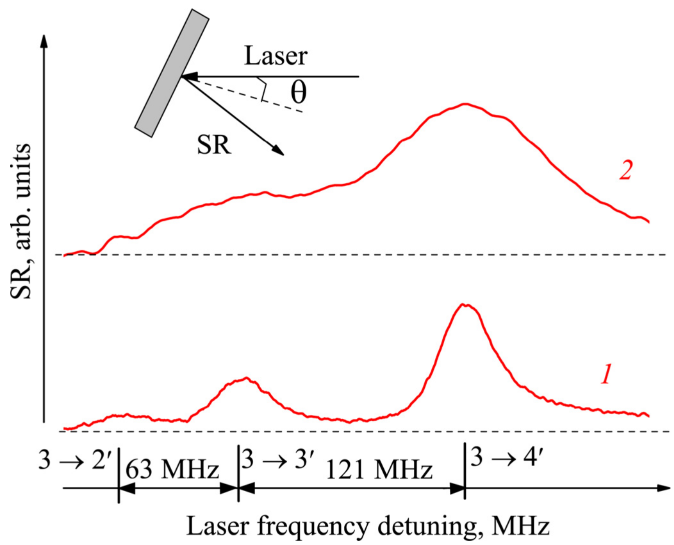

Рис.7. Спектры SR (D-пики) для ^{85}Rb, D_2-линия, переходы $3 \to 2'$, $3'$, $4'$: кривая *1* – угол $\theta = 0°$, кривая *2* – угол $\theta = 6°$. Показана геометрия взаимодействия, θ – угол между лазерным излучением и нормалью к НЯ.

Ранее в работах [3, 9–11] было показано, что важным параметром, определяющим спектральную ширину, форму линии и величину поглощения в НЯ является параметр L / λ, где L – толщина столба паров, λ – длина волны лазерного излучения, резонансного атомному переходу. В частности, было показано, что спектральная ширина резонансного поглощения достигает своего минимального значения при $L = (2n+1)\lambda/2$ (где n – целое число), которое было названо эффектом когерентного сужения Дике (КСД), в то время как при $L = n\lambda$, спектральная ширина резонансного поглощения достигает максимального значения, близкого к доплеровской ширине. Это явление был названо коллапсом эффекта КСД. В работе [6] теоретически был предсказан другой новый эффект – осцилляции знака наклона (ОЗН) спектра SR, т. е. осцилляции знака прозводной D с (+) на (–) при изменении толщины НЯ вблизи $L \sim \lambda/2$ и $L \sim \lambda$. Отметим, что разница между КСД и ОЗН в том, что, если в первом случае (скажем при толщине $L \sim \lambda/2$) спектральная ширина резонансного поглощения достигает своего минимального значения (~120 МГц), то оно практически не меняется при изменении толщины вблизи $L = \lambda/2 \pm 30$ нм. В случае ОЗН осцилляции знака производной D с (+) на (–) происходят при изменении толщины вблизи $L = \lambda/2 \pm 30$ нм. На рис.8 приведены спектры ОЗН для переходов ^{85}Rb $3 \rightarrow 2'$, $3'$, $4'$ при возрастании толщины L (снизу вверх) и видны осцилляции знака производной D с (+) на (–).

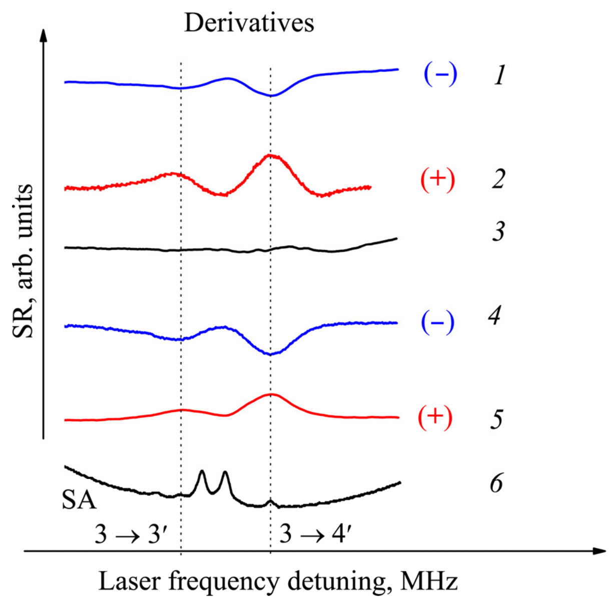

Рис.8. Производные огибающих кривых SR спектров ^{85}Rb, D_2-линия, переходы $3 \rightarrow 2'$, $3'$, $4'$. Эффект осцилляции знака наклона спектра SR, т. е. осцилляции знака производной D с (+) на (–) при изменении толщины НЯ: *1* – $L = 1.5\lambda + 30$ нм , *2* – $L = 1.25\ \lambda$, *3* – $L = \lambda$ (SR практически нулевое), *4* – $L = \lambda/2 + 30$ нм и *5* – $L = \lambda/2 - 30$ нм. Кривая *6* – реперный спектр НП с переходами $3 \rightarrow 3'$ и $3 \rightarrow 4'$.

Процессу SR в случае использования спектроскопических ячеек толщиной 1–10 см посвящено много экспериментальных и теоретических работ [13–15]. Интерес к SR обусловлен формируемым субдоплеровским спектром и большим коэффициентом отражения (может достигать порядка двух десятков процентов от падающего излучения), что обусловливает его практическое применение. В работе [16] SR использовалось при изучении взаимодействия атома с диэлектрическим окном ячейки для измерения ван дер Ваальсовского взаимодействия, которое проявляется в виде «красного» сдвига частоты SR. В работе [7] дисперсионная форма сигнала SR применялась для стабилизации частоты непрерывного диодного лазера.

На рис.9 приведен спектр SR (кривая *1*) при использовании Rb ячейки при L = 10 мм. Как видим, форма спектра сильно отличается от формы SR при использовании НЯ с L = 360 нм (сравните с кривой *2* на рис.3). Производная SR спектра также сильно отличается от D-пиков при использовании НЯ с L = 360 нм (сравните с кривой *3* на рис.3). Следовательно, D-пики могут быть использованы в качестве частотных реперов для атомных переходов щелочных металлов только при использовании НЯ. Заметим, что такое различие свидетельствует о том, что в длинных ячейках в формировании SR участвуют не только атомы, находящиеся в прилегающем к окну слое (иногда отмечают толщину такого слоя как $L = \lambda/2\pi \approx$ 125 нм), а также атомы, находящиеся дальше от окна ячейки. Важно отметить, что приведенная форма спектра SR на рис.9 может отличаться от спектра SR при использовании Rb ячейки с L = 5–6 см, поскольку при использовании ячейки с L = 10 мм отраженное от задней стенки излучение может влиять на форму SR, в то время как в более длинной ячейке из-за сильного поглощения отраженное от задней стенки излучение не доходит до первого окна и не влияет на спектр SR. Поскольку теория процесса SR для ячеек сантиметровой длины подробно изложена в работах [13–15], поэтому опишем процесс SR качественно, без учета влияния отраженного от заднего окна излучения. Коэффициент R_{SR} может быть представлен простой френелевской формулой для отражения

$$R_{SR} = \left[\left(n_w - n_A\right)/\left(n_w + n_A\right)\right]^2, \qquad (1)$$

где n_W – показатель преломления окна ячейки, который для сапфирового окна в видимой области равен 1.76, а n_A – показатель преломления паров атомов вблизи

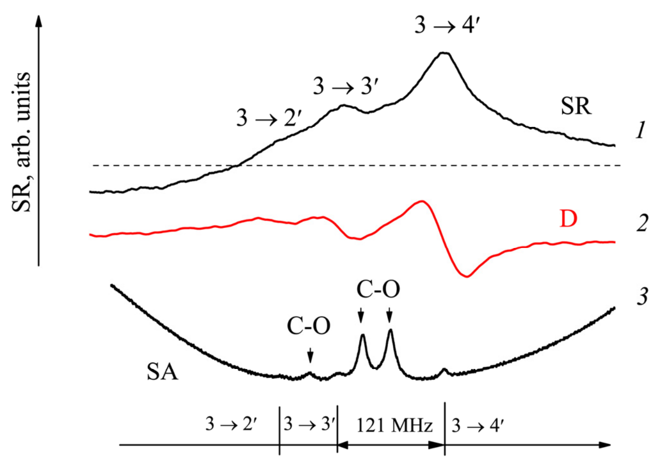

Рис.9. Спектры ^{85}Rb, D_2-линия, для обычной Rb ячейки *с* длиной L = 10 мм, переходы 3 → 2′, 3′, 4′: кривая *1* – спектр SR, температура ~120°C, мощность лазера <1мВт (пунктирная кривая показывает SR в 7.6%, которая является асимптотой для крыльев SR), кривая *2* – производная спектра SR (кривая D), кривая *3* – реперный спектр НП (SA), в котором видны три ОРСС и три C-O.

атомного перехода, который имеет дисперсионную форму и приведен в работе [2]. Когда частота лазера меньше частоты перехода, то $n_A > 1$ (как правило, больше единицы на величину $0.1–10^{-3}$). В случае, когда частота лазера больше частоты перехода, то $n_A < 1$ примерно на такую же величину. Из формулы (1) нетрудно видеть, что R_{SR} также будет иметь следующий дисперсионный вид: когда частота лазера меньше частоты перехода $R_{SR} < 7.6\%$ (величину 7.6% получаем из формулы (1), когда $n_A = 1$) и когда частота лазера больше частоты перехода $R_{SR} > 7.6\%$. Вдали от резонанса оба крыла SR будут стремиться к асимптоте в 7.6%, которая показана на рис.9 горизонтальной пунктирной линией.

3. Заключение

Экспериментально продемонстрировано (на примере D_2-линии атомов Rb), что частотный репер атомных переходов, основанный на применении спектра селективного отражения от границы паров атомов при использовании НЯ с толщиной $L \sim \lambda/2 \sim 390$ нм является простым и удобным инструментом. Показано, что в случае, когда лазерное излучение направлено близко к нормали поверхности НЯ в реальном времени формируется производная SR, которая представляет собою пик, расположенный на атомном переходе со спектральной шириной 35 МГц. Экспериментально продемонстрирован ряд преимуществ характеристик такого частотного репера по сравнению с характеристиками широко применяемой техники НП, в частности: 1) наличие в спектре только «полезных» резонансов, которые указывают частотное положение атомных переходов; 2) репер правильно показывает относительные вероятности атомных переходов; 3) работает с единичным лазерным пучком; 4) необходимая мощность лазера для функционирования 20–30 мкВт. Продемонстрировано также преимущество применения спектра SR по сравнению со спектром флуоресценции при использовании НЯ той же толщины $L \sim \lambda/2$. В сильных магнитных полях вплоть до нескольких кГс SR позволит проследить частотное и вероятностное поведение каждого из 20 атомных переходов Rb D_2-линии с лучшим пространственно-спектральным разрешением, чем тот, что ранее был реализован в работах [17–20] с использованием спектров поглощения наноячейки.

Исследование выполнено в рамках проекта № SCS # 15T-1C040 ГКН МОН Армении и в рамках Международный Ассоциированной Лаборатории IRMAS (CNRS-France & SCS-Armenia).

ЛИТЕРАТУРА

1. **M. Auzinsh, D. Budker, and S. Rochester**. Optically Polarized Atoms: Understanding Light-Atom Interactions. Oxford Univ. Press, Oxford, 2010.
2. **W. Demtroder**. Laser Spectroscopy: Basic Concepts and Instrumentation. Springer-Verlag, Berlin, 2004.
3. **A. Sargsyan, Y. Pashayan-Leroy, C. Leroy, D. Sarkisyan.** J. Physics B: Atomic,

Molecular and Optical Physics**, 49,** 075001 (2016).
4. **M. Fleischhauer, A. Imamoglu, J.P. Marangos.** Rev. Modern Physics, **77**, 633 (2005).
5. **А. Саргсян, Г. Ахумян, Р. Мирзоян, Д. Саркисян.** Письма в ЖЭТФ, **98**, 499 (2013).
6. **G. Dutier, S. Saltiel, D. Bloch, M. Ducloy.** JOSA B, **20**, 793 (2003).
7. **E.A. Gazazyan, A.V. Papoyan, D. Sarkisyan, A. Weis.** Laser Phys. Lett., **4**, 801 (2007).
8. **D. Sarkisyan, T. Becker, A. Papoyan, P. Thoumany, H. Walther.** Appl. Phys. B, **76**, 625 (2003).
9. **G. Dutier, A. Yarovitski, S. Saltiel, A. Papoyan, D. Sarkisyan, D. Bloch, M. Ducloy.** Europhys. Lett., **63**, 35 (2003).
10. **D. Sarkisyan, T. Varzhapetyan, A. Sarkisyan, Yu. Malakyan, A. Papoyan, A. Lezama, D. Bloch, M. Ducloy.** Phys. Rev. A, **69**, 065802 (2004).
11. **А.Д. Саргсян, Д.Г. Саркисян, Е. Пашаян-Леруа, К. Леруа, П. Морошкин, А. Вейс,** Известия НАН Армении, Физика, **43**, 11 (2008).
12. **D. Sarkisyan, A. Papoyan, T. Varzhapetyan, K. Blush, M. Auzinsh.** JOSA B, **22**, 88, (2005).
13. **H. Failache, S. Saltiel, M. Fichet, D. Bloch, M. Ducloy.** Phys. Rev. Lett., **83**, 5467 (1999).
14. **A.V. Papoyan, G.G. Grigoryan, S.V. Shmavonyan, D. Sarkisyan, J. Guéna, M. Lintz, M.A. Bouchiat.** Eur. Phys. J. D, **30**, 265 (2004).
15. **M. Fichet, G. Dutier, A. Yarovitsky, P. Todorov, I. Hamdi, I. Maurin, S. Saltiel, D. Sarkisyan, M.P. Gorza, D. Bloch, M. Ducloy.** Europhys. Lett., **77**, 54001 (2007).
16. **D. Bloch, M. Ducloy.** Advances Atom. Mol. Opt. Phys., **50**, 91 (2005).
17. **Т.С. Варжапетян, Г.Т. Ахумян, В.В. Бабушкин, Д.Г. Саркисян, А. Атварс, М. Аузиньш,** Известия НАН Армении, Физика, **42**, 338 (2007).
18. **А. Саргсян, Г. Ахумян, А. Папоян, Д. Саркисян.** Письма в ЖЭТФ, **101**, 330 (2015).
19. **A. Sargsyan, A. Tonoyan, G. Hakhumyan, C. Leroy, Y. Pashayan-Leroy, D. Sarkisyan.** Europhys. Lett., **110**, 23001 (2015).
20. **A.D. Sargsyan, G.T. Hakhumyan, A.H. Amiryan, C. Leroy, H.S. Sarkisyan, D.H. Sarkisyan**, J. Contemp. Phys. (Armenian Ac. Sci.), **50**, 317 (2015).

FREQUENCY REFERENCE FOR ATOMIC TRANSITIONS OF Rb D_2-LINE BASED ON THE EFFECT OF SELECTIVE REFLECTION

A.D. SARGSYAN, G.T. HAKHUMYAN, A.S. SARKISYAN, A.O. AMIRYAN, D. SARKISYAN

The work of a frequency reference for Rb D_2 atomic transitions with the use of a Rb nano-cell with a thickness $L \sim \lambda/2$, (where $\lambda = 780$ nm is the laser wavelength) based on the selective reflectance (SR) spectrum, was demonstrated. Varying the thickness of the nano-cell near thickness $L \sim \lambda/2$ we observe the sign inversion of SR tilt profile which is positive when $L < \lambda/2$ and is negative when $L > \lambda/2$. In the case when the incident angle of the laser beam to the surface of the nano-cell is close to the normal, it is possible to form in situ the derivatives of SR, which present a resonance peak with ~35 MHz spectral linewidth, located on an atomic transition. It is demonstrated periodic changes of the tilt sign while varying nano-cell thickness from $L \sim \lambda/2$ up to $L \sim 3/2\lambda$. Possible applications of SR are indicated.

Известия НАН Армении, Физика, т.51, №4, с.437-451 (2016)

УДК 537.311

ВЛИЯНИЕ РАЗНОСТИ ФАЗ СУБПИКОСЕКУНДНЫХ ИК ЛАЗЕРНЫХ ИМПУЛЬСОВ, РАСПРОСТРАНЯЮЩИХСЯ В ПЕРИОДИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЕ GaAs/ZnTe, НА ЭФФЕКТИВНОСТЬ ГЕНЕРАЦИИ ИЗЛУЧЕНИЯ СУММАРНОЙ И РАЗНОСТНОЙ ЧАСТОТ

Д.Л. ОГАНЕСЯН[1*], А.О. ВАРДАНЯН[1], Г.Д. ОГАНЕСЯН[2]

[1]Национальный институт метрологии, Ереван, Армения
[2]Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

[*]e-mail: davidhl@ysu.am

(Поступила в редакцию 17 мая 2016 г.)

Приведены результаты теоретического исследования и численного моделирования процесса нелинейного взаимодействия взаимно-ортогональных линейно-поляризованных субпикосекундных ИК лазерных импульсов с одномерной периодической структурой GaAs/ZnTe. В частности, рассмотрено взаимодействие таких импульсов с одинаковой амплитудой электрического поля 70.71 МВ/м, длительностью 333 фс на центральной длине волны $\lambda_0 = 10$ мкм с периодической структурой с толщиной слоев GaAs и ZnTe, равными $\lambda_0/2n_{\mathrm{GaAs}} =$ 1.527 мкм и $\lambda_0/4n_{\mathrm{ZnTe}} = 0.931$ мкм, соответственно, и количеством периодов, равным 100. Показано, что эффективность генерации излучения суммарной и разностной частот пропорциональна разности фаз взаимодействующих ИК импульсов накачки.

1. Введение

Нелинейно-оптические методы генерации и регистрации широкополосного ИК импульса имеют практическое значение для нестационарной ИК спектроскопии многоатомных молекул, исследования процессов возбуждения и релаксации многоатомных молекул, разработки методов получения неравновесных внутримолекулярных возбуждений, изучения физики узкозонных полупроводников [1–4] и т. д. Определение смещения фазы несущей частоты широкополосного ИК импульса относительно огибающей имеет принципиальное значение при разработке и создании импульсных ИК-лазеров со стабилизацией фазы несущей частоты относительно огибающей. В работе [5] предлагается метод определения фазового сдвига центральной частоты субпикосекундного лазерного импульса в среднем ИК диапазоне длин волн, основанный на генерации излучения суммарной частоты (ИСЧ) двумя одинаковыми линейно-поляризованными лазерными субпикосекундными импульсами накачки с разностью фаз, распространяющимися в кристалле GaSe с регулярной доменной структурой. Показано, что в поле субпикосекундных ИК лазерных импульсов, распространяющихся в кристалле GaSe с регулярной доменной структурой, эффективность генерации ИСЧ пропорциональна разности фаз взаимодействующих импульсов. Повышение эффективности генерации ИСЧ на фиксированных длинах волн обеспечивается благодаря использованию структуры с периодическим изменением знака нелинейной восприимчивости. При этом толщина домена выбирается таким образом, чтобы имела место одновременная квазисинхронная генерация второй, третьей и четвертой гармоник ИК импульса. Следует отметить, что квазисинхронная генерация может быть также реализована путем использования традиционного дисперсионного механизма компенсации фазовой расстройки за счет изменения (увеличения или уменьшения) эффективного показателя преломления среды на краях запрещенной зоны одномерной периодической структуры – фотонного кристалла (ФК) [6,7]. Для ФК существует также несинхронный механизм повышения эффективности нелинейно-оптического взаимодействия, который связан с локализацией поля в ФК, приводящей к увеличению плотности энергии полей на краях брэгговской запрещенной зоны ФК с большой разностью показателей преломления в соседних слоях [8].

В настоящей работе приводятся результаты теоретического исследования и численного моделирования процесса нелинейного взаимодействия взаимно-ортогональных линейно-поляризованных субпикосекундных ИК лазерных импульсов с одномерной периодической структурой GaAs/ZnTe.

2. Генерация ИСЧ и ИРЧ в поле субпикосекундных ИК импульсов, распространяющихся в периодической структуре GaAs/ZnTe

На основе системы нелинейных уравнений Максвелла рассматривается процесс влияния разности фаз между двумя одинаковыми взаимно-ортогональными линейно-поляризованными субпикосекундными ИК лазерными импульсами, распространяющимися в периодической структуре GaAs/ZnTe, на эффективность генерации ИСЧ и ИРЧ. Представленная на рис.1а периодическая структура GaAs/ZnTe – одномерный ФК, состоящий из параллельных друг другу слоев GaAs и ZnTe с толщинами l_g и l_z и коэффициентами преломления $n_g = n_{\mathrm{GaAs}}$ и $n_z = n_{\mathrm{ZnTe}}$, соответственно. Грани изотропных кристаллов GaAs и ZnTe с кубической кристаллической структурой группы симметрии $\bar{4}3m$ параллельны плоскостям (110). На рис.1б показана взаимная ориентация кристаллографических (XYZ) и лабораторных (xyz) координатных систем. Согласно рис.1а, период изменения

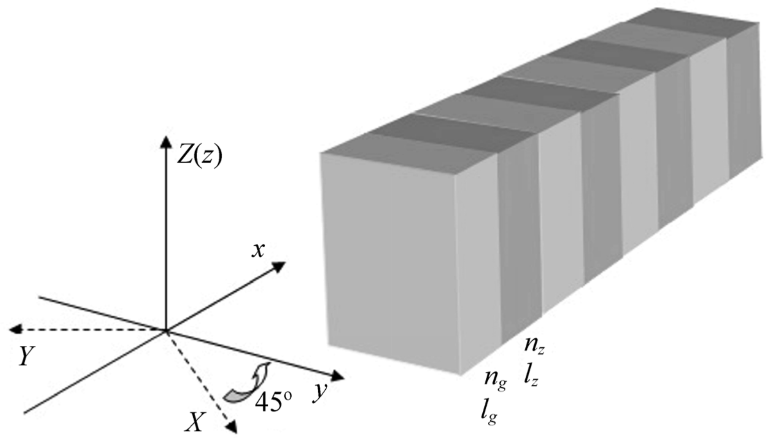

Рис.1. (a) Периодическая структура GaAs/ZnTe и (b) взаимная ориентация кристаллографических (*XYZ*) и лабораторных (*xyz*) координатных систем.

коэффициента преломления $\Lambda = l_g + l_z$. Рассмотрим одинаковые взаимно-ортогональные линейно-поляризованные лазерные импульсы с плоскими волновыми фронтами и компонентами электромагнитного поля $(0, E_y, E_z)$ и $(0, H_y, H_z)$, распространяющиеся вдоль оси x, совпадающей с нормалью к плоскости (110), в периодической структуре GaAs/ZnTe. В этом случае система уравнений Максвелла, описывающая данный процесс, может быть представлена в виде

$$\frac{\partial D_y}{\partial t} = -\frac{\partial H_z}{\partial x}, \quad \frac{\partial H_z}{\partial t} = -\frac{1}{\mu_0}\frac{\partial E_y}{\partial x}, \quad E_y = \frac{D_y - P_{y\mathrm{L}} - P_{y\mathrm{NL}}}{\varepsilon_0}, \qquad (1)$$

$$\frac{\partial D_z}{\partial t} = \frac{\partial H_y}{\partial x}, \quad \frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{1}{\mu_0}\frac{\partial E_z}{\partial x}, \quad E_z = \frac{D_z - P_{z\mathrm{L}} - P_{z\mathrm{NL}}}{\varepsilon_0}, \qquad (2)$$

где D_z и D_y – компоненты электрической индукции, ε_0 и μ_0 – проницаемости вакуума, а $P_{z\mathrm{L}}$, $P_{y\mathrm{L}}$, $P_{z\mathrm{NL}}$ и $P_{y\mathrm{NL}}$ – соответственно линейная и нелинейная поляризации среды. D_z и D_y определяются согласно материальным уравнениям, в которых учитываются линейная дисперсия и нелинейная поляризация среды

$$D_z = \varepsilon_0 E_z + P_{z\mathrm{L}} + P_{z\mathrm{NL}}\,, \qquad (3)$$

$$D_y = \varepsilon_0 E_y + P_{y\mathrm{L}} + P_{y\mathrm{NL}}\,. \qquad (4)$$

Линейная поляризация периодической среды может быть представлена в виде

$$P_{z\mathrm{L}}(t)=\varepsilon_0\int_{-\infty}^{t}\chi^{(1)}(t-\tau)E_z(\tau)d\tau,$$
$$P_{y\mathrm{L}}(t)=\varepsilon_0\int_{-\infty}^{t}\chi^{(1)}(t-\tau)E_y(\tau)d\tau, \tag{5}$$

где в линейной части поляризации (5) частотно-зависимая линейная восприимчивость $\chi^{(1)}(\omega)$ в рассматриваемой нами геометрии определяется через показатели преломления $n_{\mathrm{GaAs}}(\omega)$ и $n_{\mathrm{ZnTe}}(\omega)$ следующим образом: при $m(l_g+l_z)<x<m(l_g+l_z)+l_g$, ($m\in Z$ – целое число)

$$\chi^{(1)}(\omega)=n^2_{\mathrm{GaAs}}(\omega)-1=b_0+\sum_{i=1}^{3}\frac{b_i(2\pi c)^2}{\omega_i^2-\omega^2}, \tag{6а}$$

где $b_0 = 4.372514$, $b_1 = 27.83972$, $b_2 = 0.031764 + 4.35\times10^{-5}\Delta T + 4.664\times10^{-7}\Delta T^{-2}$, $b_3 = 0.00143636$, $\lambda_1 = 0.4431307 + 0.50564\times10^{-4}\,\Delta T$ мкм, $\lambda_2 = 0.\ 8746453 + 0.1913\times10^{-3}\,\Delta T - 4.882\times10^{-7}\,\Delta T^{-2}$ мкм, $\lambda_3 = 36.9166 - 0.011622\times\Delta T$ мкм, $\lambda_i = 2\pi c/\omega_i$, $\Delta T = 0$ – девиация значения температуры от комнатной $T = 293$ K ($t = 22$°C) [9], а при $m(l_g+l_z)+l_g<x<m(l_g+l_z)+l_g+l_z$ и $t = 22$°C

$$\chi^{(1)}(\omega)=n^2_{\mathrm{ZnTe}}(\omega)-1=a_0+\sum_{i=1}^{2}\frac{a_i(2\pi c)^2}{\omega_i^2-\omega^2}, \tag{6б}$$

где $a_0 = 3.3033$, $a_1 = 20.9070$, $a_2 = 8.2569\times10^{-4}$, $\lambda_1 = 0.37766$ мкм, $\omega_1 = 2\pi c/\lambda_1$, $\lambda_2 = 56.5$ мкм, $\omega_2 = 2\pi c/\lambda_2$ и $c = 3\times10^{14}$ мкм/с [10]. Полоса прозрачности кристалла GaAs составляет 0.97–17 мкм, а кристалла ZnTe – 0.55–30 мкм [9,10]. В соответствии с (6), линейный отклик среды может быть записан в виде

$$P_{y\mathrm{L},z\mathrm{L}}(\omega)=\varepsilon_0\left(b_0+\sum_{i=1}^{3}\frac{b_i(2\pi c)^2}{\omega_i^2-\omega^2}\right)E_{y,z}(\omega)=\varepsilon_0 b_0 E_{y,z}(\omega)+\sum_{i=1}^{3}P_{iy\mathrm{L},iz\mathrm{L}}(\omega) \tag{7а}$$

при $m(l_g+l_z)<x<m(l_g+l_z)+l_g$ и в виде

$$P_{y\mathrm{L},z\mathrm{L}}(\omega)=\varepsilon_0\left(a_0+\sum_{i=1}^{2}\frac{a_i(2\pi c)^2}{\omega_i^2-\omega^2}\right)E_{y,z}(\omega)=\varepsilon_0 a_0 E_{y,z}(\omega)+\sum_{i=1}^{2}P_{iy\mathrm{L},iz\mathrm{L}}(\omega) \tag{7б}$$

при $m(l_g+l_z)+l_g<x<m(l_g+l_z)+l_g+l_z$.

Система уравнений (7) во временной области может быть представлена в виде системы обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\frac{1}{\omega_i^2}\frac{\partial^2 P_{iy\mathrm{L},iz\mathrm{L}}}{\partial t^2}+P_{iy\mathrm{L},iz\mathrm{L}}=\varepsilon_0\frac{b_i(2\pi c)^2}{\omega_i^2}E_{y,z}(t) \tag{8а}$$

при $m(l_g+l_z)<x<m(l_g+l_z)+l_g$, где $i = 1, 2, 3$, и в виде

$$\frac{1}{\omega_i^2}\frac{\partial^2 P_{iy\mathrm{L},iz\mathrm{L}}}{\partial t^2}+P_{iy\mathrm{L},iz\mathrm{L}}=\varepsilon_0\frac{a_i\left(2\pi c\right)^2}{\omega_i^2}E_{y,z}\left(t\right) \tag{8б}$$

при $m\left(l_g+l_z\right)+l_g<x<m\left(l_g+l_z\right)+l_g+l_z$, где i = 1, 2.

Уравнения (8а) и (8б) описывают линейную дисперсию GaAs и ZnTe в полосе прозрачности в соответствии с классической моделью Лоренца. Нелинейная поляризация периодической структуры GaAs/ZnTe в полосе прозрачности рассматривается в квазистатическом приближении

$$\begin{aligned} &P_{z\mathrm{NL}}\left(t\right)=\varepsilon_0 d_{14}E_y^2\left(t\right),\\ &P_{y\mathrm{NL}}\left(t\right)=\sqrt{2}\varepsilon_0 d_{14}E_y\left(t\right)E_z\left(t\right), \end{aligned} \tag{9}$$

где при $m\left(l_g+l_z\right)<x<m\left(l_g+l_z\right)+l_g$, d_{14} = d_{14}(GaAs) = 186.4 пм/В, а при $m\left(l_g+l_z\right)+l_g<x<m\left(l_g+l_z\right)+l_g+l_z$ d_{14} = d_{14}(ZnTe) = 92.15 пм/В [6].

Коэффициент тензора d_{14} определяется через соответствующую компоненту тензора нелинейной восприимчивости $\chi^{(2)}$ как $d_{14}=\chi^{(2)}{}_{XYZ}/2$, где X, Y и Z – кристаллографические оси кристалла. В выбранной нами лабораторной координатной системе ось z совпадает с осью Z, а ось X составляет угол 45° с осью y. Выражение (9) соответствует мгновенному нелинейному отклику структуры. С учетом (8) и (9) компоненты вектора электрической индукции D_z и D_y могут быть записаны при $m\left(l_g+l_z\right)<x<m\left(l_g+l_z\right)+l_g$ в виде

$$D_z=\varepsilon_0 E_z+\varepsilon_0 b_0 E_z+\sum_{i=1}^{3}P_{iz\mathrm{L}}+\varepsilon_0 d_{14}E_y^2, \tag{10а}$$

$$D_y=\varepsilon_0 E_y+\varepsilon_0 b_0 E_y+\sum_{i=1}^{3}P_{iy\mathrm{L}}+\sqrt{2}\varepsilon_0 d_{14}E_z E_y, \tag{10б}$$

и при $m\left(l_g+l_z\right)+l_g<x<m\left(l_g+l_z\right)+l_g+l_z$ в виде

$$D_z=\varepsilon_0 E_z+\varepsilon_0 a_0 E_z+\sum_{i=1}^{2}P_{iz\mathrm{L}}+\varepsilon_0 d_{14}E_y^2, \tag{11а}$$

$$D_y=\varepsilon_0 E_y+\varepsilon_0 a_0 E_y+\sum_{i=1}^{2}P_{iy\mathrm{L}}+\sqrt{2}\varepsilon_0 d_{14}E_z E_y. \tag{11б}$$

Согласно (10) и (11), величины нелинейной добавки к показателям преломления для z- и y-поляризованных импульсов, обусловленных нелинейной поляризацией среды, можно оценить как

$$\delta n_z\left(E_y,E_z\right)=\frac{d_{14}E_y^2}{2n_0 E_z}, \tag{12}$$

$$\delta n_y\left(E_z\right)=\frac{\sqrt{2}d_{14}E_z}{2n_0}, \tag{13}$$

где n_0 соответствует $n_{\mathrm{GaAs}}(\omega_0) = 3.2741$ и $n_{\mathrm{ZnTe}}((\omega_0) = 2.6839$ для GaAs и ZnTe слоев, соответственно. Как видно из (12) и (13), нелинейная добавка к показателю преломления для z-поляризованного излучения зависит как от E_z, так и от E_y, а для y-поляризованного излучения зависит только от E_z, В соответствии с [6], для эффективной генерации второй гармоники (ГВГ) условие фазового синхронизма в случае бесконечного одномерного ФК, состоящего из составляющих структуру материалов без дисперсии, может быть записано в виде

$$\cos^2\left(\frac{\omega_0 n_g(\omega_0) l_g}{c}\right) + \cos^2\left(\frac{\omega_0 n_z(\omega_0) l_z}{c}\right) - \cos^2\left(\frac{\omega_0 n_g(\omega_0) l_g}{c}\right)\cos^2\left(\frac{\omega_0 n_z(\omega_0) l_z}{c}\right) = 1, \tag{14}$$

которое выполняется только тогда, когда один из квадратов косинусов равен единице. Например, $\cos^2\left(\omega_0 n_g(\omega_0) l_g / c\right) = 1$, в этом случае толщина GaAs слоя равна $l_g = \lambda_0 m / 2n_g$, где m – целое число и $\omega_0 = 2\pi c/\lambda_0$. Как показано в [6], в ФК, в котором одна из подсистем представляет собой набор полуволновых пластин без нелинейности с пренебрежимо малой дисперсией, а вторая – квадратично-нелинейная среда с зависящим от частоты показателем преломления, возможно одновременно удовлетворить условиям фазового и группового синхронизма только при определенных значениях коэффициентов преломления слоев. С физической точки зрения фазовый и групповой синхронизмы для процесса ГВГ в ФК, в котором нелинейный материал характеризуется дисперсией показателя преломления, достигаются за счет компенсации дисперсии материала дисперсией периодической структуры. С учетом относительно слабо выраженной дисперсии кристаллов GaAs и ZnTe в диапазоне длин волн 4.5–10.5 мкм, для рассматриваемого ФК толщина слоев в соответствии [6] выбиралась из условий $l_g = \lambda_0/2n_g =$ 1.527 мкм и $l_z = \lambda_0/4n_z =$ 0.931 мкм, при выполнении которых достигается максимальная эффективность ГВГ в отсутствие частотной дисперсии.

На рис.2 приведены основные дисперсионные характеристики рассматриваемой нами структуры с периодом, равным 100. На рис.2a показана зависимость реальной части выражения

$$\cos\left(K(\omega)d\right) = \cos\left(\frac{\omega n_g(\omega) l_g}{c}\right)\cos\left(\frac{\omega n_z(\omega) l_z}{c}\right) - \frac{1}{2}\left(\frac{n_g(\omega)}{n_z(\omega)} + \frac{n_z(\omega)}{n_g(\omega)}\right)\sin\left(\frac{\omega n_g(\omega) l_g}{c}\right)\sin\left(\frac{\omega n_z(\omega) l_z}{c}\right)$$

от частоты ω (где $d = l_g + l_z$). На рис.2b показана зависимость реальной части $K(\omega)$ от частоты, на рис.2c – зависимость отношения реальной части фазовой скорости

$v_p(\omega) = \left(K(\omega)/\omega\right)^{-1}$ к скорости света c в вакууме, на рис.2d – зависимость отношения реальной части групповой скорости $v_g(\omega) = \left(dK(\omega)/d\omega\right)^{-1}$ к скорости света в вакууме. Согласно результатам расчетов, полученных методом матрицы переноса (МП) [11], и как видно из рис.2, запрещенным зонам рассматриваемого ФК соответствуют диапазоны частот (длин волн): 19.13–21.23 ТГц (14.13–15.54 мкм); 38.80–40.97 ТГц (7.322–7.732 мкм); 78.22–80.39 ТГц (3.732–3.835 мкм); 97.87–100.10 ТГц (2.997–3.065 мкм); 136.80–138.90 ТГц (2.159–2.193 мкм). В спектральных диапазонах, соответствующих запрещенным зонам, групповая скорость равна нулю. В спектральных диапазонах, в которых групповая скорость отрицательна, т. е. эффективный коэффициент преломления v_g/c меньше нуля, импульс излучения выходит из среды раньше, чем он полностью в нее войдет [12]. Данное явление, которое противоречит нашим обычным представлениям, было впервые зарегистрировано в линейно-поглощающей среде [13].

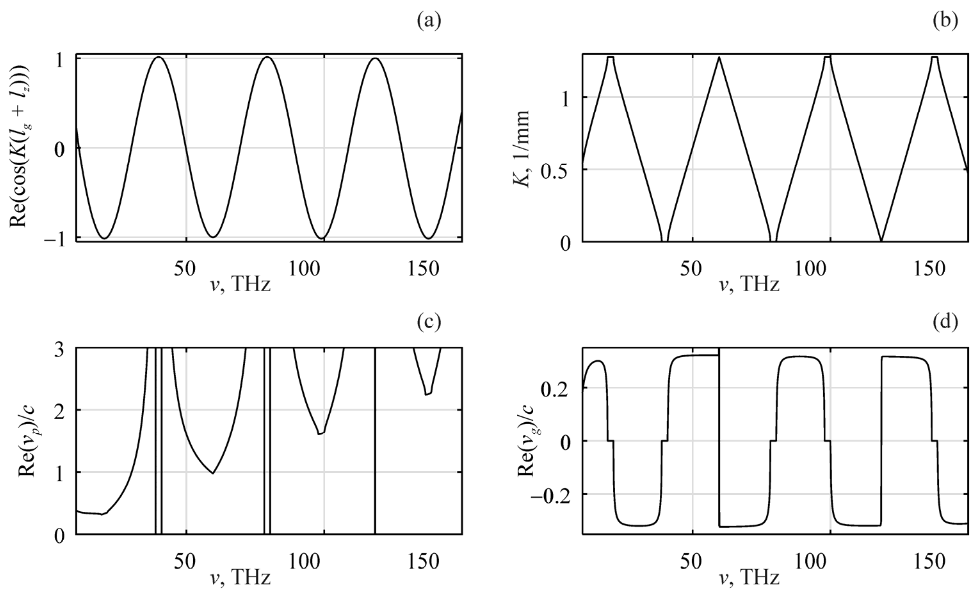

Рис.2. Дисперсионные характеристики периодической структуры GaAs/ZnTe с периодом, равным 100.

Из расчетов получено, что $2K(\omega_0) = K(2\omega_0)$ и $\partial K(\omega)/\partial\omega\big|_{\omega=\omega_0} = \partial K(\omega)/\partial\omega\big|_{\omega=2\omega_0}$ ($\omega_0 = 2\pi c/\lambda_0$, $\lambda_0 = 10$ мкм), следовательно, для рассматриваемой структуры одновременно выполняются условия фазового и группового синхронизма для ГВГ. В соответствии с (12) и (13), нелинейная добавка к показателю преломления для z-поляризованного излучения при амплитуде электрического поля $E_{z0} = E_{y0} = E_0 = 70.71$ МВ/м, составляет 2.021×10^{-3} и 1.218×10^{-3} для GaAs и ZnTe слоев, соответственно. А для y-поляризованного излучения 2.858×10^{-3} и 1.810×10^{-3} для GaAs и ZnTe слоев, соответственно. Согласно расчетам, при указанных величинах нелинейных добавок к показателю преломления смещениями дисперсионных кривых вдоль частотной оси (рис.2) можно пренебречь.

В процессе распространения импульса излучения ВГ в ФК происходит нелинейное взаимодействие импульса излучения ВГ с начальным субпикосекундным лазерным ИК импульсом, что приводит к генерации ИСЧ на длине волны $\lambda_{\text{ИСЧ}} = \lambda_0 \times (\lambda_0/2) \big/ 3\lambda_0/2 = \lambda_0/3$. В поле субпикосекундного лазерного ИК импульса будет иметь место также генерация ИРЧ на длине волны $\lambda_{\text{ИРЧ}} = \lambda_{\text{К}}\lambda_{\text{Д}} \big/ (\lambda_{\text{Д}} - \lambda_{\text{К}})$, где $\lambda_{\text{К}}$ и $\lambda_{\text{Д}}$ – коротковолновые и длинноволновые спектральные компоненты в пределах ширины спектра ИК импульса. Согласно результатам расчетов и как видно из рис.2, для рассматриваемого GaAs/ZnTe ФК с периодом $d = l_g + l_z = 2.458$ мкм и количеством периодов 100 для ИРЧ с длиной волны больше 30 мкм не существует запрещенных зон, т. е. ФК ведет себя как однородная среда со средним показателем преломления.

В настоящей работе для исследования влияния разности фаз взаимно-ортогональных линейно-поляризованных ИК субпикосекундных лазерных импульсов, распространяющихся в периодической структуре GaAs/ZnTe, на эффективность генерации ИСЧ и ИРЧ реализован алгоритм FDTD (метод конечных разностей во временной области), позволяющий провести численное интегрирование системы уравнений (1), (2) и (11). Начальные условия для численного решения системы нелинейных уравнений Максвелла выбираются в виде

$$\begin{aligned} E_y(t, x=0) &= E_0 \exp\left(-\frac{t^2}{\tau_0{}^2}\right) \cos\left(\frac{2\pi c}{\lambda_0} t + \delta\varphi\right), \\ E_z(t, x=0) &= E_0 \exp\left(-\frac{t^2}{\tau_0{}^2}\right) \cos\left(\frac{2\pi c}{\lambda_0} t\right), \end{aligned} \tag{15}$$

где E_0 – амплитуда ИК импульса, $2\tau_0 = 10T_0 = 10\lambda_0/c = 333$ фс – длительность ИК импульса, $\lambda_0 = 10$ мкм – центральная длина волны, $\delta\phi$ – разность фаз между взаимно-ортогональными линейно-поляризованными импульсами и амплитуда импульса $E_0 = 70.71$ МВ/м. Использование такого широкополосного импульса накачки с шириной полосы $\Delta\nu \approx 0.441/\tau_0 = 1.323$ ТГц на несущей частоте $\nu_0 = c/\lambda_0 = 30$ ТГц может привести к увеличению эффективности генерации ИРЧ, что определяется количеством длинноволновых и коротковолновых спектральных компонент, удовлетворяющих условиям законов сохранения энергии и импульса. Линейный фазовый набег z- и y-поляризованных импульсов в рассматриваемой структуре одинаковый, поскольку GaAs и ZnTe являются изотропными кристаллами. Согласно (12) и (13), при равных амплитудах электрического поля взаимно-ортогональных поляризованных ИК импульсов нелинейный набег для y-

поляризованного импульса в $\sqrt{2}$ раза больше, чем для z-поляризованного импульса.

В ходе численного интегрирования для определения зависимостей спектральных распределений взаимно-ортогональных поляризованных импульсов ИСЧ и ИРЧ на выходе из кристалла от разности фаз $\delta\phi$ между взаимодействующими ИК импульсами на входе кристалла проводилась спектральная фильтрация электрических полей z- и y-поляризованных импульсов на выходе с помощью фильтров высоких и низких частот с коэффициентами пропускания

$$H_{\text{high}}\left(f\right)=\frac{1}{1+\left(f_{\text{high}}/f\right)^{4}}, \tag{16}$$

$$H_{\text{low}}\left(f\right)=\frac{1}{1+\left(f/f_{\text{low}}\right)^{4}}, \tag{17}$$

где f_{high} = 42.86 ТГц – частота среза фильтра высоких частот, соответствующая длине волны $\lambda_{\text{high}} = c/f_{\text{high}}$ = 7 мкм, f_{low} = 15 ТГц – частота среза фильтра низких частот, соответствующая длине волны $\lambda_{\text{low}} = c/f_{\text{low}}$ = 20 мкм. Согласно (9), только спектр y-поляризованной нелинейной поляризации является функцией от разности фаз $\delta\phi$ взаимодействующих ИК импульсов. При равных амплитудах z- и y-поляризованных взаимодействующих импульсов спектр y-поляризованной нелинейной поляризации среды при $\delta\phi = 0$ определяется как

$$\tilde{P}_{y\text{NL}}\left(\omega\right)\propto\tilde{F}\left(\omega\right)+\tilde{F}\left(\omega-2\omega_{0}\right), \tag{18}$$

а при $\delta\phi = \pi/2$

$$\tilde{P}_{y\text{NL}}\left(\omega\right)\propto\tilde{F}\left(\omega-2\omega_{0}\right), \tag{19}$$

где $\tilde{F}\left(\omega\right)=\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-2t^{2}/\tau_{0}^{2}\right)\exp\left(-j\omega t\right)d\omega$ – Фурье-образ огибающей начального ИК импульса. Согласно формулам (18) и (19), при $\delta\phi = 0$ после процесса спектральной фильтрации спектр y-поляризованной нелинейной поляризации будет сосредоточен как в окрестности низких частот (ИРЧ), так и в окрестности высоких частот (ИСЧ). При $\delta\phi = \pi/2$ максимум спектра y-поляризованной нелинейной поляризации сосредоточен в окрестности высоких частот, т. е. энергия ИСЧ максимальна. Очевидно, что в общем случае произвольного значения разности фаз $\delta\phi$ распределение энергии как ИСЧ, так и ИРЧ является функцией от $\delta\phi$, а нелинейная поляризация среды для y-поляризованного излучения может быть представлена в виде

$$P_{y\text{NL}}\left(m,\delta\varphi\right)\propto E_{0}^{2}\exp\left(-2\frac{t^{2}}{\tau_{0}^{2}}\right)\left(\cos\left(\delta\varphi\right)+\cos\left(2\omega_{0}t+\delta\varphi\right)\right). \tag{20}$$

Из формулы (20) следует, что при $\delta\phi = \pi/2$ интенсивность y-поляризованного излучения ВГ минимальна, это означает, что минимальна будет также интенсивность третьей гармоники (ИСЧ) на длине волны 3.3 мкм. Следовательно, изменению разности фаз между двумя взаимно-ортогональными поляризованными ИК импульсами будет соответствовать изменение эффективности генерации y-поляризованного ИСЧ и ИРЧ. При этом диапазон длин волн, в котором происходит эффективная селективная генерация ИСЧ, определяется возможностью реализации условий одновременного фазового и группового синхронизма для ГВГ, а диапазон длин волн, в котором происходит эффективная генерация ИРЧ, определяется шириной спектра ИК импульса.

3. Результаты численных расчетов и обсуждение

Ниже приведены результаты численных расчетов спектров y-поляризованных ИСЧ и ИРЧ, возникающих на выходе из нелинейного кристалла. Толщина GaAs и ZnTe слоев одномерного ФК выбиралась равной $\lambda_0/2n_{\mathrm{GaAs}}$ = 1.527 мкм и $\lambda_0/4n_{\mathrm{ZnTe}}$ = 0.931 мкм и период $d = l_g + l_z$ = 2.458 мкм, что обеспечило ГВГ на длине волны 5 мкм в условиях одновременной фазовой и групповой синхронизации. Дальнейшее смешение несущей частоты ИК импульса с частотой излучения ВГ приводит к генерации ИСЧ на длине волны 3.33 мкм. Количество периодов рассматриваемого ФК выбиралось равным 100, а длина структуры составляла 100 × 2.458 мкм = 245.8 мкм. С целью обеспечения условий приближения плоской волны длина кристалла должна быть меньше, чем $\pi\sigma^2/2\lambda_0$, где σ – диаметр пучка накачки. Так при σ = 300 мкм параметр $\pi\sigma^2/2\lambda_0$ = 14.13 мм, что в 57 раз превосходит выбранную длину кристалла, и, следовательно, применимо приближение плоской волны. Характерная нелинейная длина, на которой сдвиг фазы из-за нелинейного взаимодействия достигает $\pi/2$, для z-поляризованного излучения $L_n = \lambda_0 n_0 / 2d_{14}E_0$ в GaAs составляла 2.484 мм, а в ZnTe – 2.036 мм, а характерная нелинейная длина для y-поляризованного излучения $L_n = \lambda_0 n_0 / 2d_{14}E_0$ в GaAs составляла 1.762 мм и в ZnTe – 1.454 мм. Длина дисперсии второго порядка $L_d = \tau_0^2 / 2|\beta_2|$ при $\left(\beta_2 = \partial^2 k(\omega) / \partial\omega^2 \big|_{\omega_0}\right)$ равнялась 54.1 мм и 96.1 мм для GaAs и ZnTe, соответственно. Таким образом, выбранная толщина кристалла существенно меньше, чем дисперсионная длина.

Устойчивость и дисперсионные свойства используемой численной схемы FDTD достаточно подробно исследованы нами [14]. Шаг пространственной ячейки Δx выбирается равным $\lambda_0/400$ = 25 нм (λ_0 = 10 мкм), а шаг по времени Δt определяется условием Куранта $\Delta t = \Delta x/2c$ = 0.0416 фс. На рис.3 показана зависимость спектральной плотности прошедшего через ФК y-поляризованного субпикосекундного ИК импульса от длины волны в спектральном диапазоне от

1 до 200 мкм при δϕ = 0 (рис.3a), в спектральном диапазоне от 2 до 8 мкм, полученном в результате фильтрации фильтром высоких частот, (рис.3b) и в спектральном диапазоне от 40 до 200 мкм, полученном в результате использования фильтра низких частот, (рис.3c). Здесь представлена также зависимость спектральной плотности отраженного от ФК *y*-поляризованного субпикосекундного ИК импульса от длины волны в спектральном диапазоне от 2 до 8 мкм (рис.3d) и от 40 до 200 мкм (рис.3e) при δϕ = 0. В соответствии с результатами расчетов, спектральная плотность прошедшего через ФК *y*-поляризованного импульса излучения ВГ на длине волны 5 мкм составляет –33.25 дБ, а импульса ИСЧ на длине волны 3.3 мкм составляет –60.34 дБ. Согласно результатам расчетов, спектральная плотность отраженного от ФК *y*-поляризованного импульса излучения ВГ на длине волны 5 мкм составляет –33.74 дБ, а импульса ИСЧ на длине волны

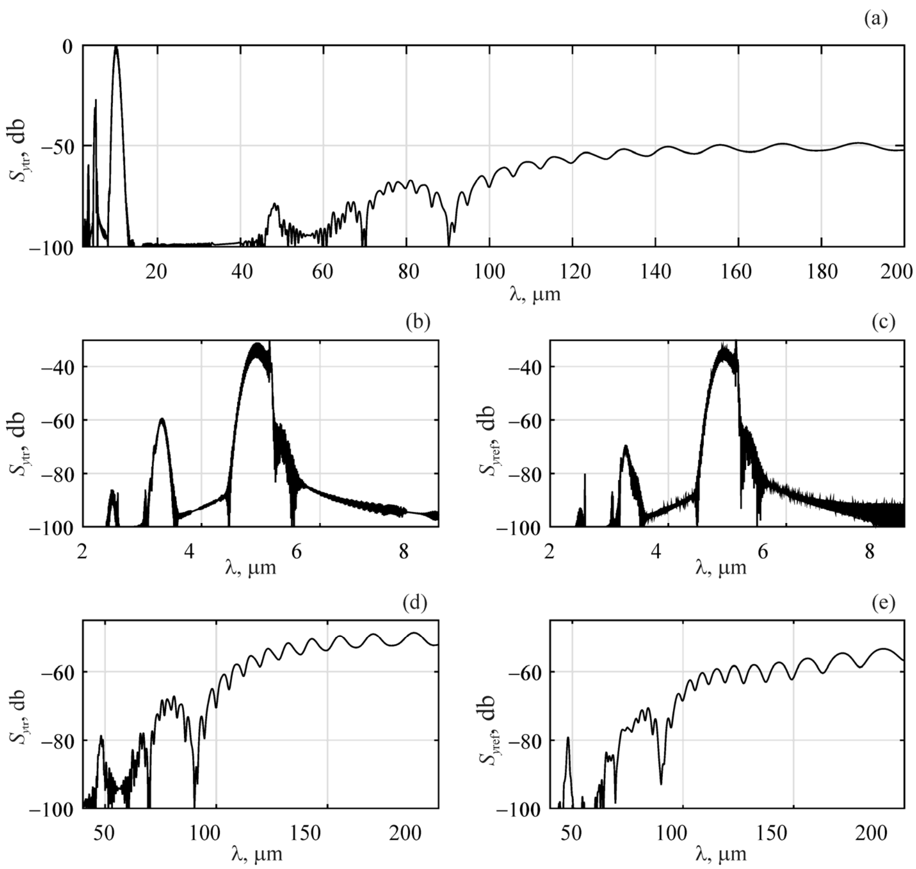

Рис.3. Зависимость спектральной плотности прошедшего через ФК *y*-поляризованного субпикосекундного ИК импульса от длины волны в спектральном диапазоне (a) от 1 до 200 мкм при δϕ = 0, (b) от 2 до 8 мкм и (c) от 40 до 200 мкм. Зависимость спектральной плотности отраженного от ФК *y*-поляризованного субпикосекундного ИК импульса от длины волны в спектральном диапазоне (d) от 2 до 8 мкм при δϕ = 0 и (e) от 40 до 200 мкм.

3.3 мкм – (–69.91 дБ).

На рис.4 приведены нормированные на максимум зависимости спектральных плотностей прошедшего через ФК и отраженного от ФК y-поляризованного импульса ИСЧ от разности фаз $\delta\phi$ в диапазоне длин волн от 2 до 4 мкм. Согласно вышеизложенному и как видно из рис.4, значение $\delta\phi = 90^o$ соответствует минимуму спектральной плотности как отраженного, так и прошедшего y-поляризованного импульса ИСЧ в диапазоне длин волн от 2 до 4 мкм. При увеличении $\delta\phi$ от 0 до 90^o спектральная плотность прошедшего излучения уменьшается от –61.8 до –76.4 дБ, а спектральная плотность отраженного излучения уменьшается от –75.7 до –87.8 дБ.

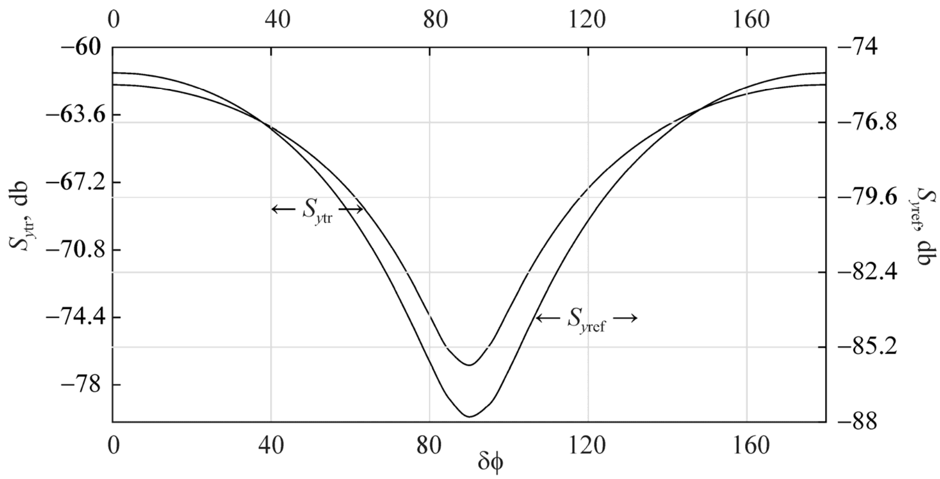

Рис.4. Нормированные на максимум зависимости спектральных плотностей прошедшего через ФК и отраженного от ФК y-поляризованного импульса ИСЧ от разности фаз $\delta\phi$ в диапазоне длин волн от 2 до 4 мкм.

На рис.5 приведены нормированные на максимум зависимости спектральных плотностей прошедшего через ФК и отраженного от ФК y-поляризованного импульса ИРЧ от разности фаз $\delta\phi$ в диапазоне длин волн от 40 до 200 мкм. Значение $\delta\phi = 90^o$ соответствует минимуму спектральной плотности как отраженного, так и прошедшего y-поляризованного импульса ИРЧ в диапазоне длин волн от 40 до 200 мкм. При увеличении $\delta\phi$ от 0 до 90^o спектральная плотность прошедшего излучения уменьшается от –57 до –91 дБ, а спектральная плотность отраженного излучения уменьшается от –60 дБ до –100 дБ.

Согласно формуле (20), в приближении бездисперсного распространения волн интенсивность ИРЧ определяется через интенсивность импульса накачки (основной гармоники) и разность фаз как

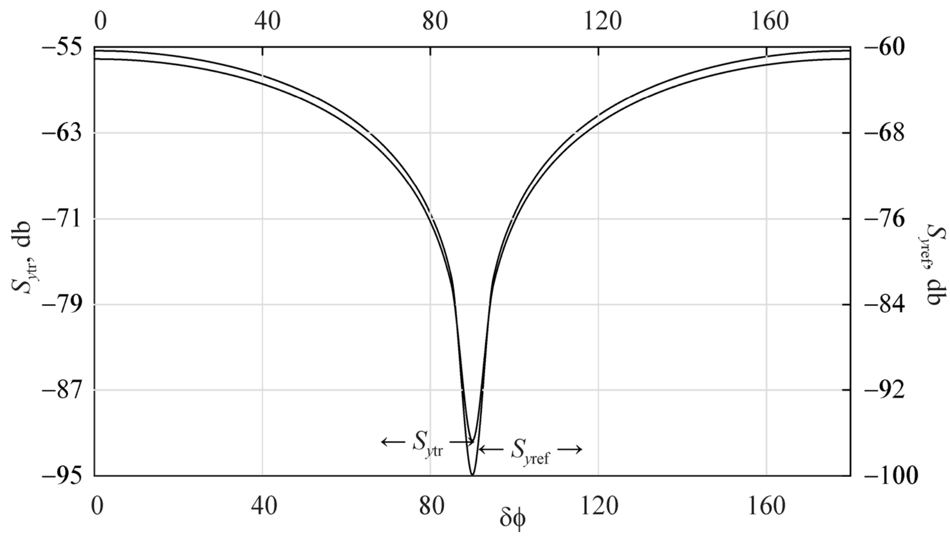

Рис.5. Нормированные на максимум зависимости спектральных плотностей прошедшего через ФК и отраженного от ФК *y*-поляризованного импульса ИРЧ от разности фаз δϕ в диапазоне длин волн от 40 до 200 мкм.

$$I_{\text{ИРЧ}} \propto I_{\omega_0}^2 \cos^2(\delta\phi), \tag{21}$$

а коэффициент пропорциональности между отношением интенсивности ИРЧ к интенсивности основной гармоники и разностью фаз, согласно (21), как

$$\left|\frac{d\left(I_{\text{ИРЧ}}/I_{\omega_0}\right)}{d(\delta\phi)}\right| = I_{\omega_0}\sin(2\delta\varphi). \tag{22}$$

Из формулы (22) следует, что коэффициент пропорциональности определяется интенсивностью основной гармоники, а максимальное значение коэффициент пропорциональности принимает при разности фаз $\delta\varphi = \pi/4$. В общем случае в выражении (22) следует учитывать изменение временных профилей и спектров импульсов накачки, обусловленных нелинейным взаимодействием с дисперсным ФК GaAs/ZnTe.

Таким образом, при генерации ИСЧ и ИРЧ в поле двух сонаправленных взаимно-ортогональных линейно-поляризованных субпикосекундных ИК лазерных импульсов, распространяющихся в ФК GaAs/ZnTe, эффективность генерации ИСЧ в диапазоне длин волн от 2 до 4 мкм и ИРЧ в диапазоне длин волн от 40 до 200 мкм при изменении разности фаз от 0 до 90° пропорциональна разности фаз между субпикосекундными импульсами.

4. Заключение

Показано, что в поле субпикосекундного лазерного ИК импульса на центральной длине волны 10 мкм, с длительностью 333 фс и амплитудой электрического поля 70.71 МВ/м, распространяющегося в ФК GaAs/ZnTe с толщинами слоев $l_g = \lambda_0/2n_g$ = 1.527 мкм и $l_z = \lambda_0/4n_z$ = 0.931 мкм и количеством периодов 100 происходит ГВГ ИК импульса на длине волны 5 мкм при условиях выполнения одновременного фазового и группового синхронизма. Смешение частоты излучения ВГ с несущей частотой ИК импульса приводит к генерации третьей гармоники ИК импульса. А смешение высокочастотных и низкочастотных спектральных компонент в пределах ширины спектра ИК импульса приводит к генерации ИРЧ, для которых рассматриваемый ФК ведет себя как однородная среда со средним показателем преломления. Показано, что изменению разности фаз между двумя взаимно-ортогональными линейно-поляризованными ИК импульсами от 0 до 90° будет соответствовать изменение эффективности генерации *y*-поляризованного ИСЧ и ИРЧ. При этом диапазон длин волн, в котором происходит эффективная селективная генерация ИСЧ, определяется возможностью реализации условий одновременного фазового и группового синхронизма для ГВГ, а диапазон длин волн, в котором происходит эффективная генерация ИРЧ определяется шириной спектра ИК импульса. Полученные зависимости между разностью фаз и эффективностью селективной генерации ИСЧ и ИРЧ могут быть использованы для создания импульсных ИК лазеров со стабилизацией фазы несущей частоты относительно огибающей. Полученные результаты могут быть также использованы при разработке нелинейно-оптического фазового коррелятора для определения фазы субпикосекундного лазерного импульса в среднем ИК диапазоне длин волн.

ЛИТЕРАТУРА

1. **V. Petrov, F. Rotermund, F. Noack**. J. Opt. Pure Appl. **3**, R1 (2001).
2. **R.A. Kaindl**, **M. Wurm**, **K. Reimann**, **P. Hamm**, **A.M. Weiner**, **M. Woerner.** J. Opt. Soc. Am. B, **17**, 2086 (2000).
3. **F. Rotermund, V. Petrov, F. Noack**. Opt. Commun, **185**, 177 (2000).
4. **А.А. Ахумян, Г.Д. Оганесян.** Известия НАН Армении, Физика, **50**, 476 (2015).
5. **А.А. Ахумян, Р.М. Мартиросян, Д.Л. Оганесян, Г.Д. Оганесян.** Физические основы приборостроения, **5**, 20 (2016).
6. **А.В. Тарасишин, А.М. Желтиков, С.А. Магницкий.** Письма в ЖЭТФ, **70**, 800 (1999).
7. **Б.И. Манцызов.** Когерентная и нелинейная оптика фотонных кристаллов. Москва, Физматлит, 2009.
8. **T. Skauli, P.S. Kuo** , **K.L. Vodopyanov**, **T.J. Pinguet**, **O. Levi**, **L.A. Eyres**, **J.S. Harris**, **M.M. Fejer**, **E.L. Ginzton**, **B. Gerard**, **L. Becouarn**, **E. Lallier.** J. Appl. Phys., **94**, 6447 (2003).
9. **H.H. Li.** J. Phys. Chem. Ref. Data, **13**, 103 (1984).

10. **A. Sadao.** Properties of Group-IV, III–V and II–VI Semiconductors. John Wiley & Sons, 2005.
11. **А. Ярив, П. Юх.** Оптические волны в кристаллах. Москва, Мир, 1987.
12. **L.J. Wang, A. Kuzmich, A. Dogariu.** Nature, **406**, 277 (2000).
13. **C. Chu, S. Wong.** Phys. Rev. Lett., **48**, 738 (1982).
14. **D.L. Hovhannisyan, A.A. Hakhoumian, R.M. Martirosyan, A.S. Nikoghosyan, E.M. Laziev, G.D. Hovhannisyan.** Modern Optics, **57**, 1075 (2010).

GaAs/ZnTe ՊԱՐԲԵՐԱԿԱՆ ԿԱՌՈՒՑՎԱԾՔՈՎ ՄԻՋԱՎԱՅՐՈՒՄ ՏԱՐԱԾՎՈՂ ՍՈՒԲՊԻԿՈՎԱՅՐԿՅԱՆԱՅԻՆ ԻՆՖՐԱԿԱՐՄԻՐ ԼԱԶԵՐԱՅԻՆ ԻՄՊՈՒԼՍՆԵՐԻ ՓՈՒԼԵՐԻ ՏԱՐԲԵՐՈՒԹՅԱՆ ԱԶԴԵՑՈՒԹՅՈՒՆԸ ԳՈՒՄԱՐԱՅԻՆ ԵՎ ՏԱՐԲԵՐԱՅԻՆ ՀԱՃԱԽԱՅԻՆ ԲԱՂԱԴՐԻՉՆԵՐԻ ԳԵՆԵՐԱՑՄԱՆ ԱՐԴՅՈՒՆԱՎԵՏՈՒԹՅԱՆ ՎՐԱ

Դ.Լ. ՀՈՎՀԱՆՆԻՍՅԱՆ, Ա.Հ. ՎԱՐԴԱՆՅԱՆ, Գ.Դ. ՀՈՎՀԱՆՆԻՍՅԱՆ

Ներկայացված են փոխուղղահայաց գծային բևեռացմամբ, ենթապիկովայրկյանային ինֆրակարմիր լազերային իմպուլսների և միաչափ GaAs/ZnTe պարբերական միջավայրերի ոչ գծային փոխազդեցությունը նկարագրող տեսական հետազոտության և թվային մոդելավորման արդյունքները: Ցույց է տրված, որ գումարային և տարբերային հաճախային բաղադրիչների գեներացման արդյունավետությունը համեմատական է միմյանց հետ փոխազդող մղման ինֆրակարմիր իմպուլսների փուլերի տարբերությանը: Մասնավորապես, դիտարկված է 70.71 ՄՎ/մ էլեկտրական դաշտի լարվածությամբ, 333 ֆվ տևողությամբ և 10 մկմ կենտրոնական ալիքի երկարությամբ փոխուղղահայաց գծային բևեռացմամբ ենթապիկովայրկյանային ինֆրակարմիր լազերային իմպուլսների փոխազդեցությունը GaAs / ZnTe պարբերական միջավայրերում: GaAs և ZnTe միջավայրերի հաստությունները համապատասխանաբար $\lambda_0/2n_{\mathrm{GaAs}}$ = 1.527 մկմ և $\lambda_0/4n_{\mathrm{ZnTe}}$ = 0.931 մկմ են, իսկ պարբերություն-ների քանակը հավասար է 100-ի: Ստացված արդյունքները կարող են կիրառվել միջին ինֆրակարմիր տիրույթի լազերային իմպուլսների փուլերի տարբերությունը դետեկտող ոչ գծային օպտիկական փուլային կոռելյատորի մշակման համար:

THE EFFECT OF PHASE DIFFERENCE OF SUBPICOSECOND IR LASER PULSES PROPAGATING IN A GaAs/ZnTe PERIODIC STRUCTURE ON THE EFFICIENCY OF GENERATION OF THE SUM AND DIFFERENCE FREQUENCIES RADIATIONS

D.L. HOVHANNISYAN, A.H. VARDANYAN, G.D. HOVHANNISYAN

Results of the theoretical research and numerical simulation of nonlinear interaction process of mutually orthogonal and linearly polarized subpicosecond IR laser pulses with a one-dimensional periodic structure of GaAs/ZnTe are presented. In particular, considered the interaction of such pulses with the same amplitude of the electric field 70.71 MV/m, duration of 333 fs at a central wavelength λ_0 = 10 μm with a periodic structure of GaAs and the ZnTe with thickness of layers, equal $\lambda_0/2n_{\mathrm{GaAs}}$ = 1.527 μm and $\lambda_0/4n_{\mathrm{ZnTe}}$ = 0.931 μm, respectively, and with the number of periods equal to 100. It is shown that the efficiency of generation of sum and difference frequency radiation is proportional to the phase difference of the interacting IR pump pulses.

Известия НАН Армении, Физика, т.51, №4, с.452-463 (2016)

УДК 592.2

АМПЛИТУДЫ РАССЕЯНИЯ МИКРОЧАСТИЦЫ В КВАНТОВОЙ ПРОВОЛОКЕ С ТРЕХМЕРНЫМИ δ-ПОТЕНЦИАЛАМИ

Д.М. СЕДРАКЯН*, Д.А. БАДАЛЯН, А.Ю. АЛЕКСАНЯН

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

*e-mail: dsedrak@ysu.am

(Поступила в редакцию 25 апреля 2016 г.)

Рассмотрено прохождение микрочастицы (электрона) через δ-потенциальные барьеры, которые вложены в квантовую проволоку цилиндрической формы с характерным эффектом размерного квантования в поперечном направлении. Найдены аналитические выражения для амплитуд многоканального рассеяния, которые справедливы для барьеров, состоящих из одного δ-потенциала и двух δ-потенциалов, расположенных на некотором расстоянии друг от друга. Показано, что многоканальное рассеяние переходит в одноканальное, если первоначальная энергия продольного движения электрона недостаточна для возбуждения более высоких каналов рассеяния. В этом случае полученные формулы для амплитуд рассеяния совпадают с хорошо известными выражениями, полученными для одномерного рассеяния. Найденные нами решения удовлетворяют закону сохранения числа частиц, что является косвенным доказательством правильности полученных результатов.

1. Введение

В нанопроволоках (наностержнях, нанотрубках) с поперечными размерами, удовлетворяющими условию размерного квантования, движение вдоль аксиальной оси структуры является свободным, в то время как поперечное движение ограничено и его энергия может принимать лишь дискретные значения [1]. Исследование движения квантовой частицы в низкоразмерных структурах, содержащих изолированные дефекты (потенциальные барьеры или квантовые ямы), представляет значительный теоретический и практический интерес. Для решения такого типа задач в подавляющем большинстве случаев используется одномерное уравнение Шредингера с рассеивающим потенциалом, зависящим только от координаты, задающей направление рассеяния частицы. Между тем, потенциал рассеяния в общем случае должен зависеть от трех пространственных координат. Более точные результаты могут быть получены с привлечением квазиодномерных моделей [2–4], в которых, в соответствии с физической картиной, поперечное движение не исключается, а ограничивается внешними полями, в том числе – боковой поверхностью наноструктуры. В этих условиях при упругом рассеянии в продольном направлении частица может перейти на другой квантовый уровень в поперечном движении и, следовательно, может возникнуть новый канал рассеяния со своим значением волнового вектора. То есть, рассеяние в квазиодномерной системе, в отличие от одномерной, является многоканальным.

Для решения задач многоканального рассеяния в работе [5] был предложен метод, фактически обобщающий известный метод погружения [6,7]. Используя этот метод, в ряде работ [8–13] исследовано рассеяние квантовой частицы на двухмерных и трехмерных потенциалах, вложенных в квазиоднородную наноструктуру. В различных приближениях получены формулы для амплитуд прохождения и отражения, спектра энергии частицы, ландауэровского сопротивления и т. д.

Настоящая работа является продолжением этих исследований. В ней используется более простая методика, основанная на процедуре «сшивания» волновых функций и их производных в точках рассеяния. Рассматриваются две задачи, для которых получены точные решения. В первой из них исследуется нанотрубка с точечным дефектом, который моделируется трехмерным δ-потенциалом. Показано, что эта задача сводится к аналогичной задаче рассеяния на плоскости [14]. Во второй задаче рассматривается нанотрубка с двумя точечными дефектами. Интерес к этой задаче связан с тем, что в системах, содержащих более одного потенциального барьера, общий коэффициент прохождения из-за интерференционных эффектов может стать больше коэффициента прохождения через любой барьер этой системы.

2. Уравнение многоканального рассеяния для квантовой проволоки

Пусть частица движется в проволоке цилиндрической формы по направлению оси z, совпадающей с осью цилиндра. Потенциал рассеяния характеризуется функцией $U(\rho,\varphi,z)$ (ρ, φ, z – цилиндрические координаты). Движение в поперечной к оси плоскости (ρ,φ) ограничено непрозрачной стенкой в виде цилиндрической поверхности с радиусом кругового сечения a. Уравнение Шредингера частицы в цилиндрических координатах имеет вид

$$\left[\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\right)+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}+\chi^2-V(\rho,\varphi,z)\right]\Psi(\rho,\varphi,z)=0\,, \tag{1}$$

где $\chi^2=(2m/\hbar^2)E$, $V(\rho,\varphi,z)=(2m/\hbar^2)U(\rho,\varphi,z)$ и E – энергия частицы при рассеянии.

Уравнение (1) удовлетворяет граничному условию

$$\Psi(\rho,\varphi,z)=0\,,\ \text{если}\ \rho\geq a\,. \tag{2}$$

Решение уравнения (1), удовлетворяющее условию (2), можно записать в виде

$$\Psi(\rho,\varphi,z)=\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{l=0}^{\infty}\Psi_{nl}(z)\Phi_{nl}(\rho)\cos l\varphi\,, \tag{3}$$

где

$$\Phi_{nl}(\rho)=\frac{J_l(\chi_{nl}\rho)}{a\sqrt{\pi}J_{l+1}(\chi_{nl}a)}\,, \tag{4}$$

J_l – цилиндрическая функция Бесселя и величины χ_{nl} определяются из условия (2), которое принимает вид

$$J_l(\chi_{nl}a)=0\,. \tag{5}$$

Решения трансцендентного уравнения (5) хорошо известны: наименьшее значение χ_{nl}, соответствующее паре индексов $n=1$, $l=0$, определяется из равенства $\lambda_{10}=\chi_{10}a\approx 2.405$. Следующий уровень нумеруется индексами $n=1$, $l=1$, для которого $\lambda_{11}=\chi_{11}a\approx 3.832$ и т. д.

В формуле (3) функции $\Psi_{nl}(z)$ являются решениями системы линейных уравнений

$$\left\{\frac{d^2\Psi_{nl}(z)}{dz^2}+k_{nl}^2\Psi_{nl}(z)-\sum_{n'=1}^{\infty}\sum_{l'=0}^{\infty}V_{nl,n'l'}(z)\Psi_{n'l'}(z)=0\right.\,, \tag{6}$$

где

$$V_{nl,n'l'}(z)=\int_0^a\rho d\rho\Phi_{nl}(\rho)\Phi_{n'l'}(\rho)\int_0^{2\pi}d\varphi V(\rho,\varphi,z)\cos l\varphi\cos l'\varphi\,, \tag{7}$$

$$k_{nl}^2=\chi^2-\chi_{nl}^2\,. \tag{8}$$

3. Амплитуды многоканального рассеяния для δ-потенциалов

Найдем амплитуды рассеяния для частного вида потенциала $V(\rho,\varphi,z)$, представляющего собой трехмерную δ-функцию, помещенную в точке с радиус-вектором $\mathbf{r}_0=(\rho_0\cos\varphi_0,\rho_0\sin\varphi_0,0)$:

$$V(\rho,\varphi,z)=P\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)=P\delta(\rho\cos\varphi-\rho_0\cos\varphi_0)\delta(\rho\sin\varphi-\rho_0\sin\varphi_0)\delta(z)\,, \tag{9}$$

где P – мощность δ-потенциала. Подставляя (9) в (7), получим [12]

$$V_{nl,n'l'}(z)=c_{nl}c_{n'l'}\delta(z)\,, \tag{10}$$

где

$$c_{nl}=\frac{\sqrt{P}J_l(\chi_{nl}\rho_0)\cos l\varphi_0}{a\sqrt{\pi}J_{l+1}(\chi_{nl}a)}\,. \tag{11}$$

Подстановка (11) в (6) дает

$$\left\{\frac{d^2\Psi_{nl}(z)}{dz^2}+k_{nl}^2\Psi_{nl}(z)-\left(c_{nl}\sum_{n'l'}c_{n'l'}\Psi_{n'l'}(z)\right)\delta(z)=0\,. \qquad (12)\right.$$

Если рассматривать рассеяние частицы по N каналам, то в этом случае нужно определить амплитуды прохождения t_m и отражения r_m, где m меняется от единицы до N. Число N равняется числу поперечных уровней энергии частицы, по которым происходит рассеяние. Следовательно, каждый индекс m соответствует паре индексов (n,l), которые описывают энергетические состояния поперечного движения. Условимся эти состояния нумеровать согласно росту значений поперечной энергии. Такая нумерация одновременно обозначает номер канала рассеяния.

Учитывая сказанное выше, уравнение (12) можно переписать в виде

$$\left\{\frac{d^2\Psi_m(z)}{dz^2}+k_m^2\Psi_m(z)-\delta(z)\sum_{m'=1}^{N}a_{mm'}\Psi_{m'}(z)=0\,, \qquad (13)\right.$$

где введено обозначение

$$a_{mm'}=c_m c_{m'} \quad (c_m\equiv c_{nl})\,. \qquad (14)$$

Система уравнений (13) в точности совпадает с соответствующими уравнениями работы [14], где частица движется в плоскости xy, а в направлении y движение ограничено непроницаемыми стенками. Повторение расчетов по нахождению амплитуд рассеяния t_m и r_m приводит к следующим формулам:

$$t_1=1-i\frac{a_{11}}{2k_1}G\,,\quad t_{m\neq 1}=-i\frac{a_{1m}}{2k_m}G\,, \qquad (15)$$

$$r_1=-i\frac{a_{11}}{2k_1}G\,,\quad r_{m\neq 1}=t_{m\neq 1}\,, \qquad (16)$$

где

$$G=\frac{1}{1+i\sum\limits_{m'=1}^{N}\frac{a_{m'm'}}{2k_{m'}}}\,.$$

Используя формулы (15) и (16), можно показать, что

$$|t_1|^2+|r_1|^2+\sum_{m'=2}^{N}\frac{k_{m'}}{k_1}\left[|t_{m'}|^2+|r_{m'}|^2\right]=1\,. \qquad (17)$$

Уравнение (17) выражает закон сохранения числа частиц при многоканальном рассеянии.

Найдем теперь амплитуды рассеяния, при которых частица рассеивается на двухбарьерном потенциале

$$V(\rho,\varphi,z)=P\delta(\rho\cos\varphi-\rho_0\cos\varphi_0)\delta(\rho\sin\varphi-\rho_0\sin\varphi_0)[\delta(z)+\delta(z-l)]\,, \qquad (18)$$

где l – расстояние (по z) между δ-потенциалами. Подставляя (18) в (7) и далее в (6), получим

$$\left\{ \Psi''_m(z) + k_m^2 \Psi_m(z) - [\delta(z) + \delta(z-l)] \sum_{m'=1}^{N} a_{mm'} \Psi_{m'}(z) = 0 \right. . \qquad (19)$$

Здесь и далее предполагается, что индекс m принимает N значений.

Асимптотические решения системы уравнений (19) до и после преодоления потенциального барьера (18) являются решениями уравнений для свободной частицы. Следовательно, волновые функции $\Psi_m(z)$ можно представить в виде

$$\Psi_m(z) = \begin{cases} \delta_{m1} e^{ik_m z} + r_m e^{-ik_m z}, & z < 0 \\ c_m e^{ik_m z} + d_m e^{-ik_m z}, & 0 \le z \le l \\ t_m e^{ik_m (z-l)}, & z > l. \end{cases} \qquad (20)$$

Из формул (20) получим производные $\Psi'_m(z)$:

$$\Psi'_m(z) = \begin{cases} ik_m (\delta_{m1} e^{ik_m z} - r_m e^{-ik_m z}), & z < 0 \\ ik_m (c_m e^{ik_m z} - d_m e^{-ik_m z}), & 0 \le z \le l \\ ik_m t_m e^{ik_m (z-l)}, & z > l. \end{cases} \qquad (21)$$

Условия «сшивания» волновых функций (20) и их производных при прохождении частицы через сингулярные точки $z = 0$ и $z = l$ имеют вид

$$\begin{cases} \Psi_m(+0) = \Psi_m(-0) = \Psi_m(0) \\ \Psi_m(l+0) = \Psi_m(l-0) = \Psi_m(l) \\ \Psi'_m(+0) - \Psi'_m(-0) = \sum_{m'=1}^{N} a_{mm'} \Psi_{m'}(0) \\ \Psi'_m(l+0) - \Psi'_m(l-0) = \sum_{m'=1}^{N} a_{mm'} \Psi_{m'}(l). \end{cases} \qquad (22)$$

Используя формулы (20)–(22), получим

$$\begin{cases} \delta_{m1} + r_m = c_m + d_m \\ t_m = c_m e^{ik_m l} + d_m e^{-ik_m l} \\ ik_m (c_m - d_m - \delta_{m1} + r_m) = \sum_{m'=1}^{N} a_{mm'} (c_{m'} + d_{m'}) \\ ik_m (t_m - c_m e^{ik_m l} + d_m e^{-ik_m l}) = \sum_{m'=1}^{N} a_{mm'} (c_{m'} e^{ik_{m'} l} + d_{m'} e^{-ik_{m'} l}). \end{cases} \qquad (23)$$

Из (23) имеем

$$r_m = c_m + d_m - \delta_{m1}\,,\; t_m = c_m e^{ik_m l} + d_m e^{-ik_m l}\,. \tag{24}$$

Исключив из остальных уравнений r_m и t_m, получим

$$\begin{cases} 2ik_m(c_m - \delta_{m1}) = \sum\limits_{m'=1}^{N} a_{mm'}(c_{m'} + d_{m'}) \\ 2ik_m d_m e^{-ik_m l} = \sum\limits_{m'=1}^{N} a_{mm'}(c_{m'} e^{ik_{m'} l} + d_{m'} e^{-ik_{m'} l}). \end{cases} \tag{25}$$

Формулы (25) представляют собой $2N$ линейных уравнений относительно неизвестных c_m и d_m. Введем вместо них новые неизвестные x_m и y_m, которые связаны с c_m и d_m следующим образом:

$$\begin{aligned} x_m &= c_m + d_m, \\ y_m &= c_m e^{ik_m l} + d_m e^{-ik_m l}. \end{aligned} \tag{26}$$

Обратная связь неизвестных имеет вид

$$\begin{aligned} c_m &= f_1(m) x_m - f_2(m) y_m, \\ d_m &= f_2(m) y_m - f_3(m) x_m, \end{aligned} \tag{27}$$

где

$$f_1(m) = \frac{e^{-ik_m l}}{\Delta_m}\,,\; f_2(m) = \frac{1}{\Delta_m}\,,\; f_3(m) = \frac{e^{ik_m l}}{\Delta_m}\,,\; \Delta_m = e^{-ik_m l} - e^{ik_m l}\,. \tag{28}$$

Используя (26) и (27), вместо системы уравнений (25) получим следующие уравнения:

$$\begin{cases} 2ik_m[f_1(m)x_m - f_2(m)y_m] - \sum\limits_{m'=1}^{N} a_{mm'} x_{m'} = 2ik_m \delta_{m1} \\ 2ik_m[f_1(m)y_m - f_2(m)x_m] - \sum\limits_{m'=1}^{N} a_{mm'} y_{m'} = 0. \end{cases} \tag{29}$$

Сделаем еще одно преобразование, вместо x_m и y_m введем неизвестные v_m и w_m:

$$v_m = x_m + y_m\,,\; w_m = x_m - y_m\,. \tag{30}$$

Складывая и вычитая уравнения (29), получим две независимые системы уравнений N-го порядка относительно v_m и w_m

$$\begin{cases} 2ik_m \alpha_m v_m - \sum\limits_{m'=1}^{N} a_{mm'} v_{m'} = 2ik_m \delta_{m1}\,, \end{cases} \tag{31}$$

$$\begin{cases} 2ik_m \beta_m w_m - \sum\limits_{m'=1}^{N} a_{mm'} w_{m'} = 2ik_m \delta_{m1}\,. \end{cases} \tag{32}$$

В уравнениях (31) и (32)

$$\alpha_m = f_1(m) - f_2(m)\,,\ \beta_m = f_1(m) + f_2(m)\,. \qquad (33)$$

Системы уравнений (31) и (32) – тождественны, поэтому достаточно найти решения для одной из них. Перепишем систему (31) так, чтобы выделить уравнение с индексом $m = 1$:

$$\begin{cases} 2ik_1\alpha_1 v_1 - a_{11}v_1 - \sum\limits_{m'=2}^{N} a_{1m'}v_{m'} = 2ik_1 \\ 2ik_m\alpha_m v_m - a_{m1}v_1 - \sum\limits_{m'=2}^{N} a_{mm'}v_{m'} = 0,\ m \neq 1. \end{cases} \qquad (34)$$

Предполагая, что $v_1 \neq 0$, далее вместо v_1 и $v_{m\neq 1}$ введем неизвестные z_1 и $z_{m\neq 1}$:

$$z_1 = \frac{1}{v_1}\,,\ z_{m\neq 1} = \frac{v_{m\neq 1}}{v_1}\,. \qquad (35)$$

Разделив левые и правые части уравнений на v_1, согласно (35) получим

$$\begin{cases} \sum\limits_{m'=2}^{N} a_{1m'}z_{m'} + 2ik_1 z_1 = -b_{11} \\ \sum\limits_{m'=2}^{N} a_{mm'}z_{m'} - 2ik_m\alpha_m z_m = -a_{m1},\ \ (m = 2,3,...,N), \end{cases} \qquad (36)$$

где $b_{mm} = a_{mm} - 2ik_m\alpha_m$. Легче сначала найти z_1, которое определяется по формуле Крамера

$$z_1 = \frac{D}{D_1}\,, \qquad (37)$$

где

$$D_1 = \begin{vmatrix} 2ik_1 & a_{12} & \dots & \dots & a_{1N} \\ 0 & b_{22} & \dots & \dots & a_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & a_{N2} & \dots & \dots & b_{NN} \end{vmatrix}. \qquad (38)$$

Определитель D получается из D_1 заменой первого столбца столбцом свободных членов системы (36). Вычисление (38) выполняется по формуле, полученной в работе [14],

$$D_1 = 2ik_1\left(1 + \sum_{m'=2}^{N} \frac{a_{m'm'}}{b_{m'm'} - a_{m'm'}}\right)\prod_{m''=2}^{N}(b_{m''m''} - a_{m''m''})\,. \qquad (39)$$

Подставляя в (39) значение b_{mm}, окончательно получим

$$D_1 = -\frac{1}{\alpha_1}\left(1 + i\sum_{m'=2}^{N}\frac{a_{m'm'}}{2k_{m'}\alpha_{m'}}\right)\prod_{m''=1}^{N}(-2ik_{m''}\alpha_{m''})\ . \tag{40}$$

Определитель D вычисляется аналогичным образом. Имеем

$$D = -\left(1 + i\sum_{m'=1}^{N}\frac{a_{m'm'}}{2k_{m'}\alpha_{m'}}\right)\prod_{m''=1}^{N}(-2ik_{m''}\alpha_{m''})\ . \tag{41}$$

Теперь по формуле (37) найдем

$$z_1 = \alpha_1\frac{1 + i\sum\limits_{m'=1}^{N}\dfrac{a_{m'm'}}{2k_{m'}\alpha_{m'}}}{1 + i\sum\limits_{m'=2}^{N}\dfrac{a_{m'm'}}{2k_{m'}\alpha_{m'}}}. \tag{42}$$

Остальные неизвестные можно получить по методике, предложенной в работе [14]. Имеем

$$z_{m\neq 1} = -\frac{i\dfrac{a_{1m}}{2k_m\alpha_m}}{1 + i\sum\limits_{m'=2}^{N}\dfrac{a_{m'm'}}{2k_{m'}\alpha_{m'}}}\ . \tag{43}$$

Возвращаясь к неизвестным v_1 и $v_{m\neq 1}$, после простых преобразований получим

$$\begin{aligned} v_1 &= \frac{1}{\alpha_1}\left(1 - i\frac{a_{11}}{2k_1\alpha_1}G_\alpha\right), \\ v_{m\neq 1} &= -i\frac{a_{1m}}{2\alpha_1\alpha_m k_m}G_\alpha, \end{aligned} \tag{44}$$

где

$$G_\alpha = \frac{1}{1 + i\sum\limits_{m'=1}^{N}\dfrac{a_{m'm'}}{2k_{m'}\alpha_{m'}}}\ . \tag{45}$$

Что касается неизвестных w_m, то единственное отличие соответствующих формул от (44) и (45) заключается в том, что вместо функций α_m будут фигурировать функции β_m (см. формулы (33)). Таким образом, имеем

$$\begin{aligned} w_1 &= \frac{1}{\beta_1}\left(1 - i\frac{a_{11}}{2k_1\beta_1}G_\beta\right), \\ w_{m\neq 1} &= -i\frac{a_{1m}}{2\beta_1\beta_m k_m}G_\beta, \end{aligned} \tag{46}$$

где

$$G_\beta = \frac{1}{1 + i\sum_{m'=1}^{N} \frac{a_{m'm'}}{2k_{m'}\beta_{m'}}}. \tag{47}$$

Подставляя (44) и (46) в (30) и далее используя формулы (27) и (24), получим

$$t_1 = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\alpha_1} - \frac{1}{\beta_1}\right) - i\frac{a_{11}}{4k_1}\left(\frac{G_\alpha}{\alpha_1^2} - \frac{G_\beta}{\beta_1^2}\right), \tag{48}$$

$$t_{m\neq 1} = -i\frac{a_{1m}}{4k_m}\left(\frac{G_\alpha}{\alpha_1\alpha_m} - \frac{G_\beta}{\beta_1\beta_m}\right), \tag{49}$$

$$r_1 = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\alpha_1} + \frac{1}{\beta_1}\right) - i\frac{a_{11}}{4k_1}\left(\frac{G_\alpha}{\alpha_1^2} + \frac{G_\beta}{\beta_1^2}\right) - 1, \tag{50}$$

$$r_{m\neq 1} = -i\frac{a_{1m}}{4k_m}\left(\frac{G_\alpha}{\alpha_1\alpha_m} + \frac{G_\beta}{\beta_1\beta_m}\right). \tag{51}$$

Отметим, что выражения (48)–(51) при стремлении l к нулю переходят в решения (15) и (16), найденные для однобарьерного потенциала (9). Для этого достаточно учесть, что в формулах (48)–(51) при $l \to 0$ $\alpha_m / 2 = 1$ и $\beta_m = \infty$, а мощность потенциала уменьшается вдвое.

4. Заключение

Рассмотрено прохождение микрочастицы (электрона) через δ-потенциальные барьеры, которые вложены в квантовую проволоку цилиндрической формы с характерным эффектом размерного квантования в поперечном направлении. Основным результатом является получение точных решений для амплитуд многоканального рассеяния. Эти выражения справедливы для барьеров, состоящих из одного δ-потенциала и двух δ-потенциалов, расположенных на некотором расстоянии друг от друга. Важно отметить, что многоканальное рассеяние переходит в одноканальное, если первоначальная энергия продольного движения электрона недостаточна для возбуждения более высоких каналов рассеивания. В этом случае выведенные нами формулы формально совпадают с хорошо известными выражениями, полученными для одномерного рассеяния [15]. Определение амплитуд рассеяния $t(s)$ и $r(s)$ при прохождении частицы через квазиодномерную структуру с вложенной цепочкой из s атомных потенциалов (типа модели Кронига-Пенни) является весьма важной задачей. Одним из способов нахождения $t(s)$ и $r(s)$ является метод, использованный в настоящей статье для описания прохождения частицы через барьеры с одним или двумя δ-потенциалами ($s = 1, 2$). Что же касается моделей с $s \geq 3$, то из-за математических трудностей точных решений не удается получить. С другой стороны, в работах

[16,17] получены рекуррентные уравнения, связывающие амплитуды $t(s-1)$, $t(s)$ и $t(s+1)$. Если совместить эти уравнения с результатами, полученными в данной работе, то возможно удастся найти формулы для амплитуд рассеяния более высокого порядка, чем $t(2)$ и $r(2)$.

Необходимо подчеркнуть, что найденные нами решения (48)–(51) должны удовлетворять закону сохранения числа частиц (формула (17)), что является косвенным доказательством правильности полученных формул. Ввиду важности этой задачи покажем, что соотношение (17) выполняется, опустив довольно длинные промежуточные расчеты.

Представим формулы (48)–(51) в следующем виде:

$$\frac{1}{t_1} = \frac{B_\alpha B_\beta}{C_{\alpha\beta}}, \tag{52}$$

$$\frac{r_1}{t_1} = \frac{\dfrac{C_\alpha}{2\alpha_1} B_\beta + \dfrac{C_\beta}{2\beta_1} B_\alpha - B_\alpha B_\beta}{C_{\alpha\beta}}, \tag{53}$$

$$\frac{t_m}{t_1} = -i\frac{a_{1m}}{4k_m} \frac{\dfrac{B_\beta}{\alpha_1\alpha_m} - \dfrac{B_\alpha}{\beta_1\beta_m}}{C_{\alpha\beta}}, \tag{54}$$

$$\frac{r_m}{t_1} = -i\frac{a_{1m}}{4k_m} \frac{\dfrac{B_\beta}{\alpha_1\alpha_m} + \dfrac{B_\alpha}{\beta_1\beta_m}}{C_{\alpha\beta}}, \tag{55}$$

где

$$B_\alpha = C_\alpha + i\frac{a_{11}}{2k_1\alpha_1}, \quad B_\beta = C_\beta + i\frac{a_{11}}{2k_1\beta_1},$$

$$C_\alpha = 1 + i\sum_{m'=2}^{N} \frac{a_{m'm'}}{2k_{m'}\alpha_{m'}}, \quad C_\beta = 1 + i\sum_{m'=2}^{N} \frac{a_{m'm'}}{2k_{m'}\beta_{m'}},$$

$$C_{\alpha\beta} = \frac{C_\alpha}{2\alpha_1} B_\beta - \frac{C_\beta}{2\beta_1} B_\alpha .$$

Соотношение (17) запишем в виде равенства

$$M_{\text{left}} = M_{\text{right}}, \tag{56}$$

где

$$M_{\text{left}} = \sum_{m'=2}^{N} \frac{k_{m'}}{k_1} \left[\left|\frac{t_{m'}}{t_1}\right|^2 + \left|\frac{r_{m'}}{t_1}\right|^2 \right], \tag{57}$$

$$M_{\text{right}} = \left|\frac{1}{t_1}\right|^2 - \left|\frac{r_1}{t_1}\right|^2 - 1 . \tag{58}$$

Используя формулы (54) и (55), получим

$$M_{\text{left}} = \left|\frac{B_\beta}{C_{\alpha\beta}}\right|^2 \sum_{m'=2}^{N} \frac{a_{1m'}^2}{8k_1 k_{m'} \left|\alpha_1\right|^2 \left|\alpha_{m'}\right|^2} + \left|\frac{B_\alpha}{C_{\alpha\beta}}\right|^2 \sum_{m'=2}^{N} \frac{a_{1m'}^2}{8k_1 k_{m'} \left|\beta_1\right|^2 \left|\beta_{m'}\right|^2} . \tag{59}$$

Соответственно из формул (52) и (53) найдем

$$M_{\text{right}} = \left|\frac{B_\beta}{C_{\alpha\beta}}\right|^2 \sum_{m'=2}^{N} \frac{a_{11} a_{m'm'}}{8k_1 k_{m'} \left|\alpha_1\right|^2 \left|\alpha_{m'}\right|^2} + \left|\frac{B_\alpha}{C_{\alpha\beta}}\right|^2 \sum_{m'=2}^{N} \frac{a_{11} a_{m'm'}}{8k_1 k_{m'} \left|\beta_1\right|^2 \left|\beta_{m'}\right|^2} . \tag{60}$$

Из определения коэффициентов $a_{m'm'}$ (формула (14)) следует, что

$$a_{mm'}^2 = a_{mm} a_{m'm'} . \tag{61}$$

Используя это свойство коэффициентов $a_{mm'}$ легко заметить, что равенство (56) выполняется.

Мы не затронули проблему интерференционных эффектов, которые возможны в случае прохождения частицы через потенциальный барьер, сконструированный из двух δ-потенциалов. Для этого необходимо из формул (48)–(51) получить коэффициенты прохождения или отражения и исследовать их поведение в зависимости от первоначальной энергии электрона и расстояния l между δ-потенциалами.

ЛИТЕРАТУРА

1. **P. Harrison.** Quantum Wells, Wires and Dots. Theoretical and Computational Physics. New York, Wiley and Sons Ltd, 2005.
2. **D. Boese, M. Lischka, L.E. Reichl.** Phys. Rev. B, **62**, 16933 (2000).
3. **S. Souma, A. Suzuki.** Phys. Rev. B**, 65**, 115307 (2002).
4. **J. Prior, A.M. Somoza, M. Ortuno.** Phys. Rev. B, **72**, 024206 (2005).
5. **Д.М. Седракян, Э.М. Казарян, Л.Р. Седракян.** Изв. НАН Армении, Физика, **44**, 395 (2009).
6. **В.В. Бабиков.** Метод фазовых функций в квантовой механике. Москва, Наука, 1976.
7. **И.В. Кляцкин.** Метод погружения в теории распространения волн. Москва, Наука, 1986.
8. **Д.М. Седракян, Э.М. Казарян, Л.Р. Седракян.** Изв. НАН Армении, Физика, **45**, 173 (2010).
9. **Д.М. Седракян, Э.М. Казарян, Л.Р. Седракян.** Изв. НАН Армении, Физика, **46**, 18 (2011).
10. **Д.М. Седракян, Д.А. Бадалян, Л.Р. Седракян.** Изв. НАН Армении, Физика, **47**, 151 (2012).
11. **Д.М. Седракян, Л.Р. Седракян.** ФТТ, **53**, 1628 (2011).
12. **Д.М. Седракян, Д.А. Бадалян, Л.Р. Седракян.** Изв. НАН Армении, Физика, **49**, 71 (2014).
13. **Д.М. Седракян, Л.Р. Седракян.** Изв. НАН Армении, Физика, **49**, 327 (2014).

14. **Д.М. Седракян, Д.А. Бадалян, Л.Р. Седракян.** Изв. НАН Армении, Физика, **50**, 176 (2015).
15. **З. Флюгге.** Задачи по квантовой механике. Том 1. Москва, Мир, 1974.
16. **Д.М. Седракян.** Изв. НАН Армении, Физика, **45**, 39 (2010).
17. **Д.М. Седракян.** Изв. НАН Армении, Физика, **45**, 183 (2010).

ՄԻԿՐՈՄԱՍՆԻԿԻ ՑՐՄԱՆ ԱՄՊԼԻՏՈՒԴՆԵՐԸ ԵՌԱՉԱՓ δ-ՊՈՏԵՆՑԻԱԼՆԵՐՈՎ ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ԼԱՐՈՒՄ

Դ.Մ. ՍԵԴՐԱԿՅԱՆ, Դ.Հ. ԲԱԴԱԼՅԱՆ, Ա.ՅՈՒ. ԱԼԵՔՍԱՆՅԱՆ

Դիտարկված է միկրոմասնիկի (էլեկտրոնի) անցումը δ-պոտենցիալային արգելքներով, որոնք տեղադրված են լայնական ուղղությամբ բնութագրական չափային քվանտացման երևույթով զլանաձև քվանտային լարում: Բազմուղի ցրման լայնույթների համար գտնված են վերլուծական արտահայտություններ, որոնք ճիշտ են միմյանցից որոշակի հեռավորության վրա գտնվող մեկ և երկու δ-պոտենցիալներից բաղկացած արգելքների համար: Ցույց է տրված, որ բազմուղի ցրումը դառնում է միաուղի, եթե էլեկտրոնի երկայնական շարժման սկզբնական էներգիան բավարար չէ ցրման ավելի բարձր ուղիները գրգռելու համար: Այդ դեպքում ցրման ամպլիտուդների համար ստացված բանաձևերը համընկնում են միաչափ ցրման համար ստացված արտահայտությունների հետ:

Ցույց է տրված, որ ստացված լուծումները բավարարում են մասնիկների թվի պահպանման օրենքին, որը բանաձևերի ճիշտ լինելու անուղղակի ապացույց է:

MULTICHANNEL SCATTERING AMPLITUDES OF MICROPARTICLE IN A QUANTUM WIRE WITH THREE-DIMENSIONAL δ-POTENTIALS

D.M. SEDRAKIAN, D.H. BADALYAN, A.YU. ALEKSANYAN

The passage of the microparticle (of an electron) through the δ-potential barriers which are embedded in the quantum cylindrical shaped wire with a characteristic effect of dimensional quantization in the transverse direction was considered. Some analytical expressions for amplitudes of the multichannel scattering, which are valid for barriers consisting of one and two δ-potentials located at a certain distance from each other, was found. It is shown that the multichannel scattering goes into one-dimension scattering if the initial energy of the longitudinal motion of the electron is not sufficient to excite the higher scattering channels. In this case, the obtained formulas for the scattering amplitudes coincide with the well-known expressions obtained for the one-dimensional scattering. Obtained solutions are according to the law of the conservation of the number of particles, which is an indirect evidence of the corrections of the derived formulas.

Известия НАН Армении, Физика, т.51, №4, с.464-470 (2016)

УДК 621.315.592

ЭФФЕКТ СМЕЩЕНИЯ КРАЯ ПОГЛОЩЕНИЯ В КРЕМНИЕВОЙ НАНОПРОВОЛОКЕ

Ф.В. ГАСПАРЯН, А.А. АРАКЕЛЯН, Г.Д. ХОНДКАРЯН*

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

*e-mail: hxondkaryan@mail.ru

(Поступила в редакцию 20 мая 2016 г.)

Исследованы темновые и фото вольт–амперные характеристики (ВАХ), спектр поглощения и фоточувствительность полевого транзистора на основе кремниевой нанопроволоки. Получены спектральные зависимости фототока. Показано, что поглощающая способность кремниевой нанопроволоки смещается в коротковолновую область спектра. В отличие от массивного кремния фототок и фоточувствительность растут при комнатной температуре и принимают рекордно большие значения в ультрафиолетовой области. Предлагается использовать полевые транзисторы на основе кремниевых нанопроволок как высокочувствительные приемники для ультрафиолетовой области спектра, работающие при комнатной температуре.

1. Введение

Структуры на основе кремниевых нанопроволок (Si НП) представляют большой интерес для применения в оптоэлектронике. Одним из направлений этих применений может быть использование взаимодействия излучения с группой нанопроволок, нанесенных на подложку. Наноразмерные структуры с размерами, близкими к длинам волн падающего излучения, проявляют интересные оптические свойства, такие как низкая отражающая способность и высокое значение коэффициента поглощения. Исследования оптического поглощения Si НП показывают существенную зависимость поглощающей способности от их размеров [1]. Измерения спектра оптического поглощения в образцах из Si НП показали высокие значения коэффициентов поглощения [2]. Показано также, что в них значительно ослабляется отражающая способность по сравнению с массивным образцом кремния [2−3]. Оптическое поглощение растет с уменьшением длины волны падающего излучения. Необходимо отметить, что в отличие от массивного образца Si НП − прямозонный полупроводник, что делает его превосходным материалом для оптических применений [4−7]. С другой стороны ширина запрещенной зоны НП увеличивается с уменьшением ее диаметра [4]. Из сказанного следует, что можно ожидать существенного сдвига спектра поглощения Si НП в области коротких длин волн.

В настоящей работе представлены результаты экспериментальных исследований спектров поглощения, а также фоточувствительности полевого транзистора на основе p^+-p-p^+ структуры, изготовленной из Si НП.

2. Образцы и техника эксперимента

Структуры, состоящие из верхнего слоя оксида кремния *p*-Si НП, нижнего окисного слоя кремния и *p*-Si подложки (рис.1), были изготовлены по технологии кремний на изоляторе (SOI). Толщины верхнего и нижнего слоя SiO_2 составляли 9 нм и 145 нм, соответственно, диаметр нанопроволоки равнялся 250 нм и ее длина – 20 мкм. Особенности изготовления образца представлены в работе [8]. Si НП легировалась атомами бора с концентрацией 10^{15} см$^{-3}$. Области истока (S) и стока (D) (крайние p^+-области) были изготовлены на той же НП с высоким уровнем легирования атомами бора (10^{19} см$^{-3}$). Спектральные измерения проводились при комнатной температуре с помощью монохроматора YM-2. Для освещения были использованы лампы накаливания, находящиеся от верхнего слоя SiO_2 на расстоянии 15 см. Плотность, падающего на образец излучения W составляла 1.1 Вт/см^2 и 1.6 Вт/см^2 в области длин волн 0.25–0.6 мкм.

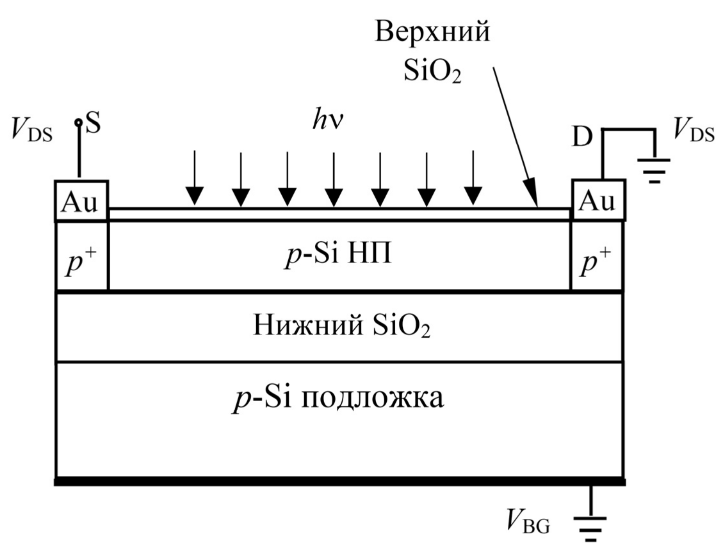

Рис.1. Схема полевого транзистора со структурой SiO_2/*p*-Si НП/SiO_2/*p*-Si подложка: S и D – исток и сток, соответственно, а V_{DS} и V_{BG} – напряжения на истоке и тыльном контакте, соответственно.

3. Результаты и их обсуждение

На рис.2 представлены темновые и фото ВАХ. Как видно, ВАХ имеют обычный для полевого транзистора вид.

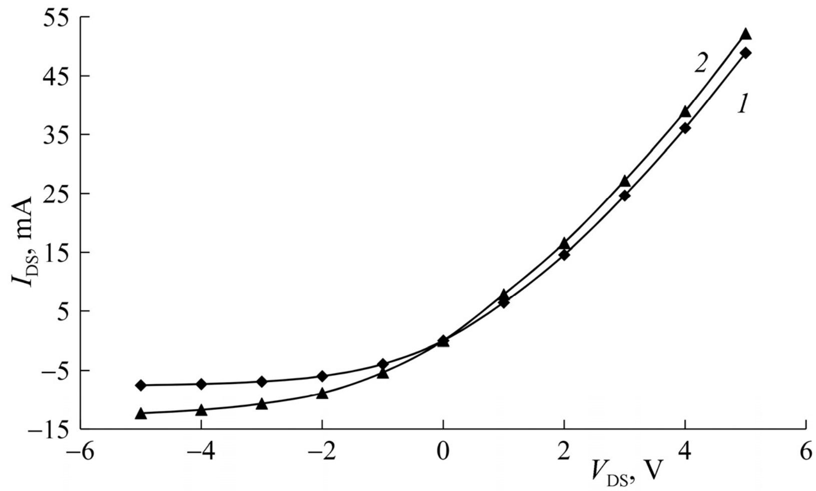

Рис.2. ВАХ сток–исток при V_{BG} = – 5 В, T = 300 K и плотности излучения W = 1.1 Вт/см^2: *1* – фото ВАХ и *2* – темновая ВАХ.

На рис.3 представлены спектральные зависимости тока сток–исток I_{DS} при $V_{BG} = V_{DS} = -5$ В. Как видно, спектральные зависимости тока I_{DS} смещаются

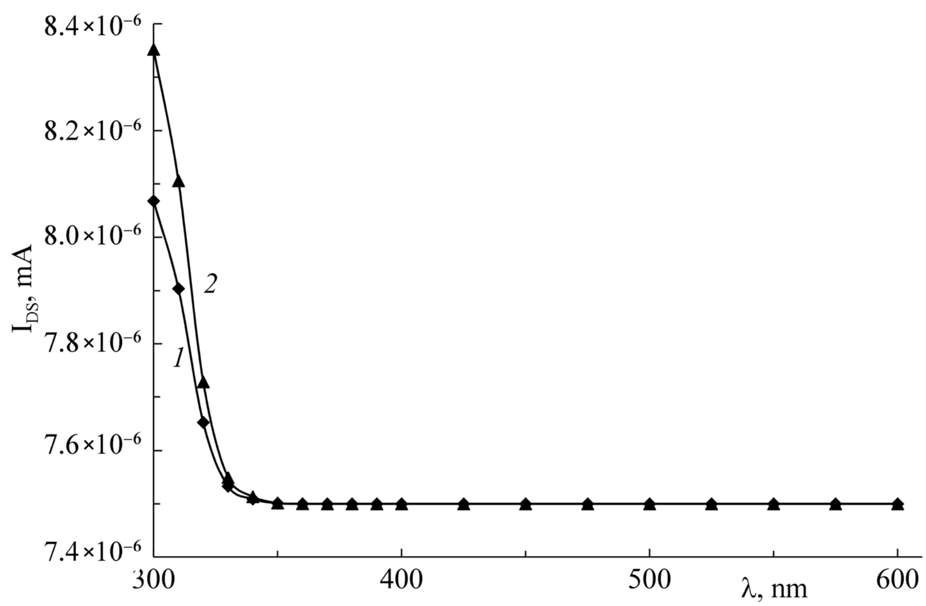

Рис.3. Спектральные зависимости тока I_{DS} при V_{BG} = −5 В, V_{DS} = −5 В и разных плотностях излучения: *1* − 1.1 Вт/см^2 и *2* − 1.6 Вт/см^2.

в область коротких длин волн по сравнению с массивным образцом кремния (известно, что у массивного кремния спектральная чувствительность лежит в области более 1 мкм [9]). Токовая фоточувствительность возрастает в области длин волн ниже 500 нм. Очевидно, что это обусловлено малыми размерами кремния в исследуемом образце. О спектральном смещении фототока с уменьшением диаметра Si НП сообщалось также в работе [10].

Такое поведение фототока и фоточувствительности Si можно объяснить следующим образом: во-первых, небольшой диаметр нанопроволоки (250 нм) ограничивает поглощение длинноволновых фотонов; во-вторых, в отличие от массивного монокристаллического Si, запрещенная зона Si НП растет с уменьшением размеров нанопроволоки [4]; в-третьих, начиная с энергии кванта $h\nu \geq 3$ эВ, внутренний квантовый выход для кремния растет и достигает значений 2–3 [11]; в-четвертых, как известно [12], длина волны испускаемого света от наноразмерных полупроводниковых образцов управляется выбором их размера L, так как энергия излучаемого кванта $h\nu = E_g + E_e + E_h$, где E_g – энергия запрещенной зоны, а E_e и E_h – энергии связи электронов и дырок, соответственно. Последние (E_e и E_h) увеличиваются с уменьшением размеров L. С другой стороны, согласно соотношению Ван Русбрек–Шокли, поглощение и испускание излучения – взаимосвязанные процессы [13]. Смещение спектра поглощения Si НП

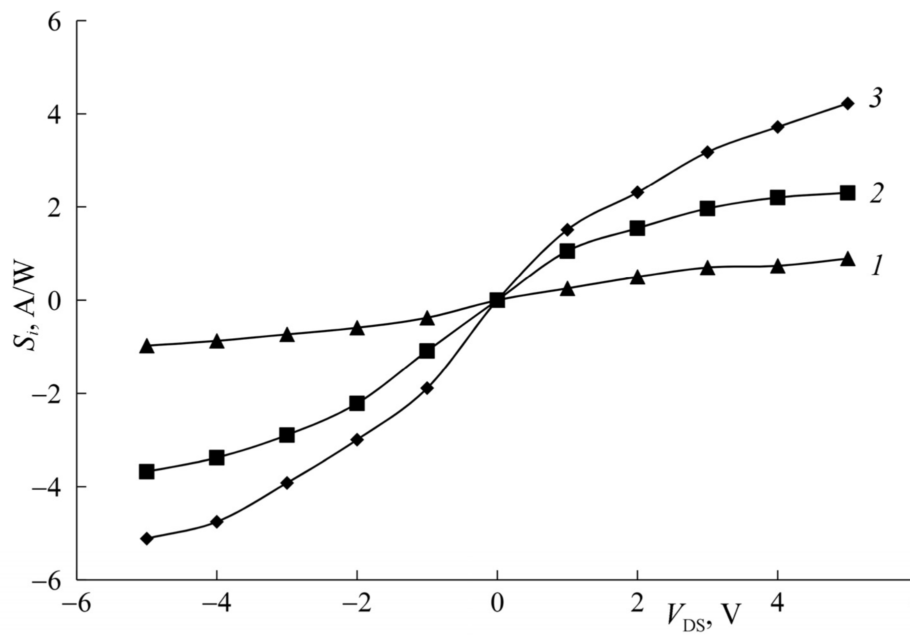

Рис.4. Зависимость фоточувствительности от напряжения сток–исток V_{DS} при T = 300 K и различных значениях напряжения на тыльном затворе V_{BG}: *1* – V_{BG} = –1 В, 2 – V_{BG} = –5 В и *3* – V_{BG} = –10 В.

в коротковолновую область связано также с этим фактором. Показано, что такое оптическое ограничение (голубое смещение) по энергии пропорционально $1/L^2$ [12]. Следовательно, с уменьшением размеров образцов коротковолновые фотоны могут более эффективно поглощаться в Si НП.

Зависимости фоточувствительности от напряжения сток–исток, а также спектральные зависимости фоточувствительности представлены на рис.4 и 5, соответственно. Зависимости токовой фоточувствительности $S_i(\lambda)$ от напряжения сток–исток V_{DS} и их спектральные зависимости рассчитаны по формуле

$$S_i(\lambda) = \frac{\Delta I_{\text{DS}}(\lambda)}{AW(\Delta\lambda)}.$$

Здесь A – площадь фоточувствительной площадки НП, $\Delta I_{\text{DS}}(\lambda)$ – фототок при длине волны λ и $\Delta\lambda = 10$ нм – минимально возможная при измерении полоса разрешения длин волн.

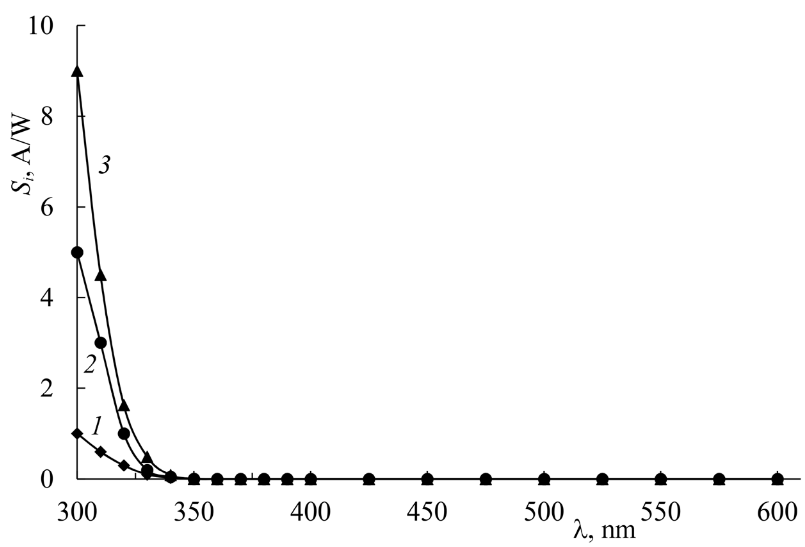

Рис.5. Спектральная зависимость фоточувствительности при T = 300 K: *1* – $V_{\text{BG}} = -1$ В, *2* – $V_{\text{BG}} = -5$ В и *3* – $V_{\text{BG}} = -10$ В.

Фоточувствительность в зависимости от V_{DS} достигает значений 4–6 А/Вт при комнатной температуре. Чувствительность растет в УФ области спектра и ее значения в ~10 раз больше по сравнению с фотодетекторами, изготовленными на основе массивного кремния [14–18] (см. рис.4 и 5). Например, в фотодетекторах на основе полевых транзисторов из графена значение фоточувствительности достигало ~126 мА/Вт при больших напряжениях (8 В) и мощности излучения в 20 мВт [19].

4. Заключение

Показано, что поглощающая способность кремниевой нанопроволоки смещается в коротковолновую область спектра и в отличие от массивного кремния фототок и фоточувствительность растут при комнатной температуре и принимают рекордно большие значения в УФ области. Таким образом, полевые транзисторы на основе Si НП могут успешно работать при комнатной температуре в УФ области спектра.

Исследование выполнено при финансовой поддержке ГКН МОН Армении в рамках научного проекта № 15T-1C279.

ЛИТЕРАТУРА

1. **G. Chen, L. Hu.** SPIE Newsroom: Solar & Alternative Energy, **1**, 1 (2008).
2. **L. Tsakalakos, J. Balch, J. Fronheiser, M.-Y. Shih, S.F. LeBoeuf, M. Pietrzykowski, P.J. Codella, B.A. Korevaar, O. Sulima, J. Rand, A. Davuluru, U. Rapolc.** J. Nanophotonics, **1**, 013552 (2007).
3. **E. Garnett, P. Yang.** Nano Lett., **10**, 1082 (2010).
4. **V. Parkash, A.K. Kulkarni.** IEEE Transactions on Nanotechnology, **10**, 1293 (2011).
5. **G. Sanders, Y.C. Chang.** Phys. Rev. B, **45**, 9202 (1992).
6. **A. Miranda, R. Vazquez, A. Dıaz-Mendez, M. Cruz-Irisson.** Microelectronics, **40**, 456 (2009).
7. **M. Bruno, M. Palummo, S. Ossicini, R.D. Sole.** Surface Science, **601**, 2707 (2007).
8. **S. Pud, J. Li, V. Sibiliev, M. Petrychuk, V. Kovalenko, A. Offenhäusser, S. Vitusevich.** Nano Lett., **14**, 578 (2014).
9. **Р.Р. Варданян, В.К. Даллакян, У. Керст, К. Бойт.** Изв. НАН Армении, Физика, **47**, 111 (2012).
10. **T. Xu, Y. Lambert, Ch. Krzeminski, B. Grandidier, D. Stiévenard, G. Lévêque, A. Akjouj, Y. Pennec, B. Djafari-Rouhani.** J. Appl. Phys., **112**, 033506 (2012).
11. **В.С. Вавилов.** Действие излучения на полупроводники. Москва, Физматгиз, 1963.
12. **E.L. Wolf.** Nanophysics and Nanotechnology: An Introduction to Modern Concepts in Nanoscience. Second Ed., WILEY-VCH Verlag, Weinheim, 2006.
13. **J.I. Pankove.** Optical Processes in Semiconductors. New Jersey, Prentice-Hall, 1971.
14. http://www.labsphere.com/products/spheres-and-components/laser-power-measurement-spheres/detector-assemblies.aspx
15. https://www.solarmeter.com/model57.html
16. http://www.kyosemi.co.jp/en/sensor/gan_uv_sensor/kpdu37s1_q1
17. http://physics.nist.gov/Pubs/TN1421/detector.html
18. http://www.scitec.uk.com/uvphotodiodes/uvphotodiodes/notes/uv_index_measuring
19. **J. Wang, Z. Cheng, Z. Chen, J.-B. Xu, H. Ki Tsang, C. Shu.** J. Appl. Phys., **117**, 144504 (2015).

ԿԼԱՆՄԱՆ ԵԶՐԻ ՇԵՂՄԱՆ ԵՐԵՎՈւՅԹԸ ՍԻԼԻՑԻՈւՄԱՅԻՆ ՆԱՆՈԼԱՐՈւՄ

Ֆ.Վ. ԳԱՍՊԱՐՅԱՆ, Ա.Հ. ԱՌԱՔԵԼՅԱՆ, Հ.Դ. ԽՈՆԴԿԱՐՅԱՆ

Հետազոտված են սիլիցիումային նանոլարից պատրաստված դաշտային տրանզիստորի մթնային և լուսային վոլտ-ամպերային բնութագրերը (ՎԱԲ)։ Ստացված են ինչպես ՎԱԲ-երը, այնպես էլ ֆոտոհոսանքի ու ըստ հոսանքի ֆոտոզգայնության սպեկտրալ կախվածությունները։ Ցույց է տրված, որ սիլիցիումային նանոլարի կլանումը շեղվում է դեպի սպեկտրի կարճալիքային տիրույթ և ի տարբերություն հոծ սիլիցիումի ֆոտոհոսանքն ու ֆոտոզգայնությունը աճում են և սենյակային ջերմաստիճանում ընդունում արտակարգ բարձր արժեքներ սպեկտրի ուլտրամանուշակագույն տիրույթում։ Առաջարկված է սիլիցիումային նանոլարից պատրաստված դաշտային տրանզիստորները օգտագործել որպես սենյակային ջերմաստիճանում աշխատող բարձր զգայնության ընդունիչներ սպեկտրի ուլտրամանուշա-կագույն տիրույթի համար։

SHIFTING EFFECT OF THE ABSORPTION EDGE IN THE SILICON NANOWIRE

F.V. GASPARYAN, A.H. ARAKELYAN, H.D. KHONDKARYAN

The dark and photo current–voltage characteristics (CVC), absorption spectrum and photosensitivity of the field effect transistor based on silicon nanowires were investigated. The spectral dependences of the photocurrent were obtained. It is shown that the absorption capacity of the silicon nanowire is shifted to shorter wavelengths. In contrast to bulk silicon photocurrent and photosensitivity rise at room temperature and take record high values in the ultraviolet region. It is offered to use the field-effect transistors based on silicon nanowires as a high-sensitive detectors for the ultraviolet spectral region, operating at room temperature.

Известия НАН Армении, Физика, т.51, №4, с.471-483 (2016)

УДК 621.315

ОДНОЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ В ПОЛУПРОВОДНИКОВОМ НАНОСФЕРИЧЕСКОМ СЛОЕ БОЛЬШОГО РАДИУСА

В.А. АРУТЮНЯН[1], Д.Б. АЙРАПЕТЯН[1,2*], Д.А. БАГДАСАРЯН[1]

[1]Российско–Армянский (Славянский) университет, Ереван, Армения
[2]Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

[*]e-mail: dhayrap82@gmail.com

(Поступила в редакцию 4 апреля 2016 г.)

В режиме сильного квантования рассмотрены одночастичные состояния в сферическом нанослое ядро/оболочка/оболочка. Соотношение между геометрическими размерами соответствующих компонент образца выбраны так, что различия между характеристиками материалов компонент структуры формируют в среднем слое композиции квантовую яму для носителей заряда. Предложены адекватные приближенные подходы, позволяющие в аналитическом виде определять энергетический спектр и волновые функции одноэлектронных состояний в сферическом нанослое. Проведено сравнение результатов аналитических и численных расчетов энергетического спектра носителей заряда в слое. Определен интервал значений отношения толщины слоя к его радиусу, при которых результаты предложенных приближений с достаточной точностью совпадают с результатами численных расчетов.

1. Введение

Быстрое развитие полупроводниковых технологий позволяет в настоящее время изготовление и получение квантовых наноструктур с различной геометрической конфигурацией и с различными физическими свойствами. В последние два десятилетия получены и интенсивно исследуются теоретически и экспериментально отдельные виды квантовых слоистых гетероструктур, так называемые квантовые точки–квантовые ямы (КТКЯ). В этих структурах обычно используются гетеропереходы на основе материалов A_2B_6, A_4B_6 и A_3B_5 таких, как CdS/HgS/CdS, ZnS/CdS/ZnS, CdSe/HgSe/CdSe, CdTe/HgTe/CdTe, CdS/PbS/CdS, PbSe/CdS/PbSe, PbSe/CdSe/PbSe, AlAs/GaAs/AlAs/, InP/InAs/InP и др. [1–13]. Структура КТКЯ представляет собой наносистему, состоящую из квантовой точки (ядра), окруженного двумя или более оболочками чередующихся узкозонного и широкозонного материалов.

Особенностью КТКЯ является возможность контролировать физические свойства путем изменения радиуса ядра, толщины квантованного слоя и размера внешней оболочки. Дополнительное манипулирование положением энергетических уровней и волновыми функциями носителей заряда в КТКЯ может быть достигнуто путем изменения состава и ширины квантовой ямы, окружающей квантовую точку (ядро). Такие гетерофазные наноструктуры привлекают к себе большое внимание из-за интересных физических свойств и возможных применений в электронике и оптоэлектронике [1–16]. Эти структуры также перспективны для использования в области современной медицины и биологии [17–20].

КТКЯ могут быть сформированы путем нанесения на предпочтительно сферическую квантовую точку (ядро) тонкого слоя другого полупроводника, который имеет меньшую ширину запрещённой зоны, а затем дополнительно покрыты толстым слоем (оболочкой) из материала ядра. Например, в CdS/HgS/CdS КТКЯ-структуре ядро из CdS (запрещенная зона ~2.5 эВ) окружено слоем узкозонного материала (запрещенная зона для β-HgS ~0.5 эВ), который затем покрывается более толстым слоем CdS (оболочка). Слой β-HgS является квантовой ямой как для электронов, так и для дырок, тогда как CdS-ядро и оболочка в такой композиции играют роль квантовых барьеров [1–3,21,22]. Таким образом, наряду с «всеобщим» размерным квантованием носителей заряда во всей наночастице в КТКЯ-структурах имеет место также дополнительное «локальное» размерное квантование движения носителей во внутренней квантовой яме образца.

Экспериментальные и теоретические исследования подобных систем показали, что после оптического возбуждения электроны и дырки в этих гетероструктурах локализованы в области квантовой ямы промежуточного слоя [6,10]. Другими примерами широко изучаемых КТКЯ-систем являются, например, структуры ZnS/CdS/ZnS [4,11] и CdTe/HgTe/CdTe [9], которые также обладают аналогичными свойствами. Очевидно, что определенный физический интерес представляет изучение состояний носителей заряда в области ямы при различных физических условиях в таких структурах.

2. Общий модельный подход

Рассмотрение наноструктуры ядро/оболочка/оболочка проведем на примере нанорадиального гетероперехода CdS/HgS/CdS [21,22]. Предположим, что для геометрических размеров системы имеют место следующие условия:

$$L \ll a_L , \tag{1}$$

$$L \ll R_1 , \tag{2}$$

где $L = R_2 - R_1$ – толщина слоя (R_1 и R_2 – соответственно внутренний и внешний радиусы слоя) и a_L – боровский радиус объемного экситона в материале слоя.

Условие (1) означает, что состояние носителей заряда в слое соответствует режиму сильного квантования, т. е. в данном случае энергией кулоновского взаимодействия между электроном и дыркой в слое можно пренебречь по сравнению с энергией размерного квантования носителей заряда. Условие (2) означает, что сам слой достаточно удален от центра системы. В плане технической реализуемости структуры ядро/оболочка/оболочка это условие является наиболее реалистичным. С физической точки зрения подобная структура представляет определенный интерес, т. к. в этом случае слой комбинирует в себе свойства как квантовой точки (КТ), так и квантовой пленки (КП), т. е. система уже не КТ, но еще не КП.

В табл.1 и 2 приведены соответственно физические характеристики и энергетические параметры кристаллов CdS и HgS при различных значениях L и R_1.

Табл.1. Характеристики кристаллов CdS и HgS [21,22]

Материал	a, нм	ε_0	μ_c/m_0	μ_v/m_0	a_{ex}, нм	E_g, эВ	U^c, эВ	U^v, эВ
CdS	0.5818	9.1	0.2	0.7	3	2.5	–3.8	–6.3
HgS	0.5851	18.2	0.036	0.044	50	0.5	–5.0	–5.5

Здесь μ_c и μ_v – эффективные массы носителей заряда, a – постоянная решетки, E_g – ширина запрещенной зоны объемного образца, U^c и U^v – соответственно дно зоны проводимости и потолок валентной зоны, отсчитываемые от уровня вакуума, ε_0 – статическая диэлектрическая проницаемость и a_{ex} – боровский радиус объемного экситона в данном материале.

Табл.2. Энергетические характеристики слоя HgS в гетероструктуре CdS/HgS/CdS [23,24]

R_1, нм	L, нм	ΔU^c, эВ	ΔU^v, эВ	E^c_{rad}, мэВ	E^c_{rot}, мэВ	E^v_{rad}, мэВ	E^v_{rot}, мэВ
15	5	1.2	–0.8	42.37	3.677	34.69	3.009
30	10	1.2	–0.8	10.59	0.9142	8.674	0.7482

Здесь ΔU^c и ΔU^v – энергетические разрывы для зоны проводимости и валентной зоны, соответственно, $E^{c,v}_{rad}$ и $E^{c,v}_{rot}$ представляют собой минимальные энергии соответственно радиального и вращательного движений носителей заряда в слое.

Из приведенных таблиц видно, что при выполнении условий (1) и (2) слой HgS в радиальном направлении можно аппроксимировать бесконечно глубокой потенциальной ямой [21,22]:

$$V(r)=\begin{cases}0, \; R_1<r<R_2\\ \infty, \; r\le R_1, \; r\ge R_2.\end{cases} \tag{3}$$

В приближении изотропной эффективной массы μ для носителя заряда в пределах слоя в сферических координатах имеем следующее уравнение Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)\Psi(r,\theta,\varphi)-\frac{\hat{\mathbf{l}}^2}{r^2}\Psi(r,\theta,\varphi)\right]=E\Psi(r,\theta,\varphi). \tag{4}$$

Здесь E – полная энергия частицы, $\psi(r,\theta,\varphi)$ – ее полная волновая функция и $\hat{\mathbf{l}}$ – оператор момента импульса $(l=0,1,2,...)$. С учетом сферической симметрии системы волновую функцию $\Psi(r,\theta,\varphi)$ будем искать в виде

$$\Psi(r,\theta,\varphi)=\Phi(r)Y_{l,m}(\theta,\varphi), \tag{5}$$

где $Y_{l,m}(\theta,\varphi)$ – нормированные сферические гармоники [25] и m – азимутальное число $(m=0,\pm1,...,\pm l)$. Подставляя (5) в (4) для радиальной волновой функции $\Phi(r)$ получим уравнение

$$\frac{1}{r^2}\left[r^2\frac{d\Phi(r)}{dr}\right]-\frac{l(l+1)}{r^2}\Phi(r)+\frac{2\mu}{\hbar^2}E\Phi(r)=0. \tag{6}$$

Сделав подстановку

$$\Phi(r)=\frac{\chi(r)}{\sqrt{r}} \tag{7}$$

и перейдя к безразмерной переменной

$$x=kr, \; \left(k^2=2\mu E/\hbar^2\right), \tag{8}$$

уравнение (6) можно свести к уравнению Бесселя

$$x^2\frac{d^2\chi(x)}{dx^2}+x\frac{d\chi(x)}{dx}+\left[x^2-\left(l+\frac{1}{2}\right)^2\right]\chi(x)=0. \tag{9}$$

В случае потенциала (3) решения уравнении (9) или (6) даются линейной комбинацией сферических функций Бесселя $J_{l+1/2}(x)$ и функций Неймана $N_{l+1/2}(x)$ [26]

$$\chi(x)=C_1J_{l+\frac{1}{2}}(x)+C_2N_{l+\frac{1}{2}}(x), \tag{10}$$

где C_1 и C_2 – постоянные нормировки. Соответствующие граничные условия для потенциальной ямы (3) запишутся в следующем виде:

$$\chi(kR_1) = \chi(kR_2) = 0, \tag{11}$$

$$\begin{cases} C_1 J_{l+1/2}(kR_1) + C_2 N_{l+1/2}(kR_1) = 0 \\ C_1 J_{l+1/2}(kR_2) + C_2 N_{l+1/2}(kR_1) = 0. \end{cases} \tag{12}$$

Из требования нетривиальности решений системы (12) приходим к общему условию определения энергетического спектра носителя заряда в слое при ограничивающем потенциале (3)

$$\frac{J_{l+1/2}\left[\pi b \varepsilon^{1/2}\right]}{N_{l+1/2}\left[\pi b \varepsilon^{1/2}\right]} = \frac{J_{l+1/2}\left[\pi(1+b)\varepsilon^{1/2}\right]}{N_{l+1/2}\left[\pi(1+b)\varepsilon^{1/2}\right]}, \tag{13}$$

где сделаны следующие обозначения: $b = R_1/L$, $\varepsilon = E / E_1^{(0)}$ и $E_1^0 = \pi^2\hbar^2/2\mu L^2$. Трансцендентное уравнение (13) без труда поддается численному решению [26], что позволяет с большой точностью определить значения энергии частицы в слое при различных значениях L и R_1. Однако учитывая, что для рассматриваемой системы выполняется условие (2), то для решения уравнения (6) можно применить адекватные условию (2) приближенные методы расчета и для определенного интервала значений отношения L / R_1 получить энергетический спектр E и радиальные волновые функции $\Phi(r)$ в аналитическом виде. Перейдем к изложению этих подходов.

3. Приближенные решения

3.1. Использование асимптотического поведения

По определению аргумент функции в выражении (10) представляет собой величину

$$x = kr = \pi\sqrt{\frac{E_{\text{rad}}}{E_1^{(0)}}}\frac{r}{L}. \tag{14}$$

Согласно условию (2), отношение r/L в интервале $r \in [R_1, R_2]$ всегда много больше единицы:

$$r/L \gg 1,\ r \in [R_1, R_2]. \tag{15}$$

С другой стороны, отношение $E_{\text{rad}}/E_1^{(0)} \geq 1$, так что при выполнении условий (2), (14) и (15) аргумент волновых функций из (10) в интервале $r \in [R_1, R_2]$ всегда много больше единицы:

$$x = kr \gg 1. \tag{16}$$

Учитывая асимптотическое поведение функций $J_{l+1/2}(x)$ и $N_{l+1/2}(x)$ при $x \gg 1$ [26], для функций $\chi(x)$ можно записать

$$\chi(x)\big|_{x>>1} \cong \sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{1}{\sqrt{x}}\left\{C_1\cos\left[x-\frac{\pi}{2}\left(l+\frac{1}{2}\right)-\frac{\pi}{4}\right]\right.$$
$$\left.+C_2\sin\left[x-\frac{\pi}{2}\left(l+\frac{1}{2}\right)-\frac{\pi}{4}\right]\right\}. \tag{17}$$

Из граничных условий (11), записанных для функции (17), без труда получаем явный вид энергетического спектра (3) частицы в слое при выполнении условий (1) и (2)

$$E = E_n = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2\mu L^2},\ \left(n = 1,2,3\right). \tag{18}$$

Из этих же граничных условий получаем также связь между нормировочными постоянными

$$C_2 = C_1\tan\left(kR_z - \frac{\pi l}{2}\right). \tag{19}$$

Проводя нормировку

$$\int_{R_1}^{R_2}\left|\Phi(r)\right|^2 r^2 dr = \int_{R_1}^{R_2}\left|\chi(r)\right|^2 r dr = 1, \tag{20}$$

для радиальной волновой функции при $L/R_1 \ll 1$ получаем

$$\Phi(r)\big|_{L<<R_1} \equiv \Phi_n(r)\big|_{L<<R_1} \cong \sqrt{\frac{2}{L}}\frac{\sin\frac{\pi n}{L}\left(r-R_1\right)}{r}. \tag{21}$$

Это приближение с достаточной точностью описывает состояния с малыми значениями орбитального числа $l \sim 1$, когда в силу условия (2) центробежной энергией частицы в слое можно пренебречь. Учитывая следующий член асимптотического разложения, для определения энергии получаем следующее трансцендентное уравнение:

$$\tan\left(\pi\sqrt{\varepsilon}\right) = \frac{2\pi\sqrt{\varepsilon}\,l\left(l+1\right)}{l^2\left(l+1\right)^2 + 4\pi^2\varepsilon\lambda^{-1}\left(1+\lambda^{-1}\right)}.$$

Соответственно для огибающей радиальной волновой функции получаем

$$\chi_l(kr) \cong \sqrt{\frac{2}{L}}\left\{\left[1+\frac{l^2\left(l+1\right)^2}{4k^2 rR_1}\right]\sin\left[k\left(r-R_1\right)\right]\right\},\ k = \sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}.$$

Эти соотношения позволяют определить зависимость энергии и радиальных волновых функций носителей заряда от орбитального квантового числа l и геометрических размеров образца.

3.2. Приближение сферического ротатора

Суть этого приближения, основанного на выполнении условий (1) и (2), состоит в том, что вследствие «тонкости» слоя в его пределах радиальная переменная и соответственно связанная с ней центробежная энергия изменяются относительно мало. Действительно, в пределах слоя для среднего значения величины r^{-2} можем написать (с точностью до членов первого порядка по L/R_1)

$$\overline{r}^{-2} = \frac{1}{2}\left[R_1^{-2} + R_2^{-2}\right] \approx \frac{1}{R_1^2}\left(1 - \frac{L}{R_1}\right). \quad (22)$$

Соответственно в уравнении (6) в выражении для центробежной энергии без нарушения физической общности задачи можно провести замену [27]

$$\frac{1}{r^2} \to \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle \equiv \frac{1}{R_0^2} = \frac{1}{2}\left[\frac{1}{R_1^2} + \frac{1}{R_2^2}\right]. \quad (23)$$

Тогда уравнение (6) можно записать в следующем виде:

$$\frac{1}{r^2}\left[r^2 \frac{d\Phi(r)}{dr}\right] + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E - E_{\text{rot}}\right]\Phi(r) = 0, \quad (24)$$

где введено обозначение $E_{\text{rot}} = \hbar^2 l(l+1)/2\mu R_0^2$. Сделаем теперь подстановку

$$\Phi(r) = \frac{\chi(r)}{r}, \quad (25)$$

и, введя обозначение $E - E_{\text{rot}} = E_{\text{rad}}$, для энергии и радиальной волновой функции получаем

$$E_{\text{rad}} = E_n = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2\mu L^2},\; E_{\text{rot}} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu R_0^2},\; E\Big|_{L<<R_1} \equiv E_{n.l} \cong E_{\text{rad}} + E_{\text{rot}}, \quad (26)$$

$$\Phi(r)\Big|_{L<<R_1} \cong \sqrt{\frac{2}{L}}\,\frac{\sin\frac{\pi n}{L}(r - R_1)}{r}. \quad (27)$$

3.3. Адиабатическое приближение

Опять же в силу условия (2) радиальное движение частицы в пределах слоя можно считать «быстрым» по сравнению с «медленным» ротационным движением по радиусу $r \gg L$. Это дает нам возможность для применения адиабатического приближения [28]. Подстановкой радиальной волновой функции (25) в (6) для радиальной части системы получим

$$\frac{d^2\chi(r)}{dr^2} + \frac{2\mu E}{\hbar^2}\chi(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}\chi(r) = 0. \quad (28)$$

Для «быстрой» радиальной части имеем уравнение

$$\frac{d^2\chi(r)}{dr^2}+\frac{2\mu E_{\text{rad}}}{\hbar^2}\chi(r)=0\,, \tag{29}$$

решениями которого являются

$$E_{\text{rad}}\equiv E_n=\frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2\mu L^2},\ \chi(r)=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{\pi n}{L}(r-R_1)\,. \tag{30}$$

Усредняя центробежный потенциал по состояниям (30), получаем

$$\frac{\pi^2}{2\mu}\left\langle\frac{l(l+1)}{r^2}\right\rangle=\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu R_n^2}\cong\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu R_1^2}\left[1-\frac{L}{R_1}+\frac{L^2}{R_1^2}\left(1-\frac{3}{2\pi^2 n^2}\right)\right], \tag{31}$$

$$E_{n,l}=E_1^{(0)}n^2+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu R_n^2}\,.$$

3.4. Ротационное движение как возмущение

Обратимся вновь к уравнению (27) и проведем в нем замену переменной

$$\rho=r-R_1,\ r\in[R_1,R_2],\ \rho\in[0,L]\,. \tag{32}$$

В силу условия (2) для переменной ρ имеет место условие

$$\frac{\rho}{R_1}\ll 1\,. \tag{33}$$

Воспользовавшись этим условием, проведем в уравнении (27) в выражении центробежной энергии разложение по степеням малого параметра ρ/R_1. Тогда уравнение (27) принимает следующий вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2\chi(\rho)}{d\rho^2}+\left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu R_1^2}-\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu R_1^2}\frac{2\rho}{R_1}\right]\chi(\rho)=E\chi(\rho)\,. \tag{34}$$

В данном случае величину

$$F_l(\rho)=-\frac{\hbar^2 l(l+1)}{\mu R_1^2}\frac{\rho}{R_1} \tag{35}$$

можно представить как возмущение в уравнении (35). Для решений «невозмущенного» уравнения

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2\chi^{(0)}(\rho)}{d\rho^2}=E'\chi^{(0)}(\rho),\ E'=E-\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu R_1^2} \tag{36}$$

получаем следующие выражения:

$$E' \equiv E_n^{(0)} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2\mu L^2} = E_1^{(0)} n^2 , \tag{37}$$

$$\chi^{(0)}(r) = \chi_n^{(0)}(r) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi n}{L}(r - R_1) . \tag{38}$$

Используя теперь стандартную методику расчета теории возмущений [25] и известные формулы суммирования рядов [26], для поправок первого и второго порядков к «невозмущенной» энергии $E' = E_n$ соответственно получаем

$$\Delta E_n^{(1)} = -\frac{F_l L}{2} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu R_1^2} \frac{L}{R_1}, \tag{39}$$

$$\Delta E_n^{(2)} = \frac{(F_l L)^2}{48 \Delta E_1^{(1)} n^2} \left(1 - \frac{15}{\pi^2 n^2}\right). \tag{40}$$

Проводя вычисления по той же методике, для возмущенной волновой функции получаем [26]

$$\begin{aligned}\chi(\rho) &= \chi_{n,l}(\rho) \\ &= \sqrt{\frac{2}{L}} \left\{ \sin\frac{\pi n \rho}{L} - \frac{F_l L}{4E_1^{(0)} n^2} \left[\frac{\pi n \rho}{L}\left(1 - \frac{\rho}{L}\right) \cos\frac{\pi n \rho}{L} - \left(\frac{1}{2} - \frac{\rho}{L}\right) \sin\frac{\pi n \rho}{L} \right] \right\} \qquad (41) \\ &= \chi_n^{(0)}(\rho) - \frac{\eta_l}{4n^2} f_n(\rho), \;\; \eta_l = \frac{F_l L}{E_1^{(0)}}.\end{aligned}$$

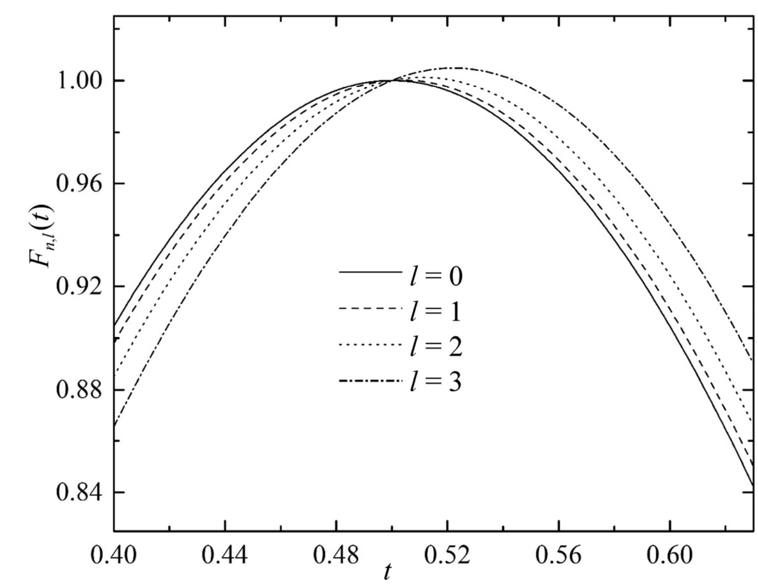

Рис.1. Графики функции $F_l(t) = L|\chi_{n,l}(t)|^2/2$ для значений $n = 1$ и $l = 0,1,2,3$; $t = \rho/l$.

В этом случае возмущенная радиальная волновая функция становится зависящей от орбитального числа l. На рис.1 представлены графики функции $F_{n,l}(\rho) = L\left|\chi_{n,l}(\rho)\right|^2 / 2$ для различных значений орбитального числа l. С ростом числа l максимум функции $F_{n,l}(t)$ смещается в область больших t, т. е. с увеличением энергии ротационного движения максимум плотности вероятности пространственного распределения носителей смещается в область больших радиусов.

3.5. Приближение Вентцеля–Крамерса–Бриллюэна (ВКБ-метод)

Рассмотрим теперь случай, когда для слоя по-прежнему выполняется условие (1), а вместо условия (2) имеет место более «мягкое» условие

$$L < R_1 . \tag{42}$$

Вводя обозначения

$$\frac{2\mu E}{\hbar^2} = -\xi^2, \quad g_l(r) = \frac{l(l+1)}{r^2} = \frac{\beta_l}{r^2}, \tag{43}$$

уравнение (27) запишем в виде

$$\frac{d^2\chi_{n,l}(\rho)}{dr^2} - \left[\xi^2 - g_l(r)\right]\chi_{n,l}(\rho) = 0 . \tag{44}$$

Табл.3. Значения безразмерной энергии $\varepsilon_{11} = E_{11}/E_1^{(0)}$, ($n = 1$, $l = 1$) для различных значений параметра $\lambda = L/R_1$

λ / ε_{11}	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5
Точное решение	1.00184	1.00672	1.01388	1.02276	1.03293
Модель ротатора	1.0018529	1.0068742	1.014529	1.024507	1.036625
Адиабат. приближение	1.0018429	1.006766	1.014173	1.023876	1.036105
Теория возмущений	1.0018255	1.006491	1.012789	1.01947	1.02536
ВКБ-метод	1.00184	1.00672	1.01391	1.02276	1.03297
МКР*	1.00184	1.00672	1.01380	1.02268	1.03285
МКЭ**	1.00184	1.00675	1.01376	1.02294	1.03235
Метод Арнольди***	1.00184	1.00677	1.01368	1.02544	1.03296

*Область $r \in [R_1, R_2]$ дискретизирована с шагом $R_2 - R_1/100$.

**Наибольший размер элемента ~$R_2 - R_1/100$.

***Использовано 100 итераций.

Методика решения этого уравнения приведена в работе [28]. В табл.3 и 4 представлены результаты расчета энергии одночастичных состояний в структуре CdS/HgS/CdS приближенными методами, описанными в разделах 3.1–3.5 и численных расчетов, проведенных методом конечных разностей (МКР) [29], методом конечных элементов (МКЭ) [30,31] и итеративным методом Арнольди [32].

Табл.4. Значения безразмерной энергии $\varepsilon_{21} = E_{21}/E_1^{(0)}$ ($n = 2$, $l = 1$) для различных значений параметра $\lambda = L/R_1$

ε_{21} \ λ	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5
Точное решение	4.00184	4.00675	4.01402	4.02306	4.03356
Модель ротатора	4.001853	4.006874	4.014529	4.024507	4.036625
Адиабат. приближение	4.001845	4.006803	4.01436	4.02447	4.03755
Теория возмущений	4.001826	4.006491	4.012789	4.01947	4.02536
ВКБ-метод	4.00184	4.00675	4.01402	4.02306	4.03355
МКР	4.00184	4.00664	4.01413	4.02305	4.03355
МКЭ	4.00184	4.00674	4.01402	4.02309	4.03354
Метод Арнольди	4.0020	4.00723	4.00950	4.01991	4.05054

4. Заключение

Результаты численных расчетов в интервале значений отношения $L/R_1 = \lambda \in [0; 0.4]$ с достаточной точностью совпадают с результатами, полученными аналитическим путем. Для класса наносферических структур, геометрические размеры и физические параметры которых допускают модельные описания (1)–(3), в указанном интервале значений параметра λ приведенные выше приближенные методы вполне адекватно описывают одночастичные состояния носителей заряда в наносферическом гетерослое и позволяют получить соответствующие аналитические выражения для энергетического спектра и огибающих волновых функций частиц.

ЛИТЕРАТУРА

1. **D. Schooss, A. Mews, A. Eychmüller, H. Weller.** Phys. Rev. B, **49**, 17072 (1994).
2. **G.W. Bryant.** Phys. Rev. B, **52**, 16997 (1995).
3. **M. Braun, C. Burda, M.A. El-Sayed.** Phys. Chem. A, **105**, 5548 (2001).
4. **J. Perez-Conde, A.K. Bhattacharjee.** Phys. Stat. Sol. (a), **203**, 1182 (2006).
5. **I.C. Chen, C.L. Weng, Y.C. Tsai.** J. Appl. Phys., **103**, 064310 (2008).
6. **M. Royo, J. Planelles, M. Pi.** Phys. Rev. B, **75**, 033302 (2007).
7. **D.A. Baghdasaryan, D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan.** J. Nanophotonics, **10**, 033508 (2016).
8. **G. Jia**. Optoel. Adv. Mater, **5**, 738 (2011).
9. **D.W. Kim, K. Cho, H. Kim, B. Park, M.Y. Sung, S. Kim.** Sol. St. Commun, **140**, 215 (2006).
10. **M. Braun, S. Link, C. Burda, M. El-Sayed.** Phys. Rev. B, **66**, 205312 (2002).
11. **L. Cao, S. Huang, S. Lü, J. Lin.** J. Col. Interf. Sci., **284**, 516 (2005).
12. **Sh. Jun-Jie.** Chines Phys., **11**, 1286 (2002).
13. **В.А. Арутюнян, Э.М. Казарян, А.А. Саркисян.** Известия НАН Армении, Физика, **46**, 440 (2011).
14. **Q. Zhong, L. Lai**. J. Semicond., **34**, 122002 (2013).
15. **L.J. Lauhon, M.S. Gudiksen, D. Wang, C.M. Lieber.** Nature, **420**, 57, (2002).
16. **Д.Б. Айрапетян, Э.М. Казарян, О.Х. Тевосян.** Известия НАН Армении, Физика, **49**, 190 (2014).
17. **A. Smith, H. Duan, A. Mohs, S. Nie, S.** Adv. Drug Delivery Rev., **60**, 1226 (2008).
18. Metal Nanoparticles in Microbiology, M. Rai, N. Duran, Eds., Heidelberg-Dordrecht-London-New York, Springer Science & Business Media, 2011.
19. **N. Waiskopf, R. Rany, Sh. Itzhak, Y. Lior, S. Hermona, B. Uri Banin.** BioNanoScience, **3**, 1 (2013).
20. **S. Ogli, A. Rostani.** Nano Biotechnology IET, **7**, 14 (2013).
21. **V.A. Haroutyunian.** Thin Solid Films, **446**, 258 (2004).
22. **V.A. Harutyunyan, K.S. Aramyan, H.S. Petrosyan, G.H. Demirjian.** Physica E, **24**, 173, (2004).
23. **В.А. Арутюнян, К.С. Арамян, Г.Ш. Петросян.** ФТП, **38**, 349 (2004).
24. **В.А. Арутюнян.** ФТТ, **45**, 1280 (2003).
25. **L.D. Landau, E.M. Lifshits.** Course of Theoretical Physics. Quantum Mechanics, Non-Relativistic Theory, vol. 3, Oxford, Pergamon, 1974.
26. **V. Harutyunyan.** Effect of Static Electric Fields on the Electronic and Optical Properties of Layered Semiconductor Nanostructures, chapter 1, Bentham Science, 2015.
27. **Э.М. Казарян, А.А Костанян, А.А Саркисян.** Известия НАН Армении Физика, **42**, 218 (2007).
28. **В.А. Арутюнян, С.Л. Арутюнян, Г.О. Демирчян, Н.Г. Гаспарян,** Известия НАН Армении, Физика, **43**, 336 (2008).
29. **А.А. Самарский, Е.С. Николаев.** Методы решения сеточных уравнений. Москва, Наука, 1978.
30. **O.C. Zienkiewicz, R.L. Taylor, O.C. Zienkiewicz, R.L. Taylor, R. L.** The Finite Element Method, vol. 3. London, McGraw-Hill, 1977.
31. **P. Craig.** Phys. Rev. B, **56**, 10404 (1997).
32. **V. Heinrich.** Comp. Phys. Commun., **174**, 441 (2006).

ՄԻԱԷԼԵԿՏՐՈՆԱՅԻՆ ՎԻՃԱԿՆԵՐԸ ՄԵԾ ՇԱՌԱՎՂՈՎ ԿԻՍԱՀԱՂՈՐԴՉԱՅԻՆ ՆԱՆՈԳՆԴԱՅԻՆ ՇԵՐՏՈՒՄ

Վ.Ա. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ, Դ.Բ. ՀԱՅՐԱՊԵՏՅԱՆ, Դ.Ա. ԲԱՂԴԱՍԱՐՅԱՆ

Դիտարկված են միամասնիկային վիճակները գնդային միջուկ/թաղանթ/թաղանթ նանոշերտում ուժեղ քվանտացման ռեժիմում: Դիտարկումն իրականացված է այնպիսի կառուցվածքների համար, որոնցում բաղադրիչների երկրաչափական չափերի հարաբերություններն ու նրանց նյութերի հատկությունների տարբերությունը բերում է նրան, որ կառուցվածքի միջին շերտը լիցքակիրների համար սկսում է հանդես գալ որպես քվանտային փոս: Առաջարկված են մոտավոր լուծման համարժեք մոտեցումներ, որոնք հնարավորություն են տալիս միամասնիկային մոտավորությամբ վերլուծական տեսքով ստանալ լիցքակիրների էներգիական սպեկտրն ու ալիքային ֆունկցիաները կառուցվածքի քվանտային շերտում: Կատարված է նաև վերլուծական մեթոդներով ստացված արդյունքների համեմատություն թվային եղանակով ստացված արդյունքների հետ: Նշված է քվանտացված շերտի հաստության և նրա շառավղի միջև հարաբերության արժեքների այն տիրույթը, որի դեպքում վերլուծական և թվային հաշվարկների արդյունքները համընկնում են բավարար ճշգրտությամբ:

SINGLE-ELECTRON STATES IN SEMICONDUCTOR NANOSPHERICAL LAYER OF LARGE RADIUS

V.A. HARUTYUNYAN, D.B. HAYRAPETYAN, D.A. BAGHDASARYAN

The single-particle states in spherical core/shell/shell nanolayer in strong quantization regime were considered. The ratio between the geometrical dimensions of the corresponding components of the sample was chosen such that the differences between the characteristics of materials form a quantum well for charge carriers in the middle layer. The adequate approximation approaches to analytically determine the energy spectrum and the wave functions of the single-electron states in spherical nanolayer were suggested. A comparison of the results of the analytical and the numerical calculations was performed. The interval of the values of ratio between the layer thickness and its radius at which the results of proposed approximations coincide with the results of numerical calculations with sufficient accuracy was determined.

Известия НАН Армении, Физика, т.51, №4, с.484-496 (2016)

УДК 536.2

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ТЕПЛА В СЕНСОРЕ $W/(La,Ce)B_6/W$ ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ДЕТЕКТОРА

А.А. КУЗАНЯН

Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак, Армения

e-mail: astghik.kuzanyan@gmail.com

(Поступила в редакцию 15 июня 2016 г.)

Представлены результаты компьютерного моделирования процессов распространения тепла в многослойном $W/(La,Ce)B_6/W$ сенсоре термоэлектрического детектора после поглощения одиночного фотона с энергией в диапазоне 1–100 эВ. Подробно изучено влияние параметров компьютерного моделирования на выявление особенностей процессов теплопереноса, протекающих в сенсоре детектора в зависимости от энергии фотона, геометрии сенсора, области поверхности поглотителя, в которой поглотился фотон и глубины, на которой произошла термализация фотона. Оценены энергетическое разрешение и скорость счета сенсора. Показано, что многослойный сенсор с термоэлектриком $(La,Ce)B_6$ способен при температуре 0.5 К регистрировать одиночный фотон в широкой области электромагнитного спектра, он имеет ряд преимуществ по сравнению с сенсором на основе CeB_6, рабочая температура которого 9 К, и перспективен для использования в науке и технике.

1. Введение

Однослойный сенсор термоэлектрического однофотонного детектора подробно исследовался в работах [1–5]. Он содержит поглотитель и теплоотвод из тяжелого металла, которые нанесены на диэлектрическую подложку и соединены друг с другом термоэлектрическим мостиком. Сенсор термоэлектрического однофотонного детектора не требует источника питания, он максимально прост и обеспечивает возможность создания детекторной матрицы из множества элементов с простой электронной структурой. Результаты исследований методом компьютерного моделирования процессов распространения тепла в однослойном сенсоре термоэлектрического однофотонного детектора, содержащего термоэлектрик $(La,Ce)B_6$ или CeB_6, выявили закономерности зависимости энергетического разрешения и скорости счета от геометрических размеров компонентов сенсора [6–9]. Было также показано, что форма временной зависимости возникающего на сенсоре сигнала зависит от области поглотителя, в которой произошло поглощение фотона. Поэтому была предложена концепция многослойного сенсора, которая лишена этого недостатка [10]. Подробные исследования свойств многослойного сенсора $W/CeB_6/W$ для случаев поглощения фотона с энергией 100 эВ и 1 кэВ представлены в [11]. Исследования показали, что генерируемый сенсором сигнал не зависит от расположения области термализации фотона в поглотителе (за исключением краев сенсора), выявили независимость амплитуды генерируемого сигнала от площади сенсора, в то время как увеличение площади сенсора приводит к возрастанию скорости счета фотонов.

Настоящая работа продолжает исследования многослойного термоэлектрического сенсора $W/(La,Ce)B_6/W$. Рассматриваются характеристики сенсора при поглощении фотонов с энергиями от 1 до 100 эВ. Целью работы является также выявление влияния используемых при компьютерном моделировании параметров на полученные результаты.

2. Методика компьютерного моделирования

Расчеты проводились на основе уравнения распространения тепла из ограниченного объема с использованием трехмерного матричного метода. Подробности использованных подходов и приближений приведены в [7]. Там отмечалось, что точность результатов компьютерного моделирования зависит от таких параметров, как размер зоны термализации фотона, шаг изменения размеров зоны термализации (Δx, Δy, Δz) и шаг расчета по времени Δt. В данной работе изменение этих параметров будет осуществлено в широких пределах с целью выявления их влияния на результаты компьютерного моделирования.

Конструкция многослойного сенсора подробно описана в [11]. В настоящей работе рассматривается многослойный сенсор, в котором поглотитель и теплоотвод выполнены из вольфрама (W), термоэлектрический слой из гексаборида лантана–церия $(La,Ce)B_6$ и подложка из сапфира. Высокий термоэлектрический КПД соединения $(La,Ce)B_6$ достигается при 0.5 К. Значения использованных в расчетах физических величин для W, $(La,Ce)B_6$ и Al_2O_3 при температуре 0.5 К, выбранной в качестве рабочей, приведены в табл.1.

Табл.1. Параметры использованных материалов при 0.5 К

Параметр	Материал		
	W	$(La,Ce)B_6$	Al_2O_3
Плотность ρ, кг/м^3	19250	4800	4000
Удельная теплоемкость *c*, Дж/кг×К	2.6×10^{-3}	0.196	9.8×10^{-4}
Теплопроводность λ, Вт/м×К	735	0.94	40
Коэффициент Зеебека *S*, мкВ/К	–	85	–

Ранее нами было показано, что фотоны с энергией 100 эВ (жесткий УФ) поглощаются с ~100% вероятностью в вольфрамовом поглотителе толщиной 0.5 мкм [6]. Для фотонов с энергией 10 эВ и меньше (от мягкого УФ до ИК) эта толщина составляет 0.1 мкм. Именно эти толщины поглотителя использованы в расчетах в качестве минимальных.

3. Результаты и их обсуждение

3.1. Регистрация фотонов с энергией 100 эВ

3.1.1. Поглощение фотонов в центре поглотителя

Рассмотрим поглощение фотонов с энергией 100 эВ в геометрическом центре поверхности поглотителя. Исследования временной зависимости возникающей на термоэлектрическом слое разности температур (ΔT) в различных областях сенсора $W/CeB_6/W$ показали, что наибольшие значения ΔT достигаются в центре сенсора непосредственно под местом термализации фотона [17]. Для сенсора $W/(La,Ce)B_6/W$ наблюдается аналогичная картина. Электрический сигнал сенсора соответствует максимальной разности температур на термоэлектрике. Поэтому в дальнейшем будем сравнивать зависимости $\Delta T(t)$, рассчитанные для области, находящейся непосредственно под зоной термализации фотона.

Результаты расчетов процессов распределения тепла в сенсоре $W/(La,Ce)B_6/W$ для фотонов с энергией ~100 эВ приведены в табл.2. Размеры поверхности сенсора составляли $x = y = 10$ мкм, зоны термализации фотона – $0.8 \times 0.6 \times 0.4$ мкм^3 и толщина поглотителя – 0.5 мкм. Принималось, что фотон попадает в центр поверхности поглотителя и термализуется на глубине 0.2 мкм. В табл.2 приведены: номер расчета, толщина слоя термоэлектрика z_t, шаг расчета по z – Δz, шаг расчета по времени Δt, толщина теплоотвода z_{hs}, энергия фотона E, максимальное значение разности температур ΔT_m, время достижения максимальной разности температур, прошедшее с момента поглощения фотона t_m, максимальная величина возникающей на сенсоре разности потенциала U_m, время спада сигнала t_b до фонового значения разности температур $\Delta T = 10^{-4}$ K и обратная ей величина (скорость счета) R. Величина U_m рассчитывалась с использованием среднего по литературным данным значения коэффициента Зеебека для гексаборида $(La,Ce)B_6$ при 0.5 K (табл.1). Также принималось, что максимальная разность потенциала будет соответствовать максимальной разности температур, возникающей по всей поверхности термоэлектрического слоя, независимо от места вывода электрических контактов с поглотителя фотонов и теплоотвода к регистрирующему устройству.

В верхней части таблицы расположены расчеты (1M–7aM) характеристик сенсоров с различной толщиной термоэлектрического слоя. На рис.1 приведены временные зависимости $\Delta T(t)$ для представленных в табл.2 расчетов 1M–1cM, соответствующих толщине термоэлектрика 1 мкм и параметру расчета Δz = 0.1 мкм. Расчеты проводились с временным шагом Δt: 1M – 0.3 пс, 1aM – 0.015 пс, 1bM – 0.001 пс и 1cM – 0.00005 пс. По приведенным в таблице и рисунке данным видно, что временные зависимости ΔT для толщины термоэлектрического слоя 1 мкм при разных значениях параметра Δt ощутимо отличаются лишь при малых временах (вставка на рис.1), а после достижения максимума кривые практически совпадают. Значения параметров ΔT_m, U_m, $t\Delta T_m$ расчетов 1bM и 1cM отличаются мало (табл.2). Можно сделать заключение, что использование в расчетах параметра Δt меньше 0.001 пс может лишь незначительно уточнить характеристики сенсора, но не может изменить их существенно. Существенное изменение характеристик сенсора происходит при уменьшении в расчетах параметра Δz, что видно из табл.2 при сравнении расчетов 1cM (Δz = 0.1 мкм) и 1dM (Δz = 0.001 мкм). Параметр ΔT_m при этом уменьшается от 1.0302 К до 0.6908 К, т. е. на 31%. Отметим, что это существенное изменение, и продолжим рассмотрение приведенных в табл.2 данных.

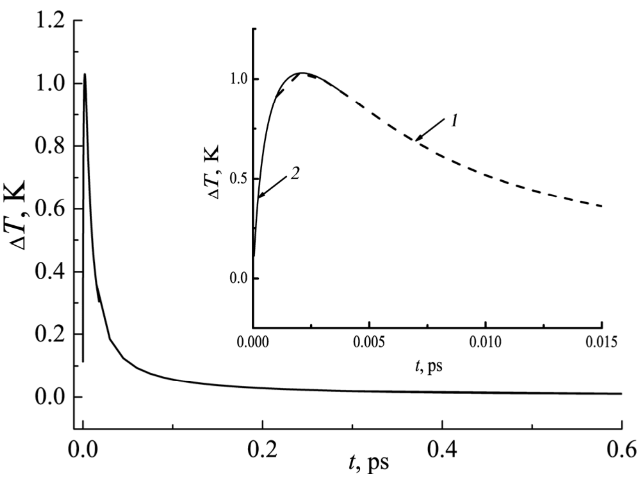

Рис.1. Временная зависимость разности температур ΔT на границах поглотитель–термоэлектрик и термоэлектрик–теплоотвод для толщины термоэлектрического слоя 1 мкм (расчеты 1M–1cM). На вставке шаг по времени Δt равен: *1* – 0.001 пс, *2* – 0.00005 пс.

Полученные при рассмотрении расчетов серии 1M закономерности реализуются также и в расчетах серий 2M (z_t = 0.5 мкм), 3M (z_t = 0.1 мкм) и 4M (z_t = 0.01 мкм). Дополнительной информацией является то, что с уменьшением толщины термоэлектрика значение ΔT_m не изменяется, а скорость счета растет (рис.2). Скорость счета увеличивается особенно резко, когда толщина термоэлектрика становится меньше 0.1 мкм.

Табл.2. Характеристики W/(La,Ce)B6/W сенсора при поглощении фотона в центре поглотителя

Номер расчета	z_t, мкм	Δz, мкм	Δt, пс	z_{hs}, мкм	E, эВ	ΔT_m, К	$t\Delta T_m$, пс	U_m, мкВ	t_b, пс	R, ГГц
1M	1	0.1	0.3	1	100	>0.0189	<0.3	>1.6	1860	0.54
1aM	1	0.1	0.015	1	100	>0.3609	<0.015	>30.68		
1bM	1	0.1	0.001	1	100	1.0296	0.002	87.516		
1cM	1	0.1	0.00005	1	100	1.0302	0.0021	87.567		
1dM	1	0.001	0.00005	1	100	0.6908	0.0015	58.718		
2M	0.5	0.1	0.3	1	100	>0.0189	<0.3	>1.6	862.2	3.16
2aM	0.5	0.1	0.015	1	100	>0.3609	<0.015	>30.68		
2bM	0.5	0.1	0.001	1	100	1.0296	0.002	87.516		
2cM	0.5	0.001	0.00005	1	100	0.6908	0.0015	58.718		
3M	0.1	0.01	0.3	1	100	>0.0163	<0.3	>1.38	18.9	52,9
3aM	0.1	0.01	0.001	1	100	1.0211	0.002	86.794		
3bM	0.1	0.01	0.00005	1	100	1.0214	0.002	86.819		
3cM	0.1	0.001	0.00005	1	100	0.6908	0.0015	58.718		
4M	0.01	0.001	0.3	1	100	>0.0189	<0.3	>1.6	0.6	1666
4aM	0.01	0.001	0.015	1	100	>0.3609	<0.015	>30.68	0.465	2150
4bM	0.01	0.001	0.001	1	100	0.6818	0.002	57.953	0.472	2119
4cM	0.01	0.001	0.00005	1	100	0.6908	0.0015	58.718		
5M [1)]	0.01	0.001	0.001	1	100	0.6711	0.002	57.044	0.478	2092
6M	0.01	0.0005	0.001	1	100				0.519	1927
6aM	0.01	0.0005	0.00005	1	100	0.4770	0.0014			
7M	0.01	0.0001	0.001	1	100					
7aM	0.01	0.0001	0.00005	1	100	0.4770	0.0014			
8M	0.01	0.001	0.001	1.5	100	0.6818	0.002	57.953	0.54	1852
9M	0.01	0.001	0.001	2	100	0.6818	0.002	57.953	0.57	1754
10M	0.01	0.001	0.001	5	100	0.6818	0.002	57.953	0.75	1333
11M	0.01	0.001	0.001	5	110	0.7499	0.002	63.742	0.78	1282
12M	0.01	0.001	0.001	5	90	0.6136	0.002	52.156	0.72	1388
13M	0.05	0.005	0.001	1	100	0.9969	0.002	84.737	4.5	222
14M	0.05	0.005	0.001	1	110	1.0965	0.002	93.203	4.8	208
15M	0.05	0.005	0.001	1	90	0.8972	0.002	76.262	4.5	222
16M	0.01	0.001	0.001	1	99	0.6750	0.002	57.375	0.465	2150
17M	0.01	0.001	0.001	1	101	0.6886	0.002	58.531	0.474	2110

[1)] Размеры зоны термализации $0.8 \times 0.8 \times 0.3$ мкм^3.

Полученные результаты легко объяснить с учетом того факта, что у термоэлектрика $(La,Ce)B_6$ коэффициент теплопроводности значительно меньше, чем у W (табл.1). Термоэлектрический слой является препятствием для распространения тепла в перпендикулярном к поверхности сенсора направлении, и чем меньше толщина этого слоя, тем быстрее выравнивается разность температур на его границах и достигается большая скорость счета. Для сравнения на рис.2 (кривая *2*) приведены значения скорости счета сенсора $W/CeB_6/W$. Как видно, сенсор $W/(La,Ce)B_6/W$ при малых толщинах термоэлектрического слоя обладает значительно большей скоростью счета фотонов с энергией 100 эВ.

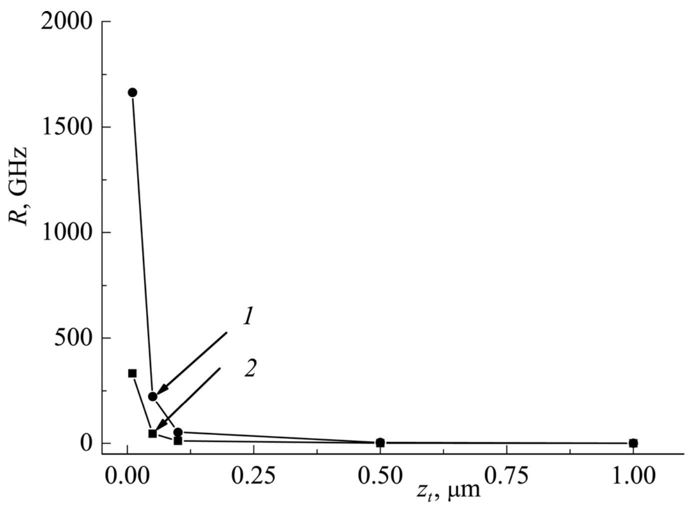

Рис.2. Зависимость скорости счета от толщины термоэлектрического слоя: *1* – по расчетам 1М–4М (для параметра Δt = 0.3 пс) и 13М, *2* – данные сенсора $W/CeB_6/W$ [11].

Значение параметра ΔT_m не зависит от толщины термоэлектрика, если эта толщина не очень мала, а определяется энергией поглощенного фотона и объемом поглотителя, в который проникает тепло из зоны термализации за промежуток времени $t\Delta T_m$. Этим объясняется зависимость ΔT_m от параметра расчета Δz. По той же причине незначительно, но отличаются характеристики сенсора расчета 5М (ΔT_m = 0.6711 К) от характеристик расчета 4bМ (ΔT_m = 0.6818 К). Эти два расчета, при прочих равных параметрах, отличаются размерами зоны термализации.

Расчеты 6М и 7М в табл.2 показывают как изменятся характеристики сенсора, если параметр Δz уменьшить в 2 и 10 раз. Расчеты 6аМ (Δz = 0.001 мкм) и 4сМ (Δz = 0.0005 мкм) отличаются только значением параметра Δz. Уменьшение Δz в 2 раза приводит к уменьшению значения максимального сигнала ΔT_m от 0.6908 К до 0.4770 К (изменение на 31%). При уменьшении Δz еще в 5 раз (расчет 7аМ) значение ΔT_m не изменяется. Можно заключить, что использование в расчетах значений параметра Δz = 0.001 мкм является достаточно хорошим приближением, которое не может приводить к большим ошибкам. Напомним, что чем меньше параметры Δz и Δt, тем продолжительнее процесс расчета при одинаковой производительности компьютера.

Расчеты 8М–10М вместе с расчетом 4bМ показывают, что, при прочих равных условиях, увеличение толщины теплоотвода от 1 мкм до 5 мкм без изменения значения ΔT_{m} приводит к увеличению значения t_b, т. е. времени спада ΔT до фонового значения 10^{-4} К, и уменьшению скорости счета от 2119 ГГц до 1333 ГГц. Факт того, что сенсор реально готов к регистрации следующего фотона при таком выборе фонового значения ΔT, становится очевидным при рассмотрении рис.3, где приведены временные зависимости температур на границе поглотитель–термоэлектрик, термоэлектрик–теплоотвод и их разности – параметр ΔT (расчет 4М). При спаде параметра ΔT до фонового значения температура на обеих границах отличается от начальной температуры сенсора всего на 4 мК.

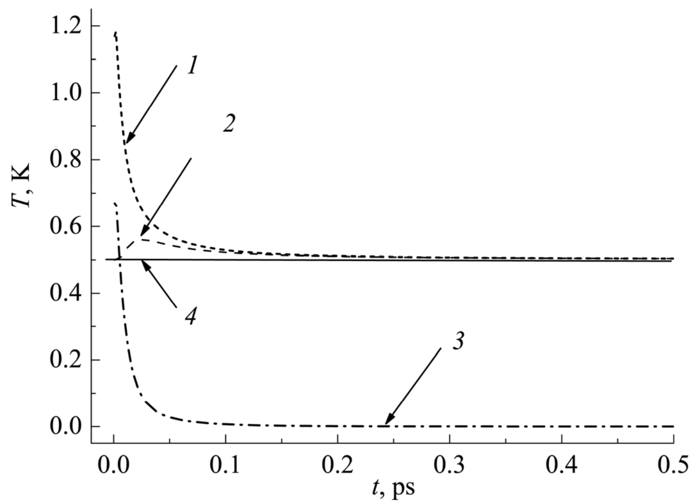

Рис.3. Временная зависимость температур на границах поглотитель–термоэлектрик (*1*) и термоэлектрик–теплоотвод (*2*), разности температур между ними (*3*) по данным расчета 4М и рабочая температура сенсора 0.5 К (*4*).

Следующие три группы расчетов (10М–12М, 13М–15М, 16М–17М) в табл.2 выявляют зависимость характеристик сенсора для случаев поглощения фотонов с несколько отличающимися от 100 эВ энергиями. Расчеты 10М–12М выполнены для энергий фотона 100 эВ, 110 эВ и 90 эВ при толщинах термоэлектрика 10 нм и теплоотвода 5 мкм. Увеличение энергии фотона на 10 эВ приводит к увеличению параметра U_{m} на 5.8 мкВ и уменьшению скорости счета на 50 ГГц. Для расчетов 13М–15М (толщины термоэлектрика 50 нм и теплоотвода 5 мкм) увеличение энергии фотона на 10 эВ приводит к увеличению параметра U_{m} на 8.5 мкВ и уменьшению скорости счета на 14 ГГц. Характеристики первой группы расчетов показывают, что такой сенсор привлекателен для решения задач, где желательно получить большие скорости счета, а второй группы – обеспечение больших значений сигнала.

Отметим, что сенсор $W/(La,Ce)B_6/W$, при одинаковых размерах слоев сенсора и параметрах расчета, обеспечивает получение значительно более высоких характеристик ΔT_m и U_m, чем сенсор $W/CeB_6/W$. Как показано в [11], поглощение фотонов с энергией 100 эВ в сенсоре $W/CeB_6/W$ приводит к появлению сигнала с характеристиками $\Delta T_m \sim 0.0337$ K и $U_m \sim 5$ мкВ, что значительно меньше приведенных в табл.2 для расчета 4cM значений $\Delta T_m = 0.6818$ K и $U_m \sim 57.9$ мкВ. Эти характеристики отличаются также значительно для энергий поглощенного фотона 100 ± 10 эВ. Как указывалось выше, в случае сенсора $W/(La,Ce)B_6/W$ изменение значений этих характеристик составляет $U_m(100\ K) - U_m(90\ K) = 8.5$ мкВ и для сенсора $W/CeB_6/W$ – 0.55 мкВ [11].

Завершается табл.2 расчетами 16M и 17M, демонстрирующими, что изменение энергии фотона в 1 эВ на уровне 100 эв приведет к разнице параметра U_m на 1.2 мкВ.

3.1.2. Поглощение фотонов в различных областях поглотителя

Рассмотрим случаи попадания фотона не в центр поверхности поглотителя и его поглощения на большей, чем рассматривалось выше глубине в 0.2 мкм.

Табл.3. Характеристики $W/(La,Ce)B_6/W$ сенсора при поглощении фотона с энергией 100 эВ в различных областях поглотителя

номер расчета	x, y, z, мкм	$\Delta x, \Delta y, \Delta z$, мкм	ΔT_m, K	$t\ \Delta T_m$, пс	U_m, мкВ	t_b, пс	R, ГГц
4cM	0, 0, 0.2	0.8×0.6×0.4	0.6908	0.0015	58.718	0.472	2119
18F [1)]	−4.5, −4.5, 0.2	0.8×0.6×0.4	0.7020	0.0017	59.67	0.945	1058
19F [1)]	−4.2, −4.2, 0.2	0.8×0.6×0.4	0.6908	0.0015	58.718	0.9011	1110
20F [1)]	−3.9, −3.9, 0.2	0.8×0.6×0.4	0.6808	0.0015	58.633	0.8304	1204
21F [1)]	−3.6, −3.6, 0.2	0.8×0.6×0.4	0.6908	0.0015	58.718	0.7293	1371
22N [1)]	0, −4.5, 0.2	0.8×0.6×0.4	0.6928	0.0015	58.888	0.6496	1539
23N [1)]	0, −4.2, 0.2	0.8×0.6×0.4	0.6908	0.0015	58.718	0.6293	1589
24N [1)]	0, −3.9, 0.2	0.8×0.6×0.4	0.6908	0.0015	58.718	0.5998	1667
25N [1)]	0, −3.6, 0.2	0.8×0.6×0.4	0.6908	0.0015	58.718	0.5626	1777
26M [2)]	0, 0, 0.15	0.8×0.8×0.3	0.825	0.012	7.013	0.318	3145
27M [2)]	0, 0, 0.25	0.8×0.8×0.3	0.985	0.009	8.373	0.315	3174
28M [2)]	0, 0, 0.35	0.8×0.8×0.3	1.308	0.006	11.118	0.3135	3190
29M [2)]	0, 0, 0.45	0.8×0.8×0.3	1.882	0.0045	15.997	0.311	3215

[1)] Толщина поглотителя 0.5 мкм и шаг расчета по времени 0.00005 пс.

[2)] Толщина поглотителя 1 мкм и шаг расчета по времени 0.0015 пс.

В табл.3 приведены результаты расчетов при использовании следующих параметров: энергия фотонов 100 эВ, размеры поверхности сенсора 10 × 10 мкм^2, толщина термоэлектрика 10 нм, шаг расчета по z 1 нм и толщина теплоотвода 1 мкм. В табл.3, кроме параметров включенных в табл.2, приведены координаты центра зоны термализации x, y, z (начало координат расположено в центре поверхности поглотителя) и размеры зоны термализации Δx, Δy, Δz.

В первой строчке табл.3 повторены результаты расчета 4сМ, поглощение фотона с энергией 100 эВ в центре поверхности поглотителя. С этими данными проводится сравнение результатов новых расчетов. Расчеты 18F–21F выполнены для случаев поглощения фотона по диагонали поверхности поглотителя, начиная с угла поглотителя. Отметим, что характеристики ΔT_{m} и $t\Delta T_{\text{m}}$ только у расчета 18F отличаются от данных расчета 4сМ. Несколько иная картина получается для скорости счета. Она значительно ниже в случае термализации фотона в углу поглотителя и возрастает при приближении к центру, но остается меньше для всех расчетов F по сравнению с расчетом 4сМ.

Следующие 4 расчета в табл.3 (22N–25N) выполнены для случая поглощения фотона на прямой, проходящей через середину стороны квадрата поверхности поглотителя и центр. По характеристикам ΔT_{m} и $t\Delta T_{\text{m}}$ от 4сМ отличается только расчет 22N – поглощение фотона у самого края поглотителя. Скорость счета расчетов N несколько больше, чем расчетов F, но остается меньше, чем у 4сМ. Такое различие значений скорости счета расчетов M, N и F понятно. В случае расчетов M тепло в сенсоре рассеивается по всем направлениям, а в случае расчетов N область сенсора для распространения тепла меньше в 2 раза и в случае расчетов F – в 4 раза.

Вернемся к поглощению фотона в центре поверхности поглотителя и рассмотрим случаи термализации фотона на разной глубине (26M–29M). Отметим, что вероятность достижения фотона определенной глубины в поглотителе резко уменьшается по глубине. Рассмотрим случаи термализации вплоть до глубины 0.45 мкм, вероятность достижения которой у фотона близка к нулю. Из данных табл.3 видно, что при увеличении координаты Z центра зоны термализации, то есть приближения зоны термализации к термоэлектрическому слою, характеристика ΔT_{m} растет, а $t\Delta T_{\text{m}}$ – уменьшается, что логично. При этом скорость счета увеличивается. Однако более важно, что скорость счета сенсора по данным расчетов 26M–29M (толщина поглотителя 1мкм) значительно больше, чем в случае поглотителя толщиной 0.5 мкм.

3.2. Регистрация фотонов с энергией 0.9–11 эВ

В табл.4 приведены результаты расчетов при следующих геометрических размерах сенсора и параметрах расчетов: толщины поглотителя, термоэлектрика и теплоотвода составляли 0.1 мкм, 0.01 мкм и 1 мкм, соответственно, размеры

Табл.4. Характеристики сенсора $W/(La,Ce)B_6/W$ при поглощении фотона с энергией 0.9–11 эВ

Номер расчета	E, эВ	ΔT_m, К	$t\,\Delta T_m$, пс	U_m, мкВ	t_b, пс	R, ГГц
30М	11	1.0384	0.0004	88.264	13.55	74
31М	10	0.9440	0.0004	80.24	13.12	76
32М	9	0.8494	0.0004	72.2	12.61	79
33М	7	0.6608	0.0004	56.168	11.44	87
34М	4	0.3776	0.0004	32.1	8.82	113
35М	1.1	0.1038	0.0004	8.823	1.82	549
36М	1	0.0944	0.0004	8.024	1.31	763
37М	0.9	0.0849	0.0004	7.22	1.091	917

зоны термализации $0.4 \times 0.4 \times 0.04$ мкм^3, шаг расчета по z 1 нм, при определении характеристик сенсора ΔT_m, $t\Delta T_m$ и U_m шаг расчета по времени составлял 0.00005 пс, а при определении t_b и R – шаг по времени был равен 0.001 пс.

Из данных табл.4 следует, что мы имеем достаточно большой сигнал по сравнению с предыдущими расчетами, хотя и уменьшили значительно энергию фотона. Это обусловлено тем, что для абсорбции фотона с вероятностью близкой к 1 требуется поглотитель меньшей толщины. Одновременно скорость счета имеет меньшие значения. Расчеты 30М–32М показывают, что на уровне 10 ± 1 эВ разность потенциалов на граничащих с поглотителем и теплоотводом поверхностях термоэлектрического слоя составляет 80.24 ± 8.032 мкВ. Эта характеристика может быть измерена с большим на порядок разрешением, т. е. сенсор

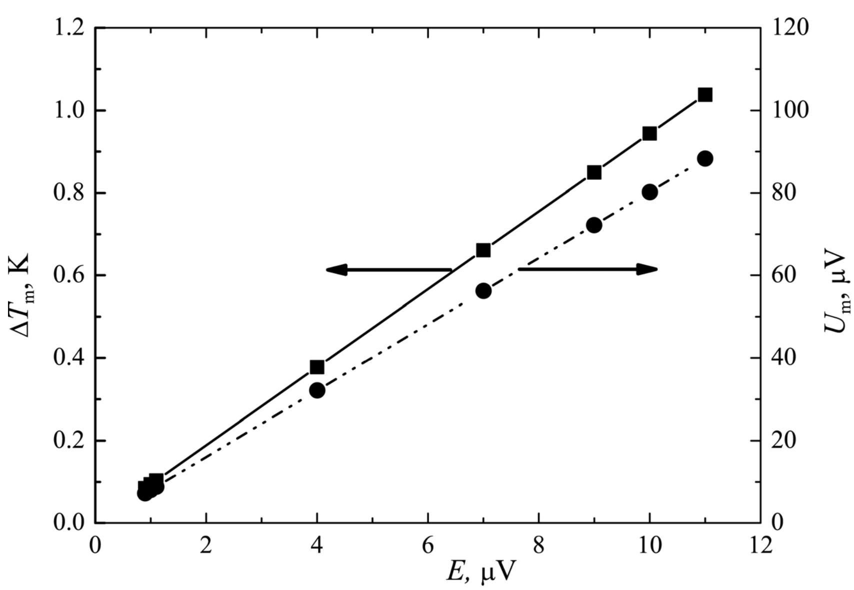

Рис.4. Зависимость характеристик ΔT_m и U_m сенсора $W/(La,Ce)B_6/W$ от энергии поглощенного фотона.

может обеспечить разрешение 0.1 эВ на уровне 10 эВ. Чтобы измерять энергию фотона с разрешением 10% на уровне 1 эВ (расчеты 35M–37M) достаточно суметь измерить разность потенциалов 8.024 ± 0.8 мкВ, а для обеспечения энергетического разрешения 1% точность измерения ΔU должна быть не хуже 80 нВ.

Расчеты 30M–37M демонстрируют, что параметры сенсора ΔT_m и U_m линейно зависят от энергии поглощенного фотона (рис.4). Зависимости $\Delta T_m(E)$ и $U_m(E)$ задаются соответственно уравнениями $\Delta T_m = -2.7 \times 10^{-5} + 0.094E$, $U_m = -4.2 \times 10^{-4} + 8.024E$. Эти данные позволяют утверждать, что используя сенсор $W/(La,Ce)B_6/W$, как и в случае сенсора на CeB_6, можно определять энергию фотона по максимуму возникающего на сенсоре сигнала.

Из данных табл.4 видно, что характеристика $t\Delta T_m$, время достижения максимального значения сигнала, отсчитанное от момента начала процесса, одинакова для всех расчетов. В отличие от этого характеристики t_b и R (рис.5) зависят от энергии поглощенного фотона. Зависимость $t_b(E)$ можно представить в виде полинома $t_b = 3.3199 + 5.5294E - 0.8615E^2 + 0.0673E^3 - 0.002E^4$. Зависимость $R(E)$ аппроксимируется гиперболой $R = 74E/(-0.9 + E)$.

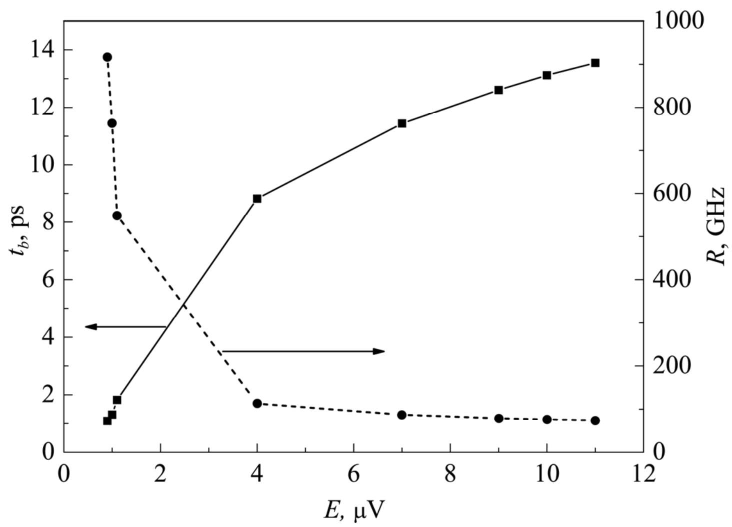

Рис.5. Зависимость времени спада сигнала до фонового значения t_b и скорости счета R от энергии поглощенного фотона.

Из рис.5 видно, что время спада сигнала до фонового значения больше для фотонов с большей энергией. Это вполне логично, т. к. чем больше энергия фотона, тем большее количество тепла образуется в поглотителе в результате его термализации и тем дольше будет продолжаться спад сигнала до фонового значения. В соответствии с этим, скорость счета будет уменьшаться, что мы и видим на рис.5.

4. Заключение

Исследовано влияние параметров компьютерного моделирования на выявление особенностей процессов распространения тепла в многослойном сенсоре термоэлектрического детектора. Показано, что пространственный шаг расчета в 1 нм и временной шаг в 1 фс обеспечивают достаточно хорошее приближение при расчете таких характеристик сенсора, как амплитуда сигнала и скорость счета. Выявлено, что W/(La,Ce)B_6/W сенсор термоэлектрического однофотонного детектора способен обеспечить регистрацию одиночного фотона и определить его энергию в широкой области электромагнитного спектра от ИК до жесткого УФ.

Проведено сравнение характеристик многослойного сенсора с термоэлектрическим слоем из (La,Ce)B_6 и CeB_6. Показано, что в обоих случаях генерируемый сенсором сигнал не зависит от расположения области термализации фотона в поглотителе, за исключением краев сенсора. Одновременно, при прочих равных условиях, сенсор W/(La,Ce)B_6/W обеспечивает получение большего по амплитуде сигнала и большей скорости счета.

Сенсоры с термоэлектриками (La,Ce)B_6 и CeB_6 имеют рабочую температуру 0.5 К и 9 К, соответственно. Более низкие температуры обеспечивают более высокие значения параметра сигнал/шум, но одновременно требуют для работы применения более сложного и дорогого в эксплуатации оборудования. Вместе они предоставляют пользователям возможность выбрать более подходящий вариант для решения конкретной задачи.

Автор выражает благодарность А.С. Кузаняну и А.М. Гуляну за интерес к работе и полезные замечания, В.Р. Никогосяну за помощь в проведении расчетов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке ГКН МОН РА (Армения) и РФФИ (Российская Федерация) в рамках совместных научных программ 15RF-018 и 15-53-05047, соответственно.

ЛИТЕРАТУРА

1. **K. Wood, D. Van Vechten, G. Fritz et al.** Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res., **A 520**, 56 (2004).
2. **A. Gulian, K. Wood, D.Van Vechten et al.** Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res., **A 520**, 36 (2004).
3. **A. Gulian, K. Wood, D. Van Vechten, G. Fritzdet.** J. Mod. Opt., **51**, 1467 (2004).
4. **В.А. Петросян.** Известия НАН Армении, Физика, **46**, 194 (2011).
5. **A.A. Kuzanyan, V.A. Petrosyan, A.S. Kuzanyan.** J. Mod. Phys. Conf. Ser., **350**, 012028 (2012).
6. **A.A. Kuzanyan, A.S. Kuzanyan.** Proc. SPIE, **8773**, 87730L-1(2013).
7. **A.A. Kuzanyan.** Nano Studies, **9**, 93 (2014).
8. **A. Kuzanyan, V. Nikoghosyan, A. Kuzanyan.** Proc. SPIE, **9504**, 95040O (2015).

9. **A. Kuzanian, V. Nikoghosyan, A. Kuzanyan.** Sensors & Transducers, **191**, 57 (2015).
10. **A. Kuzanyan, A. Kuzanyan, V. Nikoghosyan.** Armenian Patent, no. 2946 (2015).
11. **А.А. Кузанян, А.С. Кузанян, В.Р. Никогосян, В.Н.Гурин, М.П. Волков.** Известия НАН Армении, Физика, **51**, 244 (2016).

ՋԵՐՄՈՒԹՅԱՆ ՏԱՐԱԾՄԱՆ ՊՐՈՑԵՍՆԵՐԻ ՀԱՄԱԿԱՐԳՉԱՅԻՆ ՄՈԴԵԼԱՎՈՐՈՒՄԸ ՋԵՐՄԱԷԼԵԿՏՐԱԿԱՆ ԴԵՏՈԿՏՈՐԻ W/(La,Ce)B_6/W ՏՎԻՉՈՒՄ

Ա.Ա. ԿՈՒԶԱՆՅԱՆ

Ներկայացված են ջերմաէլեկտրական դետեկտորի W/(La,Ce)B_6/W բազմաշերտ տվիչում 1–100 էՎ էներգիայով մեկ ֆոտոնի կլանման հետևանքով առաջացած ջերմության տարածման պրոցեսների համակարգչային մոդելավորման արդյունքները: Մանրամասն ուսումնասիրված է մոդելավորման պարամետրերի ընտրության ազդեցությունը դետեկտորի տվիչում ջերմափոխանցման առանձնահատկությունների բացահայտման վրա, որոնք կախված են ֆոտոնի էներգիայից, տվիչի երկրաչափությունից, կլանիչի մակերեսին ֆոտոնի կլանման տիրույթից և խորությունից, որում տեղի է ունեցել ֆոտոնի ջերմավորումը:

Գնահատված են տվիչի էներգետիկ լուծողականությունը և հաշվարկի արագությունը: Ցույց է տրված, որ (La,Ce)B_6 ջերմաէլեկտրիկով տվիչը ունակ է գրանցել միակի ֆոտոններ էլետրամագնիսական սպեկտրի լայն տիրույթում 0.5 Կ ջերմաստիճանում: Նշված տվիչը ունի մի շարք առավելություններ CeB_6 –ի վրա հիմնված տվիչի համեմատ, որի աշխատանքային ջերմաստիճանն ե 9 Կ, և հեռանկարային է գիտության մեջ և տեխնիկայում օգտագործվելու համար:

COMPUTER MODELING OF HEAT DISTRIBUTION PROCESSES IN W/(La,Ce)B_6/W SENSOR OF THERMOELECTRIC DETECTOR

A.A. KUZANYAN

The results of computer modeling of the processes of heat distribution in W/(La,Ce)B_6/W multilayer sensor of the thermoelectric detector after the absorption of single photons with 1–100 eV energies are presented. The influence of the computer modeling parameters choice on revelation of the peculiarities of heat transmission processes occurring in the sensor of detector depending on the photon energy, the sensor geometry, the absorption area of the absorber surface and the depth of photon thermalization is investigated in details. The energy resolution and count rate of sensor are evaluated. It is shown that the multilayer sensor with (La,Ce)B_6 thermoelectric is capable to register single photon in a wide range of the electromagnetic spectrum at 0.5 K temperature, it has advantages in comparison with the sensor based on of CeB_6, operating temperature of which is 9 K, and it is perspective to be used in the science and technology.

Известия НАН Армении, Физика, т.51, №4, с.497-507 (2016)

УДК 548.0

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ЛИОТРОПНЫХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛАХ, ВЫЗВАННЫЕ ИЗМЕНЕНИЕМ КОНЦЕНТРАЦИИ И γ-ИЗЛУЧЕНИЕМ

Д.А. БАДАЛЯН, М.А. СТЕПАНЯН, Г.Г. БАДАЛЯН*

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

*e-mail: hbadal@ysu.am

(Поступила в редакцию 15 июля 2016 г.)

Разработана молекулярно-статистическая теория фазовых переходов в лиотропных жидких кристаллах, которая описывает фазовые переходы между изотропной (мицеллярной), нематической и ламеллярной фазами. Получены уравнения, описывающие зависимости параметров ориентационного и трансляционного дальнего порядка от концентрации. Показано, что в зависимости от значений микроскопических констант модели фазовый переход нематическая фаза–ламеллярная фаза может быть переходом как первого, так и второго рода. Рассмотрено влияние интенсивного и низкоинтенсивного γ-излучения на указанные фазовые переходы. Показано, что облучение изменяет константы модели, отвечающие за фазовые переходы. Исходя из этого, можно предполагать, что γ-излучение влияет на ход зависимости параметров дальнего порядка от концентрации, а также изменяет величины критических концентраций фазовых переходов и даже род фазового перехода.

1. Введение

Как известно, лиотропные жидкие кристаллы (ЛЖК) получаются путем растворения амфифильных веществ в полярных растворителях. Чаще всего это водные растворы веществ, молекулы которых имеют жесткую структуру (ДНК, некоторые синтетические полипептиды и др.). ЛЖК могут быть образованы также растворенными в воде цилиндрическими мицеллами – агрегатами амфифильных молекул [1–3]. В зависимости от концентрации растворенного вещества в указанных системах появляется ориентационный и/или трансляционный порядок, который, как полагают, главным образом является результатом взаимодействия стержневидных частиц друг с другом, тогда как взаимодействие их с растворителем играет второстепенную роль [4].

Механизмы фазовых переходов и термодинамические характеристики ЛЖК, в отличие от обычных термотропных жидких кристаллах (ТЖК), изучены крайне мало. Поэтому является важным изучение термодинамических свойств ЛЖК на основе молекулярно-статистических моделей. Целью настоящей работы является микроскопическое исследование фазовых переходов в ЛЖК, образованных из стержневидных частиц (далее – стержней). Соответствующая теория представляет собой распространение метода, развитого ранее для описания ориентационного и трансляционного дальнего порядка, в термотропных жидких кристаллах (ТЖК) и органических твердых растворах [5,6].

2. Свободная энергия ЛЖК

Для дальнейшего развития теории необходимо знать свободную энергию F, зависящую от параметров ориентационного и трансляционного дальнего порядка. Выражение для F получим, используя обобщенную модель решеточного газа. Рассмотрим идеализированную систему жестких стержней в инертном бесструктурном растворителе. Центры тяжести стержней и молекул растворителя располагаются в узлах некоторой пространственной решетки с малым размером периода. Стержни в каждом узле могут принимать произвольные ориентации, описываемые единичными векторами

$$\mathbf{m} = \left(\sin\theta_{\mathbf{m}}\cos\varphi_{\mathbf{m}}, \sin\theta_{\mathbf{m}}\sin\varphi_{\mathbf{m}}, \cos\theta_{\mathbf{m}}\right),$$

где θ и φ – сферические координаты. Парные энергии взаимодействия стержней, находящихся в узлах $\mathbf{r}$ и $\mathbf{r}'$ имеющих ориентации $\mathbf{m}$ и $\mathbf{m}'$, определяются потенциалами $V_{\mathbf{m},\mathbf{m}'}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$. Предполагается, что ориентации $\mathbf{m}$ и $\mathbf{m}'$ эквивалентны.

Допустим, что ориентации частиц дискретны и их число равняется ν. В произвольном узле $\mathbf{r}$ может возникнуть $\nu+1$ различных состояний, так как узел может быть занят как молекулой растворителя, так и стержнем с одной из ν ориентаций. Введем случайные функции $c_\alpha(\mathbf{r})(\alpha = 0,1,...,\nu)$, равные единице, если узел $\mathbf{r}$ находится в состоянии α, и нулю – в обратном случае (индекс $\alpha = 0$ характеризует то состояние, когда узел занят молекулой растворителя). Функции $c_\alpha(\mathbf{r})$ подчиняются условиям нормировки

$$\sum_{\alpha=1}^{\nu} c_\alpha(\mathbf{r}) = 1, \tag{2.1}$$

означающим, что произвольный узел $\mathbf{r}$ занят либо стержнем, либо молекулой растворителя.

Дополнительно имеем

$$\sum\nolimits_{\mathbf{r}} c_0(\mathbf{r}) = N_{\text{solv}} = N(1-c), \tag{2.2}$$

где N_{solv} – число молекул растворителя, N – полное число узлов решетки и c – концентрация стержней. Следует обратить внимание на модель ЛЖК многокомпонентного твердого раствора: если в ЛЖК каждый узел решетки занят как молекулой растворителя, так и стержнем с ν различными ориентациями, то в (ν +1)-компонентном твердом растворе замещения в каждом узле также может возникнуть $\nu+1$ различных состояний в зависимости от сорта атома, попадающего в этот узел. Поэтому общие результаты, полученные в работе [6], могут быть перенесены на модель с дискретными ориентациями частиц. Если же учесть, что в ЛЖК ориентации меняются непрерывно, то суммирование по дискретным ориентациям необходимо заменить интегрированием. Тогда конфигурационная свободная энергия ЛЖК в приближении самосогласованного поля принимает вид

$$F=\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}\int V_{\mathbf{mm}'}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\rho_{\mathbf{m}}(\mathbf{r})\rho_{\mathbf{m}'}(\mathbf{r}')\,d\Omega_{\mathbf{m}}\,d\Omega_{\mathbf{m}'}$$
$$+kT\sum_{\mathbf{r}}(1-n(\mathbf{r}))\ln(1-n(\mathbf{r}))+kT\sum_{\mathbf{r}}\int\rho_{\mathbf{m}}(\mathbf{r})\ln\rho_{\mathbf{m}}(\mathbf{r})\,d\Omega_{\mathbf{m}}, \tag{2.3}$$

где $n(\mathbf{r})=1-\langle c_0(\mathbf{r})\rangle$ – вероятность нахождения стержня в узле $\mathbf{r}$, $\rho_{\mathbf{m}}(\mathbf{r})d\Omega_{\mathbf{m}}=\langle c(\mathbf{r})\rangle d\Omega_{\mathbf{m}}$ – одновременная вероятность нахождения стержня в узле $\mathbf{r}$ в малом телесном угле $d\Omega_{\mathbf{m}}=\sin\theta_{\mathbf{m}}\,d\theta_{\mathbf{m}}\,d\varphi_{\mathbf{m}}$ вокруг ориентации $\mathbf{m}$, T – абсолютная температура, k – постоянная Больцмана, <...> обозначает усреднение по ансамблю невзаимодействующих частиц при дополнительных условиях (ср. (2.1) с (2.2)) и

$$\int\rho_{\mathbf{m}}(\mathbf{r})d\Omega_{\mathbf{m}}=n(\mathbf{r});\ \sum_{\mathbf{r}}n(\mathbf{r})=c. \tag{2.4}$$

В дальнейшем мы будем пренебрегать слабой корреляцией между ориентациями и положениями центров тяжести стержней. Это предположение приводит к приближенному равенству

$$\rho_{\mathbf{m}}(\mathbf{r})=n(\mathbf{r})\rho_{\mathbf{m}}^{0}, \tag{2.5}$$

где $\rho_{\mathbf{m}}^{0}$ – вероятность ориентации стержня в малом телесном угле $d\Omega_{\mathbf{m}}$ вокруг направления $\mathbf{m}$ при условии, что узел $\mathbf{r}$ занят стержнем.

Для дальнейшего расчета допустим, что потенциал $V_{\mathbf{mm}'}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ описывается функцией

$$V_{\mathbf{mm}'}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')=\tilde{U}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')-\tilde{\Phi}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')P_2(\cos\gamma_{\mathbf{mm}'}), \tag{2.6}$$

где первый член характеризует центральные силы электростатического отталкивания, второй – ориентационные (анизотропные и дисперсионные) силы притяжения, $P_2(\cos\gamma_{\mathbf{mm}'})$ – полином Лежандра второй степени и $\gamma_{\mathbf{mm}'}$ – угол между ориентациями $\mathbf{m}$ и $\mathbf{m}'$.

Подставляя (2.5) и (2.6) с учетом (2.4) в (2.3), приходим к функционалу свободной энергии, содержащей две независимые функции распределения $\rho_{\mathbf{m}}^{0}$ и $n(\mathbf{r})$. Функцию $\rho_{\mathbf{m}}^{0}$ для одноосных ЛЖК всегда можно представить в виде разложения по полиномам Лежандра

$$\rho_{\mathbf{m}}^{0}=\frac{1}{4\pi}+\sum_{k=1}^{\infty}\frac{4k+1}{4\pi}P_{2k}(\cos\theta_{\mathbf{m}})S_{2k}, \tag{2.7}$$

где S_{2k} – коэффициенты разложения, играющие роль параметров ориентационного дальнего порядка.

Функция $n(\mathbf{r})$ для слоистых структур имеет вид

$$n(\mathbf{r}) = c + \frac{\eta}{2} e^{i\mathbf{k}_0\mathbf{r}}, \tag{2.8}$$

где η – параметр трансляционного дальнего порядка и $2\mathbf{k}_0 = 2\pi G$ (G – вектор обратной решетки решеточного газа).

Таким образом, из формул (2.3)–(2.8) получим

$$\begin{aligned} F = N\Bigg\{ &\frac{1}{8}U(\mathbf{k}_0)\eta^2 - \frac{1}{2}\Phi(0)S_2^2 - \frac{1}{8}\Phi(\mathbf{k}_0)\eta^2 S_2^2 \\ &+ \frac{kT}{2}\Bigg[\left(c+\frac{\eta}{2}\right)\ln\left(c+\frac{\eta}{2}\right) + \left(c-\frac{\eta}{2}\right)\ln\left(c-\frac{\eta}{2}\right) \\ &+ \left(1-c+\frac{\eta}{2}\right)\ln\left(1-c+\frac{\eta}{2}\right) + \left(1-c-\frac{\eta}{2}\right)\ln\left(1-c-\frac{\eta}{2}\right)\Bigg] \\ &+ kTc\int \rho_{\mathbf{m}}^0 \ln \rho_{\mathbf{m}}^0 \, d\Omega_{\mathbf{m}} \Bigg\}, \end{aligned} \tag{2.9}$$

где

$$\Phi(0) = \sum_{\mathbf{r}} \widetilde{\Phi}(\mathbf{r}), \quad \Phi(\mathbf{k}_0) = \sum_{\mathbf{r}} \widetilde{\Phi}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}_0\mathbf{r}}, \quad U(\mathbf{k}_0) = \sum_{\mathbf{r}} \widetilde{U}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}_0\mathbf{r}}.$$

3. Уравнения для параметров ориентационного и трансляционного дальнего порядка

Найдем уравнения для параметров η и S_{2k} из условий минимума свободной энергии

$$\frac{\partial F}{\partial \eta} = 0, \quad \frac{\partial F}{\partial S_{2k}} = 0 \quad (k = 1,2,3,\ldots). \tag{3.1}$$

Подставляя (2.9) в (3.1), получим замкнутую систему уравнений для параметров η и $S_{2k} \equiv S$:

$$\ln\frac{\left(1-c+\frac{\eta}{2}\right)\left(c+\frac{\eta}{2}\right)}{\left(1-c-\frac{\eta}{2}\right)\left(c-\frac{\eta}{2}\right)} = \frac{gS^2 - b}{\tau}\eta, \tag{3.2}$$

$$S = \frac{3}{4m^2}\left(\frac{e^{m^2}}{D(m)} - 1\right) - \frac{1}{2}, \tag{3.3}$$

где $g = \dfrac{\Phi(\mathbf{k}_0)}{\Phi(0)}$, $b = \dfrac{U(\mathbf{k}_0)}{\Phi(0)}$ и $\tau = \dfrac{kT}{\Phi(0)}$ – безразмерная температура, $D(m)$ – интеграл Доусона [7]: $D(m) = \int_0^0 e^{m^2 x^2} dx$, $m^2 = \dfrac{3S}{2\tau}\left(1 + \dfrac{g}{4c}\eta^2\right)$. Остальные параметры S_{2k} $(k < 1)$ выражаются через параметр S.

Система уравнений (3.2) и (3.3) при заданных τ, b и g дает зависимость параметров порядка S и η от концентрации C. Для разбавленных растворов $(c \ll 1)$ эта система имеет тривиальное решение $S = \eta = 0$, описывающее изотропный (мицеллярный) раствор. С увеличением концентрации твердого вещества могут возникнуть нетривиальные решения $\eta = 0,\ S \neq 0$ и $\eta \neq 0,\ S = 0$, которые описывают лиотропную нематическую и ламеллярную фазы.

Концентрации, которые приводят к потере устойчивости изотропной и нематической фаз, определяются из линеаризированных уравнений (3.2) и (3.3), в результате чего получается

$$\frac{1}{c_L^*(1 - c_L^*)} = \frac{g\,S_L^{*2} - b}{\tau}, \quad c_N^* = 5\tau\,, \tag{3.4}$$

где c_L^*, c_N^* – концентрации потерь устойчивостей нематической и изотропной фаз, S_L^* – значение параметра S в точке c_L^*, которая совпадает с критической концентрацией c^0 фазового перехода второго рода, если он имеет место, и несколько больше c^0, если происходит фазовый переход первого рода.

В общем случае можно упростить уравнения (3.2) и (3.3), для этого нужно учесть, что в ламеллярной фазе ориентационный дальний порядок сильно насыщен $(s \geq 0.8)$, поэтому $m^2 \gg 1$. Тогда, воспользовавшись разложением функции $D(m)$ при больших m, $D(m) \approx \dfrac{e^{m^2}}{2m^2}\left(1 + \dfrac{1}{2m^2}\right)$, получим приближенное уравнение для параметра порядка S:

$$S = \frac{1}{2}\left(1 + \sqrt{1 - \frac{4\tau}{a}}\right), \tag{3.5}$$

где $a = c + \dfrac{g}{4c}\eta^2$. Исключив параметр S из формулы (3.2) с помощью (3.5), получим уравнение относительно параметра η. Зная η, по формуле (3.5) найдем значение S.

В ламеллярной фазе, ограничиваясь областью состояний с малыми значениями параметра η, разложим левую и правую части уравнения (3.2) по степеням η. Сохранив в разложении лишь несколько первых членов, включая слагаемые $\sim\eta^4$, получим уравнение

$$Z_1 + Z_2\eta^2 + Z_3\eta^4 = 0 \tag{3.6}$$

$$Z_1 = \frac{1}{c(1-c)} - g\left(\frac{1+R}{2\tau} - \frac{1}{c}\right) + \frac{b}{\tau},$$

$$Z_2 = \frac{1}{12}\left(\frac{1}{c^3} + \frac{1}{(1-c)^3}\right) - \frac{g^2}{4c^3}\frac{1+R}{R}, \tag{3.7}$$

$$Z_3 = \frac{1}{80}\left(\frac{1}{c^5} + \frac{1}{(1-c)^5}\right) + \frac{g^3}{16c^5}\frac{1+R}{R},$$

$$R = \sqrt{1 - \frac{4\tau}{c}}.$$

Если переход из нематической фазы в ламеллярную может произойти по механизму перехода второго рода, то в точке потери устойчивости исходной фазы $\eta = 0$. Концентрация потери устойчивости c_L^*, согласно формуле (3.6), определяется из условия

$$Z_1(g, b, \tau, c_L^*) = 0. \tag{3.8}$$

При фазовом переходе первого рода параметры η и S изменяются скачкообразно. Концентрация перехода c_L^0, а также величины скачков параметров порядка определяются из условия равенства свободных энергий $F(0, S_L^0)$ при $\eta = 0$ и $S = S_L^0$ в нематической фазе и $F(\eta_L^0, \tilde{S}_L^0)$, соответствующей не равному нулю значению параметра η_L^0 в ламеллярной фазе. Также используются уравнения для η (3.6) и для S, получающееся из формулы (3.5) с учетом малости параметра η в исследуемой области. Последнее уравнение имеет вид

$$S = \frac{1}{2}\left\{1 + R\left[1 + \frac{g\tau\eta^2}{2R^2c^3}\left(1 - \frac{g^2\eta^2}{4c^2}\right)\right]\right\}. \tag{3.9}$$

Для нематической фазы формула (3.9) принимает простой вид

$$S = (1+R)/2. \tag{3.10}$$

Эта формула при критической концентрации $c_N^0 = 4\tau$ приводит к фазовому переходу первого рода: изотропная жидкость–лиотропный нематик. Скачок параметра S в этой точке равняется $S_N^0 = 0.5$. Более точное рассмотрение, основанное на формуле (3.3), дает $c_N^0 = 4.54\tau$; $S_N^0 = 0.43$ известно из теории ТЖК [4]. Сравнение показывает, что даже в точке фазового перехода в нематик приближение (3.9) приводит к ошибке, не превышающей 12–16%.

4. Исследование зависимости параметров η и S от концентрации

Исследуем зависимость параметров дальнего порядка η и S от концентрации при разных значениях *g*, *b* и τ. Корни биквадратного уравнения (3.6) получаются из формулы

$$\sigma_{\pm} = \frac{2C^2(-\tilde{Z}_2 \pm \sqrt{D})}{\tilde{Z}_3}. \qquad (4.1)$$

Здесь $\sigma = \eta^2$, $D = \tilde{Z}_2^2 - 4\tilde{Z}_1\tilde{Z}_3$, $\tilde{Z}_i$ – коэффициенты, которые связаны с прежними коэффициентами (3.7) следующими соотношениями:

$$\tilde{Z}_1 = cZ_1, \quad \tilde{Z}_2 = 4c^3 Z_2, \quad \tilde{Z}_3 = 16c^5 Z_3. \qquad (4.2)$$

Из-за требования $\sigma > 0$ вычисление корней уравнения (3.6) сильно зависит от знака коэффициентов $\tilde{Z}_l$. В связи с этим в формулах (3.7) нужно взять $g > 0$ (в противном случае, возникновение ламеллярной фазы является затруднительным). Из этого предположения следует, что $\tilde{Z}_3 > 0$, а коэффициенты $\tilde{Z}_1$ и $\tilde{Z}_2$ могут быть как положительными, так и отрицательными. В общем случае возможны следующие варианты:

$$1\begin{cases}\tilde{Z}_1 \geq 0 \\ \tilde{Z}_2 \geq 0\end{cases}, \quad 2\begin{cases}\tilde{Z}_1 \leq 0 \\ \tilde{Z}_2 \geq 0\end{cases}, \quad 3\begin{cases}\tilde{Z}_1 \geq 0 \\ \tilde{Z}_2 \leq 0\end{cases}, \quad 4\begin{cases}\tilde{Z}_1 \leq 0 \\ \tilde{Z}_2 \leq 0\end{cases}. \qquad (4.3)$$

Анализ показывает, что из-за требований $\sigma > 0$ и $D \geq 0$ вариант 1 исключается, так как в этом случае получаются отрицательные корни. В вариантах 2 и 4 $\sqrt{D} > |\tilde{Z}_2|$ и имеется один положительный корень σ_+. В случае варианта 3 $\sqrt{D} < |\tilde{Z}_2|$ и оба корня (σ_+, σ_-) равенства (4.1) положительные.

Таким образом, прежде чем получить кривые зависимости параметров дальнего порядка от концентрации, необходимо исследовать концентрационную зависимость коэффициентов $\tilde{Z}_l$. На рис.1 приведены зависимости $\tilde{Z}_l$ при константах $g = 0.30$, $b = 0.18$ и $\tau = 0.02$. Из рисунка следует, что этот случай соответствует второму варианту (4.3), т. е. уравнение (4.1) имеет один положи-

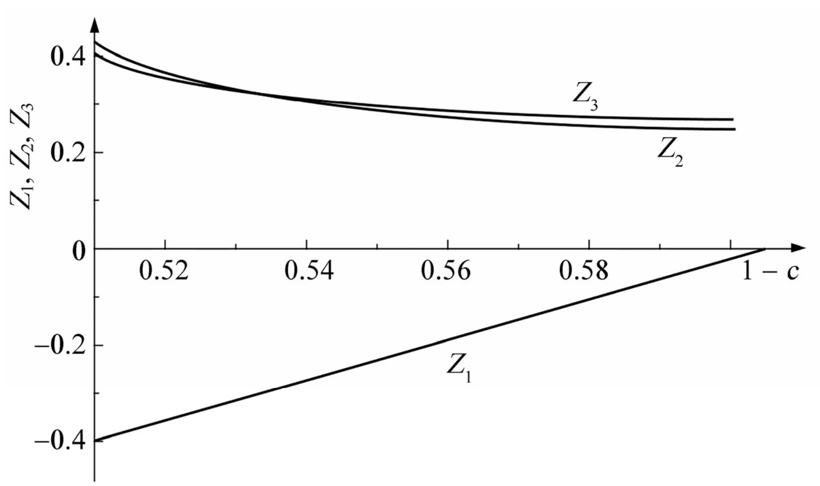

Рис.1. Зависимости коэффициентов Z_1, Z_2 и Z_3 от концентрации растворителя $(1 - c)$ и ($b = 0.18$, $g = 0.3$ и $\tau = 0.02$).

тельный корень. Из-за пересечения зависимости $\tilde{Z}_1$ с осью $1-c$ можно заключить, что в рассмотренном случае возможен переход в ламеллярную фазу с точкой потери устойчивости нематической фазы $c_L^* = 0.365$.

На рис.2 приведены концентрационные зависимости параметров S и σ_+, соответствующие формулам (3.9) и (4.1) с теми же константами. Из рисунка следует, что параметр σ_+ непрерывно убывает с увеличением $1-c$ и при концентрации c_L^* обращается в нуль. Следовательно, здесь происходит фазовый переход второго рода.

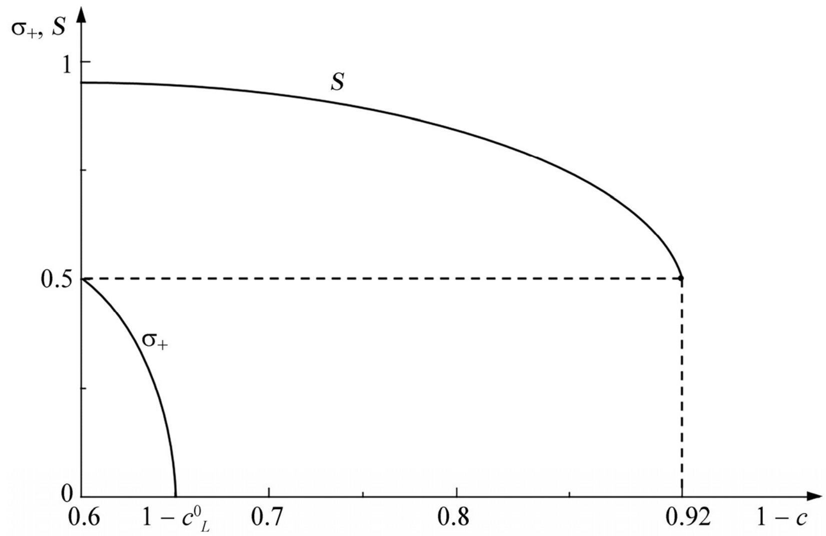

Рис.2. Зависимости параметров σ_+ и S от концентрации растворителя $(1-c)$ и ($b = 0.18$, $g = 0.3$ и $\tau = 0.02$).

Рассмотрим другой случай: не меняя τ, увеличим константы взаимодействия g и b ($g = 0.45$, $b = 0.304$ и $\tau = 0.02$). Анализ кривых $\tilde{Z}_l$ показывает, что здесь имеет место вариант 3 (уравнение (4.3)), т. е. оба корня уравнения (4.1) положительны. Зависимости функций η и S от $1-c$ показаны на рис.3. Из рисунка видно что в интервале между концентрациями $1-c_L^*$ и $1-\tilde{c}$ ($1-\tilde{c}$ – точка перегиба кривой η) каждой точке $1-c$ соответствует два значения параметра η. Как известно, такая ситуация характерна для фазовых переходов первого рода в упорядочивающихся сплавах [8]. Чтобы найти решение, соответствующее равновесному значению параметра дальнего порядка при данной концентрации ЛЖК, необходимо исследовать зависимость свободной энергии как от параметра дальнего порядка, так и при температурном фазовом переходе первого рода. Такое исследование показывает, что участок *AB* соответствует минимуму свободной энергии. Участок ВС соответствует метастабильным состояниям. Значения η в интервале *CD* соответствуют максимуму *F*, и эти состояния не реализуемы. Как уже было сказано, концентрация фазового перехода первого рода определяется

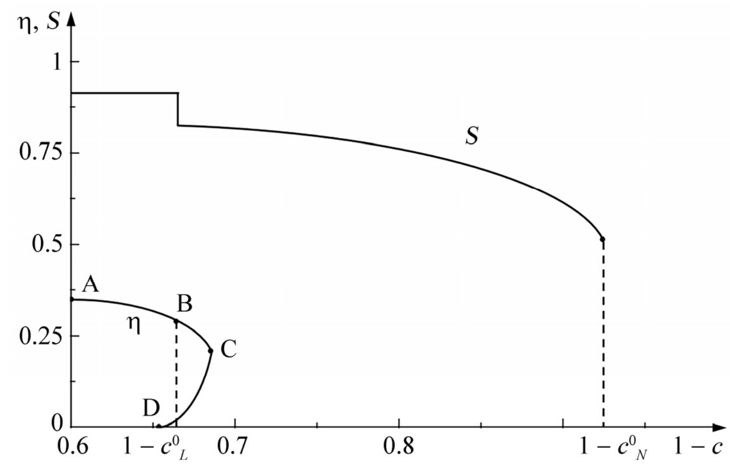

Рис.3. Зависимости параметров η и S от концентрации растворителя $(1 - c)$ и ($b = 0.304$, $g = 0.45$ и $\tau = 0.02$).

из условия равенства свободных энергий при $\eta = 0$ и $\eta = \eta_L^0$. В результате расчетов имеем: $c_L^0 \approx 0.333$ и $\eta_L^0 \approx 0.257$.

5. Влияние γ-излучения на фазовые переходы в ЛЖК

Обсудим здесь влияние внешнего γ-излучения на фазовые переходы, наблюдаемые в ЛЖК, а также рассмотрим применение развитой здесь модели ЛЖК к данной проблеме. Важность этой проблемы связана с тем, что жидкие среды организма (цитоплазма, плазма крови, лимфа и т. д.) являются одним из видов ЛЖК, которые при температуре около 37°C находятся в непосредственной близости к точке фазового перехода, поэтому они могут реагировать даже на слабые внешние сигналы, например, на низкоинтенсивное лазерное излучение, применяемое в медицине [9]. Считается, что одним из механизмов действия слабого лазерного излучения является изменение физико-химических характеристик растворителя – составной части ЛЖК. Необходимо принять во внимание, что из-за слабой интенсивности света (несколько мВт/см²) тепловые эффекты ничтожно малы. Учитывая, что электростатическое отталкивание ионов в электролите описывается потенциалом Дебая–Хюккеля, который сильно зависит от диэлектрической проницаемости растворителя, можно предполагать, что в первую очередь слабое излучение изменяет диэлектрическую проницаемость. С точки зрения развитой здесь теории это изменение влияет на константу b.

Воздействие γ-излучения на ЛЖК при высокой концентрации амфифильного вещества γ-квантами приводит к фазовым переходам двух типов: переходу от ламеллярной фазы к кристаллической (α-фаза) и переходу от фазы с упорядоченными хвостами (кристаллическое состояние) к фазе с неупорядоченными хвостами, называемой «плавлением» хвостов [10–13]. При малых концентрациях амфифильного вещества имеет место фазовый переход нематическая фаза–ламеллярная фаза. В результате радиации происходит смещение точки перехода в сторону малых значений концентрации амфифильного вещества.

Результаты воздействия γ-излучения на ЛЖК зависят от внешних параметров и состояния ЛЖК. Как известно, ионизирующая природа γ-лучей приводит к изменению заряда как ламелл или мицелл, так и растворителя. В первом случае имеет место прямое влияние γ-лучей, а во втором – опосредованное. При прямом воздействии увеличение ионного заряда приводит к росту сил электростатического отталкивания (константа b). Одновременно происходит пероксидное окисление хвостов молекул, которое уменьшает долю вандерваальсовых сил притяжения (константа g). В результате нарушения баланса этих сил силы отталкивания превышают силы притяжения, приводящие к набуханию ламелл. Это в свою очередь приводит к разрыхлению ламелл. Результатом облучения является также выделение тепловой энергии, приводящее к повышению температуры системы (константа τ) и «плавлению» области нагревания.

6. Заключение

Из вышеизложенного следует, что теория фазовых переходов в ЛЖК интерпретируется переходом из изотропной (мицеллярной) фазы в лиотропную нематическую, а также переходом между нематической и ламеллярной фазами. Получены уравнения для описания зависимости параметров ориентационного и трансляционного дальнего порядка от концентрации. Показано, что в зависимости от констант модели фазовый переход от нематической фазы в ламеллярную может быть переходом как первого, так и второго рода.

Влияние γ-радиации на ЛЖК приводит к изменению всех констант модели, отвечающих за равновесные термодинамические свойства кристалла. Это означает, что радиация изменяет ход зависимости параметров дальнего порядка от концентрации, влияя на критические концентрации фазовых переходов, а также на род фазового перехода.

Работа выполнена в рамках проекта МНТЦ А-2089.

ЛИТЕРАТУРА

1. **P. Ekwall.** Advances in Liquid Crystals. V.1, New York, Academic Press, 1975.
2. **А.А. Веденов.** Физика растворов. Москва, Наука, 1984.
3. **А.С. Сонин.** УФН, **153**, 273 (1987).
4. **П. де Жен.** Физика жидких кристаллов. Москва, Мир,1977.
5. **Д.А. Бадалян.** Кристаллография, **27**, 20 (1982).
6. **Д.А. Бадалян, Э.С. Абовян.** Кристаллография, **28**, 629 (1983).
7. **Е. Янке, Ф. Эмде, Ф. Леш.** Специальные функции. Москва, Наука, 1977.
8. **М.А. Кривоглаз, А.А. Смирнов.** Теория упорядочивающихся сплавов. Москва, Физматгиз, 1958.

9. **T.I. Karu.** The Science of Low Power Laser Therapy. London, Gordon & Breach Sci. Publ., 1998.
10. **F.M. Ali, S.E. Abo-Neima, H.A. Motaweh Fayza El-Akad, A.M. El-Khatib, A.A. Sakr.** Joint Institute for Nuclear Research (JINR), Dubna, 2013, E3-2013-22.
11. **N.S. Selim, O.S. Desouky, S.M. Aly, M.A. Ibrahim, H.A. Ashry.** Romanian J. Biophys., **19**, 171 (2009).
12. **A.D. Kitchen, G.F. Mann, J.F. Harrison, A.J. Zuckerman.** Vox Sanguinis, **56**, 223 (1989).
13. **G.J. Köteles.** Radiation and Environmental Biophysics, **21**, 1 (1982).

ԿՈՆՑԵՆՏՐԱՑԻԱՅԻ ՓՈՓՈԽՈՒԹՅԱՄԲ ԵՎ γ-ՃԱՌԱԳԱՅԹՄԱՄԲ ՊԱՅՄԱՆԱՎՈՐՎԱԾ ՓՈՒԼԱՅԻՆ ԱՆՑՈՒՄՆԵՐԸ ԼԻՈՏՐՈՊ ՀԵՂՈՒԿ ԲՅՈՐԵՂՆԵՐՈՒՄ

Դ.Հ. ԲԱԴԱԼՅԱՆ, Մ.Ա. ՍՏԵՓԱՆՅԱՆ, Հ.Գ. ԲԱԴԱԼՅԱՆ

Մշակված է լիոտրոպ հեղուկ բյուրեղներում փուլային անցումների մոլեկուլյար-ստատիստիկ տեսությունը, որը նկարագրում է փուլային անցումները իզոտրոպ (միցելյար), նեմատիկ և լամելյար փուլերի միջև: Ստացված են օրիենտացիոն և տրանսլյացիոն հեռակակարգի պարամետրերի կախվածությունը կոնցենտրացիայից նկարագրող հավասարումները: Ցույց է տրված, որ մոդելի միկրոսկոպիկ հաստատունների արժեքներից կախված նեմատիկ փուլ – լամելյար փուլ փուլային անցումը կարող է լինել ինչպես առաջին, այնպես էլ երկրորդ կարգի անցում: Քննարկված էին ինտենսիվ և ցածր ինտենսիվ γ-ռադիացիայի ազդեցությունը փուլային անցումների վրա: Ցույց է տրված, որ ճառագայթումը փոփոխում է փուլային անցումներին համապատասխանող մոդելի հաստատունները: Կարելի է ենթադրել, որ γ-ռադիացիան ազդում է կոնցենտրացիայից հեռակա կարգի պարամետրերի կախվածության ընթացքի վրա, ինչպես նաև փոփոխում է փուլային անցումների կրիտիկական կոնցենտրացիաների մեծությունները և նույնիսկ փուլային անցման կարգը:

PHASE TRANSITIONS IN LYOTROPIC LIQUID CRYSTALS CAUSED BY CONCENTRATION CHANGE AND γ-RADIATION

D.A. BADALYAN, M.A. STEPANYAN, H.G. BADALYAN

Molecular-statistical theory of phase transitions in lyotropic liquid crystals, which describes the phase transitions between isotropic (micellar), nematic and lamellar phases was developed. The equations describing the dependence of the parameters of orientation and translational long-range order on concentration were obtained. It was shown that depending on the values of the model microscopic constants, the nematic phase–lamellar phase transition can be both of the first and second kind. The influence of intensive and low intensive γ-radiation on the phase transitions mentioned herein was considered. It was shown that irradiation changes the model constants responsible for the phase transitions. On this basis it can be assumed that γ-radiation influences the course of the dependence of the long-range order parameters on concentration as well as it changes the values of the critical concentrations of the phase transitions and even a kind of the phase transition.

Известия НАН Армении, Физика, т.51, №4, с.508-515 (2016)

УДК 539.1

МНОГОСОЛИТОННЫЙ МЕТОД УДАЛЕНИЯ ДИСЛОКАЦИЙ НЕСООТВЕТСТВИЯ ИЗ ФУНКЦИОНАЛЬНОЙ ОБЛАСТИ ГЕТЕРОСТРУКТУР

М.М. АРАКЕЛЯН

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

e-mail: marakelyan@ysu.am

(Поступила в редакцию 18 июля 2016 г.)

Разработана теоретическая модель уменьшения плотности дислокаций несоответствия на границе гетероперехода. Модель основана на отталкивании многосолитонной цепочки и одиночной дислокации, вследствие чего происходит удаление дислокации из функциональной области гетероструктуры.

1. Введение

Тонконкопленочные гетероструктуры широко применяются в наноэлектронике для изготовления полупроводниковых лазеров, оптических модуляторов, СВЧ транзисторов, квантовых компьютеров и т. д. Качество низкоразмерных слоев и резкость гетерограниц оказывают сильное влияние на электрофизические свойства гетероструктуры. Жесткие требования предъявляются к размеру, форме и однородности гетероструктуры. Однако при изготовлении гетероструктур возникают остаточные напряжения, релаксация которых осуществляется путем пластической деформации, в результате чего образуются дислокации несооветствия, находящиеся в плоскости границы раздела. Наличие дислокаций несооветствия ухудшает функциональные свойства гетероструктуры [1]. Вследствие этого задача удаления дислокаций на границе гетеропереходов является актуальной.

Гетероэпитаксиальный рост сопровождается образованием дислокаций, если толщина пленки превышает некоторую критическую. Критическая толщина зависит от рассогласования периодов кристаллических решеток пленки и подложки. Очевидный способ избавления от дислокаций – использование пленок докритической толщины, однако из-за ее малости на практике это не всегда возможно. Одним из методов увеличения критической толщины пленок является предварительная пластическая деформация подложек, приводящая к образованию стенок краевых дислокаций, которые препятствуют зарождению дислокаций несоответствия в гетероструктурах [2].

В работе [3] для увеличения критической толщины пленок на границе между пленкой и подложкой формировались тонкие буферные слои с заданной структурой. В работе [4] предложено удаление дислокации несоответствия из эпитаксиальных пленок через боковые поверхности приложением напряжения несоответствия. В [5] изучались теоретические модели интерфейсов и дефектов несоответствия в поликристаллических и нанокристаллических пленках и вопросы огранки границ зерен действием напряжения несоответствия. Согласно [6], дислокации несоответствия могут быть удалены скольжением к боковым граням под действием «сил изображения». И.А. Овидько предложил теоретическую модель [7], которая описывает новый физический механизм для релаксации напряжений несоответствия в кристаллических пленках, а именно, формирование стенок из краевых дислокаций.

Таким образом, релаксация напряжений несоответствия на фазовой границе гетероструктуры может происходить посредством формирования в ней дислокаций несоответствия, которые оказывают сильное влияние на электронный транспорт, следовательно, могут искажать электрофизические свойства гетероструктур. Усовершенствование имеющихся, а также разработка новых способов удаления дислокаций несоответствия в гетероструктурах особенно важны, так как гетероструктуры являются основными компонентами устройств современной микроэлектроники.

В настоящей работе предложен новый, многосолитонный, подход к решению задачи уменьшения плотности дислокаций несоответствия в гетероструктурах.

2. Удаление дислокаций несоответствия из граничных областей гетероперехода

Простой моделью дислокаций, описывающей динамику цепи частиц, взаимодействующих с ближайшими соседями в присутствии внешнего периодического потенциала, является известная модель дислокаций Френкеля–Конторовой. В этой модели атомы над плоскостью скольжения – материальные точки, связанные пружинами с жесткостью k, а атомы под плоскостью скольжения описываются синусоидальным потенциалом.

Солитоны являются нелинейными образованиями, которые несут важную информацию о структуре среды. Дислокации Френкеля–Конторовой являются структурными дефектами параметра порядка или топологическими солитонами. Их движение описывается уравнением синус-Гордона [8]. Фундаментальными решениями этого уравнения, наряду с другими решениями, являются связанные состояния солитон–солитон, солитон–антисолитон, бризер и т. д. Как известно [9], солитоны, взаимодействующие с периодическим потенциалом решетки, или связанные состояния солитон–солитон адекватны перегибам, пересекающим потенциальные барьеры. С помощью известных технологий в кристаллах получают цепочки солитонов одного знака [9]. Образец подвергается большой пластической деформации и затем выдерживается в течение нескольких суток при комнатной температуре. В результате беспорядочно переплетенные дислокационные скопления распадаются, и определенная часть дислокаций ориентируется под малыми углами к кристаллографическим направлениям.

В настоящей работе моделируется получение такой цепочки солитонов и изучается воздействие двухсолитонной и многосолитонной цепочек на движение дислокаций. Численным экспериментом исследуется взаимодействие движущейся одиночной дислокации Френкеля–Конторовой с упругим полем дислокационной цепочки, движущейся в том же направлении и с той же скоростью. В этом случае в уравнение синус-Гордона добавляется член, описывающий такое поле, и рассматривается его воздействие на одиночную дислокацию при разных скоростях совместного движения. Двухсолитонное решение невозмущенного уравнения синус-Гордона имеет вид [8]

$$\varphi(x,t) = 4\arctan\left[\left\{1 - \frac{1-u_1u_2-\sqrt{(1-(u_1)^2}\sqrt{(1-(u_2)^2}}{1-u_1u_2+\sqrt{(1-(u_1)^2}\sqrt{(1-(u_2)^2}} \right.\right.$$
$$\left.\times\exp[-\frac{x-x_1-u_1t}{\sqrt{(1-(u_1)^2)}}-\frac{x-x_2-u_2t}{\sqrt{(1-(u_2)^2)}}]\right\} \tag{1}$$
$$\left.\Big/(\exp[-\frac{x-x_1-u_1t}{\sqrt{(1-(u_1)^2)}}]+\exp[-\frac{x-x_2-u_2t}{\sqrt{(1-(u_2)^2}}])\right],$$

где u_1 и u_2 – скорости, x_1 и x_2 – начальные фазы и φ – отклонение атома из положения равновесия. С помощью преобразования Беклунда [8] нами найдено также трехсолитонное решение уравнения синус-Гордона. Моделирование двух- и трехсолитоного решений уравнения представлено на рис.1a,b.

Связанные состояния нескольких солитонов мы рассматриваем как дислокационную цепочку. Уравнение синус-Гордона для дислокаций Френкеля-Конторовой с учетом возмущения со стороны дислокационной цепочки принимает вид

$$\varphi_{tt} - c_0^2\varphi_{xx} + \omega_0^2\sin\varphi - \frac{2\pi F_x}{ma} = 0, \tag{2}$$

где c_0 – скорость звука, $\omega_0^2 \equiv \dfrac{2\pi f_0}{ma}$ – характерная частота, $f = f_0\sin\dfrac{2\pi x}{a}$ – перио-

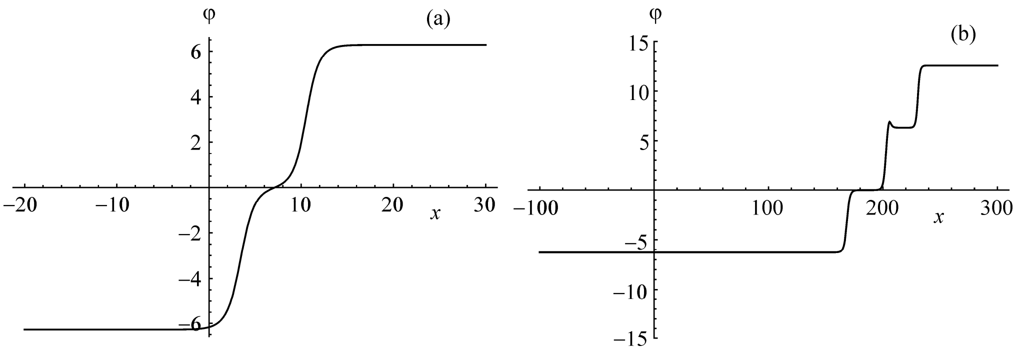

Рис.1. Поле смещений (a) двухсолитонной и (b) трехсолитонной цепочек.

дическая сила, действующая со стороны подложки в модели Френкеля–Конторовой, $f_0 = \dfrac{mc_0^2 a}{2\pi l_0^2}$ [10], $c_0^2 = \dfrac{ka^2}{m}$, a – постоянная решетки, F_x – сила, действующая на дислокацию со стороны дислокационной цепочки и l_0 – параметр, увеличивающийся при увеличении жесткости пружины в модели Френкеля–Конторовой и уменьшении силы со стороны подложки.

В плоскости скольжения ($\sigma_{xx} = 0, \quad \sigma_{yy} = 0, \quad \sigma_{zz} = 0$) действуют только касательные напряжения σ_{xy} (в наших обозначениях σ_x). Деформация является производной от смещения и определяет компоненты напряжения и силы

$$\varepsilon_x = \frac{\partial \varphi}{\partial x}, \quad \sigma_x = E\varepsilon_x, \quad F_x = b\,\sigma_x, \tag{3}$$

где ε_x – компонента деформации, σ_x – компонента сдвигового напряжения, F_x – проекция силы, действующей на единицу длины дислокации, b – вектор Бюргерса и E – модуль Юнга.

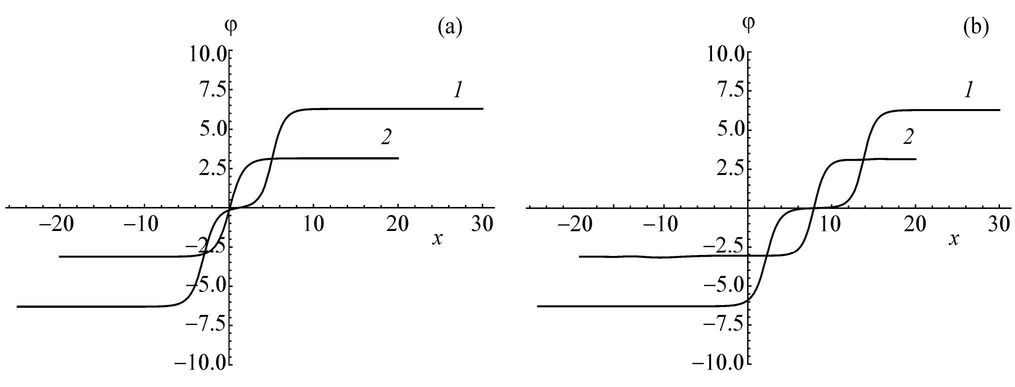

Рис.2. Движение дислокационной стенки (*1*) и одиночной дислокации (*2*) при отсутствии взаимодействия между ними для (a) t_1 и (b) t_2 при $t_1 < t_2$.

Решение уравнения (2) найдено численным образом при помощи программы Mathematica. Графики представлены в безразмерных переменных, полученных преобразованиями $x=\left(c_0/\omega_0\right)\tilde{x}$ и $t=\tilde{t}/\omega_0$, где $\tilde{t}$, $\tilde{x}$ – безразмерные переменные.

Воздействие поля двухсолитонной цепочки на одиночную дислокацию исследовалось при различных скоростях совместного скольжения. При отсутствии взаимодействия совместное движение такой структуры для последовательных моментов времени представлено на рис.2a,b. Видно, что одиночная дислокация и двухсолитонная цепочка движутся с одинаковой скоростью, не взаимодействуя друг с другом.

При упругом взаимодействии дислокации с дислокационной цепочкой для больших скоростей скольжения численный эксперимент дал результат, представленный на рис.3. Из рис.3 следует, что движение дислокации замораживается полем дислокационной цепочки при больших скоростях скольжения.

Для малых скоростей скольжения получен результат представленный на рис.4. Из рис.4 следует, что при малых скоростях скольжения дислокация выталкивается из занимаемой позиции.

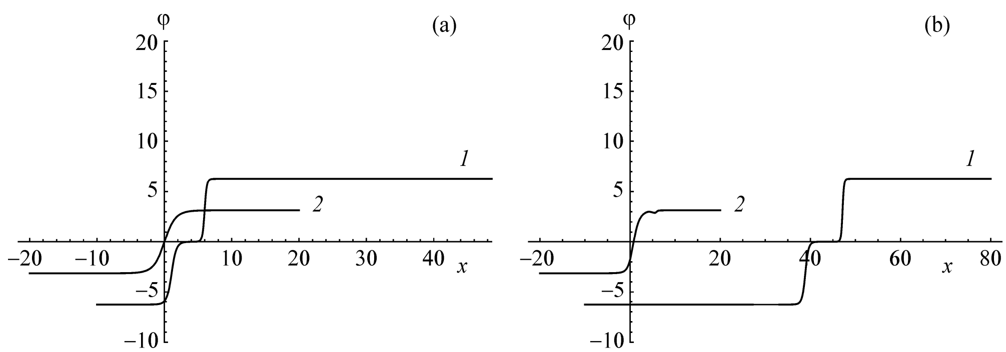

Рис.3. Движение свободной двухсолитонной цепочки (*1*) и одиночной дислокации (*2*), находящейся в поле двухсолитонной цепочки для больших скоростей скольжения 9×10^{-1} см/с для (a) t_1 и (b) t_2 при $t_1 < t_2$.

Для объяснения полученных результатов были смоделированы поля напряжений дислокационной цепочки при исследуемых скоростях скольжения, представленные на рис.5.

Из результата численного эксперимента можно заключить, что с увеличением скорости скольжения поле напряжений дислокационной цепочки сжимается в направлении скольжения и увеличивается по амплитуде. Соответственно уменьшается взаимодействие дислокации и дислокационной цепочки в направ-

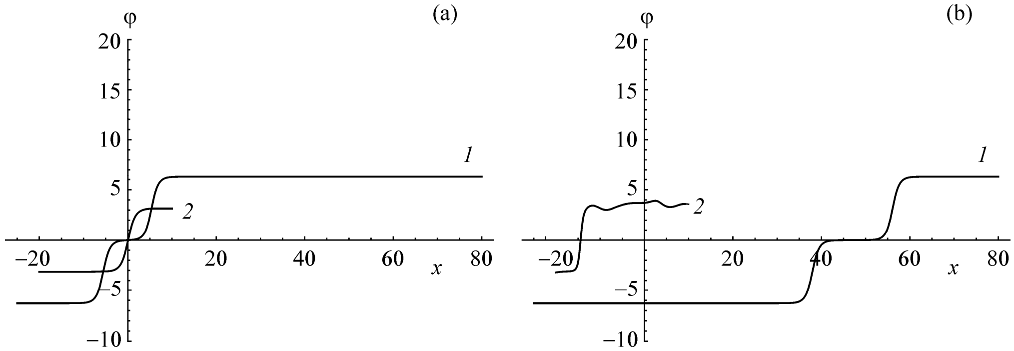

Рис.4. Движение одиночной дислокации (*1*), находящейся в поле двухсолитонной цепочки (*2*) для малых скоростей скольжения 3×10^{-1} см/с для (a) t_1 и (b) t_2 при $t_1 < t_2$.

лении скольжения. В выбранном интервале скоростей сила отталкивания дислокационной цепочки и одиночной дислокации растет с уменьшением скорости скольжения. Следовательно, изменяя скорость скольжения, можно регулировать степень воздействия поля дислокационной цепочки на дислокацию.

Таким образом, многосолитонная цепочка является «стопором», отталкивающим дислокацию. В зависимости от соотношения между временем задержки дислокации и временем ее свободного пробега между барьерами, последние можно условно разделить на низкие и высокие, которые действуют как слабые и сильные стопоры. Слабые стопоры эквивалентны существованию силы трения, действующей на дислокацию. Сильные стопоры связаны с высокими и протяженными барьерами.

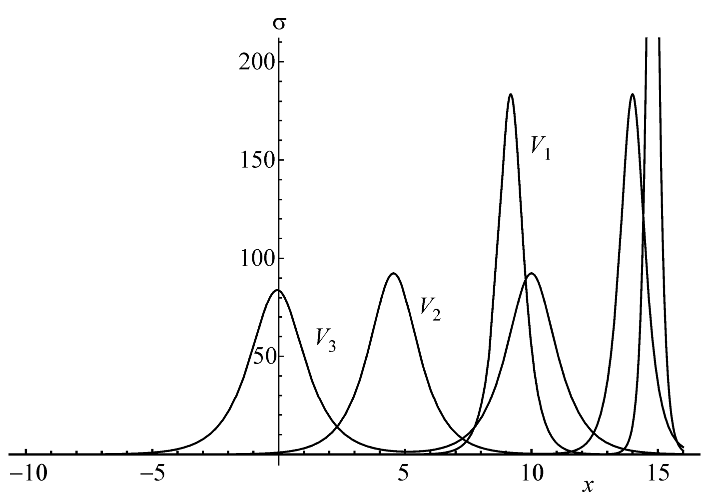

Рис.5. Поля напряжений двухсолитонной цепочки при скоростях скольжения $V_1 > V_2 > V_3$.

На практике используется полубесконечная подложка с цепочками солитонов и пленка. Пленка и подложка – упруго-изотропные твердые тела с одинаковыми модулями сдвига и коэффициентами Пуассона, а также с одинаковыми типами кристаллических решеток и близкими параметрами решеток. В этом случае наличие в подложке многосолитонной цепочки приводит к тому, что на границе пленка–подложка дислокации несоответствия выталкиваются полем цепочки из рабочей области гетероструктуры.

Для применения предложенного метода рекомендуется использование гетероструктуры Co/Cu, в которой критическая толщина достаточно мала, а плотность дислокаций несоответствия большая ($\geq 1.3 \times 10^6$ см$^{-1}$) [11]. Может быть также использована гетероструктура Fe/Cu или другие гетероструктуры с подложками из гранецентрированных кубических металлов, для которых характерна большая плотность дислокаций [12].

Существует другая возможность получения гетероструктур с минимальным количеством дислокаций несоответствия, например, при применении гетероструктур кремний на сапфире. В этом случае получают сапфировые подложки, выращенные специальными методами [13], имеющие определенные, улучшенные, параметры и допускающие эффективное увеличение критической толщины пленки.

Константы при моделировании взяты для меди, так как движение дислокаций в меди (ГЦК решетка) начинается при очень низких нагрузках (при 298 К скорость дислокаций порядка 8×10^2 см/с при $\sigma \approx 10^6$ дин/см^2) и может меняться в зависимости от напряжения в широком интервале [14].

3. Заключение

Движение дислокаций несоответствия в гетероструктурах замораживается полем многосолитонной цепочки при больших скоростях скольжения. При малых скоростях скольжения дислокации выталкиваются многосолитонной цепочкой из рабочей области гетероперехода. Наличие многосолитонной цепочки приводит к тому, что на границе пленка–подложка дислокации несоответствия могут регулируемо выталкиваться из рабочей области гетероструктур, что увеличивает стабильность их свойств и улучшает физические показатели.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Ju.A Tkhorik, L.S. Hazan.** Plastic Deformation and Misfit Dislocations in the Heteroepitaxial Systems. Kiev, Naukowa dumka,1983.
2. **И.А. Овидько, А.Г. Шейнерман.** ФТТ, **44**, 1243 (2002).
3. **Y. Obayashi, K. Shintani**, J. Appl. Phys., **88**, 105 (2000).
4. **I.W. Matthews, A.E. Blakeslee.** J. Cryst. Growth, **32**, 265 (1976).
5. **M.Ju. Gutkin, I.A. Obid'ko.** Materials Physics and Mechanics, **8**, 108, (2009).

6. **X.G. Zhang, A. Rodriguez, X. Wang, P. Li, F.C. Jain, J.E. Ayers.** Appl. Phys. Lett., **77**, 2524 (2000).
7. **I.A. Ovid'ko.** J. Phys.: Condens. Matter, **11**, 6521 (1999).
8. Soliton in Action, K.Lonngren, A. Scott, Eds., Proc. Workshop, Academic Press, New York, San Francisko, London, 1978.
9. **В.А. Мелик-Шахназаров, И.И. Мирзоева, И.А. Наскидашвили.** Письма в ЖЭТФ, **43,** 247 (1986).
10. **М.М. Аракелян**. Известия НАН Армении, Физика, **50**, 126 (2015).
11. **A.I. Fedorenko, R. Vincent.** Phil. Mag., **24**, 55 (1971).
12. **K. Yagi, K. Takaynagi, K. Kobayashi, G. Nonio.** J. Cryst. Growth**, 9**, 84 (1971).
13. **Э.А. Назарян, М.М. Аракелян.** Известия НАН Армении, Механика, **59**, 74 (2006).
14. **Дж. Хирт, И. Лоте.** Теория дислокаций. Москва, Атомиздат, 1972.

ՀԵՏԵՐՈԿԱՌՈՒՑՎԱԾՔՆԵՐԻ ՖՈՒՆԿՑԻՈՆԱԼ ՏԻՐՈՒՅԹԻՑ ԱՆՀԱՄԱՊԱՏԱՍԽԱՆՈՒԹՅԱՆ ԴԻՍԼՈԿԱՑԻԱՆԵՐԻ ՀԵՌԱՑՄԱՆ ԲԱԶՄԱՍՈԼԻՏՈՆԱՅԻՆ ՄԵԹՈԴ

Մ.Մ. ԱՌԱՔԵԼՅԱՆ

Հետերոանցումերի սահմաններում անհամապատասխանության դիսլոկացիաների խտության փոքրացման նպատակով մշակված է տեսական մոդել: Այն հիմնված է բազմա-սոլիտոնային շղթայի և միայնակ դիսլոկացիայի վանողության վրա, որի հետևանքով տեղի է ունենում դիսլոկացիայի հեռացումը հետերոկառուցվածքի ֆունկցիոնալ տիրույթից:

MULTISOLITONIC METHOD OF MISFIT DISLOCATIONS REMOVAL FROM FUNCTIONAL AREA OF HETEROSTRUCTURES

M.M. ARAKELYAN

The theoretical model of reduction of density of misfit dislocations on the heterostructure border is developed. The model is based on repulsion of a multisolitonic chain and single dislocation owing to what there a removal of dislocation from functional area of heterostructure occurs.

Известия НАН Армении, Физика, т.51, №4, с.516-522 (2016)

УДК 548.732

ПРОСТРАНСТВЕННАЯ МОДУЛЯЦИЯ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ПРИ ВНЕШНЕМ АКУСТИЧЕСКОМ ПОЛЕ

А.Р. МКРТЧЯН[1,2], А.С. БАГДАСАРЯН[3,4], В.Р. КОЧАРЯН[1,2*],
А.А. КИЗИРИДИ[2], Т.Р. МУРАДЯН[1]

[1]Институт прикладных проблем физики НАН Армении, Ереван, Армения
[2]Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия
[3]Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, Москва, Россия
[4]Научно-исследовательский институт радио, Москва, Россия

[*]e-mail: vahan2@yandex.ru

(Поступила в редакцию 26 августа 2016 г.)

Экспериментально рассмотрена двухкристальная дифракция рентгеновского излучения от отражающих атомных плоскостей $(10\bar{1}1)$ монокристалла кварца с АТ-срезом в геометрии Лауэ, когда оба кристалла одновременно находятся в поле объемных акустических волн. Показано, что в результате пространственной модуляции отраженного пучка получается нечетное число параллельных пучков рентгеновского излучения.

1. Введение

Создание новых более чувствительных и универсальных методов для проведения исследований в различных областях науки и техники, как например, определение реальных структур совершенных кристаллов, томография биологических объектов, элементов микро- и наноэлектроники и т. д., является актуальной задачей. Для решения этой задачи одним из необходимых факторов является получение альтернативных монохроматических, без гармоник, пучков гамма квантов с управляемыми в пространстве и во времени параметрами как, например, угловое расхождение и интенсивность. Одним из таких методов является дифрактометрия излучения длин волн порядка ангстрем при наличии внешних возбуждений. Наличие внешних воздействий (температурный градиент и акустические колебания) приводит к увеличению интенсивности отраженного рентгеновского излучения в процессе рассеяния рентгеновских лучей от монокристаллов, находящихся в условии Брэгга по геометрии Лауэ. При определенных параметрах внешних воздействий для отражающих атомных плоскостей $(10\bar{1}1)$ кварца происходит полная переброска рентгеновского излучения из направления прохождения в направление дифракции [1]. Поскольку зависимость интенсивности отраженного рентгеновского излучения от параметров внешнего воздействия дала возможность получить управляемые рентгеновские пучки во времени и в пространстве, в дальнейшем были проведены многочисленные исследования разных характеристик (угловая расходимость, пространственное распределение и энергетическая дисперсия) отраженного рентгеновского излучения [2–4].

В работах [5,6] экспериментально и теоретически показано, что в геометрии Лауэ с помощью акустического поля и температурного градиента можно контролировать местоположение фокуса отраженного рентгеновского излучения, а также преобразовывать сферическую волну в плоскую. А синусоидальная модуляция кристаллической решетки с коротковолновой поверхностной акустической волной при дифракции рентгеновского излучения в геометрии Брэгга приводит к появлению на кривой качания дифракционных сателлитов, угловое положение и интенсивность которых зависят от амплитуды и длины волны ультразвуковой сверхрешетки, от энергии падающего рентгеновского излучения и порядка рефлекса [7].

В работах [8,9] экспериментально исследована дифракция рентгеновского излучения от разных отражающих атомных плоскостей монокристалла кварца с АТ-срезом в геометрии Лауэ, когда в кристалле возбуждены объемные акустические волны. Показано, что объемные акустические волны приводят к пространственной модуляции дифрагированных пучков и во фронтальном сечении возникают полосы интенсивности. В зависимости от порядка гармоники возбуждения акустического поля количество полос изменяется следующим образом: $m = n + 1$, где n – порядок гармоники и принимает нечетные число, т. е. число полос интенсивностей в фронтальном сечении четное. Во всех случаях две краевые полосы получаются более узкими и менее интенсивными, чем остальные. Интенсивность и контраст возникающих полос зависит от амплитуды переменного напряжения, приложенного к кристаллу. В работах [10,11] показано, что в монокристалле кварца АТ-среза при отражении от атомных плоскостей $(10\bar{1}1)$ в геометрии Лауэ наличие объемных акустических волн приводит к одновременному увеличению интенсивностей отраженных и проходящих дифрагированных пучков до 100% участия процесса дифракции проходящего недифрагированного пучка. Причем, оба отраженный и проходящий пучки становятся идентичными при определенных значениях амплитуды возбуждения акустических колебаний.

В настоящей работе экспериментально рассмотрена возможность получения полос с нечетным числом в поперечном сечении отраженного рентгеновского пучка от отражающих атомных плоскостей $(10\bar{1}1)$ монокристалла кварца с АТ-срезом в геометрии Лауэ при наличии объемных акустических волн.

2. Эксперимент

Экспериментальное исследование проводилось на рентгеновской установке ДРОН-3 с анодной молибденовой трубкой БСВ-25 (размер фокусного пятна источника 0.2 × 10 мм^2). Использовалась двухкристальная (n; $-n$) дифракционная схема (рис.1).

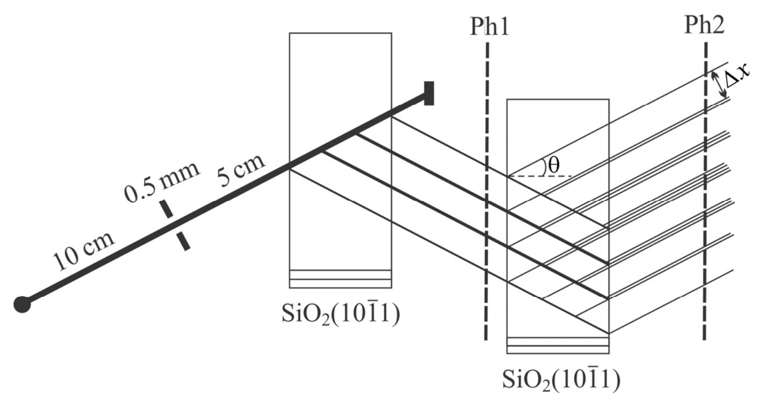

Рис.1. Схема эксперимента.

На расстоянии 10 см от источника была установлена щель с шириной 0.5 мм. Проходя через щель, пучок падает на монокристалл кварца, который поставлен в 5 см от щели в геометрии Лауэ. Коллимация пучка выбрана так, чтобы от атомных плоскостей $(10\bar{1}1)$ отражалось только излучение MoKα_1 (угол Брэгга 6°6′). После первого образца, в направления отраженного пучка, на расстоянии 18 см идентичным образом установлен второй монокристалл кварца. Регистрация рентгеновского пучка с детектором проводилась на расстоянии 20 см от второго кристалла. Поперечное сечение отраженных пучков от первого (Ph1) и второго кристалла (Ph2) регистрировалось на расстоянии 10 см с помощью рентгеновской пленки. Образцы представляли собой пластинки в виде шайбы толщиной 1.7 мм из монокристалла кварца AT-среза, поверхности которых покрыты контактами алюминиевого слоя с толщиной менее 10 мкм. Возбуждение объемных акустических волн в кристаллах осуществлялось с помощью генераторов электромагнитных волн, которые были подключены к контактам.

Для получения пространственной модуляции интенсивности отраженного пучка при наличии акустических волн рассмотрены отражения от атомных плоскостей $(10\bar{1}1)$ монокристалла кварца. При возбуждении кристаллов разными порядками резонансной частоты наблюдается увеличение интенсивности отраженного пучка в зависимости от величины амплитуды переменного электрического напряжения, а в поперечном сечении появляются вертикальные полосы, количество которых зависит от порядка резонансной частоты [8–11].

Без возбуждения кристаллов интенсивность отраженного излучения первого исследуемого образца составила 40000 имп/с, после прохождения второго кристалла осталось 7800 имп/с. Интенсивность отраженного пучка от второго кристалла составляла 1800 имп/с.

После возбуждения первого образца разными порядками резонансной частоты наблюдалось увеличение интенсивности отраженного пучка в зависимости от величины амплитуды переменного электрического напряжения. Максимальная интенсивность отраженного излучения от первого кристалла кварца при частоте возбуждения 2.936 МГц и 4.888 МГц составила 220 000 имп/с. Интенсивность проходящего пучка от второго кристалла составила 43 000 имп/с, а интенсивность отраженного пучка – 4200 имп/с. После возбуждении второго образца порядками резонансной частоты 2.936 МГц и 4.888 МГц отраженная интенсивность от второго образца составила 21 000 имп/с.

На рис. 2a,c приведены поперечные сечения отраженных пучков на расстоянии 10 см от первого и второго образца, соответственно, при одновременном возбуждении образцов с частотой 2.936 МГц. Амплитуда акустических колебаний обоих образцов соответствовала максимальному значению интенсивности отраженного пучка (напряжение электромагнитного поля 40 В). На рис.2b,d приведены поперечные сечения отраженных пучков при тех же условиях для одновременного возбуждения образцов с частотой 4.889 МГц.

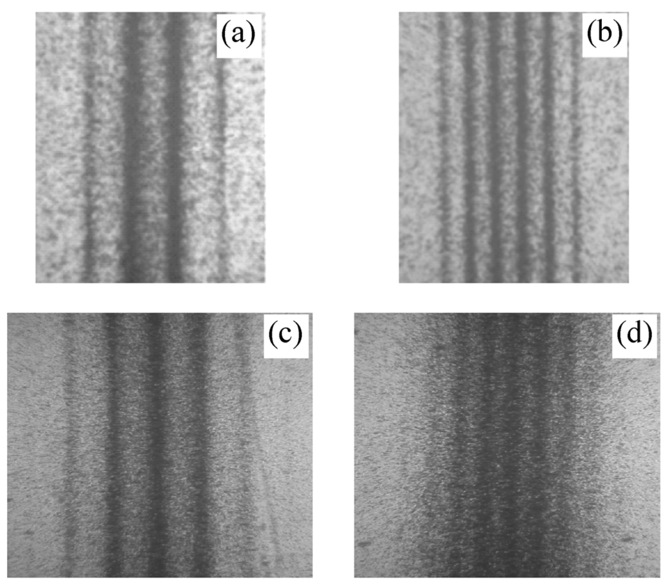

Рис.2. Поперечные сечения отраженного пучка от атомных плоскостей $(10\bar{1}1)$ при наличии акустических колебаний от (a,b) первого кристалла и (c,d) второго кристалла при частоте возбуждения 2.936 МГц и 4.888 МГц, соответственно.

На рис.3 приведены распределения интенсивности поперечных сечений отраженного рентгеновского излучения, полученные с помощью фотометра и соответствующие фотоснимкам, приведенным на рис.2.

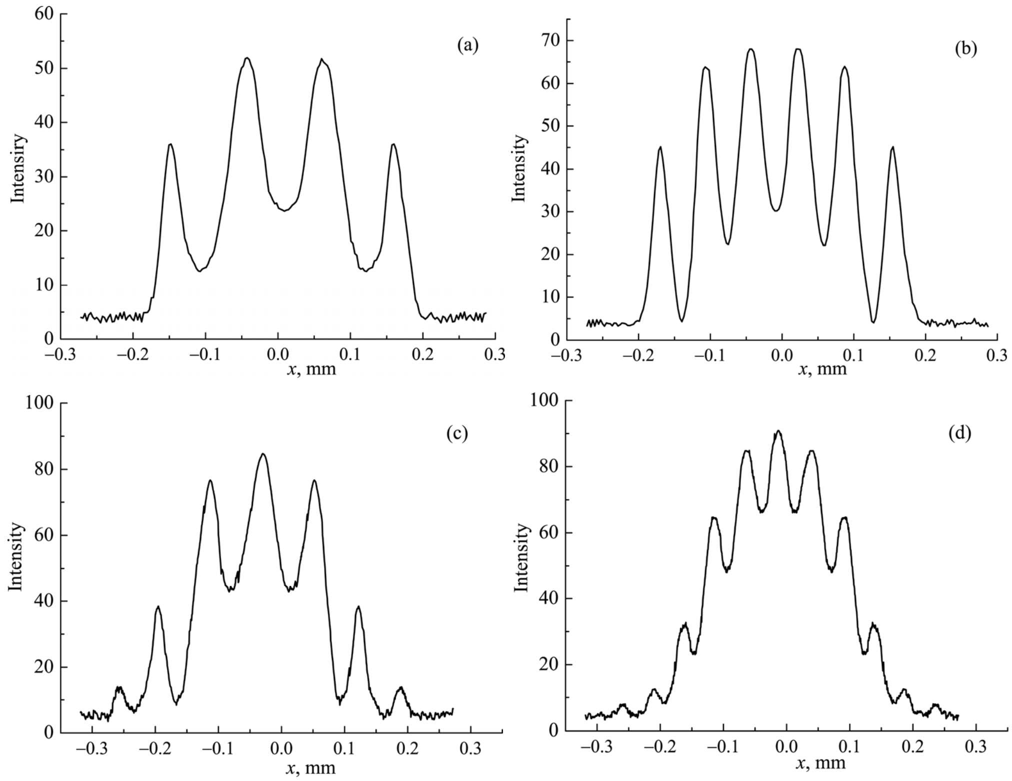

Рис.3. Распределение интенсивности поперечных сечений отраженного рентгеновского излучения от (a,b) первого кристалла и (c,d) второго кристалла, соответственно.

3. Обсуждение результатов

Как видно из рис.2a,b и рис.3a,b число полос в поперечном сечении отраженного рентгеновского пучка от первого кристалла получается четным, что соответствует условию $m = n + 1$, где n – порядок гармоники и принимает нечетные значения. Известно, что полосы формируются от пучностей стоячей акустической волны [9]. Следовательно, они распространяются друг от друга на расстояниях $\Delta x = \lambda \sin\theta \cos^2\theta$, где λ – длина рентгеновского излучения и θ – угол Брэгга. То есть, при присутствии акустических волн, когда на первый кристалл под углом Брэгга падает узкий коллимированный пучок, то имеем отраженные рентгеновские пучки (полосы) с количеством $n + 1$. Таким образом, на второй кристалл падает $n + 1$ параллельных рентгеновских пучка на расстоянии Δx друг от друга (рис.1). Поскольку толщина второго кристалла равна толщине первого кристалла и они возбуждаются одинаковой частотой, то при отражении от второго кристалла каждый пучок будет разделен на $n + 1$ пучка, которые тоже удалены друг от друга на расстояние Δx. Следовательно, полученные от каждого падающего пучка $n + 1$ пучка, отраженных от второго кристалла, перекроют n пучки, полученные от предыдущего пучка. В результате падающие на второй кристалл $n + 1$ пучка после отражения создадут $2n + 1$ пучка, которые разделены друг от друга размером Δx (рис.1). Из рис.1 видно, что самую большую интенсивность будет иметь центральный пучок, а интенсивности левых и правых пучков будут все более и более уменьшаться.

Из рис.2c,d и рис.3c,d видно, что число полос (параллельных пучков) в поперечном сечении отраженного рентгеновского пучка от второго кристалла получается нечетным, что соответствует условию $m = 2n + 1$, где n – порядок гармоники и принимает нечетные значения, т. е. число полос интенсивностей в поперечном сечении нечетное. Отметим также, что наибольшая интенсивность получается на средних пиках, как и ожидалось.

4. Заключение

Таким образом, показано, что при возбуждении первого кристалла разными порядками резонансной частоты число полос в поперечном сечении отраженного рентгеновского пучка получается четным, а при двухкристальной схеме число полос получается нечетным. Используя этот метод, можно управлять количеством возникающих полос в поперечном сечении, т. е. можно любое четное число возникающих полос преобразовать в нечетное.

ЛИТЕРАТУРА

1. **А.Р. Мкртчян, М.А. Навасардян, В.К. Мирзоян.** Письма в ЖТФ, **8**, 677 (1982).
2. **А.Р. Мкртчян, Р.Г. Габриелян, А.А. Асланян, А.Г. Мкртчян, Х.В. Котанджян.** Изв. АН Арм. ССР, Физика, **21**, 297 (1986).
3. **А.Р. Мкртчян, А.Г. Мкртчян, В.Р. Кочарян, А.Е. Мовсисян, С.Б. Дабагов, А.П. Потылицын.** Изв. НАН Армении, Физика, **48**, 212 (2013).
4. **В.Р. Кочарян, Р.Ш. Алексанян, К.Г. Труни.** Изв. НАН Армении, Физика, **45**, 290 (2010).
5. **А.Р. Мкртчян, М.А. Навасардян, Р.Г. Габриелян.** Письма в ЖТФ, **11**, 1354 (1985).
6. **A.R. Mkrtchyan, M.A. Navasardian, R.G. Gabrielyan, L.A. Kocharian, R.N. Kuzmin.** Solid State Commun., **59**, 147 (1986).
7. **Д.В. Иржак, Д.В. Рощупкин, Р. Тукулу, О. Матон.** Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, **1**, 10 (2002).
8. **В.К. Мирзоян, А.А. Егиазарян, В.Н. Агабекян, П.В. Мирзоян.** Известия НАН Армении, Физика, **43**, 104 (2008).
9. **В.К. Мирзоян, А.А. Егиазарян, Э.Г. Багдасарян, П.В. Мирзоян.** Известия НАН Армении, Физика, **42**, 355 (2007).

10. **В.Р. Кочарян, Т.Р. Мурадян, Р.В. Амирагян, А.С. Гоголев, С.Г. Хлопузян.** Труды конференции «Рентгеновская оптика – 2014», г. Черноголовка, 168, (2014).
11. **Т.Р. Мурадян, Р.В. Амирагян, С.Г. Хлопузян, А.Р. Вагнер, В.Р. Кочарян.** Известия НАН Армении, Физика, **50**, 269 (2015).

ՌԵՆՏԳԵՆՅԱՆ ՃԱՌԱԳԱՅԹՄԱՆ ՏԱՐԱԾԱԿԱՆ ՄՈԴՈՒԼՈՒՄ ԱՐՏԱՔԻՆ ԱԿՈՒՍՏԻԿ ԴԱՇՏԻ ԱՌԿԱՅՈՒԹՅԱՄԲ

Ա.Ռ. ՄԿՐՏՉՅԱՆ, Ա.Ս. ԲԱՂԴԱՍԱՐՅԱՆ, Վ.Ռ. ՔՈՉԱՐՅԱՆ,
Ա.Ա. ԿԻԶԻՐԻԴԻ, Տ.Ռ. ՄՈՒՐԱԴՅԱՆ

Փորձնականորեն դիտարկված է ռենտգենյան ճառագայթման երկբյուրեղ դիֆրակ–ցիա AT կտրվածքով կվարցի միաբյուրեղի $(10\overline{1}1)$ անդրադարձնող ատոմական հարթու-թյունների ընտանիքից՝ Լաուէի երկրաչափության պայմաններում, երբ երկու բյուրեղներում միաժամանակ առկա են ծավալային ակուստիկ ալիքներ: Ցույց է տրված, որ անդրադարձած փնջի տարածական մոդուլման արդյունքում ստացվում են կենտ թվով ռենտգենյան ճառագայթման զուգահեռ փնջեր:

SPATIAL MODULATION OF X-RAYS AT THE EXTERNAL ACOUSTIC FIELD

A.R. MKRTCHYAN, A.S. BAGHDASARYAN, V.R. KOCHARYAN,
A.A. KIZIRIDI, T.R. MURADYAN

Two-crystal diffraction of X-rays from the $(10\overline{1}1)$ reflecting atomic planes of the quartz single crystal of AT-cut is considered in the Laue geometry when both the crystals are excited by volume acoustic waves. It is shown that as a result of the spatial modulation of the reflected beam, odd numbers of parallel beams of X-rays are obtained.

Известия НАН Армении, Физика, т.51, №4, с.523-532 (2016)

УДК 548.732

ДИФРАКЦИЯ РЕНТГЕНОВСКОГО ПРОСТРАНСТВЕННО-НЕОДНОРОДНОГО ПУЧКА В КРИСТАЛЛЕ С КУБИЧЕСКОЙ НЕЛИНЕЙНОСТЬЮ

М.К. БАЛЯН

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

e-mail: mbalyan@ysu.am

(Поступила в редакцию 25 января 2016 г.)

Теоретически исследована дифракция пространственно-неоднородной рентгеновской волны в кристалле с кубическим нелинейным откликом на напряженность внешнего поля. С помощью численных расчетов для двухволновой дифракции узкого падающего пучка исследованы распределения интенсивностей на выходной поверхности кристалла в зависимости от толщины и интенсивности падающего пучка. Приведены результаты численных расчетов интегральных (пространственных) коэффициентов прохождения и отражения в зависимости от интенсивности падающей волны для фиксированной толщины кристалла.

1. Введение

Теоретические исследования нелинейной рентгеновской дифракции в кристаллах стали проводится в связи с появлением интенсивных синхротронных источников рентгеновского излучения и с разработками рентгеновских лазеров на свободных электронах. В работе [1], используя модель холодной плазмы, рассматривается линейная двухволновая дифракция второй гармоники, образовавшаяся в кристалле под влиянием интенсивного короткого импульса проходящего через него рентгеновского излучения. Обратное динамическое влияние образовавшихся двух брэгговских волн на первичную волну не рассматривается. Без привлечения модели холодной плазмы в [2,3] рассматривается кинематическая брэгговская дифракция интенсивной плоской рентгеновской волны в условиях нелинейности второго порядка с параметрической конверсией падающего рентгеновского кванта на рентгеновский квант более низкой частоты и на квант УФ излучения. В работе [4] с использованием модели холодной плазмы рассматривается прямое прохождение интенсивного пучка рентгеновских лучей через кристалл в условиях кубического отклика кристалла на напряженность электрического поля излучения. В [5], применяя обычную модель, известную из оптики света видимого диапазона [6], теоретически рассматривались основные уравнения динамической дифракции рентгеновских волн в кристалле с кубической нелинейностью. С помощью этих уравнений теоретически исследованы основные плосковолновые нелинейные дифракционные эффекты для случаев Лауэ [7] и Брэгга [8].

В настоящей работе теоретически исследована нелинейная дифракция рентгеновского пространственно-неоднородного пучка в кристалле с кубической нелинейностью на основе нелинейных уравнениях Такаги [5,7,8].

2. Нелинейные уравнения Такаги

Для дальнейшего изложения приведем основные уравнения нелинейной дифракции – нелинейные уравнения Такаги, полученные в работе [5]. Рассмотрим двухволновую дифракцию σ-поляризованной волны в кристалле (в общем случае деформированном). Согласно [5], амплитуды проходящей E_0 и дифрагированной E_h волн удовлетворяют следующей системе нелинейных уравнений Такаги:

$$\begin{aligned}
&\frac{2i}{k}\frac{\partial E_0}{\partial s_0} + (\eta_0^{(3)} I + \eta_h^{(3)} E_0 E_h^* + \eta_{\bar{h}}^{(3)} E_0^* E_h) e^{-\mu z/\cos\theta} E_0 \\
&+[\chi_{\bar{h}}^{(1)} + (\eta_0^{(3)} E_0 E_h^* + \eta_{\bar{h}}^{(3)} I + \eta_{2\bar{h}}^{(3)} E_0^* E_h) e^{-\mu z/\cos\theta}] E_h = 0, \\
&\frac{2i}{k}\frac{\partial E_h}{\partial s_h} + (\eta_0^{(3)} I + \eta_h^{(3)} E_0 E_h^* + \eta_{\bar{h}}^{(3)} E_0^* E_h) e^{-\mu z/\cos\theta} E_h \\
&+[\chi_h^{(1)} + (\eta_0^{(3)} E_0^* E_h + \eta_h^{(3)} I + \eta_{2h}^{(3)} E_0 E_h^*) e^{-\mu z/\cos\theta}] E_0 = 0.
\end{aligned} \tag{1}$$

Здесь $I = |E_0|^2+|E_h|^2$, μ – линейный коэффициент поглощения кристалла, θ – угол Брэгга, ось z направлена вдоль отражающих плоскостей, ось x направлена антипараллельно дифракционному вектору **h**, s_0 и s_h – координаты вдоль направлений распространения проходящей и диффрагированной волн, соответственно, $\chi_{0,h}^{(1)}$ – Фурье-коэффициенты линейной поляризуемости для дифракционных векторов 0 и **h** , соответственно, $\eta^{(3)}{}_{0,h,2h}$ – Фурье-коэффициенты нелинейной поляризуемости третьего порядка. Поляризуемости в общем случае комплексны и учитывают поглощение в кристалле.

Известно, что линейная часть поляризуемости кристалла пропорциональна концентрации электронов среды [9]. Исходя из этого становится возможным представление линейной поляризуемости в совершенном кристалле в виде трехмерного ряда Фурье по векторам обратной решетки. Так как в большинстве случаев дифракция рентгеновских лучей происходит в результате рассеяния на электронах внутренних оболочек атомов, которые сильно связаны в атоме, то в деформированном кристалле рассеяние рассматривается на основе модели жестких ионов, т. е. при деформации вся электронная конфигурация как целое, вместе с ядром смещается на вектор смещения **u** [9]. Вследствие этого в деформированном кристалле Фурье-коэффициенты поляризуемости получаются из Фурье-коэффициентов идеального кристалла умножением на exp(–i**gu**), где **g** – вектор обратной решетки кристалла. Как было показано в работе [5] на основе теории возмущений квантовой и классической теорий поляризуемости, при рассеянии на внутренних оболочках атомов кубическая часть поляризуемости так же, как и линейная часть, пропорциональна концентрации электронов. Поэтому и для кубической части поляризуемости в идеальном кристалле можно применять разложение по векторам обратной решетки кристалла, а в деформированном кристалле, применяя модель жестких ионов, Фурье-коэффициенты поляризуемости получаются умножением на $\exp(-i\mathbf{gu})$. Следует отметить, что модель жестких ионов применима только для электронов внутренних оболочек, когда пренебрегается рассеянием на валентных электронах, слабосвязанных с атомами. Вместе с тем, даже для внутренних электронов модель жестких ионов перестает быть применимой, когда напряженность внешнего поля становится равной или большей, чем внутриатомные поля, и невозможно применение теории возмущений. В таком случае следует применять модель холодной плазмы, образованной под влиянием внешнего излучения. Оценка критического значения напряженности электрического поля падающего на кристалл излучения, при котором рассеяние, обусловленное нелинейной частью поляризуемости, становится равным рассеянию, обусловленному линейной частью поляризуемости, приводится в работе [5].

В общем случае систему (1) необходимо решать численным методом. С этой целью приведем систему (1) к безразмерному виду, удобному для численных расчетов. Сначала представим поляризуемости в виде $\chi^{(1)}_{0,h,2h} = \chi^{(1)}_{0r,hr,2hr} + i\chi^{(1)}_{0i,hi,2hi}$ и $\eta^{(3)}_{0,h,2h} = \eta^{(3)}_{0r,hr,2hr} + i\eta^{(3)}_{0i,hi,2hi}$, причем, $\chi^{(1)}_{-hr,-2hr} = \chi^{(1)*}_{hr,2hr}$, $\chi^{(1)}_{-hi,-2hi} = \chi^{(1)*}_{hi,2hi}$ и $\eta^{(3)}_{-hr,-2hr} = \eta^{(3)*}_{hr,2hr}$,$\eta^{(3)}_{-hi,-2hi} = \eta^{(3)*}_{hi,2hi}$. Согласно [5], имеют место следующие соотношения

$$\eta^{(3)}_{0r,hr,2hr} = -3\chi^{(1)}_{0r,hr,2hr} / I_{\text{cr}}, \tag{2}$$

где I_{cr} – критическая интенсивность, при которой рассеяние от нелинейной части поляризуемости становится равным рассеянию, обусловленному линейной частью поляризуемости (оценку этой величины см. в работе [5]). Разделив уравнения системы (1) на $|\chi^{(1)}_{hr}|$ и используя соотношения (2), приходим к следующим безразмерным уравнениям:

$$\begin{gathered}
\frac{i}{\pi}\frac{\partial E_0}{\partial s_0} + (\alpha_0^{(3)} I + \alpha_h^{(3)} E_0 E_h^* + \alpha_{\bar{h}}^{(3)} E_0^* E_h) e^{-\mu' z/\cos\theta} E_0 \\
+[\beta_{\bar{h}}^{(1)} + (\alpha_0^{(3)} E_0 E_h^* + \alpha_{\bar{h}}^{(3)} I + \alpha_{2\bar{h}}^{(3)} E_0^* E_h) e^{-\mu' z/\cos\theta}] E_h = 0, \\
\frac{i}{\pi}\frac{\partial E_h}{\partial s_h} + (\alpha_0^{(3)} I + \alpha_h^{(3)} E_0 E_h^* + \alpha_{\bar{h}}^{(3)} E_0^* E_h) e^{-\mu' z/\cos\theta} E_h \\
+[\beta_h^{(1)} + (\alpha_0^{(3)} E_0^* E_h + \alpha_h^{(3)} I + \alpha_{2h}^{(3)} E_0 E_h^*) e^{-\mu' z/\cos\theta}] E_0 = 0.
\end{gathered} \tag{3}$$

Здесь s_0 и s_h – безразмерные переменные вдоль направлений проходящего и дифрагированного пучков, соответственно, связанные с размерными величинами соотношениями $s_{0,h}$ (безразм.) = $s_{0,h}$ (разм.)$|\chi^{(1)}_{hr}|/\lambda$, где λ – длина волны используемого излучения, $\alpha^{(3)}_{0,h,2h} = \eta^{(3)}_{0,h,2h}/|\eta^{(3)}_{hr}|$ и $\beta^{(1)}_{h,-h} = \chi^{(1)}_{h,-h}/|\chi^{(1)}_{hr}|$. Амплитуды в (3) выражаются через амплитуды в (1) согласно соотношениям $E_{0,h}$ (в системе (3)) = $E_{0,h}$ (в системе (1))/ $(I_{\text{cr}}/3)^{1/2}$, вследствие чего интенсивности будут выражаться в единицах $I_{\text{cr}}/3$. Значения $\alpha^{(3)}_r$ можно конкретизировать, используя значения линейных частей поляризуемостей и соотношение (2), тогда как конкретные значения $\alpha^{(3)}_i$ должны заимствоваться из опыта. Так как эти величины для рентгеновского диапазона не измерены, то их можно выбрать, учитывая, что отношение $\eta^{(3)}_r/\eta^{(3)}_i \sim |\chi^{(1)}_r|/|\chi^{(1)}_i|$ для тех же отражений. Безразмерные координаты связаны с соответствующими размерными величинами z (безразм.) = z (разм.)/Λ^L и x (безразм.) = x (разм.)/$(\Lambda^L \tan\theta)$, где $\Lambda^L = \lambda\cos\theta/|\chi^{(1)}_{hr}|$ – экстинкционная длина линейной теории и $\mu' = \mu\,\Lambda^L$.

Для численного решения системы (3) используем хорошо известный из линейной теории алгоритм полушагового численного интегрирования уравнений Такаги [9,10] с тем отличием, что на каждом шаге вычислений амплитуд на выходе из данного слоя вместо постоянных значений поляризуемости имеем эффективные поляризуемости, модулированные амплитудами проходящей и дифрагированной волн. Для эффективных поляризуемостей берем их вычисленные значения на входе в данный слой.

3. Нелинейная динамическая дифракция узкого пучка

Как и в линейной теории, имеет определенный интерес исследование нелинейной дифракции узкого пучка рентгеновских лучей. В линейной теории, в симметричной геометрии Лауэ, узким считается пучок, поперечный размер $2a$ которого в плоскости дифракции вдоль вектора дифракции удовлетворяет неравенству $2a \ll 2\Lambda^L \tan\theta/\pi$ [11]. При этом реализуется дифракция сферической волны от точечного источника, расположенного на близком расстоянии от кристалла (случай дифракции Като) [12,13]. Согласно (1), характеристики при нелинейной дифракции те же, что и при линейной дифракции, поэтому для пространственно-ограниченной падающей волны дифракционное волновое поле будет существовать в тех же областях, что и в линейной теории [11]. В частности, для падающей сферической волны при дифракции Като поле существует в треугольнике Бормана с вершиной на источнике. При нелинейной дифракции представляет интерес исследование распределения интенсивностей (нормированные интенсивностью падающей волны) как в проходящей, так и в дифрагированной волнах

$$
\begin{aligned}
I_0'(x,z) &= \exp\left(-\frac{\mu' z}{\cos\theta}\right)\frac{I_0(x,z)}{I^i}, \\
I_h'(x,z) &= \exp\left(-\frac{\mu' z}{\cos\theta}\right)\frac{I_h(x,z)}{I^i},
\end{aligned} \tag{4}
$$

в зависимости как от глубины точки наблюдения в кристалле, так и от интенсивности падающей волны. Здесь $I_{0,h} = |E_{0,h}|^2$. Кроме того, для неоднородного пучка вместо коэффициентов прохождения и отражения следует ввести интегральные (пространственные) коэффициенты прохождения $T(z)$ и отражения $R(z)$. Эти величины определяются как

$$
\begin{aligned}
T(z) &= \exp\left(-\frac{\mu' z}{\cos\theta}\right)\int_{x_{\min}}^{x_{\max}} I_0(x,z)dx \bigg/ \int_{-a}^{a} I^i(x)dx, \\
R(z) &= \exp\left(-\frac{\mu' z}{\cos\theta}\right)\int_{x_{\min}}^{x_{\max}} I_h(x,z)dx \bigg/ \int_{-a}^{a} I^i(x)dx.
\end{aligned} \tag{5}
$$

Здесь $x_{\min}$ и $x_{\max}$ – координаты концов области на выходной поверхности кристалла, где существует поле, отличное от нуля. В выражениях (5) использованы безразмерные координаты. Для случая дифракции Като $x_{\min} = -z$ и $x_{\max} = z$.

Рассмотрим пример Si(220) симметричного отражения по Лауэ σ-поляризованного излучения с длиной волны λ = 0.71 Å (17.46 кэВ). Экстинкционная длина, соответствующая линейной поляризуемости, равна $\Lambda^L = 36.6$ мкм. Отклонение падающей волны от точного условия Брэгга $\Delta\theta = 0$ и $a = 0.1/\pi$ (в размерных координатах $a = 0.1\Lambda^L \tan\theta/\pi$). Значения Фурье-коэффициентов действительной и мнимой частей линейной поляризуемости взяты из [14]. Для определения Фурье-коэффициентов действительной части кубической поляризуемости используем (2), а для определения Фурье-коэффициентов мнимой части кубической поляризуемости берем $\eta^{(3)}_{0i,hi,2hi} = 0.01\eta^{(3)}_{0r,hr,2hr}$, что приблизительно равно отношению соответствующих Фурье-коэффициентов линейной части поляризуемости. При проведении численных расчетов используем уравнения дифракции (3) в безразмерном виде и применяем метод полушага.

Обратимся к результатам численных расчетов. На рис.1 показано распределение интенсивности дифрагированной волны $I_h'(x, z)$ в зависимости от x при $z = 5$ для двух значений интенсивности падающей волны $I^i = 0.1$ (пунктирная кривая) и $I^i = 0.5$ (сплошная кривая); при этом $\mu' z = 0.27$. Как видно из рисунка, в нелинейном случае интенсивность несимметрична по x, причем, осцилляции для $I^i = 0.1$ сглажены для $x > 0$, что, по видимому, обусловлено уменьшением одной из интерферирующих мод. Это более отчетливо видно для $I^i = 0.5$, где наблюдается один максимум в области положительных x. Координата максимума (пика) относительно соответствующего максимума линейной теории и нелинейной

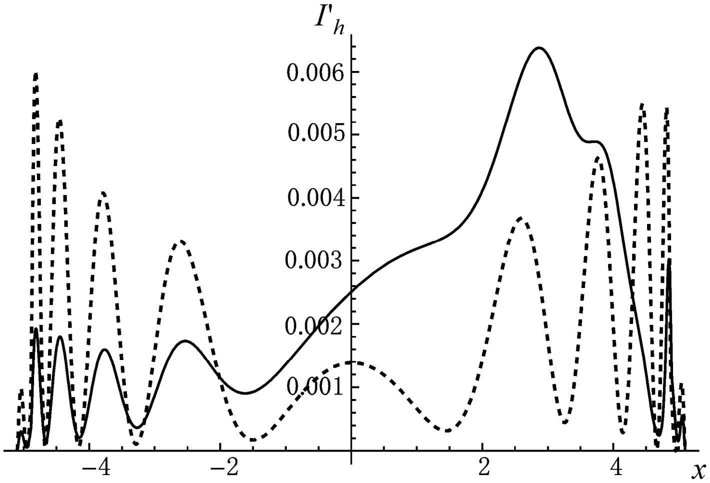

Рис.1. Распределение интенсивности дифрагированной волны на выходной поверхности кристалла: толщина кристалла $z = 5$. Интенсивность падающей волны $I^i = 0.1$ (пунктирная кривая) и $I^i = 0.5$ (сплошная кривая).

теории для $I^i = 0.1$ не смещена, а значение пика выше значения соответствующих максимумов как линейной теории, так и нелинейной теории при $I^i = 0.1$. В области отрицательных значений x координаты максимумов не смещены и значения максимумов стали меньше. Заметим, что в области положительных значений x наблюдаются два слабых максимума, координаты которых тоже не смещены. Это соответствует тому, что одна из интерферирующих мод дифрагирует с меньшей интенсивностью в области положительных x, тогда как обе моды дифрагируют с меньшей интенсивностью в области отрицательных x. Как показывают расчеты

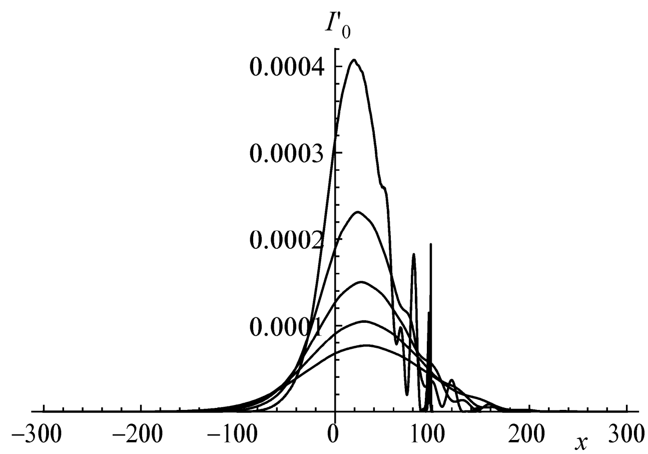

Рис.2. Распределение интенсивности проходящей волны на выходной поверхности толстого поглощающего кристалла для различных толщин от $z = 100$ до $z = 300$ с шагом $\Delta z = 50$. Интенсивность падающей волны $I^i = 0.5$.

для интенсивности $I^i = 0.1$, с увеличением толщины остается один максимум (пик). Образовавшиеся максимумы с увеличением толщины кристалла для проходящей волны смещаются в сторону положительных x, а для дифрагированной волны смещаются в сторону отрицательных x.

Соответствующие зависимости интенсивностей проходящей и дифрагированной волн показаны на рис.2 и 3 для различных возрастающих больших значений z. Интенсивность падающей волны $I^i = 0.5$. На рис.2 показаны распределения интенсивностей проходящей волны для значений толщины кристалла z от 100 до 300 с шагом $\Delta z = 50$, где $\mu' z$ изменяется от 5.5 до 16.4. На рис.3 показаны кривые распределения интенсивности дифрагированной волны для значений толщины кристалла z от 50 до 300 с тем же шагом $\Delta z = 50$, где $\mu' z$ изменяется от 5.5 до 16.4. Значения максимумов с увеличением толщины кристалла уменьшаются, поэтому нет необходимости нумеровать кривые на этих рисунках.

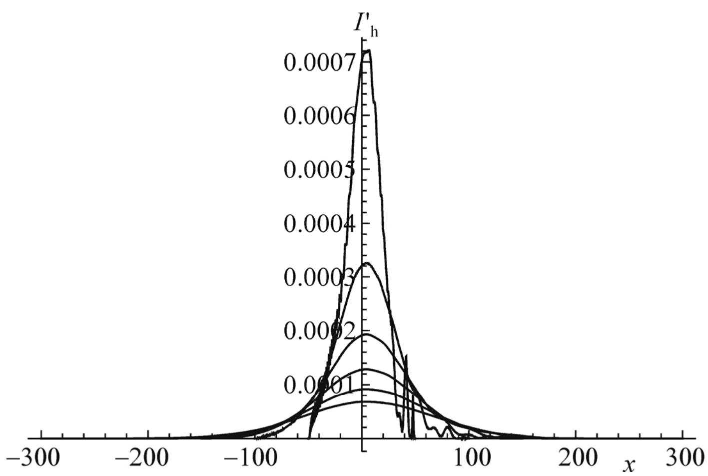

Рис.3. Распределение интенсивности дифрагированной волны на выходной поверхности толстого поглощающего кристалла для различных толщин от $z = 50$ до $z = 300$ с шагом $\Delta z = 50$. Интенсивность падающей волны $I^i = 0.5$.

Для сравнения на рис.4 приведены зависимости интенсивностей проходящей и дифрагированной волн от x при $z \approx 300$. Напомним, что в линейной теории для толстого поглощающего кристалла распределение интенсивности дифрагированной волны вследствие эффекта Бормана имеет вид гауссиана и его максимум находится в точке 0, а для проходящей волны вследствие того же эффекта с увеличением толщины кристалла максимум смещается в сторону отрицательных x и в пределе находится в точке $x = 0$. Таким образом, эффект Бормана в нелинейном случае выражается по другому, так как конкурирует с нелинейными эффектами. В линейной теории интегральные (пространственные) коэффициенты

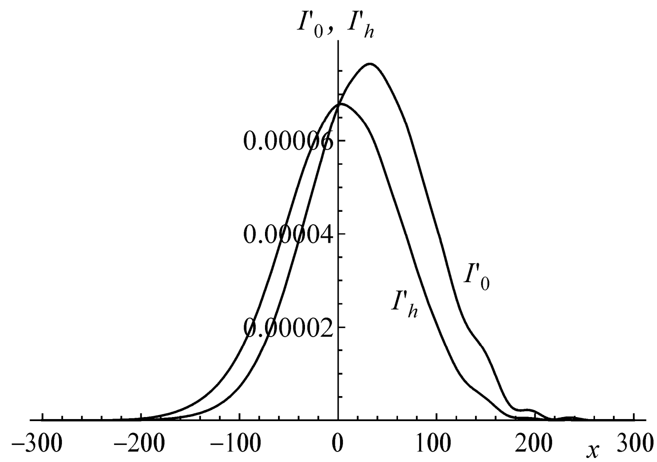

Рис.4. Сравнение интенсивностей проходящей и дифрагированной волн на выходной поверхности толстого поглощающего кристалла для $z = 300$ и $I^i = 0.5$ в нелинейном случае.

прохождения и отражения не зависят от интенсивности I^i падающей волны.

В нелинейной теории зависимости интегральных коэффициентов от интенсивности падающей волны для $z = 5$ показаны на рис.5. Интегральный коэффициент прохождения с увеличением интенсивности падающей волны уменьшается почти вдвое, а коэффициент отражения с увеличением интенсивности падающей волны увеличивается почти во столько же раз.

Линейная дифракция таких импульсов описывается зависящими от времени линейными уравнениями Такаги [15,16]. Рассмотрение нелинейной дифракции импульса требует вывода зависящих от времени нелинейных уравнений Такаги.

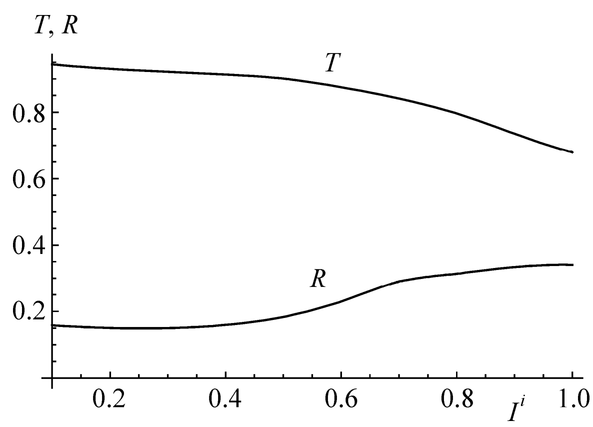

Рис.5. Зависимости интегральных (пространственных) коэффициентов прохождения и отражения от интенсивности падающей волны для толщины кристалла $z = 5$.

4. Заключение

Теоретически исследована двухволновая динамическая дифракция пространственно-неоднородной рентгеновской σ-поляризованной волны в идеальном кристалле с нелинейным кубическим откликом на напряженность электрического поля. Рассмотрена динамическая дифракция узкого падающего рентгеновского пучка. Приведены результаты численных расчетов нелинейного уравнения Такаги. Для тонкого кристалла распределение интенсивности дифрагированного пучка на выходной поверхности кристалла асимметрично относительно центра пучка, тогда как в линейном случае распределение интенсивности симметрично. С увеличением интенсивности падающего пучка распределение интенсивности для тонкого кристалла имеет один основной максимум. Для больших толщин кристалла кривая интенсивности дифрагированного пучка при относительно малых интенсивностях падающего пучка тоже имеет один основной максимум. С увеличением толщины кристалла максимум проходящей волны смешается в сторону, противоположную направлению вектора дифракции, а для дифрагированной волны – в направлении вектора дифракции. С увеличением толщины кристалла значения максимумов уменьшаются. Интегральные (пространственные) коэффициенты прохождения и отражения в линейной теории не зависят от интенсивности падающей волны. В нелинейном случае при фиксированной толщине кристалла интегральный коэффициент прохождения уменьшается, а интегральный коэффициент отражения возрастает.

Эксперименты можно проводить, используя рентгеновские источники синхротронного излучения и рентгеновские лазеры на свободных электронах.

Здесь рассматривалась дифракция монохроматической волны, между тем представляет большой интерес нелинейная дифракция рентгеновского импульса, т. к. и рентгеновские лазеры на свободных электронах и синхротронные источники испускают рентгеновские импульсы.

ЛИТЕРАТУРА

1. **A. Nazarkin, S. Podorov, I. Uschmann, E. Förster, and R. Sauerbrey.** Phys. Rev. A, **67**, 041804 (2003).
2. **K. Tamasaku, K. Ishikawa.** Phys. Rev. Lett., **98,** 244801 (2007).
3. **K. Tamasaku K., K. Ishikawa.** Acta Cryst. A, **63,** 437 (2007).
4. **C. Conti, A. Fratalocchi, G. Ruocco, F. Sette.** Optics Express, 16, 8324 (2008).
5. **M.K. Balyan.** Crystallography Reports, **7**, 993, 2015.
6. **R. Boyd**. Nonlinear Optics. New York, Academic, 2003.
7. **М.К. Балян.** Кристаллография, **7,** (2016) (принята к печати).
8. **M.K. Balyan.** J. Sync. Rad., **22,** 1410 (2015).
9. **A. Authier.** Dynamical Theory of X-ray Diffraction. Oxford, Oxford University Press, 2001.
10. **Y. Epelboin.** Acta Cryst. A, **33**, 758 (1977).

11. **И.Ш. Слободетский, Ф.Н. Чуховский.** Кристаллография, **15,** 1101 (1970).
12. **N.Kato.** Acta Cryst., **14,** 526 (1961).
13. **N.Kato.** Acta Cryst., **14**, 627 (1961).
14. **З.Г.Пинскер.** Рентгеновская кристаллооптика. Москва, Наука, 1982.
15. **Л.В.Левонян, К.Г.Труни.** Изв. АН Арм ССР, Физика, **13**, 108 (1978).
16. **Л.В.Левонян, К.Г.Труни.** Изв. АН Арм ССР, Физика, **14**, 253 (1979).

ՌԵՆՏԳԵՆՅԱՆ ՏԱՐԱԾԱԿԱՆՈՐԵՆ ԱՆՀԱՄԱՍԵՌ ՓՆՋԻ ԴԻՖՐԱԿՑԻԱՆ ԵՐՐՈՐԴ ԿԱՐԳԻ ՈՉ ԳԾԱՅՆՈՒԹՅԱՄԲ ԲՅՈՒՐԵՂՈՒՄ

Մ.Կ. ԲԱԼՅԱՆ

Տեսականորեն հետազոտված է տարածականորեն անհամասեռ ռենտգենյան ալիքի դիֆրակցիան արտաքին դաշտի լարվածության երրորդ կարգի ոչ գծային արձագանքով բյուրեղում: Թվային հաշվարկի օգնությամբ ընկնող նեղ փնջի երկալիքային դիֆրակցիայի համար ուսումնասիրված են ինտենսիվության բաշխումները բյուրեղի ելքի մակերևույթին կախված հաստությունից և ընկնող փնջի ինտենսիվությունից: Բերված են անցման և անդրադարձման ինտեգրալ (տարածական) գործակիցների թվային հաշվարկների արդյունքները կախված ընկնող փնջի ինտենսիվությունից բյուրեղի հաստության սևեռված արժեքի համար:

DIFFRACTION OF AN X-RAY SPATIALLY INHOMOGENEOUS BEAM IN A CRYSTAL WITH THIRD-ORDER NONLINEARITY

M.K. BALYAN

The diffraction of a spatially inhomogeneous X-ray wave in a crystal with the third-order nonlinear response to the strength of an external field is theoretically considered. For the two-beam diffraction case by means of numerical calculations for a narrow incident beam the intensity distributions on the exit surface of the crystal depending on the thickness and on the intensity of the incident wave are investigated. The results of numerical calculations of the integral (spatial) transmission and reflection coefficients depending on the intensity of the incident wave for a fixed thickness of the crystal are presented.

ԲՈՎԱՆԴԱԿՈՒԹՅՈՒՆ

CONTENTS

СОДЕРЖАНИЕ

Заказ № 721
Тираж 150. Сдано в набор 07.09.2016.
Подписано к печати 15.09.2016. Печ. л. 8.25.
Бумага офсетная. Цена договорная.
Типография НАН РА. Ереван, пр. Маршала Баграмяна, 24.