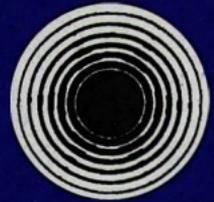


ՓԻԶԻԿԱ · ՖԻԶԻԿԱ · PHYSICS



ИЗВЕСТИЯ
НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК АРМЕНИИ

ՏԵՂԵԿԱԳԻՐ
ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԶԳԱՅԻՆ ԱԿԱԴԵՄԻԱՅԻ

PROCEEDINGS
OF NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF ARMENIA

ՅՃԿԿԵ

ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ՀԱՆՐԱՊԵՏՈՒԹՅԱՆ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԶԳԱՅԻՆ ԱԿԱԴԵՄԻԱ
НАЦИОНАЛЬНАЯ АКАДЕМИЯ НАУК РЕСПУБЛИКИ АРМЕНИЯ

ՏԵՂԵԿԱԳԻՐ ИЗВЕСТИЯ
ՖԻԶԻԿԱ ФИЗИКА

ՀԱՏՈՐ ТОМ

53

№ 1



ՀՀ ԳԱՍ "ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆ" ՀՐԱՏԱՐԱԿՉՈՒԹՅՈՒՆ

ИЗДАТЕЛЬСТВО "ТИТУЛОН" НАН РА

ԵՐԵՎԱՆ

ЕРЕВАН

2018

ՀԱՅԿԱՍՏԱՆԻ ԱՆՔՆԱԿԱԿԱՆ ԳԱՐԿԱՆՈՒԹՅԱՆ
ՖԻԶԻԿԱԿԱՆ ԻՆՏԵՐՆԱԿԱՆ ԻՆՏԵՐԻՆՍԻՏԵՏ

ԳԵՂԱՐՅԱՆ ԳՐԱԴԱՐԱՆ

88

1981

Журнал издается с 1966 г.
Выходит 4 раза в год
на русском и английском языках

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

В. М. Арутюнян, главный редактор
А. В. Папоян, зам главного редактора
К. М. Гамбарян, ответственный секретарь
А. А. Ахумян
Э. М. Казарян
Р. Б. Костанян
А. О. Меликян
А. Р. Мкртчян
Д. Г. Саркисян
А. М. Сирунян
Э. Г. Шароян

ԽՄԲԱԳՐԱԿԱՆ ԿՈՒԵԳԻԱ

Վ. Մ. Հարությունյան, գլխավոր խմբագիր
Ա. Վ. Պապոյան, գլխավոր խմբագրի տեղակալ
Կ. Մ. Դամբարյան, պատասխանատու քարտուղար
Ա. Ա. Հախումյան
Է. Մ. Ղազարյան
Ռ. Բ. Կոստանյան
Ա. Հ. Մելիքյան
Ա. Ռ. Մկրտչյան
Դ. Հ. Սարգսյան
Ա. Մ. Միրունյան
Է. Գ. Շառոյան

EDITORIAL BOARD

V. M. Aroutiounian, editor-in-chief
A. V. Papoyan, associate editor
K. M. Gambaryan, executive secretary
A. A. Hakhumyan
E. M. Kazaryan
R. B. Kostanyan
A. O. Melikyan
A. R. Mkrtchyan
D. H. Sarkisyan
A. M. Sirunyan
E. G. Sharoyan

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

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

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

УДК 530.145

УРАВНЕНИЯ РЕЛЯТИВИСТСКОЙ И КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ И ТОЧНЫЕ РЕШЕНИЯ НЕКОТОРЫХ ЗАДАЧ

В.М. МЫХИТАРЯН

Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак, Армения

e-mail: vm@ipr.sci.am

(Поступила в редакцию 13 декабря 2017 г.)

Предложены релятивистские инвариантные уравнения для функции действия и волновой функции на основе инвариантности представления обобщённого импульса. Уравнения имеют решения при любых значениях постоянной взаимодействия частицы с полем, например, в задаче водородоподобного атома, когда атомный номер ядра $Z > 137$. На основе параметрического представления действия выведены выражение для канонического лагранжиана, уравнения движения и выражение для силы, действующей на заряд при движении во внешнем электромагнитном поле. Представлено уравнение Дирака с корректным включением взаимодействия для частицы во внешнем поле. В таком виде решения уравнений не ограничены значением постоянной взаимодействия. Приведены решения задачи движения заряда в постоянном электрическом поле, задачи для частицы в потенциальной яме и прохождения частицы через потенциальный барьер, а также задачи атома водорода.

1. Введение

Для всякой теории квантовой механики существуют два камня преткновения – задача частицы в потенциальной яме и задача атома водорода, результаты решений которых определяют пригодность новых подходов. Первая выявляет соответствие решения фундаментальному в физике соотношению неопределённости, а вторая показывает насколько точно результаты решения задачи атома водорода в рамках новой теории соответствуют экспериментальным данным спектра атома водорода.

В 1913 г. Бор на основе эмпирических формул Бальмера построил модель атома на основе квантования орбитального момента [1], которая впоследствии была дополнена более общими правилами квантования Зоммерфельда. В эти годы, естественно, не предполагалось наличие спина или собственного магнитного момента у частицы или, тем более, какое-либо спин-орбитальное взаимодействие или взаимодействие с ядерным спином. О них начали серьёзно

задумываться после 1925 г., когда была опубликована работа Уленбека и Гаудсмита о спине [2].

В 1916 г. Зоммерфельд в рамках релятивистских подходов без учёта спина вывел формулу для уровней энергии водородоподобного атома [3]. Зоммерфельд исходил из модели атома Бора и для вывода своей формулы воспользовался релятивистским соотношением между импульсом \mathbf{p} и энергией E свободной частицы с массой m

$$E^2 - (\mathbf{p}c)^2 = (mc^2)^2, \quad (1)$$

где c – скорость света.

Для частицы с зарядом q во внешнем поле с четырёхмерным потенциалом (ϕ, \mathbf{A}) предполагалось, что это соотношение также можно использовать, если вычесть из выражения обобщённого импульса частицы компоненты четырёхмерного импульса поля $(q\phi, q\mathbf{A})$:

$$(E - q\phi)^2 - (\mathbf{p}c - q\mathbf{A})^2 = (mc^2)^2. \quad (2)$$

В случае кулоновского потенциала $\phi = Ze|e|/r$, где e – заряд электрона, r – расстояние от ядра и Z – атомный номер, в сферических координатах получается

$$p_r^2 + r^2 p_\phi^2 = p_r^2 + \frac{L^2}{r^2} = \frac{(E + Ze^2/r)^2 - (mc^2)^2}{c^2}, \quad (3)$$

где L – момент импульса. Условия квантования Бора–Зоммерфельда принимают вид

$$\oint p_\phi d\phi = \hbar n_\phi, \quad (4)$$

$$\oint p_r dr = \oint \sqrt{\frac{(E + Ze^2/r)^2 - (mc^2)^2}{c^2} - \frac{L^2}{r^2}} dr = \hbar n_r,$$

где n_ϕ и n_r – соответственно орбитальное и радиальное квантовые числа.

Зоммерфельд получил для уровней энергии формулу

$$E_{n,l} = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \frac{(Z\alpha)^2}{\left(n - \frac{(Z\alpha)^2}{l+1/2 + \sqrt{(l+1/2)^2 - (Z\alpha)^2}} \right)^2}}}, \quad (5)$$

где главное квантовое число $n = n_r + l + 1 = 1, 2, 3, \dots$, $l = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$ и $\alpha = e^2/\hbar c = 1/137.036$ – постоянная тонкого расщепления. Однако в изданной 1916 г. работе [3] Зоммерфельд «удачно ошибся» [4] и выведенная формула была изложена в виде

$$E_{n,l} = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \frac{(Z\alpha)^2}{\left(n - \frac{(Z\alpha)^2}{l+1 + \sqrt{(l+1)^2 - (Z\alpha)^2}}\right)^2}}}. \quad (6)$$

Формула (6) прекрасно описывала все тонкости строения спектра водорода и других подобных атомов с предельной для тех лет точностью измерений, и сомнений в правильности самой формулы не возникало. Поэтому формулу Зоммерфельда восприняли как эмпирическую, а вместо квантового числа l ввели внутреннее «таинственное» квантовое число с полуцелыми значениями $j = 1/2, 3/2, 5/2, \dots$, а формулу (6) использовали в представлении

$$E_{n,j} = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \frac{Z^2\alpha^2}{\left(n - \frac{Z^2\alpha^2}{j+1/2 + \sqrt{(j+1/2)^2 - Z^2\alpha^2}}\right)^2}}}, \quad (7)$$

где $n = n_r + j + 1/2 = 1, 2, 3, \dots$, $j = 1/2, 3/2, 5/2, \dots, n - 1/2$, а l принимает значения $l = 0$ при $j = 1/2$ и $l = j \pm 1/2$ при остальных. Эта формула совпала с результатом точного решения релятивистских уравнений Дирака в 1928 г. [5] для частицы со спином $1/2$ с классическим выражением потенциальной энергии неподвижного заряда в кулоновском поле ядра с атомным номером Z в виде $U(r) = Ze^2/r$.

Формула (7) также указывала на странное ограничение величины заряда ядра с атомным номером $Z < 137$, больше которого формула теряла смысл. Было также понятно, что в рамках изложенных подходов никак ни описываются сильные и гравитационные взаимодействия, движения планет. Проблема $Z > 137$ или $\alpha > 1$ так и осталась нерешённой задачей релятивистской квантовой механики.

Разложив формулу (7) по порядку степеней $(Z\alpha)^2$ в ряд Тейлора с точностью до членов в степени $(Z\alpha)^6$, имеем

$$E_{n,j} = mc^2 - \frac{(Z\alpha)^2}{2n^2} - \frac{(Z\alpha)^4}{2n^3} \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right) + \dots \quad (8)$$

В 1925–1926 г. Шрёдингер работал над выводом уравнения для волновой функции частицы, описывающей волны Де Бройля [6]. Вывод уравнения также был основан на релятивистском соотношении (1) между импульсом \mathbf{p} и энергией E частицы, которое он представил с помощью операторов квадратов энергии и импульса в виде уравнения для волновой функции

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right)^2 \Psi - c^2 \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right)^2 \Psi = (mc^2)^2 \Psi. \quad (9)$$

Как и Зоммерфельд, для частицы во внешнем поле Шрёдингер воспользовался представлением

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - q\phi\right)^2 \Psi + c^2 \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right)^2 \Psi = (mc^2)^2 \Psi. \quad (10)$$

Для атома водорода, в случае стационарных состояний заряженной частицы в поле кулоновского потенциала, нужно было решить уравнение

$$\Delta^2 \Psi + \frac{m^2 c^4 - (E + Ze^2/r)^2}{\hbar^2 c^2} \Psi = 0. \quad (11)$$

Решая это уравнение, Шрёдингер, как и Зоммерфельд, получил формулу (5), которая не точно описывала строение спектра водорода. А из решения задачи для частицы в потенциальной яме получается, что частица с длиной волны $\lambda = \hbar/mc$ имеет связанные состояния (помещается) в яме произвольного размера и, в частности, размерами намного меньше $\lambda/2$. Это противоречит фундаментальному принципу квантовой (волновой) теории – принципу неопределённости.

В 1925 г. Шрёдингер послал эту работу в редакцию *Annalen der Physik* [7], но потом забрал рукопись, отказался от релятивистских подходов и в 1926 г. построил волновое уравнение на основе классического выражения гамильтониана – уравнение Шрёдингера [8]

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U; \quad \rightarrow \quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \Psi = \left(\frac{1}{2m} \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\right)^2 + U\right) \Psi. \quad (12)$$

Уравнение (12) лишь качественно описывало спектр атома водорода, однако не имело каких-либо неразумных ограничений или сингулярных решений в виде формулы Зоммерфельда–Дирака. Релятивистское уравнение для частицы без спина на основе волнового уравнения опубликовали Клейн [9], Фок [10] и Гордон [11] в 1926 г., которое называют уравнением Клейна–Фока–Гордона.

С открытием спина ситуация резко изменилась, и в 1926 г. Гейзенберг и Джордан в работе [12] показали, что в рамках описания Паули спина электрона половина энергии спин-орбитального взаимодействия равна члену со степенью α^4 в разложении в ряд Тейлора формулы Зоммерфельда (8).

Почему именно половина, в 1927 г. Томас в работе [13] попытался объяснить это наличием релятивистской прецессии электрона в системе отсчёта движения по орбите. Энергия томасовской прецессии как раз и равна половине значения энергии спин-орбитального взаимодействия с обратным (положительным) знаком, которую следует добавлять к энергии спин-орбитального взаимодействия. Но некорректное предположение одинаковой частоты прецессии Томаса в обеих системах отсчёта и отсутствие общего и корректного вывода для

неинерциальных (вращающихся) систем отсчёта не придавали уверенности результатам таких подходов. Причина возникновения половины энергии спин-орбитального взаимодействия в формуле Зоммерфельда исследуется до сих пор и является одной из нерешённых проблем современной физики.

С другой стороны, при выводе своей формулы Зоммерфельд, как и при решении уравнения Клейна–Фока–Гордона для задачи атома водорода [14], изначально ни спин, ни энергия спин-орбитального взаимодействия не учитываются. Поэтому полученное тонкое расщепление никак не может быть обусловлено спин-орбитальным взаимодействием. Это – релятивистский, но чисто механический эффект, когда масса (инерционность) частицы уже зависит от скорости движения по орбите (момента импульса), из-за чего меняется радиальное движение электрона, и наоборот. Именно эта зависимость приводит к расщеплению уровней энергии электрона и невозможности введения лишь одного, главного квантового числа. Но даже при таком предположении порядок расщепления уровней по формуле (8) противоречит логике – чем больше орбитальный момент, тем меньше энергия расщепленного уровня.

Матричное представление волнового уравнения 2-ого порядка (9) системой уравнений 1-ого порядка и есть построение Дирака [15] (матрицы Дирака – частное представление чисел Клиффорда–Липшица [16]) релятивистского уравнения электрона. В стандартном представлении для свободной частицы уравнение Дирака имеет вид [17]

$$\begin{aligned}\hat{\varepsilon}\phi - \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}\chi &= mc\phi, \\ -\hat{\varepsilon}\chi + \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}\phi &= mc\chi,\end{aligned}\tag{13}$$

где

$$\mathbf{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\tag{14}$$

– матрицы Паули (единичная матрица в формулах опущена).

Для частицы во внешнем поле уравнение (13) принято записывать в виде

$$\begin{aligned}\left(\hat{\varepsilon} - \frac{q}{c}\varphi\right)\phi - \boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right)\chi &= mc\phi, \\ -\left(\hat{\varepsilon} - \frac{q}{c}\varphi\right)\chi + \boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right)\phi &= mc\chi,\end{aligned}\tag{15}$$

где для инвариантного представления в случае свободной частицы уравнения составлены для разности обобщённого импульса и импульса поля.

В результате точного решения именно этого уравнения в случае потенциальной энергии неподвижного заряда в кулоновском поле и получается формула

Зоммерфельда–Дирака, в которой опять же, хотя и для системы со спином $1/2$, изначально никак не учитывается энергия спин-орбитального взаимодействия, но половинка получается из точного решения задачи атома водорода.

Более точные измерения Лэмба в 1947 г. и последующие уточнения спектра атома водорода выявили, что кроме линий с максимальным j все остальные также расщеплены и несколько смещены (сдвиг Лэмба). Для согласования результатов теории с более точными экспериментальными данными спектра атома водорода пришлось предложить иные решения и подходы, чем были заложены при выводе уравнения Дирака.

Новые теоретические подходы ничего не дали и лишь переполнили теорию нелогичными и нефизическими предложениями для преодоления возникающей сингулярности решений: перенормировки, конечной разности бесконечностей с нужным значением разности и т. п. Учёт размера ядра подправил только значение Z в большую сторону, но принципиально не решил проблему $Z > 137$. Также получен невероятный результат для задачи атома водорода, что с наибольшей вероятностью электрон находится в центре атома, т. е. в ядре.

Результаты решения задачи для частицы в потенциальной яме как в случае уравнения Клейна–Фока–Гордона, так и в случае уравнения Дирака противоречат основному принципу квантовой механики – принципу неопределённости. Из решений получается, что частица может находиться в связанном состоянии в яме с любыми размерами, в частности, с размером намного меньшим, чем длина волны самой частицы $\lambda = h/mc$ [17].

Несмотря на то, что Дирак предложил систему линейных релятивистских уравнений первой степени в матричном представлении, которые описывали систему со спином $1/2$, противоречия не исчезли, а сам он так и остался недовольным полученными результатами своей теории. Как писал Дирак в 1956 г. [18], «развитие релятивистской теории электрона можно рассматривать сейчас как пример того, как неверные доводы приводят иногда к ценному результату». В семидесятые годы уже стало ясно, что релятивистской теории квантовой механики не существует и следует искать новые, фундаментальные подходы и уравнения для построения непротиворечивой теории релятивистской квантовой механики. А в восьмидесятые годы Дирак уже говорил о непреодолимых трудностях имеющейся квантовой теории и необходимости создания новой.

Причина краха этих теорий довольно простая – не учитывается зависимость энергии взаимодействия частицы с полем от скорости движения частицы. Обобщённый импульс системы частица + внешнее поле представляется как сумма релятивистского выражения механического импульса частицы и импульса поля в случае взаимодействия с покоящейся частицей в виде

$$\mathbf{P} = (\varepsilon, \mathbf{p}) = \frac{1}{c} \left(\frac{mc^2}{\sqrt{1-\beta^2}} + q\varphi, \frac{mc^2}{\sqrt{1-\beta^2}} \boldsymbol{\beta} + q\mathbf{A} \right), \quad \mathbf{P}^2 \neq \text{inv}, \quad (16)$$

что не является инвариантным представлением от скорости частицы. Для построения какого-то инварианта из такого представления во всех случаях использовали «инвариантное» соотношение в виде разности обобщённого импульса системы и импульса поля в случае взаимодействия с покоящейся частицей

$$\begin{aligned} (\varepsilon - q\varphi, \mathbf{p} - q\mathbf{A}) &= \frac{1}{c} \left(\frac{mc^2}{\sqrt{1-\beta^2}}, \frac{mc^2}{\sqrt{1-\beta^2}} \boldsymbol{\beta} \right), \\ (\varepsilon - q\varphi)^2 - (\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 &= (mc)^2. \end{aligned} \quad (17)$$

Очевидно, что перестановка компонент обобщённого импульса для построения инварианта не решает поставленную задачу. Утверждение, что выражение (17) является механическим импульсом частицы и поэтому также инвариантом, бездоказательно, и следует воспринимать формулу (17) как эмпирическую. Поэтому при больших скоростях или сильных взаимодействиях уже проявляется неучтённая зависимость энергии взаимодействия частицы с полем от скорости движения частицы, приводящая к ошибочным результатам или невозможности расчётов.

В работе [19] было предложено инвариантное представление обобщённого импульса системы, учитывающее зависимость энергии взаимодействия частицы с полем от скорости

$$\mathbf{P} = (\varepsilon, \mathbf{p}) = \frac{1}{c} \left(\frac{mc^2 + q\varphi + q\boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{A}}{\sqrt{1-\beta^2}}, \frac{(mc^2 + q\varphi)\boldsymbol{\beta} + q\mathbf{A}_{\parallel}}{\sqrt{1-\beta^2}} + q\mathbf{A}_{\perp} \right), \quad (18)$$

$$\mathbf{P}^2 = \varepsilon^2 - \mathbf{p}^2 = \frac{(mc^2 + q\varphi)^2 - (q\mathbf{A})^2}{c^2}, \quad (19)$$

что является четырёхмерным представлением обобщённого импульса системы на основе выражения обобщённого импульса частицы в состоянии покоя

$$\mathbf{P}_0 = (\varepsilon_0, \mathbf{p}_0) = \frac{1}{c} (mc^2 + q\varphi, q\mathbf{A}), \quad (20)$$

инвариант которого, вне зависимости от состояния системы, всегда равен выражению (19).

Применение вариационных принципов для построения релятивистской и квантовой теории было основано на принципах построения механики с помощью лагранжиана системы [20], изначально не предназначенного для релятивистских подходов. Построение Лагранжа является параметрическим с выделенной одной

переменной времени $\tau = ct$ из переменных четырёхмерного пространства (остальные представлены зависимостью от этой переменной τ) и содержит полный дифференциал по этой переменной – скорость частицы. Такое построение неприемлемо из-за невозможности применения принципа инвариантности представления переменных и ковариантного представления действия системы.

В работе [21] для построения релятивистской теории на основе вариационных принципов рассмотрены канонические (непараметрические) решения вариационной задачи для канонически определённых интегральных функционалов и приведены канонические решения вариационных задач механики в пространствах Минковского. На основе объединения вариационных принципов наименьшего действия, потока и гиперпотока получены канонически-инвариантные уравнения для обобщённого импульса. Из этих уравнений выведены уравнения для функции действия и волновой функции как общее решение объединённой вариационной задачи механики.

В настоящей работе представлены обобщённый принцип инвариантности и соответствующее представление обобщённого импульса системы, уравнения релятивистской и квантовой механики, приведены решения задач движения заряда в постоянном электрическом поле, частицы в потенциальной яме, прохождения частицы через потенциальный барьер, а также задачи атома водорода.

2. Обобщение принципа инвариантности и инвариантное представление обобщённого импульса

Принцип инвариантности представления обобщённого импульса применим и в случае движения частицы со скоростью \mathbf{v} и в случае перехода в систему отсчёта, движущуюся со скоростью \mathbf{V} .

Четырёхмерный импульс частицы \mathbf{P} с массой покоя m при движении со скоростью $\boldsymbol{\beta} = \mathbf{v}/c$ представляется в виде

$$\mathbf{P} = (\varepsilon, \mathbf{p}) = \left(\frac{mc}{\sqrt{1-\beta^2}}, \frac{mc}{\sqrt{1-\beta^2}} \boldsymbol{\beta} \right), \quad \mathbf{P}^2 = \varepsilon^2 - \mathbf{p}^2 = (mc)^2, \quad (21)$$

Это – свойство инвариантности представления четырёхмерного импульса \mathbf{P} через скорость движения частицы $\boldsymbol{\beta} = \mathbf{v}/c$.

Если рассмотреть представление четырёхмерного импульса покоящейся частицы с массой m при переходе в систему отсчёта, движущуюся со скоростью $\boldsymbol{\beta}' = \mathbf{V}/c$, то для четырёхмерного импульса частицы \mathbf{P} имеем

$$\mathbf{P} = (\varepsilon, \mathbf{p}) = \left(\frac{mc}{\sqrt{1-\beta'^2}}, \frac{mc}{\sqrt{1-\beta'^2}} \boldsymbol{\beta}' \right), \quad \mathbf{P}^2 = \varepsilon^2 - \mathbf{p}^2 = (mc)^2. \quad (22)$$

Это – свойство инвариантности представления четырёхмерного импульса \mathbf{P} через скорость движения системы отсчёта $\boldsymbol{\beta}' = \mathbf{V}/c$.

Для инварианта системы I имеем

$$I^2 = \mathbf{P}^2 = \varepsilon^2 - \mathbf{p}^2 = (\varepsilon_0)^2 = (mc)^2. \quad (23)$$

При $\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\beta}' = 0$ получим

$$\mathbf{P} = (\varepsilon, \mathbf{p})|_{\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{\beta}'=0} = \varepsilon_0 (1, 0) = mc(1, 0). \quad (24)$$

Таким образом, обобщённый импульс частицы имеет инвариантное представление от скорости движения частицы \mathbf{v} и от скорости движения системы отсчёта \mathbf{V} . Это свойство следует рассматривать как следствие общего принципа относительности движения. Соответственно, обобщённый импульс частицы \mathbf{P} является инвариантом вне зависимости от состояния системы.

Если заряженная частица находится во внешнем электромагнитном поле с потенциалами (φ, \mathbf{A}) , то неподвижный заряд чувствует поле именно с такими потенциалами. Если же заряд имеет отличную от нуля скорость \mathbf{v} , то он будет взаимодействовать с полем иначе. Для определения взаимодействия для движущегося со скоростью \mathbf{v} заряда можно исходить из принципа относительности движения. Действующие значения силы или взаимодействия движущегося со скоростью \mathbf{v} заряда с полем те же самые, что и в случае, когда заряд неподвижен, а поле движется со скоростью $-\mathbf{v}$ (в лабораторной системе отсчёта).

Более наглядно это демонстрируется на примере эффекта Доплера для двух атомов в поле резонансного излучения, когда один из них в покое, а другой движется со скоростью \mathbf{v} . Находящийся в покое атом поглощает фотон, а движущийся не поглощает или слабо взаимодействует с полем из-за зависимости взаимодействия от скорости атома. Также известно, что действующее поле для движущегося со скоростью \mathbf{v} атома соответствует взаимодействию с движущимся со скоростью $-\mathbf{v}$ полем.

Таким образом, для движущегося заряда действующие значения потенциалов (φ', \mathbf{A}') (в лабораторной системе отсчёта) запишутся в виде [22]

$$(\varphi', \mathbf{A}') = \left(\frac{\varphi + \boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{A}}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \mathbf{A}_\perp + \frac{\mathbf{A}_\parallel + \varphi \boldsymbol{\beta}}{\sqrt{1 - \beta^2}} \right). \quad (25)$$

Если представить обобщённый импульс частицы в виде

$$\mathbf{P} = \frac{1}{c} \left(\frac{mc^2}{\sqrt{1 - \beta^2}} + q\varphi', \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \beta^2}} \boldsymbol{\beta} + q\mathbf{A}' \right), \quad (26)$$

где φ' и \mathbf{A}' – уже действующие значения потенциалов взаимодействия движущейся со скоростью \mathbf{v} частицы в поле с потенциалами φ и \mathbf{A} , то получим

$$\mathbf{P} = \frac{1}{c} \left(\frac{mc^2 + q\varphi + q\boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{A}}{\sqrt{1-\beta^2}}, \frac{(mc^2 + q\varphi)\boldsymbol{\beta} + q\mathbf{A}_{\parallel}}{\sqrt{1-\beta^2}} + q\mathbf{A}_{\perp} \right). \quad (27)$$

Выражение (27) можно представить в виде

$$\mathbf{P} = \left(\frac{mc^2 + q\varphi + q\boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{A}}{c\sqrt{1-\beta^2}}, \frac{mc^2 + q\varphi + q\boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{A}}{c\sqrt{1-\beta^2}} \boldsymbol{\beta} + \frac{q}{c} \mathbf{A} - \frac{q}{c} \frac{1}{1+\sqrt{1-\beta^2}} (\mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\beta}) \boldsymbol{\beta} \right) \quad (28)$$

или

$$\mathbf{P} = \left(\varepsilon, \quad \varepsilon \boldsymbol{\beta} + \frac{q}{c} \mathbf{A} - \frac{q}{c} \frac{1}{1+\sqrt{1-\beta^2}} (\mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\beta}) \boldsymbol{\beta} \right). \quad (29)$$

Для модуля I четырёхмерного вектора обобщённого импульса \mathbf{P} имеем

$$I^2 = \mathbf{P}^2 = \varepsilon^2 - \mathbf{p}^2 = \frac{(mc^2 + q\varphi)^2 - (q\mathbf{A})^2}{c^2}, \quad (30)$$

что является четырёхмерным представлением обобщённого импульса системы на основе выражения обобщённого импульса частицы в состоянии покоя

$$\mathbf{P}_0 = (\varepsilon_0, \mathbf{p}_0) = \frac{1}{c} (mc^2 + q\varphi, q\mathbf{A}), \quad (31)$$

инвариант которого определяется выражением (30).

Таким образом, обобщённый импульс частицы во внешнем поле не только инвариантен относительно преобразований при переходе из одной системы отсчёта в другую, но и имеет инвариантное представление через скорость движения частицы (27), а значение инварианта I в каждой точке пространства определяется выражением (30). Таким свойством обладает не только представление собственного импульса частицы (механическая часть), но и обобщённый импульс частицы вообще.

Обобщим этот результат в случае представления обобщённого импульса любых систем и взаимодействий, утверждая, что вне зависимости от состояния (движения) системы обобщённый четырёхмерный импульс всегда имеет инвариантное представление

$$\mathbf{P} = (\varepsilon, \mathbf{p}), \quad \Rightarrow \quad \mathbf{P}^2 = \varepsilon^2 - \mathbf{p}^2 = \varepsilon_0^2 - \mathbf{p}_0^2 = \pm I^2 = \text{inv}, \quad (32)$$

где ε и \mathbf{p} – энергия и импульс системы, а инвариант определяется модулем суммы компонент обобщённого импульса системы ε_0 и \mathbf{p}_0 в покое. Если частицы взаимодействуют с полем в виде $(\alpha\varphi, \alpha\mathbf{A})$, то инварианты обобщённого импульса системы представляются выражениями [18]

$$\begin{aligned}
\mathbf{P}_+^2 &= (\varepsilon_0 + \alpha\varphi)^2 - (\alpha\mathbf{A})^2 = \varepsilon_0^2 + 2\varepsilon_0\alpha\varphi + (\alpha\varphi)^2 - (\alpha A)^2, \\
\mathbf{P}_-^2 &= (\alpha\varphi)^2 - (\varepsilon_0\mathbf{n} + \alpha\mathbf{A})^2 = -\varepsilon_0^2 - 2\varepsilon_0\alpha\mathbf{n} \cdot \mathbf{A} + (\alpha\varphi)^2 - (\alpha A)^2, \\
\mathbf{P}_0^2 &= (\varepsilon_0 + \alpha\varphi)^2 - (\varepsilon_0\mathbf{n} + \alpha\mathbf{A})^2 = 2\varepsilon_0\alpha(\varphi - \mathbf{n} \cdot \mathbf{A}) + (\alpha\varphi)^2 - (\alpha A)^2.
\end{aligned} \tag{33}$$

Представим выражение инварианта $\varepsilon^2 - \mathbf{p}^2$ (30) в виде

$$\varepsilon^2 = \frac{E^2}{c^2} = \mathbf{p}^2 + \frac{(mc^2 + q\varphi)^2 - (q\mathbf{A})^2}{c^2} = \mathbf{p}^2 + m^2c^2 + 2mq\varphi + \frac{q^2}{c^2}(\varphi^2 - \mathbf{A}^2) \tag{34}$$

и разделим на $2m$. Группируя, получим гамильтониан H системы в виде

$$H = \frac{\varepsilon^2 - m^2c^2}{2m} = \frac{E^2 - m^2c^4}{2mc^2} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + q\varphi + \frac{q^2}{2mc^2}(\varphi^2 - \mathbf{A}^2), \tag{35}$$

т. е. получим формулу соответствия энергии системы E и энергии системы в классическом понимании H . Соответствие в виде $H = \mathbf{p}^2/2m + U(\tau, \mathbf{r})$ [20] будет полным и точным, если определить в классическом понимании потенциальную энергию взаимодействия U и энергию системы H как

$$U = q\varphi + \frac{q^2}{2mc^2}(\varphi^2 - \mathbf{A}^2), \quad H = \frac{E^2 - m^2c^4}{2mc^2} \Rightarrow E = \pm mc^2 \sqrt{1 + \frac{2H}{mc^2}}. \tag{36}$$

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

$$U = -e\varphi + \frac{e^2}{2mc^2}(\varphi^2 - \mathbf{A}^2) = -\frac{Ze^2}{r} + \frac{1}{2mc^2} \frac{Z^2e^4}{r^2} - \frac{e^2B^2}{8mc^2} r^2 \sin^2 \theta. \tag{37}$$

Заметим, что какая бы ни была зависимость потенциала φ , возможная минимальная потенциальная энергия $U_{\min} = -mc^2/2$, а потенциальная энергия в зависимости от векторного потенциала – всегда отрицательна. Независящее от характера взаимодействий жёсткое ограничение значения классической потенциальной энергии $U_{\min} = -mc^2/2$ приводит к фундаментальным изменениям в описании взаимодействий и пересмотру результатов классической механики. Возникновение отталкивания для притягивающих сил на малых расстояниях, обусловленное принципом неопределённости, явно отражено в выражении потенциальной энергии частицы.

Гамильтониан H может быть назван энергией и его значение остаётся постоянным в случае сохранения энергии E , но само значение H и его изменения отличаются от истинных значений энергии E и изменений её количества. Таким

образом, классические подходы допустимы только в случае малых скоростей, когда $H \ll mc^2$ и выражение энергии можно представить в виде

$$E = mc^2 \sqrt{1 + \frac{2H}{mc^2}} \approx mc^2 + H. \quad (38)$$

3. Уравнения релятивистской механики и канонический лагранжиан

Воспользуемся параметрическим представлением действия по Гамильтону в виде [20]

$$S = - \int_{t_1, \mathbf{r}_1}^{t_2, \mathbf{r}_2} (\varepsilon dt - \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r}) = - \int_{\mathbf{R}_1}^{\mathbf{R}_2} \mathbf{P} \cdot d\mathbf{R} = - \int_{\mathbf{R}_1}^{\mathbf{R}_2} \mathbf{P} \cdot \frac{d\mathbf{R}}{ds} ds = - \int_{\mathbf{R}_1}^{\mathbf{R}_2} (\mathbf{P} \cdot \mathbf{V}) ds \rightarrow \min, \quad (39)$$

где ds – четырёхмерный интервал и \mathbf{V} – четырёхмерная обобщённая скорость.

Функционал, учитывающий условие инвариантного представления обобщённого импульса $\mathbf{P}^2 = \varepsilon^2 - \mathbf{p}^2 = I^2 = \text{inv}$, можно составить методом неопределённых коэффициентов Лагранжа в виде

$$S = \int_{s_1}^{s_2} \left(-\mathbf{P} \cdot \mathbf{V} + \frac{\mathbf{P}^2 - I^2}{2\lambda} \right) ds = \int_{s_1}^{s_2} \left(\frac{(\mathbf{P} - \lambda \mathbf{V})^2 + \lambda^2 - I^2}{2\lambda} \right) ds \rightarrow \min, \quad (40)$$

где $\lambda = \lambda(s)$ – определяемый условием инвариантности представления заданный параметр. Так как λ и I заданы и не зависят от скорости, то имеем явное решение в виде

$$\mathbf{P} - \lambda \mathbf{V} = 0, \quad \lambda = \pm I(\tau, \mathbf{r}), \quad (41)$$

где четырёхмерный импульс представлен в виде

$$\mathbf{P} = I\mathbf{V} = \sqrt{\varepsilon^2 - \mathbf{p}^2} \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \eta^2}}, \frac{\boldsymbol{\eta}}{\sqrt{1 - \eta^2}} \right). \quad (42)$$

Таким образом, действие представляется в виде

$$S = \int_{s_1}^{s_2} I ds = \int_{\tau_1}^{\tau_2} \sqrt{\varepsilon^2 - \mathbf{p}^2} \sqrt{1 - \eta^2} d\tau, \quad (43)$$

а канонический лагранжиан системы определяется выражением

$$L = I\sqrt{1 - \eta^2} = \sqrt{\varepsilon^2 - \mathbf{p}^2} \sqrt{1 - \eta^2}. \quad (44)$$

Правильность представленной параметризации подтверждается полученными выражениями обобщённого импульса и энергии из лагранжиана системы в виде

$$\begin{aligned}\varepsilon &= \boldsymbol{\eta} \frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{\eta}} - L = \frac{I}{\sqrt{1-\eta^2}} = \frac{\sqrt{\varepsilon^2 - \mathbf{p}^2}}{\sqrt{1-\eta^2}}, \\ \mathbf{p} &= \frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{\eta}} = \frac{I}{\sqrt{1-\eta^2}} \boldsymbol{\eta} = \varepsilon \boldsymbol{\eta},\end{aligned}\tag{45}$$

которые совпадают с начальными представлениями обобщённого импульса и энергии. Соответственно, уравнение движения Лагранжа принимает вид

$$\frac{d\mathbf{p}}{d\tau} = -\frac{I}{\varepsilon} \frac{\partial I}{\partial \mathbf{r}}.\tag{46}$$

Если умножить уравнение (47) скалярно на $\mathbf{p} = \varepsilon \boldsymbol{\eta}$, то после приведения к полному дифференциалу по времени, получим

$$\frac{d\varepsilon^2}{d\tau} = \frac{\partial I^2}{\partial \tau}.\tag{47}$$

Если инвариант явно не зависит от времени, то энергия ε сохраняется и уравнение движения представляется в виде уравнения Ньютона

$$\frac{d\boldsymbol{\eta}}{d\tau} = -\frac{I}{\varepsilon^2} \frac{\partial I}{\partial \mathbf{r}}.\tag{48}$$

Для частицы во внешнем поле имеем

$$L = -\frac{1}{c} \sqrt{(mc^2 + q\varphi)^2 - (q\mathbf{A})^2} \sqrt{1-\eta^2/c^2}.\tag{49}$$

Уравнение Гамильтона–Якоби представляется в виде

$$\left(\frac{\partial S}{\partial \tau}\right)^2 - \left(\frac{\partial S}{\partial \mathbf{r}}\right)^2 = \frac{(mc^2 + q\varphi)^2 - (q\mathbf{A})^2}{c^2}\tag{50}$$

и оно отражает инвариантность представления обобщённого импульса. Известные представления уравнения Гамильтона–Якоби [22] содержат также дифференциальные формы потенциалов – компоненты электрического \mathbf{E} и магнитного \mathbf{H} полей.

Используя явный вид обобщённого импульса (29) с точностью разложения до степени β^2 , получим уравнение движения в виде

$$\frac{d}{d\tau} \left(\varepsilon - \frac{q}{2c} \mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\beta} \right) \boldsymbol{\beta} = q\mathbf{E} + q[\boldsymbol{\beta} \times \mathbf{B}] - \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left(\frac{q}{c} \mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\beta} + \frac{q^2}{2mc^2} (\varphi^2 - \mathbf{A}^2) \right),\tag{51}$$

где присутствуют зависящие от скорости частицы компоненты силы. В частности, зависящая от скорости сила присутствует в законе электромагнитной индукции Фарадея [23], отсутствующей в традиционном выражении силы Лоренца.

3.1. Движение электрона в постоянном электрическом поле

Рассмотрим движение электрона с массой m и зарядом $-e$ в постоянном электрическом поле между плоскими электродами с разностью потенциалов U и расстоянием l между ними. Для одномерного движения, принимая точку расположения катода как начало координат и анода в точке $x = l$, из формулы (50) имеем

$$\left(\frac{\partial S}{\partial \tau}\right)^2 - \left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 = \frac{(mc^2 + eU(1-x/l))^2}{c^2}. \quad (52)$$

Представим действие S в виде

$$S = -Et + f(x), \quad (53)$$

где $E = mc^2 + eU$ – энергия электрона в начале координат на поверхности катода под напряжением $-U$, в результате из (52) получим

$$S = -Et + \frac{1}{c} \int \sqrt{E^2 - \left(mc^2 + eU - qU \frac{x}{l}\right)^2} dx. \quad (54)$$

Решение находим из условия $\partial S / \partial E = \text{const}$. В результате интегрирования получим

$$t = \frac{l}{c} \left(1 + \frac{1}{\alpha}\right) \arccos\left(1 - \frac{\alpha}{1 + \alpha} \frac{x}{l}\right), \quad \alpha = qU / mc^2 \quad (55)$$

или

$$x = l \frac{1 + \alpha}{\alpha} \left(1 - \cos\left(\frac{\alpha}{1 + \alpha} \frac{ct}{l}\right)\right), \quad t \leq \frac{l}{c} \left(\frac{1 + \alpha}{\alpha}\right) \arccos\left(\frac{1}{1 + \alpha}\right). \quad (56)$$

Известное решение в рамках традиционной теории [22] следующее:

$$t = \frac{l}{\alpha c} \sqrt{\left(1 + \alpha \frac{x}{l}\right)^2 - 1} \quad \text{или} \quad x = l \frac{(\alpha ct/l)^2}{1 + \sqrt{1 + (\alpha ct/l)^2}}, \quad t \leq \frac{l}{c} \sqrt{1 + \frac{2}{\alpha}}. \quad (57)$$

Отношение времён пролёта промежутка между электродами ($x = l$) в ультрарелятивистском пределе $eU \gg mc^2$ по формулам (55) и (57) равно $\pi/2$ (рис.1).

3.2. Задача водородоподобного атома

Рассмотрим движение электрона с массой m и зарядом $-e$ в поле неподвижного ядра с зарядом Ze . Тогда задача сведётся к исследованию движения электрона в центрально-симметричном электрическом поле с потенциалом $-Ze^2/r$.

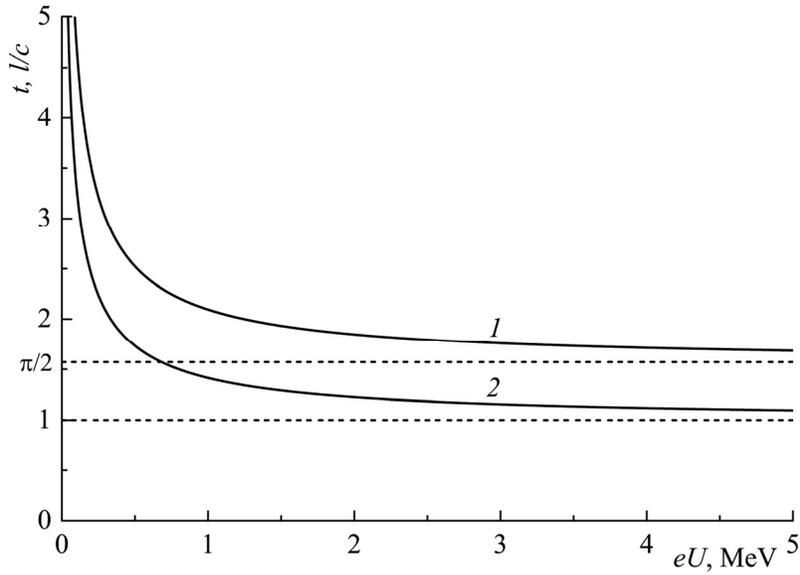


Рис.1. Зависимость времени пролёта промежутка между электродами от приложенного напряжения по формуле (55) (кривая 1) и (57) (кривая 2) в единицах l/c .

Выбирая полярные координаты (r, φ) в плоскости движения, получим уравнение Гамильтона–Якоби в виде

$$\left(\frac{\partial S}{\partial \tau}\right)^2 - \left(\frac{\partial S}{\partial r}\right)^2 - \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial S}{\partial \varphi}\right)^2 - \frac{(mc^2 - Ze^2/r)^2}{c^2} = 0. \quad (58)$$

Представим действие S в виде

$$S = -Et + M\varphi + f(r), \quad (59)$$

где E и M – постоянные энергия и момент импульса движущейся частицы. В результате получим

$$S = -Et + M\varphi + \frac{1}{c} \int \sqrt{E^2 - (mc^2)^2 + 2mc^2 \frac{Ze^2}{r} - \frac{M^2 c^2 + (Ze^2)^2}{r^2}} dr. \quad (60)$$

Траектории находим из условия $\partial S / \partial M = \text{const}$, откуда получаем

$$\varphi = \int \frac{Mc}{\sqrt{E^2 - (mc^2)^2 + 2mc^2 \frac{Ze^2}{r} - \frac{M^2 c^2 + Ze^2}{r^2}}} d\frac{1}{r}, \quad (61)$$

что приводит к решению

$$r = \frac{(Mc)^2 + (Ze^2)^2}{mc^2 Ze^2} \times \frac{1}{1 + \sqrt{\left(\frac{E}{mc^2}\right)^2 \left(1 + \left(\frac{Mc}{Ze^2}\right)^2\right) - \left(\frac{Mc}{Ze^2}\right)^2 \cos\left(\varphi \sqrt{1 + \left(\frac{Ze^2}{Mc}\right)^2}\right)}}. \quad (62)$$

Коэффициент отталкивающего эффективного потенциала существенно положительный, т. е. $M^2 c^2 + (Ze^2)^2 > 0$, поэтому какое-либо падение частицы на центр невозможно. Минимальный радиус $r_{\min} = r_0 (Z + 1)$, где $r_0 = e^2 / mc^2$ – классический радиус электрона.

Вековое смещение находим из условия

$$\varphi \sqrt{1 + (Ze^2 / Mc)^2} = 2\pi, \quad (63)$$

откуда получаем

$$\Delta\varphi = 2\pi - \frac{2\pi}{\sqrt{1 + (Ze^2 / Mc)^2}} \approx \pi \left(\frac{Ze^2}{Mc}\right)^2, \quad (64)$$

что имеет обратный знак по сравнению с решением в работе [22]. Причиной несовпадения знака является неучтённое взаимодействие собственного момента с вращающимся полем, т. е. спин-орбитальное взаимодействие.

4. Уравнения релятивистской квантовой механики для систем без спина

Пользуясь принципом инвариантного представления обобщённого импульса

$$\mathbf{P}^2 = \varepsilon^2 - \mathbf{p}^2 = I^2 = \text{inv}, \quad (65)$$

можно составить соответствующее уравнение релятивистской квантовой механики, представив переменные энергии и импульса соответствующими операторами $\hat{\varepsilon} = i\hbar \frac{\partial}{\partial \tau}$ и $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}$:

$$(\hat{\varepsilon})^2 \Psi - (\hat{\mathbf{p}})^2 \Psi = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial \tau}\right)^2 \Psi - \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\right)^2 \Psi \quad (66)$$

$$= (\varepsilon^2 - \mathbf{p}^2) \Psi + i\hbar \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial \tau} + \text{div} \mathbf{p}\right) = I^2 \Psi + i\hbar \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial \tau} + \text{div} \mathbf{p}\right),$$

$$(\hat{\varepsilon} \Psi)^2 - (\hat{\mathbf{p}} \Psi)^2 = \left(i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial \tau}\right)^2 - \left(-i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{r}}\right)^2 = (\varepsilon^2 - \mathbf{p}^2) \Psi^2 = I^2 \Psi^2. \quad (67)$$

Соотношению $\frac{\partial \varepsilon}{\partial \tau} + \operatorname{div} \mathbf{p} = 0$ соответствует случай консервативных систем, когда какие-либо потери энергии во времени или источники в пространстве отсутствуют. Таким образом,

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \tau^2} - \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \mathbf{r}^2} = -\frac{I^2}{\hbar^2} \Psi \\ \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \tau} \right)^2 - \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{r}} \right)^2 = -\frac{I^2}{\hbar^2} \Psi^2. \end{cases} \quad (68)$$

Для заряженной частицы во внешнем поле с инвариантом в виде (30) уравнения примут вид

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \tau^2} - \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \mathbf{r}^2} = -\frac{(mc^2 + q\phi)^2 - (q\mathbf{A})^2}{\hbar^2 c^2} \Psi \\ \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \tau} \right)^2 - \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{r}} \right)^2 = -\frac{(mc^2 + q\phi)^2 - (q\mathbf{A})^2}{\hbar^2 c^2} \Psi^2. \end{cases} \quad (69)$$

Для стационарных состояний получим

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \mathbf{r}^2} + \frac{E^2 - (mc^2 + q\phi)^2 + (q\mathbf{A})^2}{\hbar^2 c^2} \Psi = 0 \\ \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{r}} \right)^2 + \frac{E^2 - (mc^2 + q\phi)^2 + (q\mathbf{A})^2}{\hbar^2 c^2} \Psi^2 = 0. \end{cases} \quad (70)$$

Переписывая уравнения с учетом формул классического соответствия (36)

$$U = q\phi + \frac{q^2}{2mc^2} (\phi^2 - \mathbf{A}^2), \quad \mathbf{H} = \frac{E^2 - m^2 c^4}{2mc^2}, \quad \Rightarrow \quad E = \pm mc^2 \sqrt{1 + \frac{2\mathbf{H}}{mc^2}}, \quad (71)$$

получим уравнения волновой функции в традиционном представлении

$$\begin{cases} \Delta \Psi + \frac{2m}{\hbar^2} (\mathbf{H} - U) \Psi = 0, \\ \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{r}} \right)^2 + \frac{2m}{\hbar^2} (\mathbf{H} - U) \Psi^2 = 0, \end{cases} \quad (72)$$

первое из которых формально совпадает с уравнением Шрёдингера для волновой функции стационарных состояний.

Для функции действия S , связанной с волновой функцией с представлением $\Psi = A \exp(-iS/\hbar)$ или $S = i\hbar \ln \Psi + i\hbar \ln A$, получим

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 S}{\partial \mathbf{r}^2} = 0 \\ \left(\frac{\partial S}{\partial \mathbf{r}} \right)^2 - \frac{E^2 - (mc^2 + q\Phi)^2 + (q\mathbf{A})^2}{c^2} = 0, \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \frac{\partial^2 S}{\partial \mathbf{r}^2} = 0 \\ \left(\frac{\partial S}{\partial \mathbf{r}} \right)^2 - 2m(H - U) = 0, \end{cases} \quad (73)$$

что выражает точное классическое соответствие взамен квазиклассического приближения [24]. Заметим, что аналогичные (73) уравнения следуют также из уравнения 46.2 в работе [24], если потребовать точное соответствие и приравнять к нулю действительную и мнимую части.

4.1. Частица в одномерной потенциальной яме

Рассмотрим частицу с массой m в одномерной прямоугольной потенциальной яме в виде

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x, x \leq a \\ -V_0, & 0 \leq x \leq a. \end{cases} \quad (74)$$

Из первого уравнения системы (70) имеем

$$\frac{d^2 \Psi}{dx^2} + \frac{E^2 - (mc^2 + V(x))^2}{\hbar^2 c^2} \Psi = 0. \quad (75)$$

Тогда $U_0 = -V_0 + V_0^2/(2mc^2)$ соответствует потенциальной энергии частицы в яме в классическом понимании. В последнем случае известно [3], что связанное состояние с энергией $H = 0$ ($E = mc^2$) возникает при условии

$$U_0 = -\frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2 = -V_0 + \frac{V_0^2}{2mc^2} \geq -\frac{mc^2}{2}, \quad a \geq \frac{\pi \hbar}{mc} n = \frac{\lambda}{2} n, \quad (76)$$

$$\begin{aligned} E_n &= mc^2 \left(1 - \sqrt{1 - \frac{\pi^2 \hbar^2}{m^2 c^2 a^2} n^2} \right) = mc^2 \left(1 - \sqrt{1 - \left(\frac{\lambda}{2a} n \right)^2} \right) \\ &= mc^2 \frac{\left(\frac{\lambda}{2a} n \right)^2}{1 + \sqrt{1 - \left(\frac{\lambda}{2a} n \right)^2}}, \end{aligned} \quad (77)$$

где $\lambda = 2\pi\hbar/mc = h/mc$. Максимальная глубина классической ямы $U_0 = -mc^2/2$ при $V_0 = mc^2$. Условие существования связанного состояния с энергией $H = 0$ ($E = mc^2$) в потенциальной яме размером a выражается соотношением

$$a = \frac{\lambda}{2} n, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (78)$$

В трёхмерном случае для сферической ямы с диаметром d и глубиной V_0 связанное состояние с энергией $H = 0$ ($E = mc^2$) возникает при таких же условиях [24] с $d = \lambda n/2$, $n = 1, 2, 3, \dots$

Решение этого простого примера является фундаментальным и точно отражает принцип неопределённости $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$. Оно явно отражает волновое свойство частицы, ясно показывая, что стоячая волна существует только при условии $a \geq \lambda/2$, когда геометрические размеры ямы больше, чем половина длины волны частицы.

4.2. Прохождение частицы через потенциальный барьер

Рассмотрим задачу прохождения частицы через прямоугольный потенциальный барьер [24] высотой V_0 и шириной a . Тогда $U_0 = V_0 + V_0^2/(2mc^2)$ соответствует потенциальной энергии частицы в яме в классическом понимании, а $H = (E^2 - m^2c^4)/2mc^2 - \text{энергии}$. Подставляя эти выражения в решение уравнения Шрёдингера для прямоугольного потенциального барьера, получим для коэффициента прохождения D частицы через потенциальный барьер: при $E > |V_0 + mc^2|$

$$D = \left[1 + \frac{\left(\left(\frac{V_0}{mc^2} + 1 \right)^2 - 1 \right)^2}{4 \left(\left(\frac{E}{mc^2} \right)^2 - 1 \right) \left(\left(\frac{E}{mc^2} \right)^2 - \left(\frac{V_0}{mc^2} + 1 \right)^2 \right)} \right. \\ \left. \times \sin^2 \left(\frac{a}{\lambda} \sqrt{\left(\frac{E}{mc^2} \right)^2 - \left(\frac{V_0}{mc^2} + 1 \right)^2} \right) \right]^{-1}, \quad (79)$$

при $E < |V_0 + mc^2|$

$$D = \left[1 + \frac{\left(\left(\frac{V_0}{mc^2} + 1 \right)^2 + 1 - 2 \left(\frac{E}{mc^2} \right)^2 \right)^2}{4 \left(\left(\frac{E}{mc^2} \right)^2 - 1 \right) \left(\left(\frac{V_0}{mc^2} + 1 \right)^2 - \left(\frac{E}{mc^2} \right)^2 \right)} \right. \\ \left. \times \sinh^2 \left(\frac{a}{\lambda} \sqrt{\left(\frac{V_0}{mc^2} + 1 \right)^2 - \left(\frac{E}{mc^2} \right)^2} \right) \right]^{-1}, \quad (80)$$

где $\lambda = \hbar/mc$ – де бройлевская длина волны частицы. Как видим, барьер образуется только в диапазоне энергий $-2mc^2 > V_0 > mc^2$.

4.3. Движение электрона в постоянном электрическом поле

Рассмотрим движение электрона с массой m и зарядом $-e$ в постоянном электрическом поле F . Из уравнения (50) имеем

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{E^2 - (mc^2 + eFx)^2}{\hbar^2 c^2} \Psi = 0. \quad (81)$$

Перепишав уравнение в виде

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{E^2}{2mc^2} - \frac{m}{2} \left(\frac{eF}{mc} \right)^2 \left(x + \frac{mc^2}{eF} \right)^2 \right) \Psi = 0, \quad (82)$$

получим уравнение линейного осциллятора с частотой $\omega = eF/mc$, из которого дискретные уровни E_n определяются формулой

$$E_n = \sqrt{\hbar eFc(2n+1)} = mc^2 \sqrt{\frac{eF\lambda}{mc^2}(2n+1)}, \quad \lambda = \hbar/mc, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (83)$$

В рамках традиционной теории спектр энергий заряда в постоянном электрическом поле F непрерывный [24]. В данном случае для частицы с энергией $E_n = mc^2$ и $n = \frac{mc^2}{2eF\lambda} - \frac{1}{2}$ расстояние между ближайшими уровнями $\Delta E_{mc^2} = eF\lambda$.

В общем случае

$$\Delta E_n = mc^2 \sqrt{\frac{eF\lambda}{mc^2(2n+1)}}. \quad (84)$$

4.4. Задача атома водорода

Движение заряженной частицы в кулоновском поле можно описать как движение в поле атомного ядра (без спина и магнитного момента) с потенциальной энергией $-Ze^2/r$.

Уравнение (70) для волновой функции в сферических координатах примет вид

$$\begin{aligned} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} \\ + \frac{1}{\hbar^2 c^2} \left(E^2 - \left(mc^2 - \frac{Ze^2}{r} \right)^2 \right) \Psi = 0. \end{aligned} \quad (85)$$

Разделяя переменные

$$\Psi = \Phi_m(\varphi) Y_{l,m}(\theta) R_{nR,l}(r) \quad (86)$$

и вводя обозначения [22]

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}, \quad \rho = \frac{mZe^2}{\hbar^2} \frac{2r}{n} = Z\alpha \frac{mc}{\hbar} \frac{2r}{n},$$

$$H_n = \frac{E_n^2 - m^2c^4}{2mc^2} = -\frac{mZ^2e^4}{\hbar^2} \frac{1}{2n^2} = -mc^2 Z^2 \alpha^2 \frac{1}{2n^2}, \quad M^2 = \hbar^2 l(l+1), \quad (87)$$

$$s(s+1) = l(l+1) + Z^2 \alpha^2 \quad \Rightarrow \quad s = -1/2 + \sqrt{(l+1/2)^2 + Z^2 \alpha^2}$$

(для s берётся только положительный корень), для стационарных состояний имеем

$$\frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} = -m^2 \Phi,$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dY}{d\theta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} Y = -l(l+1)Y, \quad (88)$$

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR}{d\rho} - \frac{s(s+1)}{\rho^2} R = -\left(\frac{n}{\rho} - \frac{1}{4} \right) R,$$

где $m = \pm 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, $l = 0, 1, 2, 3, \dots$, $|m| < l$ и $s = -1/2 + \sqrt{(l+1/2)^2 + Z^2 \alpha^2}$.

Решение уравнений (88) формально совпадает с известным решением Фьюза для молекулярного потенциала Кратцера в виде $U = \frac{A}{r^2} - \frac{B}{r} = \frac{Z^2 e^4}{2mc^2} \frac{1}{r^2} - Ze^2 \frac{1}{r}$ при условии, что $n - s - 1 = n_r$ должно быть целым положительным числом или нулём. Согласно (87), получаем уровни энергии

$$H_{n,j} = -mc^2 \frac{Z^2 \alpha^2}{2 \left(n_r + 1/2 + \sqrt{(l+1/2)^2 + Z^2 \alpha^2} \right)^2},$$

$$E_{n,j} = mc^2 \sqrt{1 + \frac{2H_{n,j}}{mc^2}} = mc^2 \sqrt{1 - \frac{Z^2 \alpha^2}{\left(n_r + 1/2 + \sqrt{(l+1/2)^2 + Z^2 \alpha^2} \right)^2}}, \quad (89)$$

где радиальное квантовое число $n_r = 0, 1, 2, \dots$. Вводя главное квантовое число $n = n_r + l + 1/2$, $l < n$ ($n = 1, 2, 3, \dots$), окончательно получим

$$E_{n,j} = mc^2 \sqrt{1 - \frac{Z^2 \alpha^2}{\left(n + \frac{Z^2 \alpha^2}{l + 1/2 + \sqrt{(l+1/2)^2 + Z^2 \alpha^2}} \right)^2}}. \quad (90)$$

Для основного состояния с $l = 0$ и $n = 1$ имеем

$$E_0 = \frac{mc^2}{\sqrt{1/2 + \sqrt{1/4 + Z^2 \alpha^2}}}, \quad s = \frac{Z^2 \alpha^2}{1/2 + \sqrt{1/4 + Z^2 \alpha^2}} \quad (91)$$

без каких-либо ограничений для значения Z . В этом случае $1 - s > 0$ и никакого падения частицы на центр [24] не наблюдается, а вероятность нахождения частицы в центре (в ядре) всегда равна нулю.

В данном случае полученное тонкое расщепление никак не связано со спин-орбитальным взаимодействием и обусловлено релятивистской зависимостью массы от орбитальной и радиальной скорости движения, которые приводят к расщеплению уровней.

5. Уравнения релятивистской квантовой механики для систем со спином $\frac{1}{2}$

В стандартном представлении уравнения Дирака для частицы в компактных обозначениях имеют вид [15]

$$\begin{aligned}\hat{\varepsilon}\phi - \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}\chi &= mc\phi, \\ \hat{\varepsilon}\chi + \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}\phi &= mc\chi.\end{aligned}\tag{92}$$

Соответственно для частицы во внешнем поле их можно представить в виде

$$\begin{aligned}\hat{\varepsilon}\phi - \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}\chi &= \left(mc + \frac{q}{c}\varphi \right)\phi + \frac{q}{c}\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A}\chi, \\ \hat{\varepsilon}\chi + \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}\phi &= \left(mc + \frac{q}{c}\varphi \right)\chi - \frac{q}{c}\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A}\phi.\end{aligned}\tag{93}$$

Составляя волновые уравнения для волновых функций, получим

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} - \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} \right)\phi &= -\frac{(mc^2 + q\varphi)^2 - (q\mathbf{A})^2}{\hbar^2 c^2}\phi - \frac{q}{\hbar c}\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{B} - i\mathbf{E})\chi, \\ \left(\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} - \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} \right)\chi &= -\frac{(mc^2 + q\varphi)^2 - (q\mathbf{A})^2}{\hbar^2 c^2}\chi + \frac{q}{\hbar c}\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{B} - i\mathbf{E})\phi,\end{aligned}\tag{94}$$

где воспользовались свойствами матриц Паули.

В случае стационарного состояния стандартное представление волновых уравнений (92) имеет вид

$$\begin{aligned}\left(\varepsilon - mc - \frac{q}{c}\varphi \right)\phi &= \boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\mathbf{p} + \frac{q}{c}\mathbf{A} \right)\chi, \\ \left(\varepsilon + mc + \frac{q}{c}\varphi \right)\chi &= \boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A} \right)\phi.\end{aligned}\tag{95}$$

5.1. Задача атома водорода

Для заряда в потенциальном поле с центральной симметрией [17] имеем

$$\begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{f(r)}{r} \Omega_{jlm} \\ (-1)^{1+l'} \frac{g(r)}{r} \Omega_{j'l'm} \end{pmatrix}. \quad (96)$$

После подстановки (96) в (95) получим

$$\begin{cases} f' + \frac{\chi}{r} f - \left(\varepsilon + mc - \frac{Ze^2}{c} \frac{1}{r} \right) g = 0 \\ g' - \frac{\chi}{r} g + \left(\varepsilon - mc + \frac{Ze^2}{c} \frac{1}{r} \right) f = 0, \end{cases} \quad \begin{cases} j = |l \pm 1/2|, \quad j_{\max} = l_{\max} + 1/2 \\ \chi = -1, \quad l = 0 \\ \chi = \pm(j + 1/2). \end{cases} \quad (97)$$

Представим функции f и g в виде

$$\begin{aligned} f &= \sqrt{mc + \varepsilon} e^{-\rho/2} \rho^\gamma (Q_1 + Q_2), \\ g &= \sqrt{mc - \varepsilon} e^{-\rho/2} \rho^\gamma (Q_1 - Q_2), \end{aligned} \quad (98)$$

где

$$\rho = 2\lambda r/\hbar, \quad \lambda = \sqrt{(mc)^2 - \varepsilon^2}, \quad \gamma = \sqrt{\chi^2 + Z^2 \alpha^2}, \quad \alpha = \frac{e^2}{\hbar c}. \quad (99)$$

Подставив (98) в уравнения (97), для суммы и разности уравнений имеем

$$\begin{aligned} \rho Q_1' + (\gamma - Z\alpha mc/\lambda) Q_1 + (\chi - Z\alpha \varepsilon/\lambda) Q_2 &= 0, \\ \rho Q_2' + (\gamma + Z\alpha mc/\lambda - \rho) Q_2 + (\chi + Z\alpha \varepsilon/\lambda) Q_1 &= 0. \end{aligned} \quad (100)$$

Вблизи $\rho = 0$ система уравнений всегда имеет решение, так как

$$\gamma^2 - (Z\alpha mc/\lambda)^2 = \chi^2 - (Z\alpha \varepsilon/\lambda)^2. \quad (101)$$

Тогда

$$Q_2 = -\frac{\gamma - Z\alpha mc/\lambda}{\chi - Z\alpha \varepsilon/\lambda} Q_1 = -\frac{\chi + Z\alpha \varepsilon/\lambda}{\gamma + Z\alpha mc/\lambda} Q_1. \quad (102)$$

Составляя уравнения второго порядка и разрешая относительно Q_1 и Q_2 , получим

$$\begin{aligned} \rho Q_1'' + (2\gamma + 1 - \rho) Q_1' - (\gamma - Z\alpha mc/\lambda) Q_1 &= 0, \\ \rho Q_2'' + (2\gamma + 1 - \rho) Q_2' - (\gamma + 1 - Z\alpha mc/\lambda) Q_2 &= 0. \end{aligned} \quad (103)$$

Решением этих уравнений с учётом (101) является

$$\begin{aligned} Q_1 &= AF(\gamma - Z\alpha mc/\lambda, 2\gamma + 1, \rho), \\ Q_2 &= -A \frac{\gamma - Z\alpha mc/\lambda}{\chi - Z\alpha \varepsilon/\lambda} F(\gamma + 1 - Z\alpha mc/\lambda, 2\gamma + 1, \rho), \end{aligned} \quad (104)$$

где $F(\alpha, \beta, z)$ – вырожденная гипергеометрическая функция и A – постоянная нормирования волновой функции. Функция $F(\alpha, \beta, z)$ сводится к полиному, если параметр α равен целому отрицательному числу или нулю. Поэтому конечные решения для функций f и g есть

$$\gamma - \frac{Z\alpha mc}{\lambda} = -n_r. \quad (105)$$

Из выражений (104) получим

$$\begin{aligned} f &= A\sqrt{mc + \varepsilon} e^{-\rho/2} \rho^{\gamma-1} \left(F(-n_r, 2\gamma + 1, \rho) + \frac{n_r}{\chi - Z\alpha \varepsilon/\lambda} F(1 - n_r, 2\gamma + 1, \rho) \right), \\ g &= A\sqrt{mc - \varepsilon} e^{-\rho/2} \rho^{\gamma-1} \left(F(-n_r, 2\gamma + 1, \rho) - \frac{n_r}{\chi - Z\alpha \varepsilon/\lambda} F(1 - n_r, 2\gamma + 1, \rho) \right), \end{aligned} \quad (106)$$

где $n_r = 0, 1, 2, \dots$ – радиальное квантовое число. Из условия (105) для уровней энергии получаем

$$\frac{\varepsilon_{p,\chi}}{mc} = \sqrt{1 - \frac{Z^2 \alpha^2}{\left(n_r + \sqrt{\chi^2 + Z^2 \alpha^2}\right)^2}}$$

и с учётом принимаемых значений χ окончательно имеем

$$\begin{aligned} E_{n,j} &= mc^2 \sqrt{1 - \frac{Z^2 \alpha^2}{\left(n_r + \sqrt{(j+1/2)^2 + Z^2 \alpha^2}\right)^2}} \\ &= mc^2 \sqrt{1 - \frac{Z^2 \alpha^2}{\left(n + \frac{Z^2 \alpha^2}{j+1/2 + \sqrt{(j+1/2)^2 + Z^2 \alpha^2}}\right)^2}}, \end{aligned} \quad (107)$$

где главное квантовое число $n = n_r + j + 1/2$. Кроме $j = n - 1/2$ все остальные уровни с $j < n - 1/2$ вырождены дважды по орбитальному моменту $l = |j \pm 1/2|$. Энергия основного состояния при $n = 1$ и $j = 1/2$ составляет

$$E_0 = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + Z^2 \alpha^2}} \quad (108)$$

без каких-либо ограничений для значения Z . В этом случае $\gamma - 1 = -1 + \sqrt{1 + Z^2 \alpha^2} > 0$ и никакого падения частицы на центр не наблюдается, а вероятность нахождения частицы в центре (в ядре) всегда равна нулю.

В полученной формуле (107) порядок следования уровней тонкого расщепления обратный относительно порядка следования в известной формуле Зоммерфельда–Дирака. Если сравнить разложения в ряд по степени постоянной тонкого расщепления двух формул

$$\frac{E_n}{mc^2} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{n^2} \right) \alpha^2 + \left(\frac{1}{8} + \frac{3}{8n^4} - \frac{1}{2n^3(j+1/2)} \right) \alpha^4, \quad \frac{\Delta E_{3/2,1/2}}{mc^2} = \frac{\alpha^4}{32}, \quad (109)$$

$$\frac{E_n}{mc^2} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{n^2} \right) \alpha^2 + \left(-\frac{3}{8} - \frac{1}{8n^4} + \frac{1}{2n^3(j+1/2)} \right) \alpha^4, \quad \frac{\Delta E_{3/2,1/2}}{mc^2} = -\frac{\alpha^4}{32}, \quad (110)$$

то разность составит

$$\frac{\Delta E_n}{mc^2} = \frac{\alpha^4}{2} - \frac{\alpha^4}{2n^4} - \frac{\alpha^4}{n^3(j+1/2)}, \quad (111)$$

где последний член есть выражение энергии спин-орбитального взаимодействия. Таким образом, чтобы получить истинное значение уровней энергии атома водорода, в формуле (107) следует добавить энергию спин-орбитального взаимодействия в виде (111). Это вполне резонно, т. к. изначально такое взаимодействие в уравнение (97) не включалось и не отражено в конечном результате.

6. Заключение

Обобщён принцип инвариантности и предложено соответствующее представление обобщённого импульса системы, предложены уравнения релятивистской и квантовой механики, которые лишены перечисленных выше недостатков и противоречий. Уравнения имеют решения при любых значениях постоянной взаимодействия частицы с полем, например, в задаче водородоподобного атома, когда атомный номер ядра $Z > 137$. Уравнения применимы для разных типов частиц и взаимодействий.

На основе параметрического представления действия и канонических уравнений построена соответствующая релятивистская механика на основе канонического лагранжиана и выведены уравнения движения и выражение для силы, действующей на заряд при движении во внешнем электромагнитном поле.

Матричное представление уравнений характеристик для функции дей-

ствия и волновой функции приводят к уравнению Дирака с корректным включением взаимодействия. В таком виде решения уравнений Дирака не ограничены значением постоянной взаимодействия и имеют спинорное представление скалярными решениями уравнений для функции действия и волновой функции.

Приведены решения задачи движения заряда в постоянном электрическом поле, задачи частицы в потенциальной яме, задачи прохождения частицы через потенциальный барьер и задачи атома водорода.

Анализ решений показывает полное соответствие принципам релятивистской и квантовой механики, и решения лишены каких-либо ограничений по характеру и величине взаимодействий.

ЛИТЕРАТУРА

1. N. Bohr. *Philos. Mag.*, **26**, 1, 476, 857 (1913).
2. G.E. Uhlenbeck, S. Goudsmit. *Naturwissenschaften*, **47**, 953 (1925); *Nature*, **117**, 264 (1926).
3. A. Sommerfeld. *Ann. Phys.*, **51**, 1 (1916); *Phys. Z.*, **17**, 491 (1916).
4. Я.И. Грановский. *УФН*, **174**, 577 (2004).
5. P.A.M. Dirac. *Proc. Royal Society A*, **117**, 610 (1928).
6. M. Louis de Broglie. *Comptes Rendus*, **177**, 507 (1923).
7. Д. Хоффман. Эрвин Шрёдингер. Москва, Мир, 1987.
8. E. Schrödinger. *Ann. Physik.*, **79**, 389 (1926).
9. O. Klein. *Z. Phys.*, **37**, 895 (1926).
10. V. Fock. *Z. Phys.*, **38**, 242 (1926).
11. W. Gordon. *Z. Phys.*, **40**, 117 (1926).
12. W. Heisenberg, P. Jordan. *Zeits. Phys.*, **37**, 263 (1926).
13. L.H. Thomas. *Nature*, **117**, 514 (1926); *Phil. Mag.*, **3**, 1 (1927).
14. А.А. Соколов, И.М. Тернов. *Релятивистский электрон*. Москва, Наука, 1974.
15. В.Б. Берестецкий, Е.М. Лифшиц, Л. П. Питаевский. *Квантовая электродинамика*. Москва, Физматлит, 2002.
16. Э. Маделунг. *Математический аппарат физики*. Москва, Гос. изд. физ.-мат. лит., 1968.
17. А.И. Ахиезер, В.Б. Берестецкий. *Квантовая электродинамика*. Москва, Наука, 1981.
18. П.А.М. Дирак. *Труды института истории естествознания и техники*, **22**, 32 (1959).
19. В.М. Мыхитарян. *Известия НАН Армении, Физика*, **47**, 379 (2012).
20. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Механика*. Москва, Физматлит, 2004.
21. В.М. Мыхитарян. *Известия НАН Армении, Физика*, **48**, 3 (2013).
22. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Теория поля*. Москва, Физматлит, 2003.
23. В.М. Мыхитарян. *Известия НАН Армении, Физика*, **51**, 147 (2016).
24. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Квантовая механика (нерелятивистская теория)*. Москва, Физматлит, 2004.

ՌԵԼՅԱՏԻՎԻՍՏԱԿԱՆ ԵՎ ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ՄԵԽԱՆԻԿԱՅԻ ՀԱՎԱՍԱՐՈՒՄՆԵՐ
ԵՎ ՈՐՈՇ ԽՆԴԻՐՆԵՐԻ ՃՇԳՐԻՏ ԼՈՒԾՈՒՄՆԵՐ

Վ.Մ. ՄԵԽԻԹԱՐՅԱՆ

Ընդհանրացված իմպուլսի ինվարիանտ ներկայացման հիման վրա առաջարկվել են ռելյատիվիստական ինվարիանտ հավասարումներ գործողության և ալիքային ֆունկցիաների համար: Հավասարումներն ունեն լուծումներ դաշտի հետ մասնիկի փոխազդեցության ցանկացած հաստատունի դեպքում, օրինակ, ջրածնանման ատոմի դեպքում, երբ միջուկի ատոմային թիվը $Z > 137$: Գործողության պարամետրական ներկայացման միջոցով դուրս են բերվել կանոնիկ լագրանժիանի արտահայտությունը, շարժման հավասարումներն ու արտաքին էլեկտրամագնիսական դաշտում շարժվող մասնիկի վրա ազդող ուժի արտահայտությունը: Արտաքին դաշտում գտնվող մասնիկի համար ներկայացված է Դիրակի հավասարումները, որում ճշգրիտ ներառված է փոխազդեցությունը: Այդ տեսքով հավասարումների լուծումները սահմանափակված չեն փոխազդեցության հաստատունի մեծությամբ: Բերված են մասնիկի շարժումը հաստատուն էլեկտրական դաշտում, մասնիկը պոտենցիալ հորում և մասնիկի անցումը պոտենցիալ արգելքով, ինչպես նաև ջրածնի ատոմի խնդիրի ճշգրիտ լուծումները:

EQUATIONS OF RELATIVISTIC AND QUANTUM MECHANICS
AND EXACT SOLUTIONS OF SOME PROBLEMS

V.M. MEKHITARIAN

Relativistic invariant equations are proposed for the action function and the wave function on the basis of the invariance of the representation of the generalized momentum. The equations have solutions for any values of the interaction constant of a particle with a field, for example, in the problem of a hydrogen-like atom, when the atomic number of the nucleus is $Z > 137$. On the basis of the parametric representation of the action, the expression for the canonical Lagrangian, the equations of motion and the expression for the force acting on the charge during motion in external electromagnetic field are derived. The Dirac equation with the correct inclusion of the interaction for a particle in an external field is presented. In this form, the solutions of the equations are not limited by the value of the interaction constant. Solutions of the problem of charge motion in a constant electric field, problems for a particle in a potential well, and passage of a particle through a potential barrier, as well as problem of a hydrogen atom are presented.

УДК 539.184.28

ЭФФЕКТ ЗЕЕМАНОВСКОЙ ОПУСТОШАЮЩЕЙ НАКАЧКИ НА ЦИКЛИЧЕСКИХ АТОМНЫХ ПЕРЕХОДАХ

А.В. ПАПОЯН

Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак, Армения

e-mail: papoan@ipr.sci.am

(Поступила в редакцию 6 декабря 2017 г.)

Представлены результаты исследования зависимости сигнала флуоресценции на переходе $6S_{1/2} (F_g = 4) \rightarrow 6P_{3/2} (F_e = 5)$ D₂-линии атомарных паров Cs от напряженности магнитного поля (до 90 Гс), направленного вдоль линейной поляризации возбуждающего света. Зарегистрированный спад флуоресценции в магнитном поле, особенно сильный при высокой интенсивности лазерного излучения, объясняется конверсией зеемановской оптической накачки (выстраивания) в опустошающую накачку в условиях, когда зеемановский сдвиг частот отдельных переходов между магнитными подуровнями превышает однородную ширину перехода. Как следствие, циклический сверхтонкий переход $F_g = 4 \rightarrow F_e = 5$ преобразуется в открытый.

1. Введение

Приложение внешнего магнитного поля изменяет энергетическую структуру атомов, снимая вырождение по магнитным подуровням, что обусловлено ларморовской прецессией магнитного момента электрона относительно магнитного поля (эффект Зеемана). При одновременном резонансном возбуждении атома оптическим излучением характер взаимодействия может измениться вследствие наведенной оптической поляризации, обуславливая дисперсионные (наведенное двулучепреломление) и абсорбционные (наведенный дихроизм) явления [1]. Наиболее оптимальной конфигурацией для исследования эффекта Зеемана в оптическом эксперименте является схема, в которой магнитное поле приложено вдоль направления линейно-поляризованного оптического излучения, резонансно возбуждающего атомы. В такой конфигурации исключается влияние других магнитооптических явлений, связанных с взаимодействием наведенной оптическим возбуждением поляризации атомов с магнитным полем, таким как эффекты Фарадея, Фойгта и Ханле.

Одним из ключевых процессов резонансного взаимодействия излучения с многоуровневой атомной системой является оптическая накачка – процесс, при

котором атом, переведенный излучением на возбужденный уровень с заданного начального уровня основного состояния, переводится спонтанным испусканием на другой уровень основного состояния [2]. В атомах со сверхтонким расщеплением основного состояния, таких как атомы щелочных металлов, оптическая накачка на так называемых «нециклических» или «открытых» переходах приводит к перераспределению населенности основного состояния на неактивные уровни, не взаимодействующие с лазерным излучением (опустошающая оптическая накачка). Иную роль играет оптическая накачка на «циклических» или «закрытых» переходах, для которых перевод на неактивное состояние запрещен по правилам отбора. В этом случае оптическая накачка приводит к перераспределению населенности основного уровня между магнитными подуровнями (зеemannовская накачка). С такой накачкой ассоциируются, в частности, процессы ориентации и выстраивания, происходящие при возбуждении атомной системы излучением с круговой и линейной поляризацией, соответственно [3].

Исследованию магнитооптических процессов в условиях оптической накачки в последние годы был посвящен ряд работ. В большинстве из них в качестве атомной среды использовались пары щелочных металлов, являющиеся классическим объектом исследования в атомной физике и спектроскопии. Интерес к этим исследованиям, в частности, обусловлен возможным применением полученных результатов при создании чувствительных оптических магнитометров [4].

Целью настоящей работы являлось исследование влияния эффекта Зеемана на процесс оптической накачки при возбуждении циклического перехода $6S_{1/2} (F_g = 4) \rightarrow 6P_{3/2} (F_e = 5)$ D₂-линии атома цезия линейно-поляризованным лазерным излучением в случае приложения внешнего магнитного поля вдоль направления световой поляризации ($\mathbf{B} \parallel \mathbf{E}$) с напряженностью до 100 Гс, недостаточной для спектрального разрешения отдельных доплеровски-уширенных переходов между магнитными подуровнями.

2. Экспериментальная установка и методика измерений

Схематическое представление оптической части экспериментальной установки приведено на рис.1. Непрерывное излучение титан-сапфирового лазера Coherent 899 ($\lambda \approx 852$ нм), накачиваемого аргоновым ионным лазером Innova Sabre, направлялось несфокусированным пучком на сапфировую оптическую отпаянную ячейку длиной 16.5 мм и диаметром 15 мм, отросток которой был заполнен цезием (без буферного газа). Плоскопараллельные окна ячейки были срезаны поперек *c*-оси кристалла во избежание двулучепреломления (измеренное остаточное поглощение в конфигурации скрещенных поляризаторов при комнатной температуре $\sim 10^{-5}$). Контроль температуры отростка ячейки

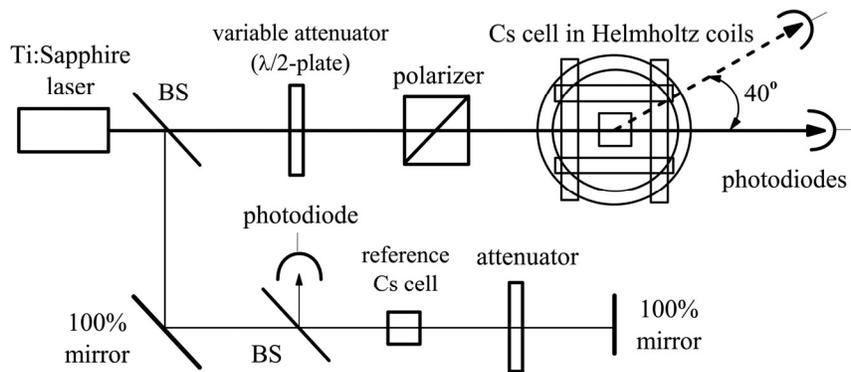


Рис.1. Схема экспериментальной установки.

осуществлялся с помощью элемента Пельтье с системой активной обратной связи, позволяющей стабилизировать заданную температуру (в представленных измерениях 20°C с точностью 0.05°C), что соответствует плотности атомарных паров цезия $N = 2.8 \times 10^{10} \text{ см}^{-3}$. В этих условиях однородное уширение сверхтонких спектральных переходов определяется естественной шириной $\gamma_{\text{nat}} \approx 5.22$ МГц, заметно превышающей столкновительное самоуширение.

Фотодиод, установленный под углом 40° к направлению распространения лазерного излучения, регистрировал резонансную флуоресценцию паров. Второй фотодиод использовался для регистрации излучения, прошедшего через ячейку. Сигналы с фотодиодов, после усиления операционными усилителями, подавались на цифровой осциллограф Tektronix TDS 340A, работающий в режиме усреднения.

Для получения спектров флуоресценции и пропускания частота лазерного излучения линейно сканировалась в области до 20 ГГц, покрывающей сверхтонкие переходы D_2 -линии Cs ($\lambda = 852.3$ нм). Типичный период сканирования составлял 0.25 с, гарантируя установление стационарного режима взаимодействия с учетом процессов возбуждения и релаксации. Спектральный анализ регистрируемого излучения не проводился. Мощность одномодового лазерного излучения со спектральной шириной $\gamma_L = 1$ МГц составляла $P_L = 300$ мВт, диаметр пучка $d = 2$ мм, что позволяло получать максимальную интенсивность излучения на входе в ячейку $I_L = 9.6$ Вт/см². Для повышения степени линейной поляризации лазерного излучения использовалась призма Глана–Томсона.

Лабораторное магнитное поле компенсировалось системой колец Гельмгольца (3 взаимно-перпендикулярные пары катушек). Те же катушки использовались также для приложения магнитного поля напряженностью до $B = 90$ Гс в любом направлении. Напряженность магнитного поля в области ячейки контролировалась с точностью 0.05 Гс цифровым магнитометром DTM130.

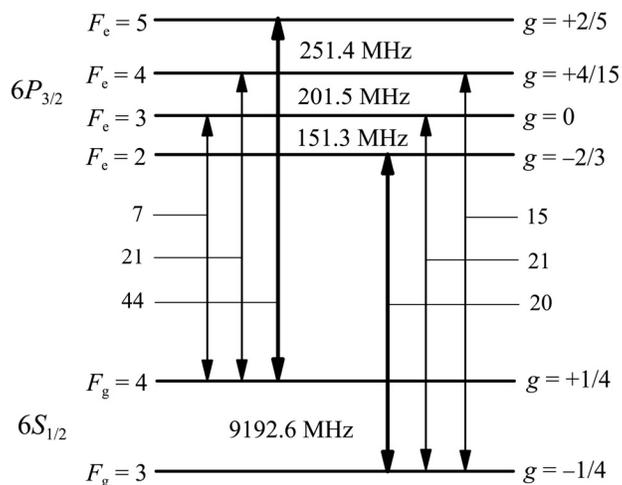


Рис.2. Уровни энергии и переходы сверхтонкой структуры на D₂-линии атома цезия. Справа приведены Ланде-факторы g отдельных подуровней. Числа на переходах показывают их относительную вероятность.

На рис.2 приведена схема энергетических уровней и переходов атома Cs. Так как сверхтонкое расщепление уровня $6P_{3/2}$ меньше доплеровского (неоднородного) уширения при комнатной температуре (~ 380 МГц), в эксперименте регистрируются только две спектрально-разрешенные линии, каждая из которых включает 3 перекрывающихся перехода: $6S_{1/2} (F_g = 3) \rightarrow 6P_{3/2} (F_e = 2,3,4)$ и $6S_{1/2} (F_g = 4) \rightarrow 6P_{3/2} (F_e = 3,4,5)$. Частотное расстояние между ними составляет около 9.2 ГГц, что задается сверхтонким расщеплением основного уровня $6S_{1/2} (F_g = 3,4)$. Следует отметить, что вследствие процесса «опустошающей» оптической накачки, устанавливающейся по мере увеличения I_L , в регистрируемых спектрах доминируют циклические переходы $F_g = 3 \rightarrow F_e = 2$ (Λ -типа) и $F_g = 4 \rightarrow F_e = 5$ (V -типа) [5]. При возбуждении линейно-поляризованным излучением перехода $F_g = 3 \rightarrow F_e = 2$ вследствие зеемановской накачки заселяются крайние непоглощающие магнитные подуровни основного состояния $m_F = \pm 3$, что приводит к подавлению поглощения и флуоресценции. В связи с этим в настоящем эксперименте исследовался только резонансный спектр на переходе $F_g = 4 \rightarrow F_e = 5$, который к тому же самый сильный из всех сверхтонких переходов D₂-линии атома цезия.

Для формирования реперного спектра сравнения в области D₂-линии Cs часть лазерного излучения отвечалась на вспомогательную установку насыщенного поглощения с использованием второй ячейки с парами цезия при комнатной температуре. Спектральная ширина отдельных сверхтонких переходов и перекрестных резонансов составляла < 10 МГц. Сигнал насыщенного поглощения регистрировался одновременно с основным сигналом флуоресценции

и (или) пропускания.

Эксперимент проводился по следующей схеме. Были выбраны 7 значений интенсивности падающего лазерного излучения I_L в области от 0.5 до 3000 мВт/см². При каждом значении I_L спектры флуоресценции и пропускания регистрировались при 12 значениях напряженности магнитного поля B , приложенного параллельно линейной поляризации возбуждающего излучения ($\mathbf{B} \parallel \mathbf{E}$). Для каждой пары значений I_L и B измерялась амплитуда спектрального сигнала флуоресценции и пропускания на переходе $F_g = 4 \rightarrow F_e = 5$.

3. Результаты измерений и обсуждение

Зависимости амплитуды A_f флуоресценции в спектральной области перехода $F_g = 4 \rightarrow F_e = 5$ D₂-линии Cs от магнитного поля $\mathbf{B} \parallel \mathbf{E}$, полученные при разных значениях интенсивности падающего лазерного излучения, представлены на рис.3. Как ожидалось из симметрии конфигурации и подтвердилось экспериментом, зарегистрированный сигнал не зависел от знака магнитного поля: $A_f(-B) = A_f(B)$, поэтому зависимости приведены для модуля напряженности магнитного поля. Были также получены такие же зависимости для пропускания, однако их графическое отображение в широком диапазоне изменения интенсивности излучения затруднено вследствие сильного изменения фонового значения спектра нерезонансного пропускания, от которого отсчитывается резонансный вклад.

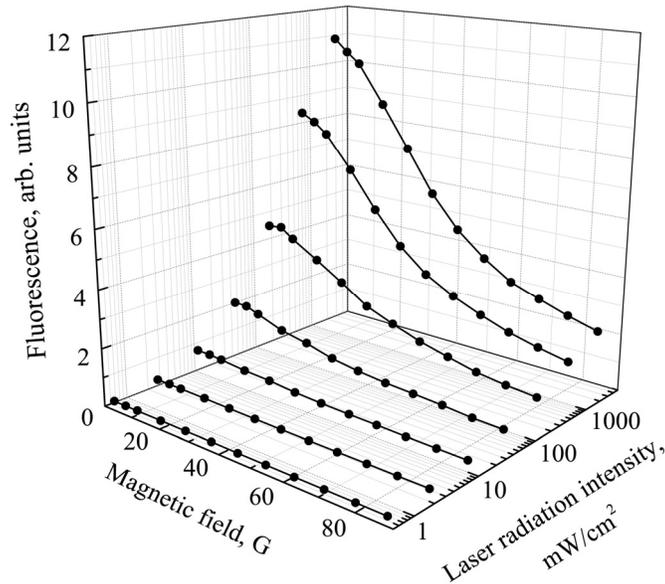


Рис.3. Зависимость амплитуды сигнала флуоресценции от напряженности магнитного поля ($\mathbf{B} \parallel \mathbf{E}$) и интенсивности лазерного излучения.

Как видно из рисунка, с увеличением приложенного магнитного поля наблюдается спад флуоресценции. В конфигурации данного эксперимента (магнитное поле направлено вдоль направления электрического поля световой волны) этот спад должен быть связан с зеемановским расщеплением сверхтонких подуровней атома цезия (см. рис.4).

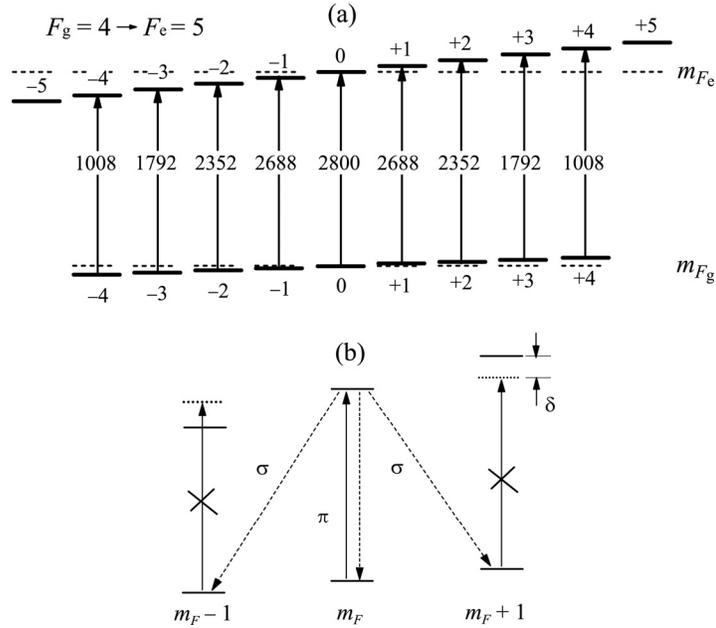


Рис.4. (а) Зеемановский сдвиг магнитных подуровней сверхтонких состояний $F_g = 4$ и $F_e = 5$ (Ланде-факторы $g_F = +1/4$ и $+2/5$, соответственно) в магнитном поле. Стрелками показаны переходы в случае линейно-поляризованного излучения с указанием относительной вероятности. (б) Установление режима опустошающей накачки в магнитном поле (см. текст).

При отсутствии магнитного поля в стационарном режиме взаимодействия с линейно-поляризованным полем излучения устанавливается перераспределение населенностей отдельных подуровней (выстраивание). Установление выстраивания реализуется в каждом атоме в течение времени резонансного взаимодействия последовательностью циклов поглощения и испускания в соответствии с правилами отбора $\Delta m_F = 0$ для поглощения и $\Delta m_F = 0, \pm 1$ для испускания, с вовлечением всех магнитных подуровней, за исключением подуровней возбужденного состояния $m_F = \pm 5$, не возбуждаемых линейно-поляризованным излучением. В результате выстраивания населенность, изначально равномерно распределенная между магнитными подуровнями основного состояния, стягивается к центральному подуровню $m_F = 0$ [5]. В условиях настоящего эксперимента время резонансного взаимодействия излучения с атомом определялось временем

пролета атома через лазерный пучок (~ 5 мкс), что допускало осуществление до сотен циклов поглощения и испускания.

Приложение магнитного поля B приводит к снятию вырождения и сдвигу магнитных подуровней. По мере увеличения B величина смещения частоты соседних переходов δ становится больше эффективной спектральной ширины перехода $\Gamma = \gamma_{\text{nat}} + \gamma_L \approx 6.25$ МГц. При этом в случае спонтанного перехода атома в состояние с $\Delta m_F = \pm 1$ с испусканием циркулярно-поляризованного (σ) фотона он перейдет в непоглощающее состояние (см. рис.4б). В результате цикл поглощений и испусканий прервется, что приведет к уменьшению сигнала флуоресценции. Минимальное оценочное значение B_{min} , при котором будет зарегистрирован спад сигнала флуоресценции, определяется смещением переходов с крайних магнитных подуровней основного состояния $m_F = \pm 4$ на величину Γ :

$$B_{\text{min}} = \frac{\Gamma}{2(2F_g + 1) |g_{F_g} - g_{F_e}| \mu_B} \approx 1.5 \text{ Гс}, \quad (1)$$

где $g_{F_g} = 0.25$ и $g_{F_e} = 0.40$ – Ланде-факторы основного ($F_g = 4$) и возбужденного ($F_e = 5$) состояний, $\mu_B = 1.4$ МГц/Гс – магнетон Бора. Уменьшение сигнала флуоресценции от магнитного поля продолжается до полного снятия перекрытия крыльев соседних γ -уширенных π -переходов $m_g = m \rightarrow m_e = m$ и $m_g = m \pm 1 \rightarrow m_e = m \pm 1$. Простая оценка величины напряженности такого насыщающего поля B_{sat} может быть проведена в предположении линейного режима эффекта Зеемана по формуле

$$B_{\text{sat}} = \frac{k_{0.05} \Gamma}{|g_{F_g} - g_{F_e}| \mu_B} \approx 130 \text{ Гс}, \quad (2)$$

где коэффициент $k_{0.05} \approx 4.36$ определяет частоту отстройки от резонанса в единицах γ , при которой амплитуда лоренцевского контура сигнала составляет 5% от пикового значения.

Как заметно из рис.3, спад флуоресценции с увеличением магнитного поля происходит быстрее при увеличении интенсивности возбуждающего излучения. Этот результат отчетливо проявляется при нормировании сигнала флуоресценции на интенсивность света, падающего на ячейку. Соответствующие зависимости $A_{\text{f-norm}}(B)$ представлены на рис.5, из которого видно, что крутизна зависимости растет с ростом I_L вплоть до стабилизации при $I_L \sim 500$ мВт/см². При этом величина нормированного сигнала флуоресценции в пределе больших полей асимптотически приближается к 1/9 части от сигнала в нулевом поле: $A_{\text{f-norm}}(\infty) \approx 0.111 \times A_{\text{f-norm}}(0)$. Последнее объясняется тем, что при полном снятии

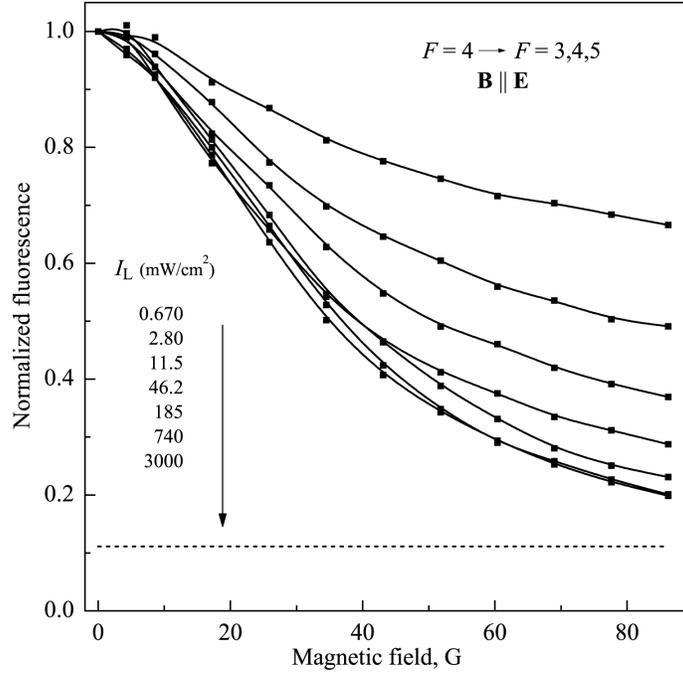


Рис.5. Зависимость нормированного сигнала флуоресценции от напряженности магнитного поля при 7 значениях интенсивности лазерного излучения. Пунктиром показано асимптотическое значение сигнала в пределе сильных полей.

частотного перекрытия соседних π -переходов в результате зеемановского сдвига из 9 изначально равнонаселенных подуровней основного состояния $m_F = -4 \dots +4$ при любой заданной частоте лазерного излучения в резонансном взаимодействии участвует только один.

Можно утверждать, что при приложении магнитного поля, достаточно сильного для снятия частотного перекрытия зеемановских π -переходов, нарушается цикличность (замкнутость) перехода $F_g = 4 \rightarrow F_e = 5$, приводя, с одной стороны, к уменьшению числа магнитных подуровней основного состояния, резонансно взаимодействующих с излучением, с другой стороны, к истощению населенности подуровня, взаимодействующего с лазерным полем. Иными словами, приложение магнитного поля приводит к конверсии зеемановской накачки из «перераспределяющей» в «опустошающую». Этому способствует повышение интенсивности излучения, которое приводит к повышению эффективности оптической накачки. В пределе низкой интенсивности ($I_L \ll I_{\text{sat}}$), где I_{sat} – интенсивность насыщения, определяемая как

$$I_L / I_{\text{sat}} = 2\Omega_R^2 / \Gamma^2, \quad (3)$$

где Ω_R – частота Раби; поглощение фотона отдельным атомом приводит к единичному акту флуоресценции независимо от B (зеemanовского смещения). С увеличением I_L развивается эффект опустошающей оптической накачки, и сигнал флуоресценции уменьшается с магнитным полем. Следует отметить, что интенсивность, при которой начинает наблюдаться оптическая накачка, заметно меньше I_{sat} [6]. В пределе высокой интенсивности ($I_L \gg I_{\text{sat}}$) помимо эффективной оптической накачки имеет место также насыщение перехода по эффективной двухуровневой системе, реализуемой в сильном магнитном поле. При этом полного опустошения активного уровня оптической накачкой в ячейке без антирелаксационного покрытия не происходит из-за постоянного влета в лазерный пучок атомов, подвергшихся спиновой релаксации при столкновении со стенками ячейки [7].

В системе невзаимодействующих атомов (разреженные пары) рассматриваемый процесс развивается на отдельных атомах. Эффект Доплера играет косвенную роль. По мере сканирования частоты лазерного излучения в пределах доплеровского профиля ($\Gamma_D \approx 380$ МГц) с излучением последовательно взаимодействуют группы атомов с различными скоростями. Отметим также, что с дальнейшим увеличением B до ~ 1000 Гс возможно спектральное разделение отдельных зеemanовских π -переходов; в этих же условиях начинает нарушаться линейный режим эффекта Зеemана [8]. Спектрально разрешить отдельные переходы можно и при существенно меньших магнитных полях с использованием наночаеек с атомарными парами, обеспечивающих субдоплеровское спектральное разрешение [8, 9].

4. Заключение

Анализ результатов эксперимента позволяет заключить, что приложение магнитного поля к атомной системе, резонансно взаимодействующей с линейно-поляризованным излучением на циклическом переходе, приводит к изменению режима взаимодействия на нециклический. Результатом такой конверсии является сильное (в 9 раз) ослабление сигналов поглощения и флуоресценции вследствие опустошающей оптической накачки. Еще большее ослабление ожидается в случае использования ячейки с антирелаксационным покрытием.

Эффект преобразования перераспределяющей накачки в опустошающую может быть использован для управления населенностями атомных уровней магнитным полем (в частности, в оптических системах связи), оптической визуализации распределения градиентного магнитного поля и т. д.

Автор выражает благодарность К. Бергманну за содействие в реализации эксперимента.

ЛИТЕРАТУРА

1. **D. Budker, W. Gawlik, D.F. Kimball, S.M. Rochester, V.V. Yashchuk, A. Weis.** Rev. Mod. Phys., **74**, 1153 (2002).
2. **W. Happer.** Rev. Mod. Phys., **44**, 169 (1972).
3. **M. Auzinsh, D. Budker, S. Rochester.** Optically Polarized Atoms: Understanding Light-Atom Interactions. Oxford University Press, 2010.
4. Optical Magnetometry. D. Budker, D.F.J. Kimball (Eds.), Cambridge University Press, 2013.
5. **H. Ravi, M. Bhattarai, V. Bharti, V. Natarajan.** EPL (Europhys. Lett.), **117**, 63002 (2017).
6. **P. Siddons, Ch.S. Adams, Ch. Ge, I.G. Hughes.** J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **41**, 155004 (2008).
7. **H.N. de Freitas, M. Oria, M. Chevrollier.** Appl. Phys. B, **75**, 703 (2002).
8. **А.Д. Саргсян, Г.Т. Ахумян, А.О. Амирян, К. Леруа, А.С. Саркисян, Д.Г. Саркисян.** Изв. НАН Армении, Физика, **50**, 428 (2015).
9. **A. Sargsyan, E. Klinger, G. Hakhumyan, A. Tonoyan, A. Papoyan, C. Leroy, D. Sarkisyan.** J. Opt. Soc. Am. B, **34**, 776 (2017).

ԶԵԵՄԱՆՅԱՆ ԱՊԱԲՆԱԿԵՑՆՈՂ ՄՂՄԱՆ ԵՐԵՎՈՒՅԹԸ
ՑԻԿԼԱՅԻՆ ԱՏՈՄԱԿԱՆ ԱՆՑՈՒՄՆԵՐՈՒՄ

Ա.Վ. ՊԱՊՈՅԱՆ

Ներկայացված են Cs ատոմական գոլորշու D_2 գծի $6S_{1/2}(F_g = 4) \rightarrow 6P_{3/2}(F_e = 5)$ անցման ֆլուորեսցենցի ազդանշանի վրա գրգռող լույսի գծային բևեռացման ուղղությամբ կիրառված մագնիսական դաշտի լարվածությունից (մինչև 90 Գս) կախման հետազոտության արդյունքները: Գրանցված ֆլուորեսցենցի անկումը մագնիսական դաշտում, որն առավել ակնառու է լազերային ճառագայթման բարձր ինտենսիվության դեպքում, բացատրված է զեեմանյան օպտիկական մղման (դասավորվածության) փոխակերպումով ապաբնակեցնող մղման՝ այն պայմանում, երբ մագնիսական ենթամակարդակների միջև առանձին անցումների զեեմանյան շեղումը գերազանցում է անցման համասեռ լայնացումը: Արդյունքում $F_g = 4 \rightarrow F_e = 5$ ցիկլային գերնուրբ անցումը ձևափոխվում է բաց անցման:

ZEEMAN DEPOPULATION PUMPING EFFECT ON CYCLING ATOMIC TRANSITIONS

A.V. PAPOYAN

The results of the studies of Cs atomic vapor fluorescence signal on $6S_{1/2}(F_g = 4) \rightarrow 6P_{3/2}(F_e = 5)$ transition of D_2 line depending on magnetic field (up to 90 G) applied along the linear polarization of the exciting light are presented. The recorded fluorescence decline in a magnetic field, especially pronounced for the high laser radiation intensity, is attributed to the conversion of a Zeeman optical pumping (alignment) into a depopulation pumping, becoming effective when the Zeeman shift of individual transitions between the magnetic sublevels exceeds the homogeneous broadening of the transition. As a result, the cycling hyperfine transition $F_g = 4 \rightarrow F_e = 5$ transforms to an open one.

УДК 539.2

РЕЗОНАНСНОЕ МНОГОКАНАЛЬНОЕ РАССЕЙНИЕ В НАНОТРУБКЕ С δ -ПОТЕНЦИАЛАМИ

Д.М. СЕДРАКЯН*, Д.А. БАДАЛЯН

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

*e-mail: dsedrak@ysu.am

(Поступила в редакцию 6 октября 2017 г.)

Рассмотрено резонансно-туннельное прохождение электрона через квантовую проволоку, содержащую внутри два трехмерных δ -потенциала, расположенных вдоль оси нанотрубки. Используя полученные ранее формулы для амплитуд многоканального рассеяния, найдено условие (уравнение) резонанса для многоканального рассеяния, при котором данная система становится полностью прозрачной для движения электрона. Предложен способ упрощения уравнения резонанса, основанный на методе векторных диаграмм. Показано, что если первоначальная энергия продольного движения недостаточна для возбуждения новых каналов рассеяния, то уравнение резонанса совпадает с соответствующим уравнением одномерной задачи.

1. Введение

Полупроводниковые резонансно-туннельные гетероструктуры относятся к числу наиболее изученных объектов наноэлектроники [1, 2]. Эти структуры представляют значительный интерес как с точки зрения исследования особенностей квантово-механических процессов в нанометровом диапазоне, так и использования их для конструирования новых приборов (туннельные диоды, транзисторы, цифровые и аналоговые устройства и т. д.) [3, 4]. Простейшим примером резонансно-туннельной гетероструктуры является система из двух потенциальных барьеров с квантовой ямой между ними. Этой модели резонансно-туннельного перехода с использованием различных форм потенциала рассеяния посвящено большое число теоретических работ. Особенно часто используется модель с двумя прямоугольными потенциальными барьерами. Следует, однако, отметить, что в подавляющем большинстве работ рассматривается одномерная задача резонансного рассеяния [5–11]. Между тем очевидно, что более точное рассмотрение требует учета того факта, что потенциал рассеяния, вообще говоря, зависит от трех пространственных координат.

В нашей работе [12] рассмотрена задача движения электрона в квантовой проволоке цилиндрической формы с встроенным внутри потенциалом,

состоящим из двух трехмерных δ -потенциалов, находящихся на некотором расстоянии друг от друга. В такой системе процесс рассеяния является многоканальным. Многоканальность возникает из-за того, что при использовании трехмерного потенциала необходимо учесть не только продольные, но и поперечные размеры квантовой проволоки. Тогда, если частица рассеивается в одном направлении, а движение в перпендикулярном направлении ограничено непроницаемыми стенками наноструктуры, то это приводит к дискретному набору волновых векторов поперечного движения. Таким образом, из-за упругого рассеяния в продольном направлении микрочастица может перейти на другой квантовый уровень в поперечном движении и в результате возникает новый канал рассеяния. В работе [12], используя стандартную технику «сшивания» волновых функций и их производных в точках сингулярности δ -функций, получены системы линейных уравнений для амплитуд прохождения t_m и амплитуд отражения r_m (индекс m указывает на номер канала рассеяния). Из этих уравнений получены аналитические выражения для всех амплитуд рассеяния.

В настоящей работе с использованием упомянутых формул сделана попытка исследования возможностей резонансного прохождения микрочастицы через двухпотенциальный δ -барьер, вложенный в нанотрубку.

2. Формулы для амплитуд рассеяния

Приведем формулы для амплитуд рассеяния t_m и r_m для системы из двух трехмерных δ -потенциалов равной мощности и расстоянием a между ними, помещенной внутрь нанотрубки с радиусом поперечного сечения R :

$$t_m = \delta_{m1} e^{ik_m a} - \frac{iA_{1m}}{4k_m} \left(\frac{G_\alpha}{\alpha_1 \alpha_m} - \frac{G_\beta}{\beta_1 \beta_m} \right), \quad (1a)$$

$$r_m = -\frac{iA_{1m}}{4k_m} \left(\frac{G_\alpha}{\alpha_1 \alpha_m} + \frac{G_\beta}{\beta_1 \beta_m} \right), \quad (1b)$$

где $m=1, 2, \dots, N$ и N – полное число каналов рассеяния,

$$G_\alpha = \left(1 + i \sum_{m'=1}^N \frac{A_{m'm'}}{2k_{m'} \alpha_{m'}} \right)^{-1}, \quad (2a)$$

$$G_\beta = \left(1 + i \sum_{m'=1}^N \frac{A_{m'm'}}{2k_{m'} \beta_{m'}} \right)^{-1}. \quad (2b)$$

Волновой вектор k_m описывает продольное движение частицы по m -му каналу:

$$k_m = \sqrt{\chi^2 - \chi_m^2}. \quad (3)$$

Здесь $\chi^2 = 2mE/\hbar^2$, E – начальная энергия электрона и χ_m – волновые векторы поперечного движения частицы, которые определяются из граничного условия для волновой функции на поверхности нанотрубки

$$J_l(\chi_m R) = 0, \quad (4)$$

где $J_l(x)$ – цилиндрическая функция Бесселя ($l = 1, 2, \dots$). В формулах (1a)–(2b)

$$A_{mm'} \equiv A_{nl, n'l'} = S_{nl} S_{n'l'} \quad (n, n' = 1, 2, \dots), \quad (5)$$

$$S_{nl} = \sqrt{\frac{P}{\pi R^2}} \frac{J_l(\chi_{nl} \rho_0) \cos l \phi_0}{J_{l+1}(\chi_{nl} R)}. \quad (6)$$

Здесь P – мощность δ -потенциала, ρ_0, ϕ_0 – полярные координаты местоположения δ -потенциалов в цилиндрической системе координат с осью Z , совпадающей с осью нанотрубки.

В формулах (1a)–(2b) важными величинами являются функции α_m и β_m , которые имеют следующий вид:

$$\alpha_m = \frac{1}{\Delta_m} (e^{-ik_m a} - 1), \quad (7a)$$

$$\beta_m = \frac{1}{\Delta_m} (e^{-ik_m a} + 1), \quad (7b)$$

где $\Delta_m = e^{-ik_m a} - e^{ik_m a}$. Фактически, α_m и β_m являются единственными функциями, которые связывают амплитуды рассеяния t_m и r_m с расстоянием a между δ -потенциалами. Для дальнейших расчетов также будут использованы следующие тождества:

$$\frac{1}{2\alpha_m} + \frac{1}{2\beta_m} = 1, \quad (8a)$$

$$\frac{1}{2\alpha_m} - \frac{1}{2\beta_m} = e^{ik_m a}. \quad (8b)$$

3. Условия резонансного прохождения электрона

Приступим теперь к выяснению тех условий, при которых потенциальный барьер прозрачен для микрочастицы, движущейся по направлению оси Z нанотрубки слева направо.

При рассмотрении одномерных задач резонансного рассеяния, исходя из закона сохранения числа частиц, иногда условием резонанса называют требование равенства нулю коэффициента отражения. При многоканальном рассеянии аналогичное требование должно соответствовать исчезновению отраженной волны во всех каналах за область взаимодействия, т. е. должны выполняться

условия

$$r_1 = r_2 = \dots = r_m = \dots = r_N = 0 \quad (9a)$$

или

$$|r_1|^2 = \dots = |r_m|^2 = \dots = |r_N|^2 = 0. \quad (9b)$$

Рассмотрим последние условия более детально. Прежде всего учтем, что при малых энергиях падающей частицы вместо многоканального получается, в основном, одноканальное рассеяние, т. е. рассеяние с индексом $m = 1$ и $k_m = k_1$. Это связано с тем, что нет достаточной начальной энергии для возбуждения каналов рассеяния более высокого порядка. То же самое может произойти и тогда, когда по разным причинам равны нулю вероятности переходов от первого канала к каналам с индексом $m > 1$ ($A_{1m} = 0$). Сравнение с одномерным рассеянием показывает, что в одноканальном приближении условие резонанса $|r_1|^2 = 0$ и его следствия формально совпадают с соответствующими результатами одномерной теории.

Рассмотрение существенно осложняется, если частица обладает энергией, достаточной для возбуждения более высоких каналов рассеяния. Предположим, что в общем случае начальные энергии частицы изменяются в интервале $0 < E < \infty$. Разделим данный диапазон энергий на отдельные участки. Первый участок – упомянутая выше область низких энергий. Этот участок описывается интервалом $\chi_1^2 < \chi^2 < \chi_2^2$ (см. формулу (3)). Из приведенного неравенства видно, что на этом участке рассеяние будет одноканальным, с волновым вектором k_1 . Второй участок энергий лежит в интервале $\chi_2^2 < \chi^2 < \chi_3^2$ и соответствует двухканальному рассеянию $m = 2$, $k_m = k_2$. Условием резонанса по этому каналу является равенство $|r_2|^2 = 0$. Из условия $|r_2|^2 = 0$ можно получить уравнение для волновых векторов k_2 , определяющих резонансно-туннельное прохождение частицы (см. ниже).

Процедуру нахождения волновых векторов k_m , отвечающих за резонансно-туннельное прохождение частиц через потенциальный барьер, можно распространить и на каналы с индексом $m > 2$. Условием резонанса для m -ого канала будет равенство $|r_m|^2 = 0$. Причем можно утверждать, что учет многоканальности рассеяния приводит к увеличению пропускной способности рассматриваемой модели. Получим общее уравнение для волновых векторов k_m , обеспечивающих резонансное туннелирование микрочастицы. Из условий $r_m = 0 \Leftrightarrow |r_m|^2 = 0$ и формул (1a) и (1b) получим

$$t_m = \delta_{m1} e^{ik_m a} - \frac{iA_{1m}}{4k_m} \left(\frac{G_\alpha^m}{\alpha_1 \alpha_m} - \frac{G_\beta^m}{\beta_1 \beta_m} \right), \quad (10a)$$

$$0 = -\frac{iA_{1m}}{4k_m} \left(\frac{G_\alpha^m}{\alpha_1 \alpha_m} + \frac{G_\beta^m}{\beta_1 \beta_m} \right), \quad (10b)$$

где верхний индекс m у величин $G_{\alpha(\beta)}^m$ означает, что в формулах (2а) и (2b) индекс суммирования m' принимает значения от единицы до m .

Если формулы (10а) и (10b) формально рассматривать как некую систему уравнений относительно функций $\frac{G_\alpha^m}{\alpha_1 \alpha_m}$ и $\frac{G_\beta^m}{\beta_1 \beta_m}$, то легко увидеть, что условием разрешимости этой системы является равенство

$$\frac{G_\alpha^m}{G_\beta^m} = -\frac{\alpha_1 \alpha_m}{\beta_1 \beta_m}. \quad (11)$$

Вычислим правую часть уравнения (11). Для удобства формулы (7а) и (7b) представим в виде

$$\alpha_m = \frac{1}{2} \left(1 - i \tan \frac{k_m a}{2} \right), \quad (12a)$$

$$\beta_m = \frac{1}{2} \left(1 + i \cot \frac{k_m a}{2} \right). \quad (12b)$$

В результате получаем

$$\frac{\alpha_1 \alpha_m}{\beta_1 \beta_m} = -\tan \frac{k_1 a}{2} \tan \frac{k_m a}{2}. \quad (13)$$

Из равенства (13) следует, что правая часть уравнения (11) является действительной величиной. Следовательно, можно утверждать, что

$$\frac{G_\alpha^m}{G_\beta^m} = \frac{G_\alpha^{m*}}{G_\beta^{m*}}, \quad (14)$$

где G_α^{m*} и G_β^{m*} – сопряженные с G_α^m и G_β^m комплексные функции. Подставляя в (14) из (2а) и (2b) значения этих функций, получим

$$\frac{1 + i \sum_{m'} \frac{A_{m'm'}}{2k_{m'} \beta_{m'}}}{1 + i \sum_{m'} \frac{A_{m'm'}}{2k_{m'} \alpha_{m'}}} = \frac{1 - i \sum_{m'} \frac{A_{m'm'}}{2k_{m'} \beta_{m'}}}{1 - i \sum_{m'} \frac{A_{m'm'}}{2k_{m'} \alpha_{m'}}}. \quad (15)$$

Из равенства (15), опустив довольно длинные промежуточные расчеты, получим

$$\frac{\sum_{m'=1}^m \frac{A_{m'm'}}{2k_{m'}} \sin k_{m'} a}{\sum_{m'=1}^m \frac{A_{m'm'}}{2k_{m'}} \cos k_{m'} a} = -\frac{1}{\sum_{m'=1}^m \frac{A_{m'm'}}{2k_{m'}}}. \quad (16)$$

Уравнение (16) в общей форме решает поставленную задачу. При заданных значениях матричных элементов $A_{m'm'}$ и расстояния a между δ -потенциалами уравнение (16) дает те волновые векторы $k_{m'}$, при которых потенциальный барьер становится прозрачным для частицы. Можно поставить и обратную задачу: при известных $k_{m'}$ и $A_{m'm'}$ найти то расстояние (или расстояния) a , при котором отраженная волна «гасится».

Для иллюстрации применения полученных формул рассмотрим некоторые частные случаи. В случае $m = 1$ (одноканальное рассеяние) формула (16) принимает достаточно простой вид

$$\tan k_1 a = -2k_1 / A_{11}. \quad (17)$$

Уравнение (17) аналогично формуле, получающейся при решении одномерного уравнения Шредингера с потенциалом $U(x) = \alpha[\delta(x) + \delta(x-a)]$ [13]. При рассмотрении потенциальных барьеров мощность P положительна, поэтому $A_{11} > 0$. Следовательно, правая часть уравнения (17) отрицательна и его действительные корни могут быть только на отрезках

$$\pi(n+1) > k_1 a > \frac{\pi}{2}(2n+1) \quad (n = 0, 1, 2, \dots), \quad (18)$$

т. е. во втором и четвертом квадрантах тригонометрической окружности, где $\tan k_1 a < 0$.

В случае $m = 2$ (двухканальное рассеяние) из формул (16) получим

$$\frac{\frac{A_{11}}{2k_1} \sin k_1 a + \frac{A_{22}}{2k_2} \sin k_2 a}{\frac{A_{11}}{2k_1} \cos k_1 a + \frac{A_{22}}{2k_2} \cos k_2 a} = -\frac{2k_1 k_2}{k_2 A_{11} + k_1 A_{22}}. \quad (19)$$

Уравнение (19) представляет собой тригонометрическое уравнение смешанного типа относительно неизвестных k_m и требует численного расчета. Отметим, что волновые векторы k_1 и k_2 связаны друг с другом. Из определения векторов k_m (формула (3)) следует, что

$$k_1^2 - k_2^2 = \chi_2^2 - \chi_1^2 = \delta_{12}, \quad (20)$$

где $\chi_1 = 2.405/R$ и $\chi_2 = 3.832/R$ [12]. Таким образом, волновой вектор k_2 всегда можно выразить через k_1 и δ_{12} , а волновой вектор k_1 – через E .

Относительно нахождения корней уравнения (19) заметим, что его правая часть, как и в случае одноканального рассеяния, отрицательна (из-за $P > 0$). Не решая самого уравнения, мы докажем, что как и в случае одноканального рассеяния, оно имеет решение. Для этого воспользуемся методом векторных диаграмм, хорошо известным в теории гармонических колебаний [14].

Рассмотрим сложение двух гармонических функций X_1 и X_2 , которые имеют вид

$$\left. \begin{aligned} X_1 &= \frac{A_{11}}{2k_1} \cos k_1 a \\ X_2 &= \frac{A_{22}}{2k_2} \cos k_2 a \end{aligned} \right\}. \quad (21)$$

Представим обе функции с помощью векторов \mathbf{A}_1 и \mathbf{A}_2 с модулями $A_1 = A_{11}/(2k_1)$ и $A_2 = A_{22}/(2k_2)$, которые с координатной осью x образуют углы $\alpha_1 = k_1 a$ и $\alpha_2 = k_2 a$. Построим по правилам сложения векторов результирующий вектор $\mathbf{A} = \mathbf{A}_1 + \mathbf{A}_2$. Легко видеть, что проекция этого вектора на ось x равна сумме проекций слагаемых векторов:

$$A_x = \frac{A_{11}}{2k_1} \cos k_1 a + \frac{A_{22}}{2k_2} \cos k_2 a. \quad (22)$$

Аналогично, проекция вектора \mathbf{A} на ось y равняется

$$A_y = \frac{A_{11}}{2k_1} \sin k_1 a + \frac{A_{22}}{2k_2} \sin k_2 a. \quad (23)$$

Если результирующий вектор \mathbf{A} образует с осью x угол α , то

$$\tan \alpha = \frac{\frac{A_{11}}{2k_1} \sin k_1 a + \frac{A_{22}}{2k_2} \sin k_2 a}{\frac{A_{11}}{2k_1} \cos k_1 a + \frac{A_{22}}{2k_2} \cos k_2 a}. \quad (24)$$

Сравнивая равенства (19) и (24), получим

$$\tan \alpha = -\frac{2k_1 k_2}{k_2 A_{11} + k_1 A_{22}}. \quad (25)$$

Угол α является сложной функцией от величин A_{11} , A_{22} , k_1 , k_2 и a . Используя методы элементарной геометрии, можно установить связь между α и указанными параметрами. Соответствующее выражение имеет следующий вид:

$$\alpha = \frac{(k_1 + k_2)a}{2} + \arctan \left(\frac{k_2 A_{11} - k_1 A_{22}}{k_2 A_{11} + k_1 A_{22}} \tan \frac{(k_1 - k_2)a}{2} \right). \quad (26)$$

Таким образом, из формул (25) и (26) окончательно получим

$$\tan \left[\frac{(k_1 + k_2)a}{2} + \arctan \left(\frac{k_2 A_{11} - k_1 A_{22}}{k_2 A_{11} + k_1 A_{22}} \tan \frac{(k_1 - k_2)a}{2} \right) \right] = -\frac{2k_1 k_2}{k_2 A_{11} + k_1 A_{22}}. \quad (27)$$

Прежде всего заметим, что левая часть уравнения (27) не зависит от

мощности P . От P зависят матричные элементы A_{11} и A_{22} , которые пропорциональны мощности. Поскольку в левой части уравнения (27) зависимость от A_{11} и A_{22} выражается дробной функцией $\frac{k_2 A_{11} - k_1 A_{22}}{k_2 A_{11} + k_1 A_{22}}$, то видно, что указанная за-

висимость исчезает. Данная дробная функция фактически отвечает и за знак угла α . Действительно, так как $k_1 > k_2$, то теоретически возможно, чтобы числитель дробной функции принял отрицательные значения. Тогда вклад в угол α второго слагаемого будет отрицательным. При $\alpha < 0$ уравнение (27) все равно будет иметь действительные решения. Только в этом случае значения $|\alpha|$ будут лежать в интервале $\frac{\pi}{2}(2n+1) > |\alpha| > \pi n \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$.

Обратим внимание, что при больших значениях энергии, когда имеют место соотношения $\chi^2 \gg \chi_1^2$, $\chi^2 \gg \chi_2^2$ и $k_1 \approx k_2$, уравнения (19) и (27) сильно упрощаются. Они переходят в уравнение (17) одноканального рассеяния с той разницей, что в правой части этого уравнения вместо матричного элемента A_{11} фигурирует сумма $A_{11} + A_{22}$. При еще больших энергиях, когда возбуждены все каналы, $\chi^2 \gg \chi_{m'}^2$ ($m' = 1, 2, \dots, m$) и $k_1 \approx \dots \approx k_m$. Тогда к формуле (17) сводится также уравнение (16). Только теперь A_{11} заменяется суммой всех матричных элементов $A_{m'm'}$.

Что касается области промежуточных значений E , то тут, для получения точных результатов, нужно обратиться к методу векторных диаграмм. Интересно, что применив этот метод, левую часть уравнения (16) опять можно представить в виде тангенса некоторого угла ϕ , зависящего от параметров $k_{m'}$, $A_{m'm'}$ и a . Эту зависимость, в принципе, можно найти методами элементарной геометрии.

В настоящей работе не были вычислены коэффициенты резонансного прохождения $|t_m|^2$, которые представляют определенный интерес. При наличии решений уравнения (16) они могут быть определены из формул (10а). При этом из-за закона сохранения числа частиц должно выполняться условие

$$\sum_{m=1}^N \frac{k_m}{k_1} |t_m|^2 = 1. \quad (28)$$

4. Заключение

В настоящей работе для описания резонансного перехода электрона через потенциальный барьер предлагается квазиодномерная модель полупроводниковой гетероструктуры. Эта модель, которая представляет собой нанотрубку с вложенными внутрь трехмерными δ -потенциалами, приводит к многоканальному рассеянию. Используются ранее полученные формулы для амплитуд рассеяния,

необходимые при исследовании эффекта резонансного туннелирования. Получены условия резонанса, представленные в виде трансцендентного уравнения тригонометрического типа. Предложено упрощение этого уравнения при помощи метода векторных диаграмм. В предельном случае одномерного движения полученные в работе результаты совпадают с ранее известными. Для нахождения начальной энергии, обеспечивающей резонансное прохождение частицы через потенциальный барьер, весь энергетический диапазон разделен на участки. Первый участок соответствует одноканальному рассеянию ($m = 1$), второй участок – двухканальному рассеянию ($m = 2$) и т. д. Условием резонансного прохождения по каждому каналу является равенство $|r_m|^2 = 0$, где m – число каналов данного участка.

Наконец отметим, что рассмотренное многоканальное рассеяние в случае одного δ -рассеивателя обладает замечательным свойством – равенством амплитуд прохождения и отражения при $m > 1$ [15]. Это свойство вытекает из условия непрерывности волновой функции при прохождении частицы через δ -потенциал. В задаче с двумя δ -потенциалами указанное свойство теряется. Мы заметили, что если на вектор k_1 наложить условие $k_1 a = 2\pi n$ (n – целое число), то в уравнениях (1a) и (1b) нарушенное свойство $t_m = r_m$ ($m > 1$) восстанавливается. Это условие не совпадает с уравнением (17), приводящим к резонансному переходу.

Авторы выражают благодарность А.Ж. Мурадян за обсуждение полученных результатов.

ЛИТЕРАТУРА

1. **J. Sing.** Physics of Semiconductors and their Heterostructures. New York, McGraw-Hill, 1993.
2. **В.П. Драгунов, И.Г. Неизвестный, В.А. Гридчин.** Основы нанoeлектроники. Новосибирск, изд-во НГТУ, 2004.
3. **J.P. Sun, G.I. Haddad, P. Mazumdar, J.N. Shulman.** Proc. IEEE, **86**, 641 (1998).
4. **P. Mazumdar, S. Kulkarni, M. Bhattacharaya, J.P. Sun, G.I. Haddad.** Proc. IEEE, **86**, 664 (1998).
5. **I.R. Lapidus.** Am. J. Phys., **50**, 663 (1982).
6. **B. Ricco, M.Ya. Azbel.** Phys. Rev. B, **29**, 1970 (1984).
7. **P.J. Price.** Phys. Rev. B, **38**, 1994 (1988).
8. **M. Gadella, M.L. Glasser, L.M. Nieto.** J. Theor. Phys., **50**, 2144 (2011).
9. **G. Cordourier-Maruri, R. De Coss, V. Gupta.** J. Mod. Phys. B, **25**, 1349 (2011).
10. **Z. Ahmed, S. Kumar, M. Sharma, V. Sharma.** Eur. J. Phys., **37**, 045406 (2016).
11. **F. Erman, M. Gadella, H. Uncu.** Phys. Rev. D, **95**, 045004 (2017).
12. **Д.М. Седракян, Д.А. Бадалян, А.Ю. Алексанян.** Изв. НАН Армении, Физика, **51**, 452 (2016).
13. **В.М. Галицкий, Б.М. Карнаков, В.И. Коган.** Задачи по квантовой механике. Москва, Наука, 1992.

14. **И.В. Савельев.** Курс общей физики, т.1. Москва, изд-во Лань, 2016.
15. **Д.М. Седракян, Д.А. Бадалян, Л.Р. Седракян.** Изв. НАН Армении, Физика, **50**, 176 (2015).

ՌԵԶՈՆԱՆՍԱՅԻՆ ԲԱԶՄՈՒՂԻ ՑՐՈՒՄ δ -ՊՈՏԵՆՑԻԱԼՆԵՐՈՎ
ՆԱՆՈՒՆՈՂՈՎԱԿՈՒՄ

Դ.Մ. ՍԵԴՐԱԿՅԱՆ, Դ.Հ. ԲԱԴԱԼՅԱՆ

Դիտարկված է էլեկտրոնի բազմուղի ռեզոնանսա-թունելային անցումը δ -պոտենցիալային արգելքներ պարունակող քվանտային լարում: Օգտագործելով բազմուղի ցրման լայնությունների համար նախկինում ստացված բանաձևերը, ուսումնասիրվել է ռեզոնանսային անցման հնարավորությունը նշված համակարգում: Ստացված են ռեզոնանսային անցման պայմանները, որոնք ներկայացված են տրանսցենդենտ հավասարման տեսքով: Առաջադրված է այդ հավասարման պարզեցման եղանակ, որը հիմնված է վեկտորական դիագրամների օգտագործման վրա: Ցույց է տրված, որ միուղի ցրման դեպքում ստացված արդյունքները համընկնում են միաչափ ցրման խնդրի արդյունքների հետ:

RESONANT MULTICHANNEL SCATTERING IN NANOTUBE
WITH δ -POTENTIALS

D.M. SEDRAKIAN, D.H. BADALYAN

The multichannel resonant-tunneling of an electron through a quantum wire containing two three-dimensional δ -potentials located along the axis of the nanotube is considered. Using the recently obtained formulas for amplitudes of multichannel scattering, a resonance condition (equation) is found, in which the given system becomes completely transparent for the motion of the electron. Simplification of the resonance equation based on the vector diagram method is proposed. It is shown that if the initial energy of longitudinal motion is insufficient to excite new scattering channels, then the resonance equation coincides with the corresponding equation of the one-dimensional problem.

УДК 548.0

ДИФРАКЦИОННАЯ НЕВЗАИМНОСТЬ В ДИФРАКЦИИ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ ВОЛНЫ НА ЩЕЛИ

А.А. Лалаян^{1*}, О.С. Ерицян^{1,2}, О.М. Аракелян³, Ш.К. Ерицян²

¹Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

²Институт прикладных проблем физики НАН Армении, Ереван, Армения

³Армянский национальный аграрный университет, Ереван, Армения

*e-mail: alalayan@ysu.am

(Поступила в редакцию 29 июня 2017 г.)

Экспериментально исследована дифракция на щели в металлическом экране, расположенном между двумя средами, отличающимися своими показателями преломления. Показано, что интенсивность дифрагирующей волны, будучи зависящей от длины волны, зависит от показателя преломления среды, в которую проникает электромагнитное излучение.

1. Введение

Существуют разные возможности создания оптических систем, у которых имеется неэквивалентность взаимно-противоположных направлений прохождения электромагнитных волн [1, 2]. Неэквивалентность взаимно-противоположных направлений имеет место также в средах, обладающих свойством необратимости волн – в магнитоэлектрических средах и в естественно гиротропных средах в присутствии магнитного поля, а также в средах с надмолекулярной спиральной структурой, какими являются холестерические жидкие кристаллы, в присутствии магнитного поля [3]. Однако эффект не взаимности, обусловленный необратимостью волн, мал.

Как показано в работах [4, 5], в спиральных периодических структурах с наличием градиента шага спирали также имеет место не взаимность: дифракционное прохождение через такую систему неодинаково для взаимно-противоположных направлений, параллельных оси спиральности, совпадающих с направлением градиента шага спирали.

В настоящей работе продолжены исследования, начатые в работе [5] с применением численных расчетов, а также осуществлен эксперимент по исследованию дифракции на прямоугольной щели в металлическом экране, по обе стороны которой диэлектрические среды с разными значениями показателя преломления.

2. Интенсивность электромагнитной волны, дифрагированной из воздуха в диэлектрическую среду через щель в экране

Рассмотрим нормальное падение электромагнитной волны на непрозрачный экран с щелью шириной a (рис.1). Обозначим интенсивность падающей волны через I_0 , угол отклонения от направления нормали к экрану дифрагированной волны обозначим через θ . Тогда интенсивность волны в интервале $\theta - (\theta + d\theta)$ определяется формулой [6]

$$dI = \frac{I_0}{2\pi} \times \frac{\sin^2(ka\theta)}{(ka\theta)^2} d(ka\theta), \quad (1)$$

где $k = (\omega/c)n$. Полная интенсивность I дифрагированной волны задается выражением

$$I = \frac{I_0}{2\pi} \times \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{\sin^2(ka\theta)}{(ka\theta)^2} d(ka\theta), \quad (2)$$

где $-\pi/2$ и $\pi/2$ – границы θ (а не $ka\theta$).

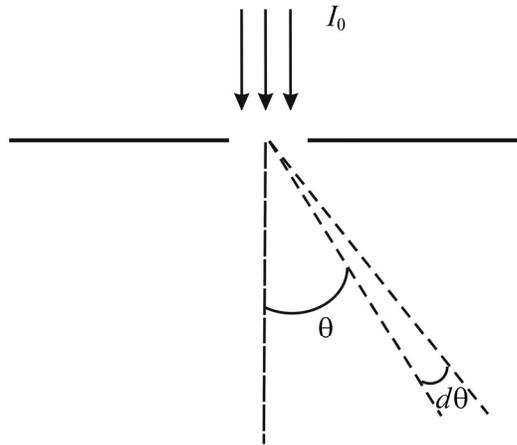


Рис.1. Схема дифракции электромагнитной волны на щели.

В выражении (2) интеграл аналитически не решается. На рис.2 представлена зависимость I от k , полученная численными методами и показывающая, что с ростом k интенсивность волны за щелью также растет.

Рост интенсивности с увеличением показателя преломления объясняется тем, что чем меньше длина волны в среде, тем дифракционное прохождение через узкую щель (соразмерную величине λ) будет больше. Математически рост интенсивности I с увеличением показателя преломления можно объяснить как результат уширения интервала интегрирования в формуле (2) с ростом значения показателя преломления.

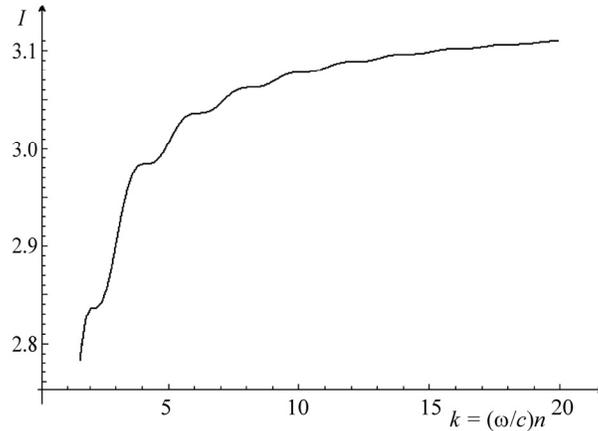


Рис.2. Зависимость интеграла (2) от k при фиксированной частоте ω .

Действительно, на рис.3 показана зависимость функции $\sin^2 \theta / \theta^2$. Значение интеграла по θ данной функции равно заштрихованной площади. С увеличением показателя преломления пределы интегрирования равные $-\pi/2$ и $\pi/2$, становятся уже $\pi \omega n a / (2c)$ и $-\pi \omega n a / (2c)$, то есть с увеличением n область интегрирования растет по обе стороны от начала координат, что ведет к изменению значения интеграла.

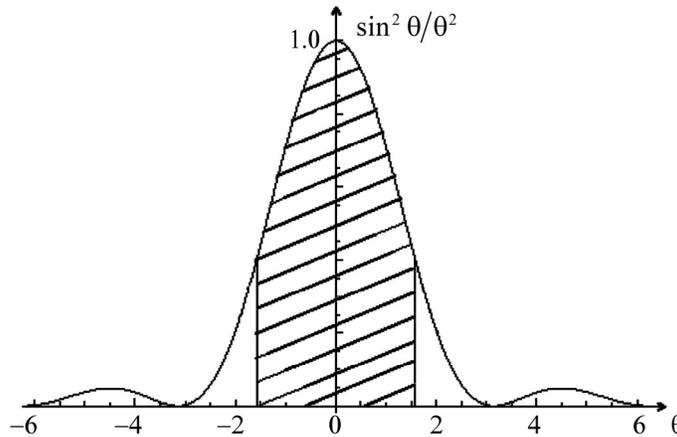


Рис.3. Зависимость подынтегральной функции $\sin^2 \theta / \theta^2$.

3. Экспериментальная часть

Нами было экспериментально исследовано дифракционное прохождение электромагнитной волны сквозь узкую щель, вырезанную в металлической пластине, установленной между двумя диэлектрическими пластинами из двух

разных материалов с различным показателем преломления. Для удобства проведения измерений был использован источник электромагнитного излучения в диапазоне 40–50 ГГц. Схема эксперимента приведена на рис.4.

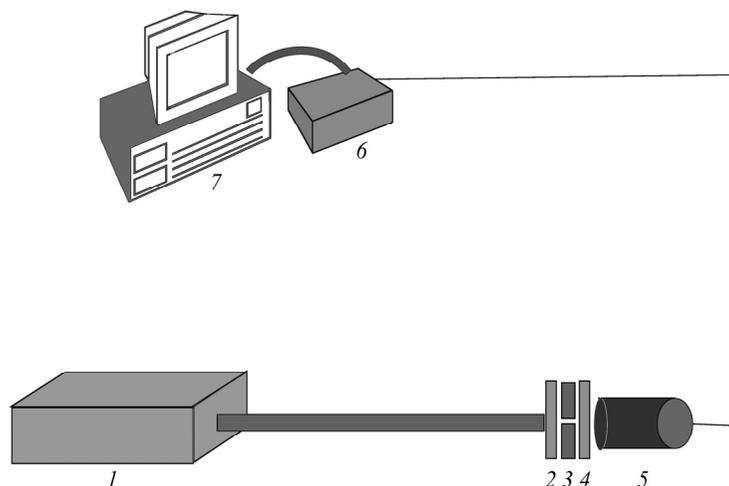


Рис.4. Схема экспериментальной установки: 1 – генератор электромагнитного излучения, 2 и 4 – пластины из диэлектрического материала, 3 – металлическая пластина с прямоугольной щелью, 5 – датчик излучения, 6 – АЦП и 7 – компьютер.

Металлическая щель 3 шириной 5 мм была изготовлена из металлической (латунной) пластины толщиной 1 мм, на данную металлическую пластину с разных сторон были прикреплены пластины 2 и 4 из тефлона (политетрафторэтилен) и оргстекла (полиметилметакрилат) одинаковой толщины, равной 3.5 мм, и разными значениями показателя преломления. Непосредственно на выходе из такой трехслойной структуры был размещен датчик излучения 5. Далее аналоговый сигнал от датчика посредством АЦП 6 преобразовывался в цифровой и вводился в компьютер.

Отметим, что диапазон значений показателя преломления аморфных полимеров гораздо меньше, чем традиционных оптических стекол, и доходит вплоть до $n = 1.70$ [7]. Соответственно значение n для полиметилметакрилата составляет 1.51. Для полимерных материалов возможно значительное уменьшение показателя преломления введением в молекулу исходного мономера атомов фтора. Фторированные полимеры имеют самые низкие показатели преломления ($n \leq 1.4$) [8]. В случае использованного в эксперименте тефлона $n \sim 1.35-1.38$ [9].

Для щели шириной 5 мм измерения показали наличие разницы амплитуды прошедшего сигнала в зависимости от последовательности расположения пластин из тефлона и оргстекла (рис.5). Как видно из рисунка, для случая

прохождения излучения в последовательности тефлон–щель–оргстекло амплитуда регистрируемого сигнала в 2.5 раза отличается от амплитуды при обратной последовательности расположения тех же диэлектрических пластин, что экспериментально подтверждает невзаимность прохождения электромагнитной волны через щель в описанной оптической системе.

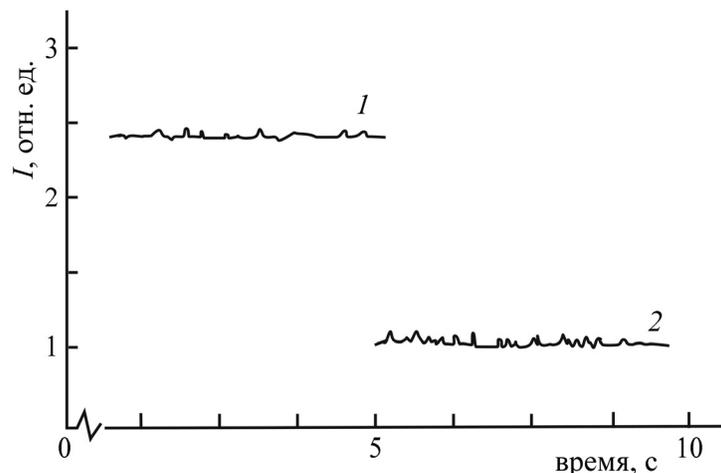


Рис.5. Зависимость амплитуды прошедшего сигнала от изменения последовательности расположения пластин из тефлона и оргстекла относительно щели: 1 – оргстекло–щель–тефлон, 2 – тефлон–щель–оргстекло; частота генератора СВЧ излучения 41 ГГц и ширина щели 5мм.

4. Заключение

Экспериментально подтверждено предположение о невзаимности дифракции электромагнитной волны на щели в бесконечном экране между двумя средами с разными показателями преломления. При этом эксперимент проведен для электромагнитного излучения миллиметрового диапазона; в качестве диэлектрических сред по разные стороны от щели были использованы тефлон (политетрафторэтилен) и полиметилметакрилат (оргстекло). Численные расчеты также подтверждают наличие невзаимности в такой оптической системе. Рассмотренное в настоящей работе явление оптической невзаимности может быть использовано для разработки невзаимных оптических элементов, а также накопителей электромагнитной энергии.

Авторы выражают благодарность А. Макаряню за предоставление СВЧ генератора и полезные обсуждения, А. Мкртчяну, Р. Костяняну и Р. Акопяну за внимание к работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. **И.А. Андропова, Г.Б. Малькин.** УФН, **172**, 849, 2002.
2. **С.И. Назаров.** Наука и образование (МГТУ им. Н.Э. Баумана). Электронный научно-технический журнал, № 9, 479 (2013).
3. **О.С. Ерицян.** Оптика гиротропных сред и холестерических жидких кристаллов. Ереван, Айастан, 1988.
4. **О.С. Ерицян.** Изв. НАН Армении, Физика, **37**, 244 (2002).
5. **О.С. Ерицян, О.М. Аракелян.** Изв. НАН Армении, Физика, **39**, 301 (2004).
6. **Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц.** Теория поля. Москва, Наука, 1967.
7. **В.Ф. Куренков, Л.А. Бударина, А.Е. Заикин.** Практикум по химии полимеров: учебное пособие. Москва, Колос, 2008.
8. **Т.А. Сперанская, Л.И. Тарутина.** Оптические свойства полимеров. Ленинград, Химия, 1976.
9. **В.Н. Серова.** Вестник Казанского технологического университета, **15**, 91 (2012).

ԴԻՖՐԱԿՑԻՈՆ ԱՆՓՈՒՍԱԴԱՐՁՈՒԹՅՈՒՆԸ՝ ՃԵՂՔԻ ՄԻՋՈՎ
ԷԼԵԿՏՐՈՄԱԳՆԵՒՍԱԿԱՆ ԱԼԻՔԻ ԴԻՖՐԱԿՑԻՈՆ ԱՆՑՄԱՆ ԴԵՊՔՈՒՄ
Ա.Ա. ԼԱԼԱՅԱՆ, Հ.Ս. ԵՐԻՑՅԱՆ, Հ.Ս. ԱՌԱՔԵԼՅԱՆ, Շ.Կ. ԵՐԻՑՅԱՆ

Հետազոտվել է դիֆրակցիան ճեղքի վրա՝ այնպիսի միջավայրում, որի բեկման ցուցիչը տարբերվում է օդի բեկման ցուցիչից: Ցույց է տրված, որ դիֆրակցված ալիքի ինտենսիվությունը, կախված լինելով ալիքի երկարությունից, կախված է այն միջավայրի բեկման ցուցիչից, ուր մտնում է էլեկտրամագնիսական ճառագայթումը: Փորձնականորեն հետազոտված է դիֆրակցիան տարբեր բեկման ցուցիչներով միջավայրերի միջև տեղադրված ճեղքի վրա:

DIFFRACTION NONRECIPROCITY IN ELECTROMAGNETIC WAVE DIFFRACTION ON THE SLIT

A.A. LALAYAN, H.S. ERITSYAN, H.M. ARAKELYAN, SH.K. ERITSYAN

The diffraction on the slit in a metal screen located between two media with differing refractive indices was experimentally investigated. It is shown that the intensity of the diffracting wave, depending on the wavelength, depends on the refractive index of the medium into which electromagnetic radiation penetrates.

УДК 543.4

ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА ИОНОВ Nd^{3+} В КРИСТАЛЛАХ $\text{Pb}(\text{MoO}_4)_x(\text{WO}_4)_{1-x}$

Н.Р. АГАМАЛЯН*, Р.Б. КОСТАНИЯН, Р.К. ОВСЕПЯН

Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак, Армения

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

(Поступила в редакцию 12 сентября 2017 г.)

Проведены спектрально-люминесцентные исследования кристаллов $\text{Pb}(\text{MoO}_4)_x(\text{WO}_4)_{1-x}$, активированных ионами Nd^{3+} . Они позволили определить энергию штарковских уровней метастабильного ${}^4F_{3/2}$, основного ${}^4I_{9/2}$ и возбужденных ${}^4I_{11/2}$ и ${}^4I_{13/2}$ состояний, а также пиковое поперечное сечение переходов, связанных с интенсивными линиями полос люминесценции в каналах ${}^4F_{3/2} \rightarrow {}^4I_{11/2}$ и ${}^4F_{3/2} \rightarrow {}^4I_{13/2}$. Полосы излучения в этом кристалле относительно широкие, поэтому можно было бы ожидать создания перестраиваемого лазера и широкополосного усилителя в области длин волн 1060 и 1330 нм.

1. Введение

Вольфраматы и молибдаты щелочноземельных металлов и свинца привлекают внимание как эффективные лазерные среды [1] и сцинтилляторы [2] из-за широкой области прозрачности (0.3–5 мкм), возможности активирования редкоземельными ионами, химической стабильности, возможности выращивания монокристаллов больших размеров с хорошим оптическим качеством.

Вольфраматы и молибдаты одного и того же двухвалентного катиона, имеющие структуру шеелита, создают твердые растворы во всей области композиционного состава [3]. Активированные ионами Nd^{3+} кристаллы PbMeO_4 (Me = Mo, W) исследовались в работах [4–12], в которых приводятся данные по оптическому поглощению, люминесценции на 1.06 мкм, излучательному времени жизни, параметрам интенсивности, лазерному излучению на ионах Nd^{3+} .

Спектроскопические (абсорбционные) исследования с использованием метода Джадда–Офельта для определения основных спектроскопических характеристик кристалла, в том числе вероятности межмультиплетных переходов и излучательного времени жизни, а также кинетика люминесценции ионов Nd^{3+} в кристаллах $\text{Pb}(\text{MoO}_4)_x(\text{WO}_4)_{1-x}$ на переходах ${}^4F_{3/2} \rightarrow J'$ проводились нами ранее и представлены в работе [13]. Цель настоящей работы – изучение люминесцентных свойств ионов Nd^{3+} в кристаллах $\text{Pb}(\text{MoO}_4)_x(\text{WO}_4)_{1-x}$ и определение на длинах

волн самых интенсивных линий его полос люминесценции в обоих каналах ${}^4F_{3/2} \rightarrow {}^4I_{11/2}$ и ${}^4F_{3/2} \rightarrow {}^4I_{13/2}$ пикового поперечного сечения $\sigma_{\text{cm}}^{\text{p}}$ для выявления потенциальных возможностей этого материала.

2. Кристаллы и методы исследований

В работе исследовались спектроскопические свойства ионов Nd^{3+} в кристаллах $\text{Pb}(\text{MoO}_4)_x(\text{WO}_4)_{1-x}$ ($x = 0.64$), который относится к тетрагональной сингонии и имеет структуру шеелита (пространственная группа $I4_1/a-C_{4h}^6$). Точечная группа симметрии примесного иона Nd^{3+} в кристалле S_4 . Для исследований использовались кристаллы, выращенные методом Чохральского, с концентрацией примеси 2.2 ат%. Образцы для исследований в виде пластинок и призм ориентировались относительно оптической C -оси кристалла.

Рентгенодифракционный анализ, рамановские исследования и определение элементного состава (концентрация неодима и соотношение MoO_4 и WO_4) исследуемых кристаллов $\text{Pb}(\text{MoO}_4)_x(\text{WO}_4)_{1-x}$ проводились нами ранее и представлены в работе [13].

Для регистрации спектров поглощения и люминесценции использовалась модифицированная установка КСВУ-2 (ЛОМО) с монохроматором МДР-4, фотоприемниками ФЭУ-62, ФЭУ-100 и Ge-фотодиодом. Возбуждение люминесценции осуществлялось модулированным излучением полупроводникового лазера с длиной волны 808 нм и максимальной мощностью 5 Вт, а также светодиодами с длиной волны излучения 588 нм и мощностью ~ 1.5 Вт. Сбор данных и управление экспериментом (синхронно-фазовым усилителем и монохроматором) осуществлялись компьютером с помощью DAQ-системы фирмы National Instruments. Излучение регистрировалось в перпендикулярном к накачке направлении во избежание паразитного рассеяния. Для записи спектров поглощения использовалась система, оснащенная галогенной лампой. Для проведения поляризационных измерений применялась призма Глана–Томсона. Измерения проводились при комнатной температуре (300 К) и температуре жидкого азота (77 К).

3. Результаты и их обсуждение

Показанные на рис.1 спектры поглощения активированных ионами Nd^{3+} кристаллов $\text{Pb}(\text{MoO}_4)_x(\text{WO}_4)_{1-x}$, соответствующие переходу ${}^4I_{9/2} \rightarrow {}^2P_{1/2}$ при 77 и 300 К, использовались в процессе определения энергии штарковских уровней основного состояния ${}^4I_{9/2}$. Стрелками на рис. 1а и 1б показаны штарковские расщепления энергетических уровней, а в скобках приведены значения энергетических уровней мультиплетов ${}^4I_{9/2}$ и ${}^2P_{1/2}$ в см^{-1} . Звездочкой отмечены значения уровней

энергии, требующие уточнения. Переход ${}^4I_{9/2} \rightarrow {}^2P_{1/2}$ служит также для определения степени разупорядоченности кристалла. Локальная неоднородность кристаллического поля вокруг оптически активного иона приводит к уширению полос поглощения и излучения. На рис.1с для сравнения показаны поляризованные спектры поглощения (переход ${}^4I_{9/2} \rightarrow {}^2P_{1/2}$) при 77 К для кристалла $\text{PbMoO}_4:\text{Nd}^{3+}$, где по линиям поглощения на этом переходе отчетливо виден многоцентровый характер активирующей примеси. Многоцентровая структура оптических спектров наблюдалась и исследовалась в изоструктурном кристалле $\text{SrWO}_4:\text{Nd}^{3+}$ при 10 К [14].

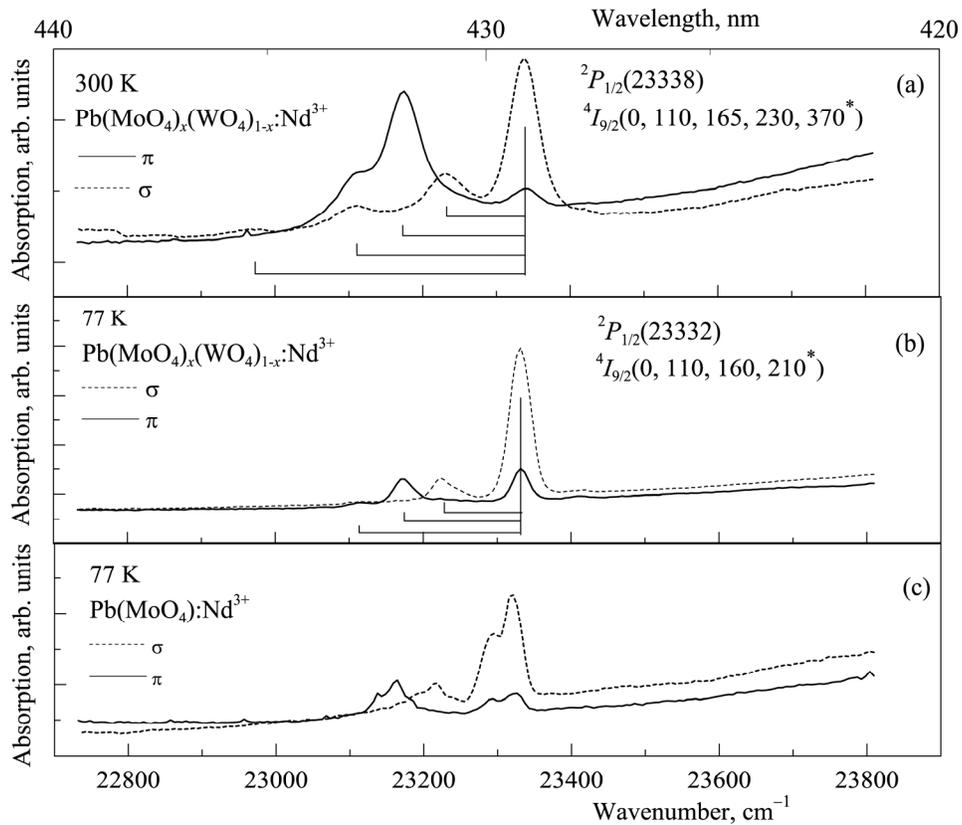


Рис.1. Поляризованные спектры поглощения, соответствующие переходу ${}^4I_{9/2} \rightarrow {}^2P_{1/2}$, при температурах 77 и 300 К для кристаллов (a, b) $\text{Pb}(\text{MoO}_4)_x(\text{WO}_4)_{1-x}:\text{Nd}^{3+}$ и (c) PbMoO_4 , активированных ионами Nd^{3+} .

Поляризованные σ - и π -спектры поглощения, когда соответственно электрическое поле $\mathbf{E} \perp C$ и электрическое поле $\mathbf{E} \parallel C$, относящиеся к переходу ${}^4I_{9/2} \rightarrow {}^4F_{3/2}$ при температурах 300 и 77 К для кристаллов $\text{Pb}(\text{MoO}_4)_x(\text{WO}_4)_{1-x}:\text{Nd}^{3+}$ и приведенные на рис.2b и 2с показывают, что полосы в π -спектрах поглощения более интенсивные, чем в σ -спектрах. Здесь же представлены (рис.2a) спектры

люминесценции, соответствующие переходу ${}^4F_{3/2} \rightarrow {}^4I_{11/2}$ иона Nd^{3+} в кристаллах $\text{Pb}(\text{MoO}_4)_x(\text{WO}_4)_{1-x}$, при температурах 77 и 300 К. Видно, что имеет место сильное неоднородное уширение линий в спектрах люминесценции, полное расщепление основного состояния составляет $\sim 400 \text{ cm}^{-1}$, что характерно для оксидных кристаллов, и в области ниже 880 нм имеет место сильное поглощение. Несмотря на значительное перекрывание спектральных линий резонансного канала ${}^4F_{3/2} \leftrightarrow {}^4I_{9/2}$ удалось расшифровать спектры люминесценции и поглощения и на их основе определить энергии штарковские уровни мультиплетов ${}^4F_{3/2}$ и ${}^4I_{9/2}$.

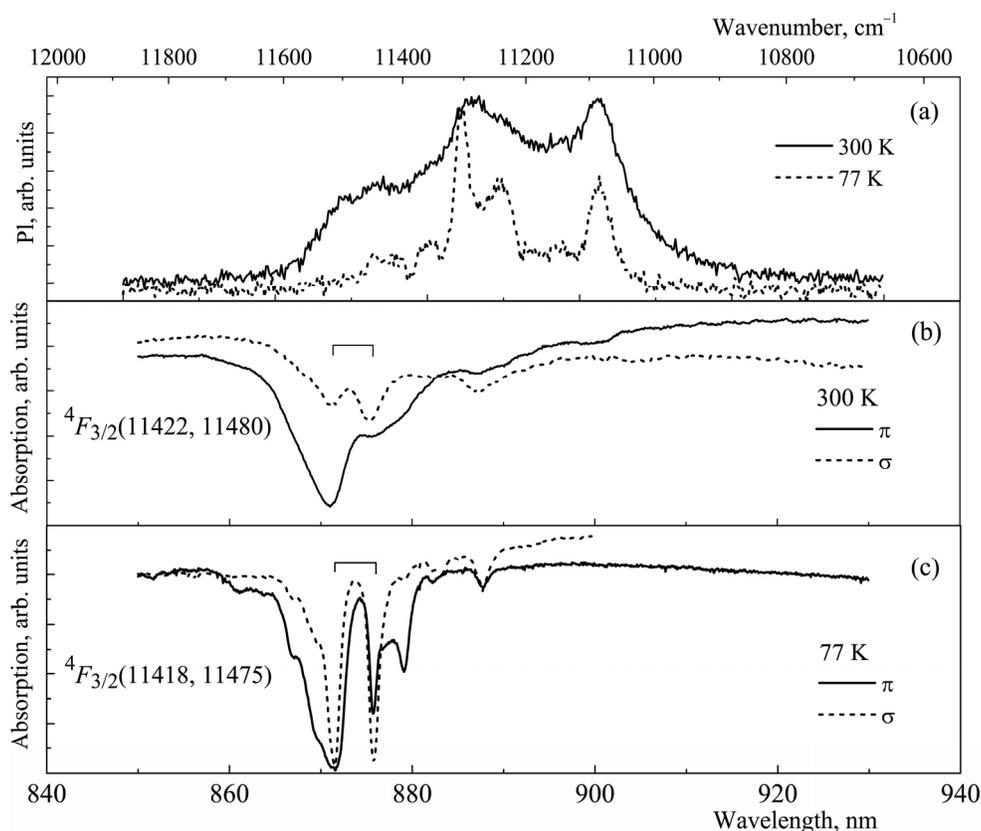


Рис.2. (а) Спектры люминесценции и (b, c) поляризованные σ - и π -спектры поглощения, соответствующие переходам ${}^4F_{3/2} \leftrightarrow {}^4I_{9/2}$, при температурах 77 и 300 К для кристаллов $\text{Pb}(\text{MoO}_4)_x(\text{WO}_4)_{1-x}:\text{Nd}^{3+}$. Стрелками показано расщепление метастабильного уровня ${}^4F_{3/2}$.

Спектры люминесценции были зарегистрированы в области от 840 до 1400 нм, соответствующей переходам с состояния ${}^4F_{3/2}$ на состояния ${}^4I_{9/2}$, ${}^4I_{11/2}$ и ${}^4I_{13/2}$. Полосы люминесценции широкие, что свидетельствует о разупорядоченности окружения ионов Nd^{3+} из-за зарядовой компенсации. Сильное неоднородное

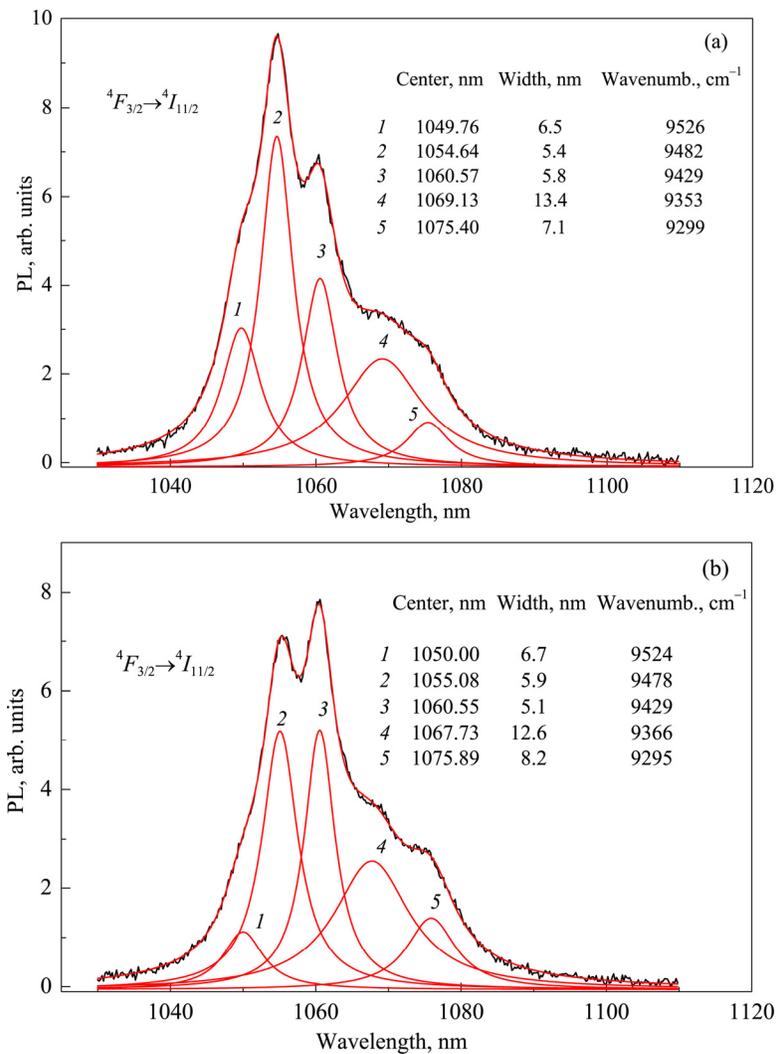


Рис.3. Спектры люминесценции, соответствующие переходу ${}^4F_{3/2} \rightarrow {}^4I_{11/2}$, при комнатной температуре для (а) перпендикулярной и (б) параллельной ориентаций оптической C -оси относительно направления возбуждения люминесценции кристаллов $\text{Pb}(\text{MoO}_4)_x(\text{WO}_4)_{1-x}:\text{Nd}^{3+}$.

уширение линий в спектрах люминесценции основного ${}^4F_{3/2} \rightarrow {}^4I_{11/2}$ (рис.3) и дополнительного ${}^4F_{3/2} \rightarrow {}^4I_{13/2}$ (рис.4) каналов затруднило определение энергии штарковских уровней мультиплетов ${}^4I_{11/2}$ и ${}^4I_{13/2}$. Наиболее интенсивный пик в спектре люминесценции на переходе ${}^4F_{3/2} \rightarrow {}^4I_{11/2}$ в случае одной ориентации кристалла (рис.3а) приходится на ~ 1055 нм, а в другом случае на ~ 1061 нм. На рисунках показаны результаты разложения полос излучения с использованием лоренцевской формы линий. Наиболее интенсивный пик в спектре люминесценции на переходе ${}^4F_{3/2} \rightarrow {}^4I_{13/2}$ в обеих ориентациях кристалла (рис.4а и 4б)

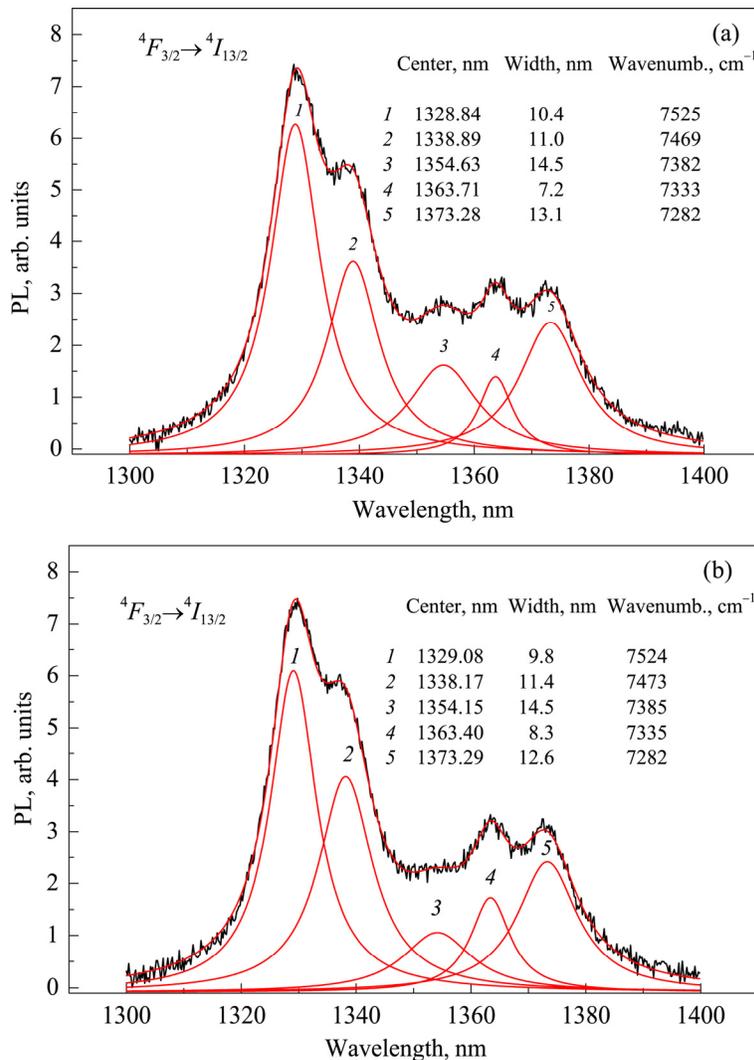


Рис.4. Спектры люминесценции, соответствующие переходу ${}^4F_{3/2} \rightarrow {}^4I_{13/2}$, при комнатной температуре для (а) перпендикулярной и (б) параллельной ориентаций оптической C -оси относительно направления возбуждения люминесценции кристаллов $\text{Pb}(\text{MoO}_4)_x(\text{WO}_4)_{1-x}:\text{Nd}^{3+}$.

приходится на ~ 1329 нм. Эти значения были в дальнейшем использованы при определении эффективной ширины полосы люминесценции соответствующих переходов. Штарковские уровни энергии пяти из соответственно шести и семи уровней мультиплетов ${}^4I_{11/2}$ и ${}^4I_{13/2}$ составили: 1895, 1940, 1990, 2060 и 2123 cm^{-1} (мультиплет ${}^4I_{11/2}$) и 3895, 3950, 4035, 4085 и 4140 cm^{-1} (мультиплет ${}^4I_{13/2}$).

Одной из задач при исследовании излучения ионов Nd^{3+} в кристаллах $\text{Pb}(\text{MoO}_4)_x(\text{WO}_4)_{1-x}$ было определение на длинах волн самых интенсивных линий полос люминесценции в обоих каналах ${}^4F_{3/2} \rightarrow {}^4I_{11/2}$ и ${}^4F_{3/2} \rightarrow {}^4I_{13/2}$ пикового

поперечного сечения $\sigma_{\text{em}}^{\text{p}}$ для выяснения потенциальных возможностей этого материала. Выражение для этого важного спектроскопического параметра лазерного кристалла в случае произвольного контура линии люминесценции или неоднородно уширенного контура линии записывается в форме [15]

$$\sigma_{\text{em}}^{\text{p}} = \frac{\lambda_{\text{p}}^2 \beta_{J,J'}}{8\pi n^2 \Delta\nu_{\text{lum}}^{\text{eff}} \tau_{\text{rad}}}, \quad (1)$$

где $\Delta\nu_{\text{lum}}^{\text{eff}}$ – эффективная частотная ширина полосы люминесценции, которая определяется как отношение ее интегральной интенсивности (площади полосы) к ее максимальному (пиковому) значению на длине волны λ_{p} , $\beta_{J,J'}$ – межмультиплетный коэффициент ветвления люминесценции и τ_{rad} – излучательное время жизни метастабильного состояния ${}^4F_{3/2}$.

Ранее нами была применена теория Джадда–Офельта [16, 17] для вычисления параметров интенсивности, определения вероятности излучательных переходов, коэффициентов ветвления люминесценции, а также излучательного времени жизни [13]. Значения $\beta_{J,J'}$ и τ_{rad} , а также вероятности спонтанных излучательных переходов $A_{J,J'}$ активированного ионами Nd^{3+} кристаллов $\text{Pb}(\text{MoO}_4)_x(\text{WO}_4)_{1-x}$ вычисляли путем анализа интегральных коэффициентов поглощения десяти полос спектра, которые служили исходной информацией проводимого анализа. Были получены следующие усредненные значения параметров Джадда–Офельта $\Omega_2 = 8.91 \times 10^{-20} \text{ см}^2$, $\Omega_4 = 4.50 \times 10^{-20} \text{ см}^2$, $\Omega_6 = 3.89 \times 10^{-20} \text{ см}^2$ для ионов Nd^{3+} в кристаллах $\text{Pb}(\text{MoO}_4)_x(\text{WO}_4)_{1-x}$, а также рассчитано излучательное время жизни τ_{rad} с возбужденного уровня ${}^4F_{3/2}$ ионов Nd^{3+} в кристаллах для неполяризованного света.

Таким образом, в результате проведенного анализа с привлечением спектров люминесценции, представленных на рис.3 и рис.4, определены спектроскопические параметры, необходимые для расчета величины $\sigma_{\text{em}}^{\text{p}}$ по формуле (1). Полученные значения представлены в табл.1, где для сравнения приведены значения этого параметра для активированных ионами Nd^{3+} изоструктурных кристаллов с шеелитоподобной структурой. Излучательное поперечное сечение для наиболее важного перехода (${}^4F_{3/2} \rightarrow {}^4I_{11/2}$) иона Nd^{3+} составило $6.50 \times 10^{-20} \text{ см}^2$ на длине волны 1055 нм для одной ориентации кристалла и $6.02 \times 10^{-20} \text{ см}^2$ на длине волны 1061 нм для другой. Эффективная ширина полосы люминесценции FWHM составила ~ 20 нм. Широкие полосы излучения, соответствующие переходу ${}^4F_{3/2} \rightarrow {}^4I_{13/2}$ (рис.4), характерны для разупорядоченного кристалла и их максимум приходится на 1329 нм с FWHM ~ 33 нм. Величина $\sigma_{\text{em}}^{\text{p}}$ для этого перехода составляет $2.13 \times 10^{-20} \text{ см}^2$. Из табл.1 видно, что эти характеристики сравнимы с кристаллами с шеелитоподобной структурой.

Найденные значения параметра $\sigma_{\text{em}}^{\text{p}}$ показывают, что в этом соединении можно возбудить генерацию стимулированного излучения, а широкополосный

характер спектров поглощения и люминесценции делает указанное соединение перспективным с точки зрения получения перестраиваемого лазера и широкополосного усилителя в области длин волн 1060 и 1330 нм.

Табл.1. Рассчитанные значения пикового поперечного сечения σ_{em}^p , излучательного времени жизни τ_{rad} и коэффициентов ветвления люминесценции с возбужденного уровня ${}^4F_{3/2}$ ионов Nd^{3+} в некоторых кристаллах с шеелиитоподобной структурой при 300 К

Кристалл, активированный ионами Nd^{3+}	λ_{em}^p , нм	FWHM на λ_{em} , нм (cm^{-1})	$\beta_{J'}$	$\sigma_{em}^p \times 10^{-20}$ cm^2	τ_{rad} , мкс	Ссылки
*Pb(MoO ₄) _x (WO ₄) _{1-x}	1055	19 (166)	0.436	6.50	133	Эта работа и [13]
	1061	21 (181)	0.436	6.02		
	1329	33 (187)	0.097	2.13		
*PbWO ₄	1058		0.433	4.5 (E⊥C)	188.2	[10]
	1063			5.7 (E C)		
PbWO ₄	1064		0.486	2.77	198	[11]
	1343		0.087			
*PbWO ₄	1061		0.413	5.90	271	[12]
*PbWO ₄	1062	14 (124)	0.56	5.07 (E⊥C)	145	[8]
	1057	17 (152)	0.57	8.75 (E C)		
SrWO ₄	1060		0.59	1.75 (E⊥C)	188.8	[18]
	1334		0.14	2.04 (E C) 3.84 (E⊥C) 4.79 (E C)		
*SrWO ₄	1063	28 (250)	0.44	9.7 (E⊥C)	184	[19]
	1056	23 (130)	0.08	7.8 (E C)		
	1332			1.6 (E C) 2.2 (E⊥C)		

*Значения пикового поперечного сечения σ_{em}^p вычислены по формуле (1) с использованием эффективной частотной ширины полосы люминесценции $\Delta\nu_{lum}^{eff}$.

4. Заключение

Исследованы люминесцентные свойства активированных ионами Nd^{3+} кристаллов $Pb(MoO_4)_x(WO_4)_{1-x}$ с возбуждением на длине волны 808 нм излучением лазерного диода. Определено пиковое поперечное сечение на длинах волн интенсивных линий полос люминесценции в обоих каналах ${}^4F_{3/2} \rightarrow {}^4I_{11/2}$ и ${}^4F_{3/2} \rightarrow {}^4I_{13/2}$. Оптические полосы уширены из-за неоднородностей кристаллического поля, вызванных процессами зарядовой компенсации, сопровождающими замещение ионов Nd^{3+} . Этот факт и высокие значения поперечных сечений излучения с мультиплета ${}^4F_{3/2}$ указывают на $Pb(MoO_4)_x(WO_4)_{1-x}:Nd$ как на возможную активную среду для перестраиваемых лазеров.

ЛИТЕРАТУРА

1. **A.A. Kaminskii.** Crystalline Lasers: Physical Processes and Operating Schemes. Laser Science & Technology Series, CRP Press Inc., 1996.
2. **M.E. Globus, B.V. Grinyov.** Inorganic Scintillation Crystals: New and Traditional Materials. Acta, Kharkov, 2000.
3. **M. Daturi, G. Busca, M.M. Borel, A. Leclaire, P. Piaggio.** J. Phys. Chem. B, **101**, 4358 (1997).
4. **V.N. Baumer, Yu.T. Dynnik, M.B. Kosmyna, B.P. Nazarenko, V.M. Puzikov, A.N. Shekhovtsov, V.F. Tkachenko.** Optical Materials, **30**, 106 (2007).
5. **M.E. Doroshenko, T.T. Basiev, S.V. Vassiliev, L.I. Ivleva, V.K. Komar, M.B. Kosmyna, H. Jelinkova, J. Sulc.** Optical Materials, **30**, 54 (2007).
6. **Yu.N. Gorobets, M.B. Kosmyna, A.P. Luchechko, B.P. Nazarenko, V.M. Puzikov, A.N. Shekhovtsov, D.Yu. Sugak.** J. Cryst. Growth, **318**, 687 (2011).
7. **W. Li, H. Huang, X. Feng.** Phys. Stat. Sol. (a), **202**, 2531 (2005).
8. **Yu. Chen, Ya. Lin, Z. Luo, Yi. Huang.** J. Opt. Soc. Am. B, **22**, 898 (2005).
9. **Y. Huang, H.J. Seo, W. Zhu.** J. Mater. Sci., **42**, 5421 (2007).
10. **A.A. Kaminskii, H.J. Eichler, K. Ueda, N.V. Klassen, B.S. Redkin, L.E. Li, J. Findeisen, D. Jaque, J. Garcia-Sole, J. Fernandez, R. Balda.** Appl. Optics, **38**, 4533 (1999).
11. **Y. Huang, X. Feng, Z. Xu, G. Zhao, G. Huang, S. Li.** Solid St. Commun., **127**, 1 (2003).
12. **Q.-G. Wang, L.-B. Su, H.-J. Li, W. Xiong, H. Yuan, L.-H. Zheng, X.-D. Xu, F. Wu, H.-L. Tang, D.-P. Jiang, J. Xu.** Chin. Phys. B, **21**, 054217 (2012).
13. **Н.Р. Агамалян, Р.Б. Костанян, Р.К. Овсепян, П.Г. Мужикян, М.Н. Нерсисян.** Известия НАН Армении, Физика, **51**, 371 (2016).
14. **A. Lupei, V. Lupei, C. Gheorghe, L. Gheorghe, A. Achim.** J. Appl. Phys., **104**, 083102 (2008).
15. **A.A. Kaminski.** Laser Crystals – Their Physics and Properties. Springer, Berlin, 1989.
16. **B.R. Judd.** Phys. Rev., **127**, 750 (1962).
17. **G.S. Ofelt.** J. Chem. Phys., **37**, 511 (1962).
18. **G. Jia, C. Tu, A. Brenier, Z. You, J. Li, Z. Zhu, Y. Wang, B. Wu.** Appl. Phys. B, **81**, 627 (2005).
19. **F. Cornacchia, A. Toncelli, M. Tonelli, E. Cavalli, E. Bovero, N. Magnani.** J. Phys.: Condens. Matt., **16**, 6867 (2004).

LUMINESCENT PROPERTIES OF Nd³⁺ IONS IN Pb(MoO₄)_x(WO₄)_{1-x} CRYSTALS

N.R. AGHAMALYAN, R.B. KOSTANYAN, R.K. HOVSEPYAN

Spectral and luminescent investigations of Pb(MoO₄)_x(WO₄)_{1-x} crystals doped by Nd³⁺ ions have been carried out. They have made it possible to determine the energies of the Stark levels of ⁴F_{3/2} metastable state, ⁴I_{9/2} ground state, ⁴I_{11/2} and ⁴I_{13/2} excited states, as well as cross section of transitions associated with intense lines of emission bands in ⁴F_{3/2}→⁴I_{11/2} and ⁴F_{3/2}→⁴I_{13/2} channels. The emission bands in this crystal are relatively wide, so one would expect the creation of a tunable laser and a broadband amplifier in the 1060 and 1330 nm wavelength regions.

УДК 621.315

МЕЖЗОННОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ И ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ В ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ СЛОИСТОЙ ГЕТЕРОСТРУКТУРЕ CdS/HgS/CdS

В.А. АРУТЮНЯН, Д.Б. АЙРАПЕТЯН*, Э.М. КАЗАРЯН

Российско–Армянский университет, Ереван, Армения

*e-mail: dhaugap82@gmail.com

(Поступила в редакцию 6 сентября 2017 г.)

В приближении изотропной эффективной массы рассмотрены одночастичные состояния носителей заряда в слоистой гетероструктуре CdS/HgS/CdS. Показано, что в условиях, когда в слое HgS реализуется режим сильного квантования, в этом слое с наибольшей вероятностью имеет место пространственная локализация носителей. Рассчитаны энергия и огибающие волновые функции электронных и дырочных состояний в рассматриваемой структуре. Рассчитано межзонное оптическое поглощение для случаев, когда система представляет собой слоистую цилиндрическую квантовую точку и когда имеет место свободное движение носителей заряда вдоль оси симметрии. Для этих же случаев рассмотрен также спектр фотолюминесценции.

1. Введение

Современное развитие науки и нанотехнологий позволяет осуществлять эффективное манипулирование свойствами наночастиц путем контроля их геометрических размеров, химического состава и морфологии. Одновременно, перспективность применения наноматериалов в различных областях современной твердотельной электроники, медицины, биологии и др. требует разработки и исследования таких материалов и структур, которые способны одновременно выполнять несколько задач и функций. Объединение нескольких функций в единой наноразмерной геометрии было достигнуто путем создания различных полупроводниковых слоистых наноструктур, основой которых являются одиночные или множественные гетеропереходы ядро/оболочка [1–4].

Важнейшим классом подобных многофункциональных материалов являются полупроводниковые аксиально-симметричные ядро/оболочка/оболочка наноструктуры, такие как полупроводниковые квантовые нанотрубки [5, 6], многослойные квантовые нити [7, 8], полые цилиндрические слои [9, 10] и др. Физической основой специфики и уникальности ряда свойств этих структур, с одной

стороны, является фактор одномерности свободного движения носителей заряда вдоль оси симметрии. С другой стороны, решающим фактором является феномен размерного квантования носителей заряда в направлении роста гетероструктуры. В технологическом плане эффект размерного квантования в таких структурах достигается, в частности, благодаря тому, что между двумя слоями одного и того же широкозонного полупроводника (ядро и внешний слой) помещают слой полупроводника с более узкой запрещенной зоной. Энергетический разрыв контактирующих материалов на интерфейсе приводит к тому, что в рассматриваемой композиции слой узкозонного полупроводника в радиальном направлении начинает играть роль квантовой ямы для носителей заряда [11, 12]. Из сказанного ясно, что подобные гетерофазные структуры комбинируют одновременно ряд свойств как квантовых пленок, так и квантовых нитей и точек. Соответственно, ряд эффектов, в принципе невозможных не только в массивных образцах, но и в квантовых областях с планарной геометрией, становится возможным наблюдать в названных аксиально-симметричных наноструктурах. Решающими модулирующими факторами, под действием которых в подобных структурах формируется и контролируется энергетический спектр носителей заряда и, соответственно, целый ряд свойств образца, являются композиционная зависимость от свойств материалов структуры и соотношения между геометрическими размерами составляющих ее компонент. Благодаря указанным свойствам и возможностям названные структуры уже сейчас имеют широкое применение в различных приборах твердотельной электроники [13, 14] и современной биомедицины [15, 16] и уже более двух десятилетий интенсивно исследуются как теоретически, так и экспериментально.

При изучении свойств любого полупроводника, в том числе и низкоразмерного, типа аксиально-симметричной структуры ядро/оболочка/оболочка, оптический подход, как известно, является одним из мощных и наиболее продуктивных методов исследования зонной структуры образца. В работах [17, 18] в приближении модели плоского ротатора для носителей заряда рассмотрены межзонные и внутризонные дипольные и квадрупольные оптические переходы в полупроводниковом цилиндрическом слое при наличии квантового размерного эффекта. В работах получены соответствующие правила отбора по радиальному и азимутальному квантовым числам и исследована частотная зависимость коэффициента поглощения слабой волны. Подобные переходы рассмотрены также в работах [19, 20] в условиях, когда энергетический спектр носителей заряда является полностью дискретным. Влияние магнитного и электрического полей на оптическое поглощение исследовано в слоистой цилиндрической квантовой точке [21], протяженном квантовом слое [22] и сферическом нанослое [23]. Специфике магнитопоглощения в слоистой цилиндрической нити полупроводников III–V

(GaAs, Al_xGa_{1-x}As и (Al_yGa_{1-y})_{0.51}In_{0.49}P) посвящена работа [24]. В связи с возможностью использования квазиодномерной гетероструктуры Al_xGa_{1-x}As /GaAs для создания лазера в работе [25] исследована полоса межподзонных оптических переходов в этой композиции, а в работе [26] в рамках метода матрицы плотности исследованы оптические свойства слоистых квантовых точек ZnS/CdSe/ZnS. Нелинейные оптические переходы и зависимость поглощения от свойства материала и геометрических размеров цилиндрической слоистой структуры GaN/Al_{0.1}Ga_{0.9}N рассмотрены в работе [27]. На примере композиций CdS/HgS и SiO₂/Si рассчитано сечение фотоионизации в полый цилиндрической слоистой квантовой точке в присутствии донорной примеси [28], а донорные состояния в цилиндрической квантовой точке – в работе [29]. Эффект гидростатического давления на диамагнитные свойства структуры ядро/оболочка/оболочка рассмотрен в работе [30].

В настоящей работе теоретически исследованы межзонное оптическое поглощение и фотолюминесценция в цилиндрической гетероструктуре ядро/оболочка/оболочка (CdS/HgS/CdS) в режиме сильного размерного квантования носителей заряда в слое HgS.

2. Одночастичные состояния

Рассмотрим специфику размерного квантования носителей заряда в структуре CdS/HgS/CdS. В табл.1 приведены характеристики кристаллов CdS и β-HgS.

Табл.1. Характеристики кристаллов CdS и β-HgS (данные взяты из работ [11, 12])

Материал	a , нм	μ_{lh}/m_0	μ_c/m_0	μ_{hh}/m_0	a_{ex} , нм	E_g , эВ	U^c , эВ	U^v , эВ
CdS	0.5818	0.7	0.2	5	3	2.5	-3.8	-6.3
HgS	0.5851	0.047	0.036	0.31	50	0.5	-5.0	-5.5

Здесь μ_c , μ_{lh} , μ_{hh} – эффективные массы электронов, легких и тяжелых дырок, соответственно, m_0 – масса свободного электрона, a – постоянная решетки, E_g – ширина запрещенной зоны массивного образца, U^c и U^v – электронное сродство зоны проводимости и валентной зоны, соответственно, a_{ex} – борровский радиус трехмерного экситона.

Из таблицы видно, что вследствие существенного энергетического разрыва на интерфейсе ($\Delta U_c = 1.2$ эВ для зоны проводимости и $\Delta U_v = 0.8$ эВ для валентной зоны) локализация носителей заряда будет иметь место именно в слое

β -HgS. Одновременно, из-за большого значения борковского радиуса экситона в β -HgS вплоть до значений толщины слоя $L \sim 15$ нм будет выполняться условие

$$L^2 \ll a_{\text{ex}}^2. \quad (1)$$

Состояния носителей заряда в слое при этом с достаточной точностью можно рассматривать в режиме «сильного квантования», который в данной работе нас особенно интересует. В радиальном направлении слой β -HgS аппроксимируем квантовой ямой, свернутой в трубку [11, 12]:

$$U(r) = \begin{cases} \Delta U_{\text{c,v}}, & 0 \leq r \leq R_1, \quad r \geq R_2 \\ 0, & R_1 \leq r \leq R_2. \end{cases} \quad (2)$$

Здесь R_1 и R_2 – соответственно внутренний и внешний радиусы слоя, а индексы при U обозначают соответственно электроны в зоне проводимости и дырки в валентной зоне. В последующих расчетах в качестве единицы измерения длины и энергии будут фигурировать соответственно борковский радиус ($a_{\text{ex}}^{\text{CdS}} \equiv a_1 = 3$ нм) и энергия связи трехмерного экситона ($E_{\text{ex}}^{\text{CdS}} \equiv V_1 \approx 30$ мэВ) в кристалле CdS.

В приближении изотропной эффективной массы μ решения уравнения Шредингера в цилиндрических координатах (r, φ, z) с потенциалом (2) и полной энергией частицы E

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \Psi(r, \varphi, z) + U(r) \Psi(r, \varphi, z) = E \Psi(r, \varphi, z) \quad (3)$$

можно представить в следующем виде:

$$\Psi(r, \varphi, z) = \Phi_{n,|m|}(r) \frac{e^{i|m|\varphi}}{\sqrt{2\pi}} f(z), \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (4)$$

К виду волновой функции продольного движения $f(z)$ мы обратимся позже, а теперь рассмотрим продольное движение носителей заряда в структуре ядро/оболочка/оболочка. По радиальной переменной уравнение (3) сводится к соответствующим уравнениям Бесселя [31], и для радиальной огибающей функции $\Phi_{n,|m|}(r)$ получаем

$$\Phi_{n,|m|}(r) = \begin{cases} AI_{|m|}(k_{1,c(v)}\rho), & 0 \leq r \leq R_1 \\ B_1 J_{|m|}(k_{2,c(v)}\rho) + B_2 Y_{|m|}(k_{2,c(v)}\rho), & R_1 \leq r \leq R_2 \\ CK_{|m|}(k_{3,c(v)}\rho), & r \geq R_2. \end{cases} \quad (5)$$

Предполагаем, что толщина внешнего слоя (CdS) значительно больше толщины квантующего слоя β -HgS, поэтому для решения в этой области не учитываем отраженную волну вследствие ее малой амплитуды.

Здесь индексы 1,2,3 относятся соответственно к ядру CdS, квантующему слою β -HgS и внешнему слою CdS. Приняты следующие обозначения: A, B_1, B_2 и C – нормировочные постоянные, $I_{|m|}(x), K_{|m|}(x)$ – модифицированные функции Бесселя соответственно первого и второго рода, $J_{|m|}(x), Y_{|m|}(x)$ – функции Бесселя соответственно первого и второго рода, $\rho = r/a_1$, $k_{1,c} = \sqrt{\Delta U_c/V_1 - \varepsilon_c} = k_{3,c}$, $\varepsilon_c = E_{tr}^c/V_1$, $k_{2,c} = \sqrt{\varepsilon_c \mu_{2,c}/\mu_{1,c}}$, $k_{1,v} = \sqrt{\frac{\mu_{1,v}}{\mu_{1,c}} \left(\frac{\Delta U_v}{V_1} - \varepsilon_v \right)} = k_{3,v}$ и $\varepsilon_v = E_{tr}^v/V_1$; $k_{2,v} = \sqrt{\varepsilon_v \mu_{2,v}/\mu_{1,c}}$; E_{tr}^c, E_{tr}^v ($E_{tr} \equiv E_{n,|m|}$) – энергия поперечного движения электрона и дырки, соответственно. К виду волновой функции продольного движения $f(z)$ мы обратимся позже.

Для определения энергии поперечного движения носителей заряда воспользуемся условием непрерывности логарифмической производной радиальных огибающих функций на интерфейсе

$$\frac{\Phi'_{1,n,|m|}(r=R_1)}{\Phi_{1,n,|m|}(r=R_1)} = \frac{\Phi'_{2,n,|m|}(r=R_1)}{\Phi_{2,n,|m|}(r=R_1)}, \quad \frac{\Phi'_{3,n,|m|}(r=R_2)}{\Phi_{3,n,|m|}(r=R_2)} = \frac{\Phi'_{2,n,|m|}(r=R_2)}{\Phi_{2,n,|m|}(r=R_2)}. \quad (6)$$

На рис.1 приведены зависимости энергии носителей заряда от ширины

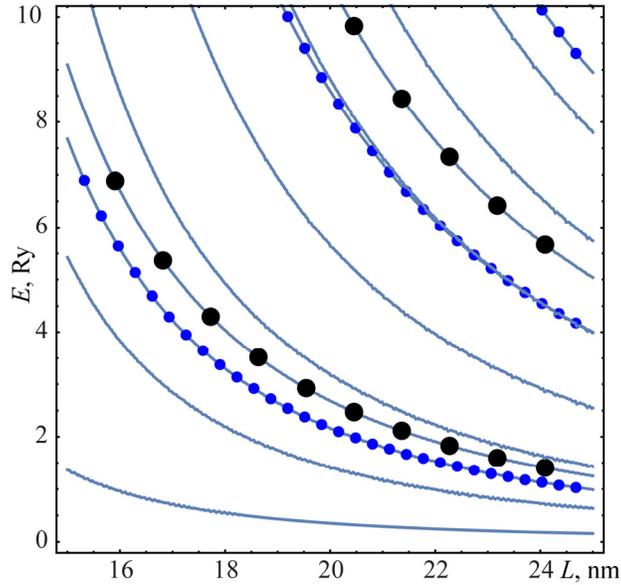


Рис.1. Зависимость энергии носителей заряда (здесь $Ry = V_1 = 30$ мэВ) в квантующем слое β -HgS цилиндрической структуры ядро/оболочка CdS/HgS/CdS от толщины слоя $L = R_2 - R_1$. Сплошные линии соответствуют состояниям тяжелых дырок, линии с малыми и большими точками – состояниям легких дырок и электронов, соответственно.

Табл.2. Значения низших энергетических уровней поперечного движения электронов и дырок $E_{n,|m|}$ (в единицах $Ry = V_1 = 30$ мэВ) при значениях толщины слоя $L = 5$ нм и $L = 10$ нм

Электронные состояния	
$L = 10$ нм	$L = 5$ нм
$E_{1,0} = 2.6824, E_{2,0} = 10.6418, E_{3,0} = 22.8609$	$E_{1,0} = 9.0959, E_{2,0} = 29.917$
$E_{1,1} = 2.8329, E_{2,1} = 10.7989, E_{3,1} = 23.0082$	$E_{1,1} = 9.2992, E_{2,1} = 30.0536$
$E_{1,2} = 3.2822, E_{2,2} = 11.2706, E_{3,2} = 23.4496$	$E_{1,2} = 9.9081, E_{2,2} = 30.4758$
Состояния легких дырок	
$L = 10$ нм	$L = 5$ нм
$E_{1,0} = 2.1663, E_{2,0} = 8.5935, E_{3,0} = 18.2061$	$E_{1,0} = 7.6772, E_{2,0} = 22.6146$
$E_{1,1} = 2.8313, E_{2,1} = 10.7127, E_{3,1} = 18.3092$	$E_{1,1} = 7.8315, E_{2,1} = 22.6748$
$E_{1,2} = 2.6247, E_{2,2} = 9.0705, E_{3,2} = 18.6117$	$E_{1,2} = 8.2935, E_{2,2} = 22.8505$
Состояния тяжелых дырок	
$L = 10$ нм	$L = 5$ нм
$E_{1,0} = 0.3516, E_{2,0} = 1.4182, E_{3,0} = 3.1916$	$E_{1,0} = 1.3623, E_{2,0} = 5.4268$
$E_{1,1} = 0.3691, E_{2,1} = 1.4366, E_{3,1} = 3.2103$	$E_{1,1} = 1.3867, E_{2,1} = 5.4514$
$E_{1,2} = 0.4212, E_{2,2} = 1.4919, E_{3,2} = 3.2661$	$E_{1,2} = 1.4598, E_{2,2} = 5.5254$

квантовой ямы (толщины слоя) $L = R_2 - R_1$ при глубине ямы $\Delta U_c = 1.2$ эВ для электронов и $\Delta U_v = 0.8$ эВ дырок, соответственно.

В табл.2 приведены значения нескольких низших энергетических уровней электронов и дырок при различных значениях толщины слоя.

Что касается продольного движения носителей (вдоль оси симметрии), то в случае протяженной структуры для волновой функции $f(z)$ имеем [11, 12]:

$$f(z) \sim e^{ikz}, \mathbf{k} = \mathbf{k}(0, 0, k). \quad (7)$$

Полная энергия частицы при этом представится в виде

$$E = E_{n,|m|}(k) = E_{n,|m|} + \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}. \quad (8)$$

Если же вдоль оси симметрии размеры системы аномально малы и в этом направлении также имеет место размерное квантование, то огибающая $f(z)$ и соответствующее слагаемое для энергии будут определяться выбором адекватного ограничивающего потенциала по переменной z . Энергетический спектр частицы в этом случае будет полностью дискретным и в общем виде запишется как

$$E = E_{n,|m|,s} = E_{n,|m|} + E_s. \quad (9)$$

Здесь s – квантовые числа, описывающие размерное квантование носителей

вдоль оси симметрии системы. В частности, для наиболее часто употребляемого приближения бесконечно глубокой потенциальной ямы

$$U(z) = \begin{cases} 0, & 0 \leq z \leq d \\ \infty, & z \leq 0, z \geq d \end{cases}, \quad (10)$$

а для волновой функции $f(z)$ и энергии E_s соответственно имеем [12]:

$$f(z) = f_s(z) = \sqrt{\frac{2}{d}} \sin \frac{\pi z}{d} s, \quad E_s = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu d^2} s^2, \quad s = 1, 2, 3, \dots, \quad (11)$$

где d – размер системы вдоль оси z .

3. Межзонное оптическое поглощение

Обратимся теперь к межзонным оптическим переходам в рассматриваемой структуре. Возмущение, связанное со световой волной, в общем случае представляется следующим выражением [32]:

$$\hat{A} = \frac{e}{m_0 c} (\mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}}). \quad (12)$$

Здесь e – заряд электрона, c – скорость света, $\hat{\mathbf{p}}$ – трехмерный оператор импульса, $\mathbf{A} = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{e} A_0 \exp[i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) - \omega t]$ – вектор-потенциал падающей волны с частотой ω и волновым вектором \mathbf{q} и \mathbf{e} – единичный вектор поляризации. Для матричного элемента межзонного перехода в общем виде имеем

$$M_{c,v} = A_{c,v} \int \Psi_c^*(r, \varphi, z) \Psi_v(r, \varphi, z) r dr d\varphi dz. \quad (13)$$

Здесь $A_{c,v}$ – дипольный матричный элемент оператора (12), построенный на блоховских амплитудах валентной зоны и зоны проводимости, интеграл $\int \Psi_c^*(r, \varphi, z) \Psi_v(r, \varphi, z) r dr d\varphi dz$ представляет собой силу осциллятора для соответствующего перехода.

Рассмотрим сначала случай, когда спектр носителей в слое полностью дискретный. Подставляя выражения (4) и (11) в выражение (13), по квантовым числам m и s получаем следующие правила отбора:

$$|m_c| = |m_v|, \quad s_c = s_v. \quad (14)$$

Численные расчеты в свою очередь показывают, что наибольшей интенсивностью (в приведенных единицах ~ 1) обладают переходы, диагональные также и по радиальному числу: $n_c = n_v$. Переходы с $n_c \neq n_v$ не запрещены, однако на несколько порядков подавлены по сравнению с переходами с $n_c = n_v$. В табл.3

представлены значения сил осцилляторов для диагональных и недиагональных по радиальному числу межзонных переходов.

Табл.3. Значения сил осцилляторов для диагональных и недиагональных по радиальному числу межзонных переходов

$ n_{lh, hh}, m_{lh, hh}\rangle \rightarrow n_e, m_e\rangle$	$lh \rightarrow c$	$hh \rightarrow c$
Диагональные переходы		
$ 1, 0\rangle \rightarrow 1, 0\rangle$	1	1
$ 2, 0\rangle \rightarrow 2, 0\rangle$	1	1
Недиагональные переходы		
$ 1, 0\rangle \rightarrow 2, 0\rangle$	0.1714276	0.1675198
$ 2, 0\rangle \rightarrow 1, 0\rangle$	0.1437021	0.1424801

Для коэффициента поглощения $\alpha(\omega)$ в этом случае можем записать:

$$\alpha(\omega) \sim A_{c,v} \delta_{n_c, n_v} \delta_{|m_c|, |m_v|} \delta_{s_c, s_v} \delta(\hbar\omega - E_g - E_{n_c, n_v} - E_{|m_c|, |m_v|} - E_{s_c, s_v}), \quad (15)$$

где δ_{ik} – символ Кронекера и $\delta(x)$ – дельта-функция Дирака. Как видим, полоса межзонного поглощения в этом случае будет представлять собой очередность δ -образных пиков, расположенных на «подзонных» пороговых частотах:

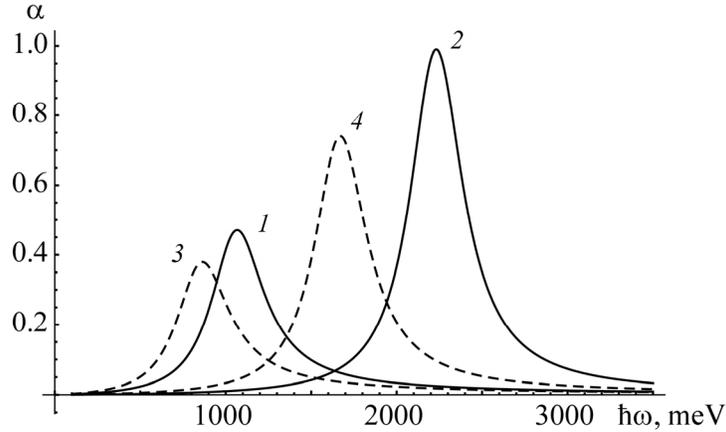


Рис.2. Зависимость интенсивности межзонных диагональных оптических переходов от частоты падающего света в энергетических единицах для спектра вида (9): сплошные линии – переходы $lh \rightarrow c$, 1 – $|1, 0\rangle \rightarrow |1, 0\rangle$ и 2 – $|2, 0\rangle \rightarrow |2, 0\rangle$, пунктирные линии – переходы $lh \rightarrow c$, 3 – $|1, 0\rangle \rightarrow |1, 0\rangle$ и 4 – $|2, 0\rangle \rightarrow |2, 0\rangle$.

$$\hbar\omega_{n,|m|,s}^{c,v} = E_g + E_{n,|m|}^c + E_{n,|m|}^v + E_s^c + E_s^v. \quad (16)$$

На рис.2 представлены зависимости интенсивности межзонных диагональных оптических переходов от частоты падающего света в энергетических единицах в случае спектра вида (9).

Когда система представляет собой протяженную вдоль оси z и в пределе бесконечную структуру, то воспользовавшись выражениями (4), (7), (8), (13) и известной связью между коэффициентом поглощения и матричным элементом межзонного перехода [33], в этом случае для $\alpha(\omega)$ получим

$$\alpha(\omega) \sim A_{c,v} \delta_{n_c, n_v} \delta_{|m_c|, |m_v|} \frac{\Theta(\hbar\omega - \Delta_{c,v})}{\sqrt{\hbar\omega - \Delta_{c,v}}}, \quad \Delta_{c,v} = E_g + E_{n_c, |m_c|} + E_{n_v, |m_v|}. \quad (17)$$

Здесь $\theta(x)$ – ступенчатая функция Хевисайда. Как видим, полоса поглощения представляет собой «пилообразную» кривую, повторяющую характерный для квазиодномерных структур ход плотности состояний: в каждой подзоне, начиная с пороговой частоты, поглощение убывает по закону $\sim x^{-1/2}$ и претерпевает скачок вверх, когда частота поглощения достигает следующего своего порогового значения.

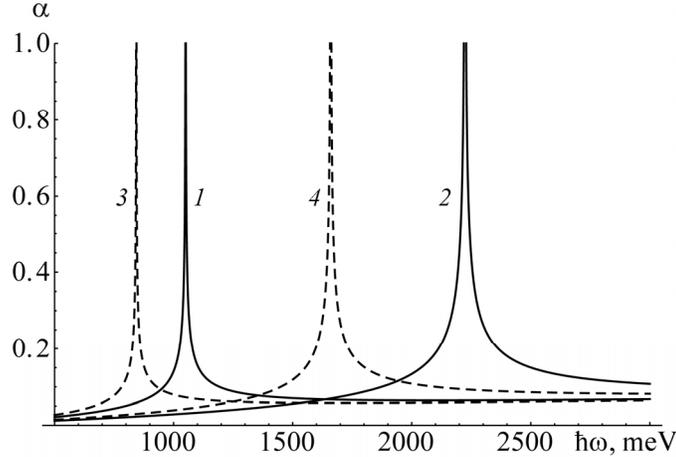


Рис.3. Зависимость интенсивности межзонных диагональных оптических переходов от частоты падающего света в энергетических единицах для спектра вида (8): сплошные линии – переходы $lh \rightarrow c$, 1 – $|1,0\rangle \rightarrow |1,0\rangle$ и 2 – $|2,0\rangle \rightarrow |2,0\rangle$, пунктирные линии – переходы $lh \rightarrow c$, 3 – $|1,0\rangle \rightarrow |1,0\rangle$ и 4 – $|2,0\rangle \rightarrow |2,0\rangle$.

На рис.3 представлены зависимости интенсивности межзонных диагональных оптических переходов от частоты падающего света в энергетических единицах в случае спектра вида (8).

4. Фотолюминесценция

Спектр фотолюминесценции вычислим с помощью соотношения Росбрека–Шокли [34, 35]:

$$R(\hbar\omega) = R_0 \alpha(\hbar\omega) \hbar\omega \frac{f_c(1-f_v)}{f_v - f_c}, \quad (18)$$

где f_c и $1-f_v$ – вероятности заполнения состояний в зоне проводимости и в валентной зоне, соответственно, величина R_0 пропорциональна квадрату модуля матричного элемента дипольного момента, взятого по блоховским функциям. Зависимость интенсивности фотолюминесценции от частоты падающего света показана на рис.4 для случая, когда спектр носителей заряда является полностью дискретным. Для высоких температур член $f_c(1-f_v)/(f_v - f_c)$ в соотношении Росбрека–Шокли принимает больцмановский вид. Заметим, что приведенная кривая фотолюминесценции рассчитана для комнатной температуры и экспоненциальный член обращается в нуль в области высоких энергий.

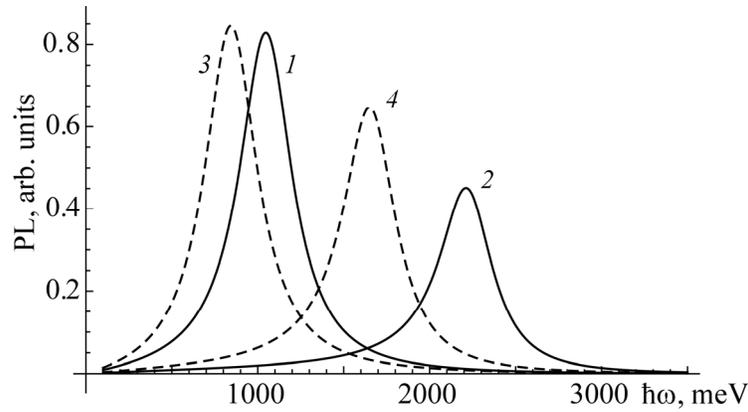


Рис.4. Зависимость интенсивности фотолюминесценции от частоты падающего света в энергетических единицах для спектра вида (9) при температуре $T = 300$ К: сплошные линии – переходы $lh \rightarrow c$, $1 - |1,0\rangle \rightarrow |1,0\rangle$ и $2 - |2,0\rangle \rightarrow |2,0\rangle$, пунктирные линии – переходы $lh \rightarrow c$, $3 - |1,0\rangle \rightarrow |1,0\rangle$ и $4 - |2,0\rangle \rightarrow |2,0\rangle$.

5. Заключение

Предложенная модель гетероструктуры CdS/HgS/CdS физически адекватно описывает состояние носителей заряда при толщине слоя β -HgS порядка 5–10 нм. При этих размерах системы локализация носителей происходит в пределах квантующего слоя β -HgS. Одновременно, при этих размерах экситонные эффекты между электроном и дыркой практически отсутствуют и для носителей

в слое осуществляется режим сильного квантования. Значения энергии носителей заряда в слое определяются толщиной слоя, шириной квантовой ямы и значением эффективной массы частицы.

При межзонных оптических переходах доминирующими являются диагональные по радиальному квантовому числу переходы. Вид волновых функций определяет также правила отбора для ротационного квантового числа. Кривые межзонных переходов повторяют ход плотности состояний носителей в рассматриваемой структуре. С увеличением энергии падающего света наблюдается рост интенсивности поглощения. В противоположность поглощению, в случае межзонной фотолюминесценции имеет место убывание интенсивности переходов с ростом энергии возбуждающего процесс света.

В итоге можем сказать, что рассматриваемая структура позволяет путем варьирования толщины квантующего слоя управляемым образом регулировать диапазон частот пропускаемого и излучаемого света.

Исследование выполнено при финансовой ГКН МОН Армении в рамках научного проекта №16YR-1C022.

ЛИТЕРАТУРА

1. **W. Qi, L. Luo, H.S. Qian, G. Ouyang, K.K. Nanda, S.O. Obare.** *J. Nanomaterials*, **2012** (2012).
2. **A.M. El-Toni, M.A. Habila, J.P. Labis, Z.A. AlOthman, M. Alhoshan, A.A. Elzatahry, F. Zhang.** *Nanoscale*, **8**, 2510 (2016).
3. **В.А. Арутюнян, Д.Б. Айрапетян, Д.А. Багдасарян.** *Изв. НАН Армении, Физика*, **51**, 471 (2016).
4. **D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan, L.S. Petrosyan, H.A. Sarkisyan.** *Physica E*, **66**, 7 (2015).
5. **J. Goldberger, R. He, Y. Zhang, S. Lee, H. Yan, H.-J. Choi, P. Yang.** *Nature*, **422**, 599 (2003).
6. **L. Ai, A. Xu, T. Teng, J. Niu, H.Sun, M. Qi.** *Nanoscale Res. Letters*, **6**, 627 (2011).
7. **M.A. Crowder, Y. Takafuji.** Patent US 7923310 B2. Core-Shell-Shell Nanowire Transistor and Fabrication Method, 2011.
8. **В.А. Арутюнян, Э.М. Казарян, А.А. Саркисян.** *Изв. НАН Армении, Физика*, **46**, 440 (2011).
9. **S.F. Wang, F. Gu, Z.S. Yang, M.K. Lu, G.J. Zhou, W.G. Zou.** *J. Crystal Growth*, **282**, 79 (2005).
10. **H.J. Fan, U. Gsele, M. Zacharias.** *Small*, **3**, 1660 (2007).
11. **V.A. Harutyunyan.** *J. Appl. Phys.*, **109**, 014325 (2011).
12. **V. Harutyunyan.** Effect of Static Electric Fields on the Electronic and Optical Properties of Layered Semiconductor Nanostructures. Chapter 1, Bentham Science, Sharjah, UAE, 2015.
13. **H. Simchi, M. Smaeilzadeh, M. Saani.** *Optics Photonics J.*, **1**, 5 (2011).
14. **Q. Xiong, C. A. Grimes, M. Zacharias, A. Fontcuberta, K. Hiruma, G. Shen.** *J. Nanotechnology*, **2012** (2012).
15. **G.Chen.** *Pharmaceut Annal Acta*, **3**, 2153 (2012).

16. **C.M. Lukehart, R.A. Scott.** Nanomaterials: Inorganic and Bioinorganic Perspectives. Chichester, John Wiley & Sons, 2013.
17. **В.А. Арутюнян, С.Л. Арутюнян, А.А. Дживанян, Г.О. Демирчян.** Изв. НАН Армении, Физика, **31**, 153 (1996).
18. **В.А. Арутюнян, С.Л. Арутюнян, Г.О. Демирчян, Н.Г. Гаспарян.** Изв. НАН Армении, Физика, **43**, 336 (2008).
19. **R.Z. Wang, K.X. Guo, B. Chen, Y.B. Zheng.** Intern. J. Modern Physics B, **23**, 3179 (2009).
20. **D.A. Baghdasaryan, D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan.** J. Nanophotonics, **10**, 033508 (2016).
21. **V.A. Harutyunyan, E.M. Kazaryan, A.A. Kostanyan, H.A. Sarkisyan.** Physica E, **36**, 114 (2007).
22. **V.A. Harutyunyan.** Physica E, **41**, 695 (2009).
23. **D.A. Baghdasaryan, D.B. Hayrapetyan, V.A. Harutyunyan.** Physica B: Cond. Matter, **510**, 33 (2017).
24. **V.R. Kishore, B. Partoens, F.M. Peeters.** J. Physics: Cond. Matter, **26**, 095501 (2014).
25. **A. Deyasi, S. Bhattacharyya, N.R. Das.** Procedia Technology, **4**, 449 (2012).
26. **H. Zhou, D. Yao, G. Xiong.** Optik-Intern. Light and Electron Optics, **125**, 1052 (2014).
27. **M. Kouhi.** Intern. J. Modern Physics B, **31**, 153 (2017).
28. **E. Feddi, M. El-Yadri, F. Dujardin, R.L. Restrepo, C.A. Duque.** J. Appl. Phys., **121**, 064303 (2017).
29. **Д.Б. Айрапетян, Э.М. Казарян, О.Х. Тевосян.** Изв. НАН Армении, Физика, **49**, 190 (2014).
30. **D.B. Hayrapetyan, S.M. Amirkhanyan, E.M. Kazaryan, H.A. Sarkisyan.** Physica E, **84**, 367 (2016).
31. **M. Abramowitz, I. Stegun.** Handbook of Mathematical Functions, Applied Mathematics Series. U.S. Government Printing Office, Washington, 1966.
32. **А.И. Ансельм.** Введение в теорию полупроводников. Наука, Москва, 1978.
33. **D. Bastard.** Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures. Paris, Les Editions de Physique, 1989.
34. **W. Van Roosbroeck, W. Shockley.** Phys. Rev., **94**, 1558 (1954).
35. **R. Bhattacharya, B. Pal, B. Bansal.** Appl. Phys. Lett. **100**, 222103 (2012).

INTERBAND ABSORPTION AND PHOTOLUMINESCENCE
IN THE CYLINDRICAL LAYERED CdS/HgS/CdS HETEROSTRUCTURE

V.A. HARUTRYUNYAN, D.B. HAYRAPETYAN, E.M. KAZARYAN

In approximation of isotropic effective mass, the one-particle states of charge carriers in the layered CdS/HgS/CdS heterostructure are considered. It is shown that under conditions in which the strong-quantization regime is realized in the HgS layer, in this layer the spatial localization of charge carriers have high probability. The energy spectrum and envelope wave functions of the electron and hole states are calculated in considered structure. The interband optical absorption are calculated when the system is a cylindrical layered quantum dot and when there is a free motion of the charge carriers along the symmetry axis. The photoluminescence spectrum is also considered for the same cases.

УДК 537.5

МЕМРИСТИВНЫЙ ЭФФЕКТ В ДВУХСЛОЙНЫХ СТРУКТУРАХ НА ОСНОВЕ ЛЕГИРОВАННЫХ ЛИТИЕМ ПЛЕНОК ZnO

А.С. ИГИТЯН, Н.Р. АГАМАЛЯН, С.И. ПЕТРОСЯН, Е.А. КАФАДАРЯН*

Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак, Армения

*e-mail: ekafadaryan@gmail.com

(Поступила в редакцию 20 сентября 2017 г.)

Исследована структура Au/Li₁₀ZnO/Li₁ZnO/LaB₆, состоящая из верхнего Au и нижнего LaB₆ омических электродов и *p-n* перехода *p*-Li₁₀ZnO/*n*-Li₁ZnO, имеющая резистивную память, где одновременно совмещены две функции – адресный доступ и процесс считывания и хранения информации. Отношение сопротивлений ($R_{\text{reset}}/R_{\text{set}} = 10$), время хранения информации (> 3 часов) и число циклов переключения (> 350) улучшены по сравнению с соответствующими однослойными структурами. Резистивная память объясняется модулирующим эффектом слоя Li₁₀ZnO, сегнетоэлектрическая поляризация которого в зависимости от ориентации изменяет ширину и высоту барьера *p-n* перехода, образованного на контакте *p*-Li₁₀ZnO/*n*-Li₁ZnO.

1. Введение

Элементы тонкопленочных *p-n* переходов перспективны для создания оптически прозрачных *p-n* гетероструктур, которые применяются, например, в плазменных дисплеях и солнечных элементах [1]. Ключевой проблемой для синтеза подобных *p-n* контактов является подбор соответствующего прозрачного полупроводника *p*-типа. В работе [2] была синтезирована гетероструктура $n^+ \text{-ZnO}/n \text{-ZnO}/p \text{-SrCu}_2\text{O}_2/\text{In}_{2-x}\text{Sn}_x\text{O}_3$, которая является полностью прозрачным оксидным *p-n* переходом с ярко выраженной диодной вольтамперной характеристикой (ВАХ). В работе [3] авторам удалось синтезировать *p-n* переход ZnO/алмаз как комбинацию двух широкозонных полупроводников с большой экситонной энергией связи (у алмаза до 80 мэВ). Гетероструктура ZnO/алмаз с *p-n* переходом продемонстрировала классическую экспоненциальную диодную характеристику. Создание мемристоров, элементов резистивной энергонезависимой памяти (ReRAM), одновременно осуществляющих адресный доступ в процессе считывания и хранения информации представляет интерес, поскольку связано с конструированием 3D массива ячеек памяти в виде кроссбаров с

объемом ~1000 терабайт [4, 5]. Это требует разработки диод-транзисторной логики, основанной на использовании *p-n* переходов или барьеров Шоттки.

В настоящей работе исследуется структура Au/Li₁₀ZnO/LiZnO/LaB₆, состоящая из двойного слоя Li₁₀ZnO/LiZnO, заключенного между электродами Au и LaB₆, и представляющая собой мемристор с диодными свойствами, где одновременно совмещены две функции – адресный доступ и хранение информации.

2. Методика эксперимента

Пленки LaB₆ с (100)-ориентацией и толщиной 600 нм были изготовлены вакуумным электронно-лучевым напылением на сапфировых (Al₂O₃) подложках при 850°C. Пленки ZnO, легированные 1% (LiZnO) и 10% (Li₁₀ZnO) лития, с толщинами 400 и 100 нм, соответственно, нанесены на LaB₆/Al₂O₃ при 250°C и отожжены при 350°C в течение 1 ч на воздухе для улучшения кристалличности. Указанные значения примеси в пленках LiZnO соответствуют содержанию лития в мишенях, используемых для электронно-лучевого напыления. Состав и структурные характеристики Li₁₀ZnO/LiZnO/LaB₆/Al₂O₃ изучены методами рентгеновской дифрактометрии с излучением CuK α (дифрактометр Дрон-4). Поверхностная структура пленки изучалась сканирующим электронным микроскопом (СЭМ) VegaTS-5130MM с использованием системы INCA Energy 300 (ЭДС) для элементного анализа. Спектры оптического пропускания были измерены UV–VIS спектрофотометром (Specord M-40). Поскольку Li₁₀ZnO, легированный 10 ат% Li, проявляет сегнетоэлектрические свойства, измерения поляризация–напряжение (*P–V*) проводились по схеме Сойера–Тауэра на частоте 80 Гц с использованием цифрового осциллографа В-423. ВАХ структур были измерены в области напряжений от –10 до +10 В при помощи генератора Agilent 33500В. Верхние Al электроды толщиной 100 нм и площадью 0.785 мм² были нанесены термическим напылением при комнатной температуре. Толщины пленок определялись оптической интерференцией, СЭМ и профилометром Ambios XP-1.

3. Результаты и обсуждение

Дифрактограммы Li₁₀ZnO/LiZnO и отдельных слоев Li₁₀ZnO и LiZnO представлены на рис.1а. На рис.1б показан пик рефлекса (002) ZnO в увеличенном масштабе для Li₁₀ZnO. Присутствие пика (002) указывает на гексагональную симметрию *c*-ориентированных пленок (*c*-ось перпендикулярна плоскости пленки).

Тип проводимости пленок *n*-LiZnO и *p*-Li₁₀ZnO определен по знаку коэффициента Зеебека ($\Delta V/\Delta T$), который равен +2.62 мкВ/К (*p*-тип проводимости)

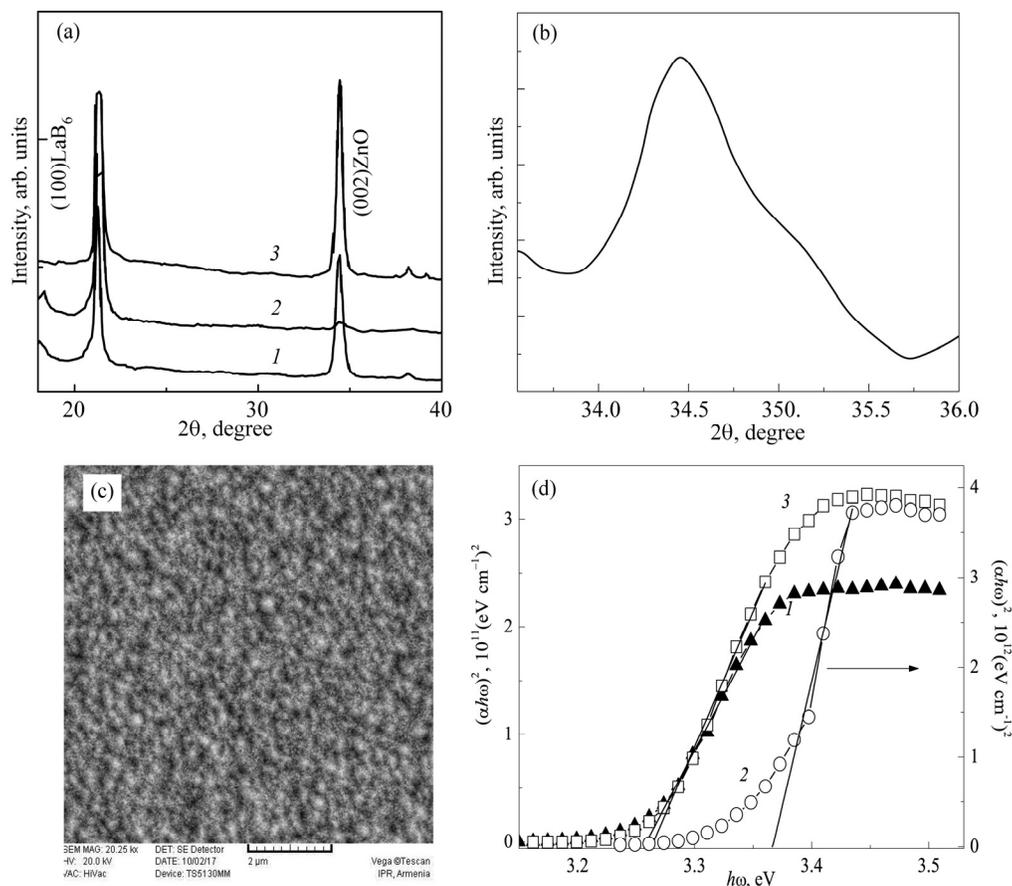


Рис.1. (а) Дифрактограммы пленок Li1ZnO (1), Li10ZnO (2) и Li10ZnO/Li1ZnO (3); (б) пик рефлекса (002) ZnO в увеличенном масштабе для Li10ZnO; (с) СЭМ изображение поверхности Li10ZnO/Li1ZnO; (д) зависимости $(\alpha h\nu)^2$ от $h\nu$ пленок Li1ZnO (1), Li10ZnO (2) и ZnO (3).

для Li10ZnO и -1.85 мкВ/К для Li1ZnO (n -тип проводимости), и измерен при разности температур горячего и холодного полюсов $\Delta T = 1^\circ$ при комнатной температуре. Соотношение O/Zn, полученное методом ЭДС, составляет ~ 1.9 и ~ 1.5 для Li10ZnO и Li1ZnO, соответственно. Поверхностная морфология верхнего слоя представлена на рис.1с. Согласно спектрам оптического поглощения, смещение края собственного поглощения Li10ZnO (кривая 2) и изменение ширины запрещенной зоны ($E_g = 3.37$ эВ) по сравнению с $E_g = 3.26$ эВ для Li1ZnO (кривая 1) составляет 0.11 эВ (рис.1д).

Вольтамперные ($I-V$) и токовременные ($I-t$) характеристики структуры Au/Li10ZnO/Li1ZnO/LaB6 показаны на рис.2а и рис.2б, соответственно. Схема исследуемой структуры представлена на вставке рис.2а, где в качестве нижнего

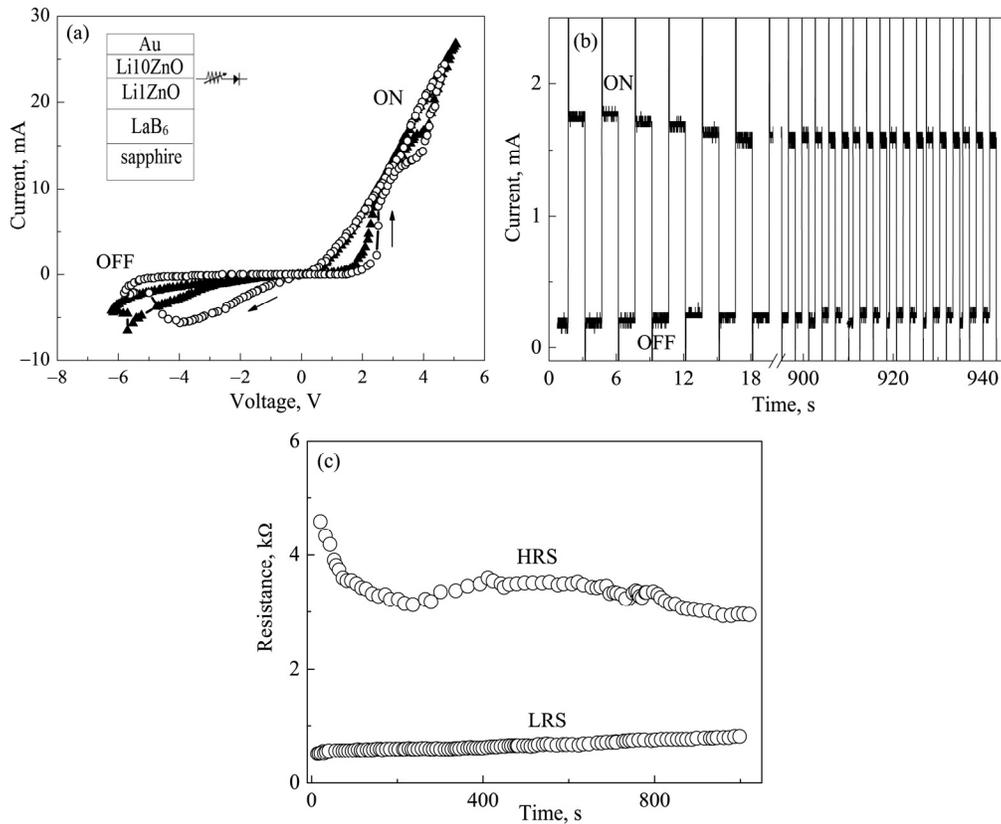


Рис.2. (а) ВАХ ($I-V$), (б) токовременная ($I-t$) характеристика и (с) время хранения информации в структуре Au/Li10ZnO/Li1ZnO/LaB₆. Кривые на рис.2а принадлежат разным ячейкам, на вставке представлена схема структуры Au/Li10ZnO/Li1ZnO/LaB₆. HRS – высокоомные и LRS – низкоомные состояния.

электрода используется LaB₆. ВАХ Au/Li10ZnO/Li1ZnO/LaB₆, полученная при изменении напряжения в последовательности 0 В → 5.87 В → 0 В → -5.87 В → 0 В, имеет диодные свойства и гистерезисную зависимость, обращающуюся в нуль в начале координат, что описывает мемристивный характер структуры. Учитывая тот факт, что p -Li10ZnO и n -Li1ZnO контактируют соответственно с металлом Au, у которого работа выхода электронов высокая (4.6 эВ), и металлом LaB₆ с низкой работой выхода (2.6 эВ), барьер Шоттки не может быть реализован теоретически на контактах Au/ p -Li10ZnO и n -Li1ZnO/LaB₆, т. е. проводимость на контактах линейная, поэтому выпрямление обусловлено $p-n$ переходом на контакте p -Li10ZnO/ n -Li1ZnO. Известно, что прямой ток для идеального диода может быть выражен как [6]

$$I = I_0 \left[\exp(V/nV_i) - 1 \right], \quad (1)$$

$$n = \frac{q}{kT} \frac{dV}{d \ln I}, \quad (2)$$

где I_0 – обратный ток насыщения, q – заряд электрона, k – постоянная Больцмана, $V_t = kT/q$, T – абсолютная температура и n – фактор идеальности, который определяется по наклону линейной области зависимости $\ln I - V$ при прямом смещении. Для полупроводникового диода $\ln I$ должен иметь линейную зависимость от напряжения V с наклоном $q/2kT$ [6]. В данном случае линейная зависимость имеет наклон $q/3kT$ в области $V < 2.6$ В (рис.2а), что указывает на неидеальный характер проводимости на $p-n$ переходе. ВАХ полученной диодной структуры имеет высокую плотность тока (до 40 А/см²) с отношением прямого и обратного токов 3×10^2 .

Наблюдалось устойчивое и воспроизводимое переключение сопротивления мемристивной структуры. Переход образца из высокоомного состояния (ВС) в низкоомное (НС) осуществлялся подачей определенного положительного смещения на $p-n$ переход, т. е. изначально высокоомная ветка ВАХ при определенном значении напряжения (2.2 В) переходила в низкоомную (включение) и в дальнейшем при уменьшении напряжения сохранялась (рис.2а). Переход образца из НС в ВС (выключение) осуществлялся уже подачей отрицательного смещения на $p-n$ переход. Импульсные изменения тока на рис.2б, показывающие обратимое переключение сопротивления между состояниями включения и выключение измерены при напряжениях записи, стирания и считывания информации 6.9, -5.1 и 0.9 В, соответственно. Число переключений без изменения резистивного соотношения $R_{\text{reset}}/R_{\text{set}} \approx 10$ составляло 350 (рис.2б), что намного больше, чем в однослойных устройствах, изготовленных при тех же условиях [7]. Относительные

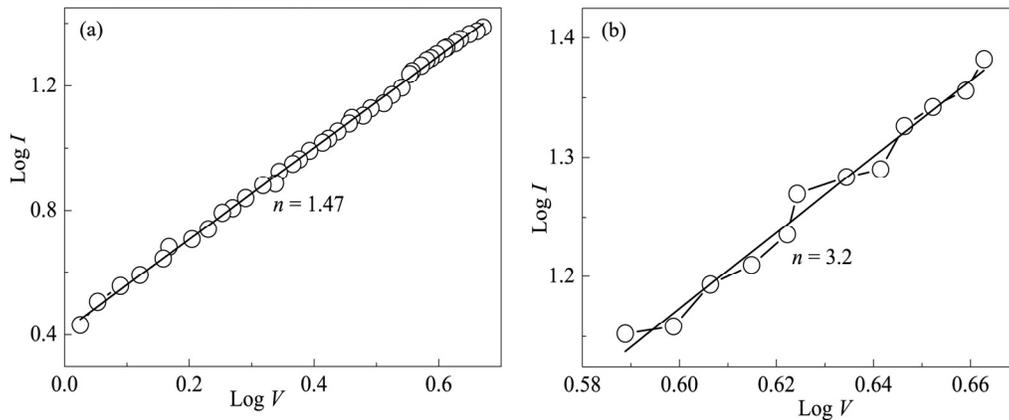


Рис.3. Результаты фитирования ВАХ структуры Au/Li10ZnO/ Li1ZnO/LaB₆ для (а) НС и (б) ВС.

флуктуации (стандартное отклонение/среднее значение) V_{set} и V_{reset} равны 10 и 13%, соответственно. Измеренные сопротивления R_{set} в НС и R_{reset} в ВС в зависимости от времени хранения стабильны в течение 10^3 с (рис.2с). Флуктуации R_{set} находятся в пределах 12%, а флуктуации R_{reset} составляют 6%. Эти данные согласуются с результатами, приведенными для ZnO в работе [8].

Для выяснения механизма проводимости в структуре Au/Li10ZnO/Li1ZnO/LaB₆ было проведено фитирование ВАХ под известные механизмы проводимости Шоттки ($\ln I \propto V^{0.5}$), Пула–Френкеля ($\ln I/V \propto V^{0.5}$), Фаулера–Нордгейма ($\ln I/V^2 \propto I/V$) и ТОПЗ (ток, ограниченный пространственным зарядом) ($I \propto V^n, n \geq 2$) [6]. Результаты фитирования показали, что зависимость $\log I - \log V$ имеет омический характер (т. е. $I \propto V^n, n = 1.3$) (рис.3а) для НС, переход из ВС в НС (включение) (рис.3б) происходит при $V > 1.8$ В согласно ТОПЗ ($I \propto V^n, n = 3.2$) [9].

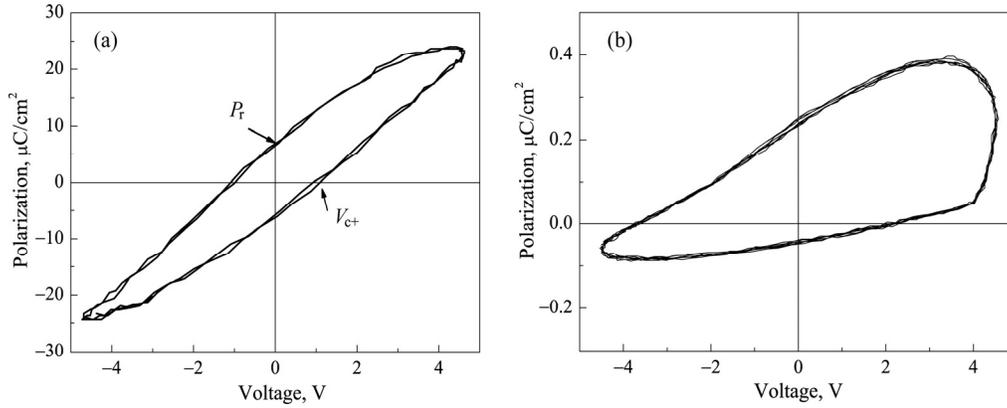


Рис.4. Зависимость поляризации от приложенного электрического поля ($P-V$) для структур (а) Al/Li10ZnO/Al и (б) Au/Li10ZnO/Li1ZnO/LaB₆.

Измерены зависимости поляризации от напряжения ($P-V$) для структур Al/*p*-Li10ZnO/Al и Au/Li10ZnO/Li1ZnO/LaB₆ (рис.4). Пленки Li10ZnO имеют характерную для сегнетоэлектрика почти симметричную петлю гистерезиса (остаточная поляризация $P_r = 6.75$ (–6.2) мкКл/см², коэрцитивное поле $V_c = 1.06$ (–1.06) В) (рис.4а). Механизм возникновения спонтанной поляризации в Li10ZnO связывают с диполями $\text{Li}_{\text{Zn}}^- - \text{Zn}_i^+$, где Li_{Zn}^- – ионы лития, замещающие цинк в узлах решетки, Zn_i^+ – междоузельный цинк [10]. Существует предположение, что комплекс $\text{Li}_{\text{Zn}}^- - \text{Li}_{\text{Zn}}^+$ также может образовывать электрический диполь, где Li_{Zn}^+ – междоузельный литий [11]. Зависимость $P-V$ для структуры Au/Li10ZnO/Li1ZnO/LaB₆ (рис.4б) имеет искаженную асимметричную форму гистерезиса

($V_c = 2.2$ (-3.7) В и $P_r = 0.24$ (-0.04) мкКл/см²), поскольку кроме сегнетоэлектрического слоя Li10ZnO имеются несегнетоэлектрический проводящий слой Li1ZnO и тонкие межграничные слои Au/Li10ZnO, Li10ZnO/Li1ZnO, Li1ZnO/LaB₆, дающие вклад в эффективную емкость, которая является результатом последовательно соединенных емкостей с сегнетоэлектрической емкостью. Из рис.4b видно, что величина коэрцитивного поля V_c соответствует значениям напряжения резистивного переключения при +2.2 (-4) В на ВАХ структуры Au/Li10ZnO/ Li1ZnO/LaB₆ (рис.2a).

Согласно работам [12–14], можно предположить, что резистивное переключение определяется переключением спонтанной поляризации в Li10ZnO, вызывающей изменение ширины и высоты потенциального барьера p - n перехода. Основываясь на механизме [13], в котором сопротивление p - n перехода модулируется поляризацией, можно предположить, что механизм переключения в Au/Li10ZnO/Li1ZnO/LaB₆ следующий. Когда спонтанная поляризация в Li10ZnO направлена вниз при приложении положительного смещающего поля к верхнему электроду, ток экспоненциально растет с напряжением и устройство переходит в состояние НС (рис.5a) и, наоборот, при отрицательном смещении, когда вектор поляризации направлен вверх, ширина обедненной области p - n перехода увеличивается и система переключается в ВС (рис.5b). В данной структуре кислородные вакансии в слое n -Li1ZnO обеспечивают высокую проводимость структуры. Аккумуляция кислородных вакансий создает проводящие нитеобразные каналы

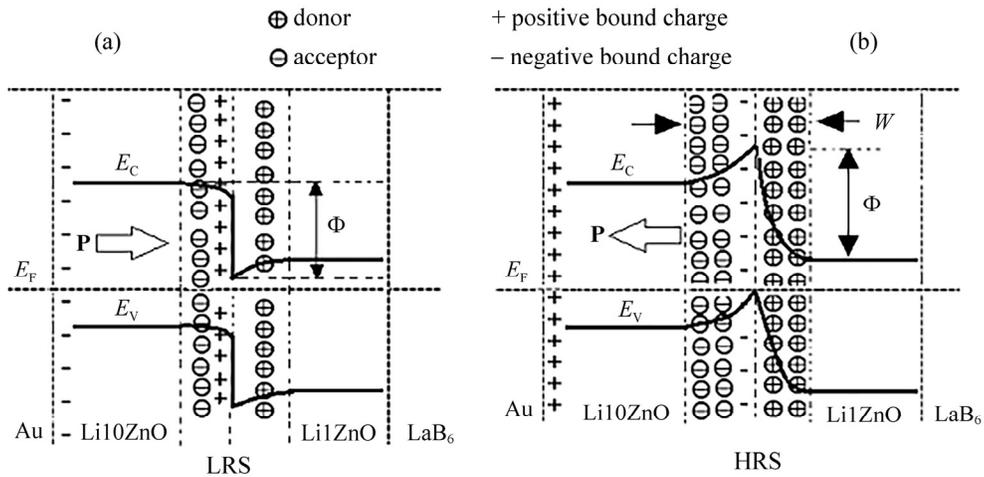


Рис.5. Зонная диаграмма p - n перехода структуры Au/Li10ZnO/ Li1ZnO/LaB₆ для (a) прямого и (b) обратного смещения при противоположных направлениях вектора поляризации P ; W и Φ – ширина p - n перехода и высота потенциального барьера, соответственно.

в LiI₂ZnO при прямом смещении, которые разрушаются при обратном смещении внешнего поля, что переводит систему из НС в ВС. Проводящие волокна ограничены в слое LiI₂ZnO и не образуются в области *p-n* перехода из-за взаимной компенсации внутреннего и внешнего электрических полей, поэтому их образование не разрушает диодную структуру, что способствует сосуществованию резистивного переключения с диодными свойствами структуры.

4. Заключение

Полученные в настоящей работе результаты показывают возможность создания резистивной памяти диодного типа на основе *p*-LiI₂ZnO/*n*-LiI₂ZnO перехода. Данная структура является одновременно и диодным селектором и переключающим элементом памяти (1D1R) в отличие от систем, где отдельные структуры из разных материалов играют эту роль по отдельности. Подобные структуры могут найти применение для создания кроссбаров.

ЛИТЕРАТУРА

1. **N.R. Aghamalyan, E.A. Kafadaryan, R.K. Hovsepyan.** Effect of Lithium and Gallium Impurities on Opto-Electrical Properties of ZnO Films. In: Trends in Semiconductor Science. T. Elliott (Ed). New York, Nova Science Publishers, 2005, pp 81–109.
2. **A. Kudo, H. Yanagi, K. Ueda, H. Hosono, H. Kawazoe, Y. Yano.** Appl. Phys. Lett., **75**, 2851 (1999).
3. **C. Wang, G. Yanga, H. Liu, Y. Han, C. Gao, G. Zou.** Appl. Phys. Lett., **84**, 2427 (2004).
4. **R. Waser, R. Dittmann, G. Staikov, K. Szot.** Adv. Mater., **21**, 2632 (2009).
5. **D.B. Strukov, G.S. Snider, D.R. Stewart, R.S. Williams.** Nature, **453**, 80 (2008).
6. **S.M. Sze.** Physics of Semiconductor Devices. New York–London–Sydney–Toronto, John Wiley & Sons, 1969.
7. **Y. Kafadaryan, A. Igityan, N. Aghamalyan, S. Petrosyan.** Phys. Stat. Sol. A, **213**, 1592 (2016).
8. **D. Xu, Y. Xiong, M. Tang, B. Zeng.** J. Alloys Comp., **584**, 269 (2014).
9. **M.A. Lampert.** Phys. Rev., **103**, 648 (1956).
10. **S.H. Jeong, B.N. Park, S.B. Lee, J.H. Boo.** Thin Solid Films, **516**, 5586 (2008).
11. **Y.J. Zeng, Z.Z. Ye, J.G. Lu, W.Z. Xu, L.P. Zhu, B.H. Zhao.** Appl. Phys. Lett., **89**, 042106, (2006).
12. **P.W.M. Blom, R.M. Wolf, J.F.M. Cillessen, M.P.C.M. Krijn.** Phys. Rev. Lett., **73**, 2107 (1994).
13. **Sh. He, G. Liu, Y. Zhu, X. Ma, J. Sun, Sh. Kang, Sh. Yan, Y. Chen, L. Mei, J. Jiao.** RSC Adv., **7**, 22715 (2017).
14. **B.B. Tian, Y. Liu, L.F. Chen, J.L. Wang, Sh. Sun, H. Shen, J.L. Sun, G.L. Yuan, S. Fusil, V. Garcia, B. Dkhil, X.J. Meng, J.H. Chu.** Sci. Rep., **5**, 18297 (2015).

ՄԵՄՐԻՍՏԻՎ ԷՖԵԿՏԸ ԼԻԹԻՈՒՄՈՎ ԼԵԳԻՐՎԱԾ ZnO ԹԱՂԱՆԹՆԵՐԻ
ՀԻՄԱՆ ՎՐԱ ՍՏԱՑԱԾ ԵՐԿՇԵՐՏ ԿԱՌՈՒՑՎԱԾՔՆԵՐՈՒՄ

Ա.Ս. ԻԳԻԹՅԱՆ, Ն.Ր. ԱՂԱՄԱԼՅԱՆ, Ս.Ի. ՊԵՏՐՈՍՅԱՆ, Ե.Ա. ԿԱՖԱԴԱՐՅԱՆ

Հետազոտված է Au/Li10ZnO/Li1ZnO/LaB6 կառուցվածքը, որը բաղկացած է վերին՝ Au-ի, և ստորին՝ LaB6-ի, օհմական էլեկտրոդներից և *p*-Li10ZnO/*n*-Li1ZnO-ի *p-n* անցումից և որն ունի մի այնպիսի ռեզիստիվ հիշողություն, որը միաժամանակ համատեղում է երկու ֆունկցիոնալ հնարավորություն՝ հասցեի մատչելիությունը և տեղեկատվության ընթերցման ու պահպանման գործընթացը: $R_{\text{reset}}/R_{\text{set}} = 10$ դիմադրությունների հարաբերակցությունը, տեղեկատվության պահպանման ժամանակը (> 3 ժամից) և փոխարկման ցիկլերի քանակը (> 350)՝ համապատասխան միաշերտ կառուցվածքների հետ համեմատած, բարելավված են: Ռեզիստիվ հիշողությունը բացատրվում է ZnO10Li շերտի մոդուլացնող էֆեկտով, որի սեզնետաէլեկտրական բևեռացման դարձելիությունը ազդում է *p*-Li10ZnO/*n*-Li1ZnO միացման տեղում առաջացած *p-n* անցման արգելքի լայնության և բարձրության վրա:

MEMRISTIVE EFFECT IN TWO-LAYERED STRUCTURES
BASED ON LITHIUM DOPED ZnO FILMS

A.S. IGITYAN, N.R. AGHAMALYAN, S.I. PETROSYAN, Y.A. KAFADARYAN

The structure of Au/Li10ZnO/Li1ZnO/LaB6, consisting of Au upper and LaB6 lower ohmic electrodes and *p-n* junction *p*-Li10ZnO/*n*-Li1ZnO which has resistive memory where two functions are simultaneously compatible, address access and the process of reading and storing information, is investigated. The resistance ratio ($R_{\text{reset}}/R_{\text{set}} = 10$), the data storage time (> 3 hours) and the number of switching cycles (> 350) are improved compared to the corresponding single-layer structures. Resistive memory is explained by the modulation effect of the Li10ZnO layer, the ferroelectric polarization of which depending on the orientation affects the width and height of the barrier of the *p-n* junction formed at the *p*-Li10ZnO/*n*-Li1ZnO contact.

УДК 537.226

ВОЛЬТ–АМПЕРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ КОММЕРЧЕСКИХ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ КОНДЕНСАТОРОВ: ОТКЛОНЕНИЯ ОТ МОДЕЛИ ПРЕЙЗАХА

М.В. КАТКОВ^{1,2*}, Д.П. ЛУБОВ^{1,3}, Ю.В. ПЕРШИН^{1,4}

¹Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск, Россия

²Durban University of Technology, Institute of Systems Science, Durban, South Africa

³Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия

⁴University of South Carolina, Columbia, USA

*e-mail: katkov@niic.nsc.ru

(Поступила в редакцию 10 ноября 2017 г.)

Гистерезисные свойства сегнетоэлектрических PZT конденсаторов исследованы с помощью измерения циклических вольт–амперных характеристик с использованием модуля источника/измерителя анализатора полупроводниковых устройств. Получены диаграммы неперелесных петель гистерезиса первого порядка, которые в целом имеют типичный вид для сегнетоэлектрических материалов. На основе полученных диаграмм сделаны выводы о степени корреляции положительных и отрицательных коэрцитивных полей сегнетоэлектрических доменов, а также об отклонениях в их поведении от свойств доменов модели Прейзаха. Наблюдался эффект расщепления пика и определены некоторые из его особенностей.

1. Введение

Изменение поляризации сегнетоэлектриков – гистерезисный процесс, определяемый динамикой сегнетоэлектрических доменов. Исследование динамики доменов на микроскопическом уровне [1] ведёт к пониманию макроскопических свойств переключения ячеек памяти на основе сегнетоэлектрических материалов (FeRAM) [2–4]. Внешнее поле, необходимое для изменения поляризации определённого домена, зависит от его окружения, в том числе структуры дефектов и других микроструктурных условий [5].

Модель Прейзаха [6] описывает сегнетоэлектрик набором невзаимодействующих элементарных доменов (соединённых параллельно независимых реле или гистеронов), каждый из которых характеризуется «положительным» и «отрицательным» коэрцитивными полями, которые не обязательно совпадают по амплитуде (неидеальные реле). Альтернативно, такая ситуация может быть

описана в терминах внутреннего и коэрцитивного полей [7]. Диаграммы непределных петель гистерезиса первого (first-order reversal curves – FORC) и второго порядка часто используются для описания распределения коэрцитивных полей в сегнетоэлектрических материалах [8]. В системах, описываемых классической моделью Прейзаха, диаграммы FORC идентичны распределению Прейзаха [9]. По сравнению с другими макроскопическими измерениями диаграммы FORC дают более подробное описание гистерезисной системы, включая в себя существенную информацию о микроскопических механизмах изменения поляризации [10].

В настоящей работе изучаются свойства сегнетоэлектрических конденсаторов компании Radiant Technologies, Inc. Применяемый подход для получения диаграмм FORC основывается на измерениях вольт–амперных характеристик (ВАХ) [11, 12] в отличие от большинства других исследований, использовавших измерения поляризации [7]. Новым в работе является использование модуля источника/измерителя анализатора полупроводниковых устройств для высокоточных измерений ВАХ. С помощью FORC исследована корреляция между положительными и отрицательными коэрцитивными полями сегнетоэлектрических доменов.

2. Непределные петли гистерезиса первого порядка

Функция распределения ρ непределных петель гистерезиса первого порядка FORC определяется второй смешанной частной производной от полной поляризации p как

$$\rho(E_r, E) = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 p_{\text{FORC}}(E_r, E)}{\partial E_r \partial E}, \quad (1)$$

где p_{FORC} – поляризация, измеренная на возвратной непределной петле гистерезиса как функция приложенного электрического поля E и поля разворота E_r . Подробное описание измерений FORC для сегнетоэлектрических систем можно найти в работе [13].

В настоящей работе для получения FORC используется измерение циклических ВАХ с линейной разверткой. Для того, чтобы показать соответствие нашего подхода определению (1) запишем плотность поляризации P в виде

$$P \approx D = \frac{q}{A}, \quad (2)$$

где D – электрическая индукция, q – заряд пластины и A – площадь пластины. Такое приближение справедливо, так как $D = \varepsilon_0 E + P$ (ε_0 – электрическая постоянная), и в случае сегнетоэлектрических устройств, как правило, $P \gg \varepsilon_0 E$ [14]. Таким образом, изменение плотности поляризации соответствует

изменению плотности поверхностного заряда. При постоянной развертке со скоростью $k = dV/dt$

$$I = A \frac{dP}{dt} = kA \frac{dP}{dV}, \quad (3)$$

где $V = El$ – приложенное напряжение, а l – расстояние между пластинами конденсатора. Используя уравнения (2) и (3), при фиксированном значении E_r дифференциал поляризации можно записать как

$$dp_{\text{FORC}} = lAdP = \frac{l^2 I(V)}{k} dE. \quad (4)$$

С помощью уравнения (4) введём дифференциальную восприимчивость на возвратной непердельной петле гистерезиса

$$\chi_{\text{FORC}}(E_r, E) = \frac{\partial p_{\text{FORC}}(E_r, E)}{\partial E} = \frac{l^2 I(E_r, E)}{k}, \quad (5)$$

которая может быть непосредственно определена экспериментально методом измерения циклических ВАХ.

В предельном случае бесконечно малых разностей

$$\begin{aligned} \rho(E_r, E) &= \frac{1}{2} \lim_{\Delta E_r \rightarrow 0} \frac{\chi_{\text{FORC}}(E_r + \Delta E_r, E) - \chi_{\text{FORC}}(E_r, E)}{\Delta E_r} \\ &= \frac{1}{2} \frac{l^2}{k} \lim_{\Delta E_r \rightarrow 0} \frac{I(E_r + \Delta E_r, E) - I(E_r, E)}{\Delta E_r} \equiv \frac{1}{2} \frac{l^2}{k} \frac{\partial I(E_r, E)}{\partial E_r}. \end{aligned} \quad (6)$$

Выражение (6) позволяет вычислить функцию распределения FORC (1) на основе экспериментально измеряемых ВАХ. В связи с более низким порядком производной вычисление функций распределения FORC на основе тока (6) является более предпочтительным по сравнению с вычислением на основе поляризации (1).

Ранее измерение ВАХ для получения функций распределения FORC было использовано в работах [11, 12], где ток измерялся через падение напряжения на сопротивлении. В настоящей работе для измерения ВАХ использовался модуль источника/измерителя SMU (вид измерительных приборов, использующих одновременно прецизионные источники тока и напряжения) анализатора полупроводниковых устройств, позволяющий высокоточное измерение ВАХ.

Одним из направлений данного исследования было изучение изменений в пике отрицательного тока на возвратной непердельной петле гистерезиса, вызываемых изменением максимального напряжения развёртки (см. схематическое изображение $V(t)$ на вставке рис.1). Для идеального сегнетоэлектрика, описываемого моделью Прейзаха, можно ожидать, что:

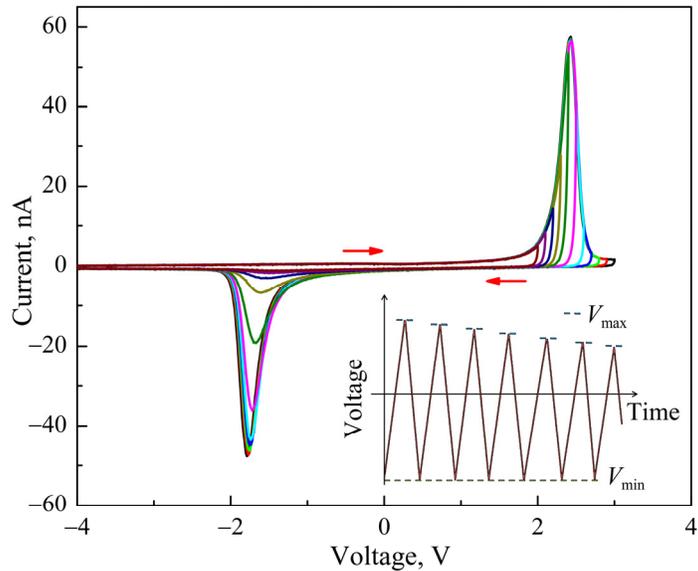


Рис.1. ВАХ в экспериментах с линейной разверткой при уменьшении максимального напряжения от 3 до 2 В и шагом 0.1 В. На вставке показана схема приложенного напряжения как функция времени.

- При увеличении E_r , разность токов $I(E_r + \Delta E_r, E) - I(E_r, E)$ в области $V < 0$ всегда положительна.
- В случае некоррелированных положительных и отрицательных коэрцитивных полей, разностные ВАХ идентичны с точностью до коэффициента масштабирования, определяемого разным количеством доменов, участвующих в процессе.
- В случае полностью симметричных положительных и отрицательных коэрцитивных полей (идеальные реле) положение пика на разностных ВАХ соответствует значению $-E_r$.

3. Измерения

Методом измерения циклических ВАХ изучались свойства сегнетоэлектрических конденсаторов на основе $\text{Pb}(\text{Zr}_{20}\text{Ti}_{80})\text{O}_3$ – PZT с толщиной пленки 255 нм и площадью от 10^2 до 10^5 μm^2 и платиновыми контактами (производитель Radiant Technologies, Inc.) [15]. Измерения осуществлялись после проведения рекомендуемой процедуры инициализации/восстановления, в ходе которой в течение 100 с на конденсатор подаётся сигнал с амплитудой 9 В и частотой 1 Гц прямоугольной формы при комнатной температуре. Для определения корреляции положительных и отрицательных коэрцитивных полей измерения проводились на конденсаторе RTAB104 (Blue) с площадью 10^5 μm^2 , в то время

как непосредственно FORC-диаграмма была получена с использованием конденсатора RTAB403 (Orange) с площадью 4×10^4 мкм². Измерение ВАХ осуществлялось с помощью модуля источника/измерителя анализатора полупроводниковых устройств B1500A (Keysight Technologies). В типичных ВАХ переключение поляризации сегнетоэлектрика наблюдалось при $|V| \sim 2$ В с разницей около 0.6 В между абсолютными значениями положений положительного и отрицательного пиков. Это косвенно указывает на наличие встроенного (внутреннего) электрического поля, эквивалентного 0.3 В приложенного напряжения [12, 16]. Во всех измерениях минимальное значение приложенного напряжения $V_{\min} = -5$ В.

В исследуемых конденсаторах наблюдался интересный эффект расщепления пика. Было обнаружено, что непредельный цикл расщепляет пик тока в последующем предельном цикле в точке, соответствующей максимальному значению напряжения в непредельном цикле (более детально эффект расщепления пика представлен ниже). При сканировании, чтобы избежать влияния эффекта расщепления пика на результат измерения, максимальное значение напряжения в непредельных циклах последовательно уменьшалось (см. вставку на рис.1). С другой стороны, эффект расщепления пика может быть подавлен включением дополнительных предельных циклов «инициализации» ($V_{\max} = 5$ В) между непредельными циклами с последовательно увеличивающимся максимальным напряжением V_{\max} .

4. Результаты и обсуждение

На рис.1 приведены экспериментально измеренные ВАХ исследуемых конденсаторов. На вставке приведена форма сигнала напряжения непредельных (неполных, от V_{\min} до $V_{\max} < |V_{\min}|$ и обратно) циклов с максимальным напряжением V_{\max} , сканирующим положительный пик ВАХ, которое уменьшается с каждым последующим циклом. Стоит отметить, что форма положительного пика ВАХ последовательно воспроизводится во всех циклах.

Одним из основных результатов настоящей работы являются разностные кривые тока, изображённые на рис.2. Согласно уравнению (6), эти кривые пропорциональны распределению FORC. В зависимости от степени сходства с поведением идеальных доменов в модели Прейзаха разностные кривые тока были разбиты на три группы. Кривые, собранные в первую группу (рис.2а), обладают только «хорошими свойствами» и, таким образом, могут быть напрямую интерпретированы в рамках модели Прейзаха. Во вторую группу собраны кривые с незначительными отклонениями (отрицательные значения в разностях тока (рис.2b)). Появление отрицательных значений может быть связано с уменьшением коэрцитивных полей некоторых доменов и вызвано циклами

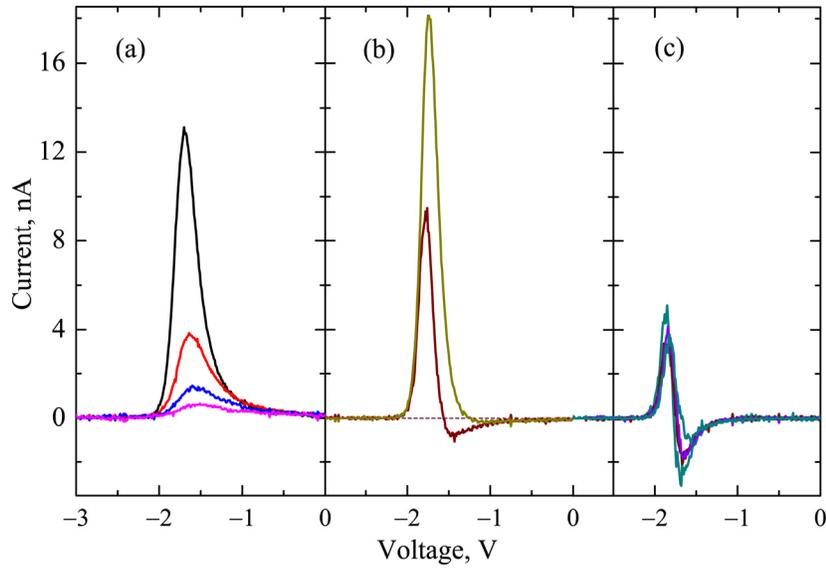


Рис.2. Кривые разности (со знаком минус) значений тока, полученные путем вычитания возвратных ВАХ на каждом последующем шаге (соответствующих уменьшению V от V_{\max} до V_{\min}), изображённых на рис. 1. Кривые собраны в следующие группы: (a) $I_{2.0}-I_{2.1}$, $I_{2.1}-I_{2.2}$, $I_{2.2}-I_{2.3}$, $I_{2.3}-I_{2.4}$, (b) $I_{2.4}-I_{2.5}$, $I_{2.5}-I_{2.6}$, (c) $I_{2.6}-I_{2.7}$, $I_{2.7}-I_{2.8}$, $I_{2.8}-I_{2.9}$, $I_{2.9}-I_{3.0}$. Нижний индекс в обозначении тока соответствует напряжению поля разворота. Кривая $I=0$ изображена для ориентира нулевого значения тока.

с более высоким значением максимального напряжения. Подчеркнем, что эти изменения (на фоне положительного пика) все еще малы. На рис.2с собраны разностные кривые, полученные при самых высоких значениях максимального напряжения в неопределённых циклах. Здесь наблюдаются сильные отклонения в виде двух пиков (положительного и отрицательного), которые появляются в связи с общим сдвигом отрицательного пика ВАХ при увеличении V_{\max} . В связи с большим отклонением от идеального поведения интерпретация последней группы в рамках модели Прейзаха является затруднительной.

Чтобы проанализировать связь между положительным и отрицательным коэрцитивными полями, на рис.3 показана зависимость максимума функции ρ (рис.2) от максимального положительного коэрцитивного поля ($E_r l$). Горизонтальная пунктирная линия представляет «некоррелированную» модельную зависимость, где отрицательное положение пика одинаково для всех положительных коэрцитивных полей. Противоположное, «полностью коррелированное» распределение, подразумевает линейную зависимость, показанную наклонной штриховой линией. Наши экспериментальные данные (сплошная линия)

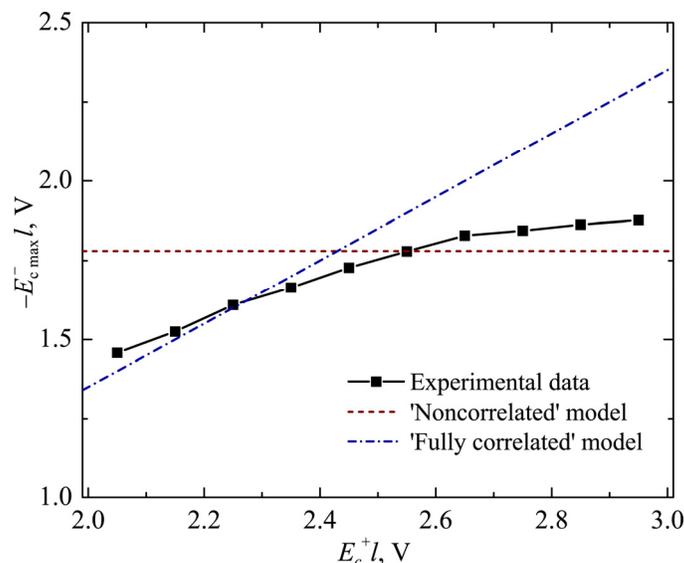


Рис.3. Зависимость положения пика (по абсолютной величине) в разности возвратных ВАХ от положительного коэрцитивного поля соответствующих доменов.

показывают уменьшение наклона кривой с увеличением $E_r l$ и, следовательно, уменьшение корреляции, начиная с $E_r l \approx 2.6$ В.

Полная диаграмма FORC, полученная в широком диапазоне значений E и E_r , изображена на рис.4. На диаграмме виден хорошо различимый максимум, расположенный при $E_r l \approx 2.4$ В и $El \approx -1.9$ В, что соответствует значению локального коэрцитивного поля $E_c = 8.3$ МВ/м и поля смещения $E_i = 0.96$ МВ/м. Домены (переключаемые единицы системы) с близкими значениями этих полей вносят наибольший вклад в поляризацию этого конденсатора. На рис.4 также видна выраженная асимметрия распределения FORC вдоль линии $El = -2.0$ В. В работе [13] такой вид асимметрии объясняется предпочтительной поляризацией доменов, расположенных на границе раздела нижний электрод/ сегнетоэлектрическая пленка. Вид диаграмм FORC исследуемых PZT конденсаторов является схожим с диаграммами PZT конденсаторов, представленными в работах [12, 13].

5. Расщепление пика

Вышеупомянутый эффект расщепления пика ВАХ демонстрируется на рис.5. Это расщепление хорошо видно на первом предельном (полном, от V_{\min} до $V_{\max} = |V_{\min}|$ и обратно) цикле (1) при значении напряжения (поля), точно соответствующему максимальному напряжению предыдущего не предельного

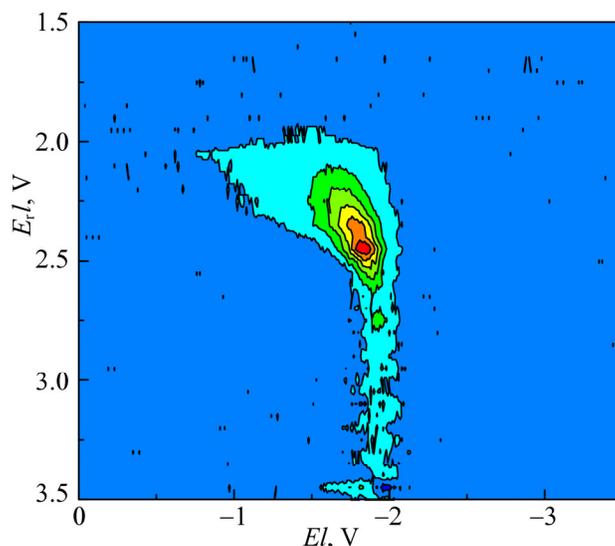


Рис.4. Диаграмма FORC PZT конденсатора с площадью 4×10^4 мкм².

(неполного) цикла. Следующий предельный цикл (2) уже не несет информацию о непердельном цикле. При других условиях проведения эксперимента было замечено, что для стирания памяти о непердельном цикле требуется несколько предельных циклов.

Ранее подобный эффект расщепления пика ВАХ наблюдался в работе [17] в сегнетоэлектрическом оксиде гафния после воздействия большого числа непердельных циклов. Было выдвинуто предположение, что расщепление происходит за счёт изменения локальной концентрации дефектов, вызванного их миграцией от активных переключаемых доменов к пассивным. В качестве альтернативной гипотезы эффект расщепления пика может быть объяснён стабилизацией доменной структуры при частичном переключении [5]. Согласно этой модели, при непердельном циклировании часть переключаемых доменов находит энергетически более выгодные позиции, которые не переключаются при больших значениях внешнего поля, в то время как другие домены оказываются в энергетически менее устойчивых конфигурациях. В первом предельном цикле как стабильные, так и неустойчивые домены переключаются так, что их энергетические конфигурации оказываются разупорядоченными.

6. Заключение

Изучены свойства коммерческих PZT конденсаторов компании Radiant Technologies, Inc. методом измерения циклических ВАХ с помощью модуля источника/измерителя SMU. На основе ВАХ непердельных циклов получены диаграммы FORC. Такой подход, альтернативный получению диаграмм из

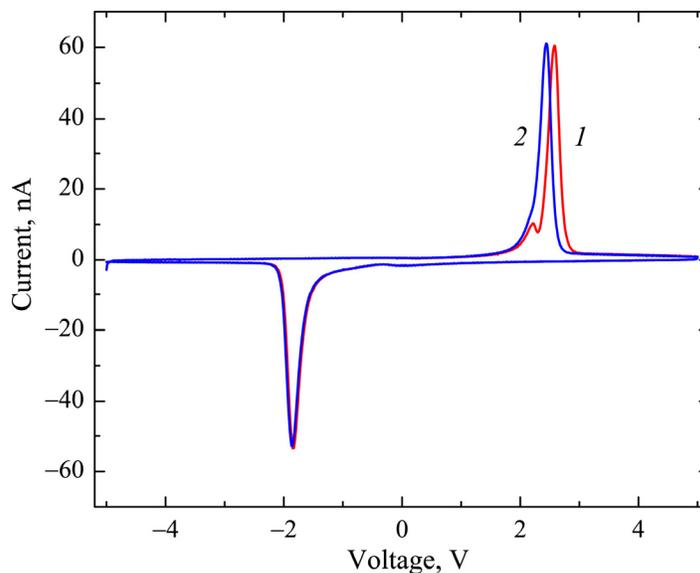


Рис.5. Эффект расщепления пика ВАХ: 1 – первый цикл после цикла с $V_{\max} = 2.4$ В, 2 – следующий цикл.

гистерезисных кривых поляризации, позволяет уменьшить отношение шума к сигналу за счёт меньшего порядка производной [18]. Проведенный анализ показывает выраженную корреляцию (с некоторым сдвигом в напряжении) между положительными и отрицательными коэрцитивными полями доменов PZT конденсаторов, которая уменьшается для более высоких коэрцитивных полей. Также наблюдалось расщепление пика ВАХ после одного непредельного цикла. Как правило, такое расщепление пропадало после одного предельного цикла.

Полученная информация о свойствах PZT конденсаторов может оказаться полезной для проектирования и экспериментов с электронными схемами, включающими в себя эти конденсаторы. Метод построения диаграмм FORC на основе циклических ВАХ может найти применение при изучении широкого круга современных систем (ячеек) с памятью [19].

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант 15-13-20021). Авторы благодарят М.А. Каныгина за полезные обсуждения и помощь с измерениями.

ЛИТЕРАТУРА

1. A.V. Ievlev, S. Jesse, A.N. Morozovska, E. Strelcov, E.A. Eliseev, Y.V. Pershin, A. Kumar, V.Ya. Shur, S.V. Kalinin. *Nature Physics*, **10**, 59 (2014).
2. G.R. Fox, F. Chu, T. Davenport. *J. Vac. Sci. Techn. B*, **19**, 1967 (2001).
3. N. Setter, D. Damjanovic, L. Eng, G. Fox, S. Gevorgian, S. Hong, A. Kingon, H.

- Kohlstedt, N.Y. Park, G.B. Stephenson, I. Stolitchnov, A.K. TagansteV, D.V. Taylor, T. Yamada, S. Streiffer.** *J. Appl. Phys.*, **100**, 051606 (2006).
4. **R. Ramesh.** *Thin Film Ferroelectric Materials and Devices. Vol. 3. Springer Science & Business Media*, 2013.
 5. **T. Granzow, N. Balke, D.C. Lupascu, J. Rödel.** *Appl. Phys. Lett.*, **87**, 212901 (2005).
 6. **F. Preisach.** *Zeitschrift für Physik*, **94**, 277 (1935).
 7. **A. Stancu, C. Pike, L. Stoleriu, P. Postolache, D. Cimpoesu.** *J. Appl. Phys.*, **93**, 6620 (2003).
 8. **A. Stancu, P. Andrei, L. Stoleriu.** *J. Appl. Phys.*, **99**, 08D702 (2006).
 9. **A. Stancu.** *J. Optoelect. Adv. Mat.*, **8**, 1656 (2006).
 10. **C.R. Pike, A.P. Roberts, K.L. Verosub.** *J. Appl. Phys.*, **85**, 6660 (1999).
 11. **T. Schenk, M. Hoffmann, J. Ocker, M. Pešić', T. Mikolajick, U. Schroeder.** *ACS Appl. Mat. Int.*, **7**, 20224 (2015).
 12. **F.P.G. Fengler, M. Pešić', S. Starschich, T. Schneller, C. Kunneht, U. Böttger, H. Mulaosmanovic, M.H. Park T. Schenk, R. Nigon, T. Mikolajick P. Muralt, U. Schroeder.** *Adv. El. Mat.*, **3**, 1600505 (2017).
 13. **A. Stancu, D. Ricinshi, L. Mitoseriu, P. Postolache, M. Okuyama.** *J. Appl. Phys.*, **83**, 3767 (2003).
 14. **B. Ando, P. Giannone, S. Graziani.** *Int. J. Mod. Ident. Contr.*, **3**, 404 (2008).
 15. **Техническая спецификация сегнетоэлектрических конденсаторов RTAB.** URL: <http://www.ferrodevices.com/1/297/files/TypeABPackageDualFeCaps.pdf> (05.12.2017).
 16. **Z. Zhao, K.J. Bowman, R.E. Garca, R. Edwin.** *J. Am. Cer. Soc.*, **95**, 1619 (2012).
 17. **T. Schenk, U. Schroeder, M. Pesic', M. Popovici, Y.V. Pershin, T. Mikolajick.** *ACS Appl. Mat. Int.*, **6**, 19744 (2014).
 18. **T.C. O'Haver, T. Begley.** *Anal. Chem.*, **53**, 1676 (1981).
 19. **Y.V. Pershin, M.Di Ventra.** *Adv. Phys.*, **60**, 145 (2011).

CURRENT–VOLTAGE CHARACTERISTICS OF COMMERCIAL FERROELECTRIC
CAPACITORS: DEVIATIONS FROM THE PREISACH MODEL

M.V. KATKOV, D.P. LUBOV, V.V. PERSHIN

Hysteresis properties of ferroelectric PZT capacitors were investigated by measuring their cyclic current–voltage characteristics using the source/measurement unit of a Semiconductor Device Analyzer. The first order reversal curve (FORC) diagrams were obtained, which have the overall form typical for ferroelectric materials. Based on obtained diagrams, the degree of correlation between positive and negative coercive fields of ferroelectric domains was identified, and deviations in their behavior from the Preisach model domains were determined. A peak-splitting phenomenon was observed and some of its features were found.

УДК 536.2

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ТЕПЛА В ЧУВСТВИТЕЛЬНОЙ ЯЧЕЙКЕ СО СВЕРХПРОВОДЯЩИМИ СЛОЯМИ ОДНОФОТОННОГО ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ДЕТЕКТОРА

А.А. КУЗАНЯН, В.Р. НИКОГОСЯН, А.С. КУЗАНЯН*

Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак, Армения

*e-mail: akuzanyan@yahoo.com

(Поступила в редакцию 13 сентября 2017 г.)

Представлены результаты компьютерного моделирования процессов распространения тепла в трехслойной чувствительной ячейке со сверхпроводящими слоями однофотонного термоэлектрического детектора после поглощения одиночных фотонов с энергией 1–1000 эВ. Рассмотрены различные геометрии чувствительной ячейки, состоящей из CeV_6 или $(\text{La,Ce})\text{V}_6$ термоэлектрического сенсора, поглотителя и теплоотвода из сверхпроводников Nb, Pb или YBCO. Расчеты на основе уравнения распространения тепла из ограниченного объема проводились с использованием трехмерного матричного метода для дифференциальных уравнений. Показано, что, изменяя материалы и размеры элементов чувствительной ячейки, а также рабочую температуру, можно получить детектор для регистрации фотонов в заданном спектральном диапазоне с требуемым энергетическим разрешением и скоростью счета. Такой детектор имеет ряд преимуществ, которые позволяют рассматривать термоэлектрический детектор как реальную альтернативу наиболее перспективным однофотонным детекторам.

1. Введение

Однофотонные детекторы, способные определять энергию фотонов и обеспечивать высокую скорость счета, востребованы во многих областях. Они используются в квантовой электронике, астрофизике, физике высоких энергий, квантовой информатике, телекоммуникационных системах, квантовой метрологии, в медицине и других областях. Среди разработок последних лет сверхпроводящие нанопроволочные однофотонные детекторы, имеющие рекордные характеристики, считаются наиболее перспективными [1, 2]. Термоэлектрический однофотонный детектор (TSPD) демонстрирует аналогичные характеристики [3, 4]. Физическая концепция TSPD была предложена в 2000 году [5, 6]. Было показано, что TSPD может составить конкуренцию сверхпроводящим детекторам [3, 7]. Компьютерное моделирование процессов распределения тепла в

однослойной чувствительной ячейке TSPD, содержащей два вольфрамовых поглотителя и термоэлектрический сенсор, выявило ряд особенностей. Наиболее существенной является зависимость формы получаемого сигнала от области термализации фотонов в поглотителе, что в некоторых случаях усложняет возможность определения энергии поглощенного фотона [8–11]. В связи с этим была предложена идея трехслойной чувствительной ячейки TSPD [12], обеспечивающей независимость отклика от области термализации фотона [13]. В работах [14, 15] приведены результаты компьютерного моделирования процессов распределения тепла в трехслойных чувствительных ячейках $W/(La,Ce)B_6/W$ и $W/CeB_6/W$ после поглощения фотонов с энергией 1–1000 эВ. Показано, что, уменьшая толщину термоэлектрического слоя, можно получить детекторы для регистрации фотонов со скоростью счета выше десятков гигагерц. Однако, чем тоньше термоэлектрический слой, тем меньше его электрическое сопротивление, что может стать препятствием для регистрации напряжения на чувствительной ячейке. Для уверенной регистрации сигнала сопротивление измерительной цепи должно быть меньше сопротивления термоэлектрического слоя. Проблема может быть решена с использованием сверхпроводящих материалов для поглотителя, теплоотвода и электрических контактов. Мы предложили новый тип термоэлектрического детектора с чувствительной ячейкой, состоящей из двух сверхпроводящих слоев и термоэлектрического слоя между ними [16].

В настоящей работе приведены результаты компьютерного моделирования процессов распространения тепла, протекающих после поглощения одиночных фотонов с энергией 1–1000 эВ в трехслойной чувствительной ячейке TSPD, состоящей из термоэлектрического сенсора и сверхпроводящих поглотителя и теплоотвода. Рассмотрено влияние размеров элементов чувствительной ячейки на основные характеристики детектора – энергетическое разрешение и скорость счета.

2. Методика расчетов

Трехслойная чувствительная ячейка TSPD имеет простую конструкцию и обеспечивает возможность создания матрицы детектора, состоящей из множества чувствительных ячеек с очень простой электронной структурой. На рис.1 показан общий вид чувствительной ячейки. В качестве материала поглотителя и теплоотвода были выбраны свинец (Pb), ниобий (Nb) и высокотемпературный сверхпроводник $YBa_2Cu_3O_{7.8}$ (YBCO) с критическими температурами 7.2, 9.25 и 90 К, соответственно [17]. Гексабориды лантана–церия ($La_{1-x}Ce_xB_6$) и церия (CeB_6) с высоким термоэлектрическим КПД при температурах ниже 1 К и около 8 К, соответственно, использовались в качестве материалов термоэлектрического

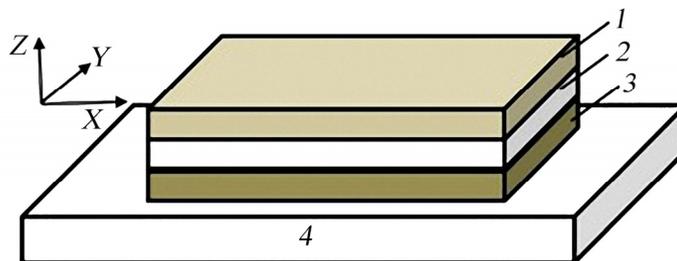


Рис.1. Трехслойная чувствительная ячейка TSPD: 1 – поглотитель, 2 – термоэлектрический сенсор, 3 – теплоотвод и 4 – подложка.

сенсора [3, 4]. Материалом подложки выбран сапфир (Al_2O_3) – диэлектрик с высокой теплопроводностью при низких температурах.

Когда фотон попадает в поглотитель, температура поглотителя возрастает по сравнению с температурой теплоотвода, что приводит к появлению электрического напряжения. Измеряя это напряжение, можно зарегистрировать факт поглощения фотона и определить его энергию. На этом основан принцип работы чувствительной ячейки TSPD.

Компьютерное моделирование процессов, протекающих в чувствительной ячейке после поглощения фотонов с определенной энергией в центре поверхности поглотителя, проводилось на основе уравнения распространения тепла из

Табл.1. Параметры использованных материалов

Параметр	Материалы					
	CeB ₆	(La,Ce)B ₆	Nb	Pb	YBCO	Al ₂ O ₃
Плотность, кг/м ³	4800	4720	8570	11342	6300	4000
0.5 К						
Удельная теплоемкость, Дж/кг К		0.196 [18]	4×10^{-3} [20]	0.02 [22]	3×10^{-3} [24]	9.8×10^{-4} [26]
Теплопроводность, Вт/м К		0.98 [19]	3.128 [21]	10 [23]	0.12 [25]	40 [27]
Коэффициент Зеебека, мкВ/К		85 [4]				
4 К						
Удельная теплоемкость, Дж/кг К	14.64[18]		0.236 [20]	0.7 [29]	0.048 [24]	88×10^{-4} [26]
Теплопроводность, Вт/м К	0.25 [19]		7.8 [21]	400 [22]	1 [25]	300 [27]
Коэффициент Зеебека, мкВ/К	70 [4]					
8 К						
Удельная теплоемкость, Дж/кг К	9.3 [18]		2.325 [20]			539×10^{-4} [26]
Теплопроводность, Вт/м К	0.7 [19]		34.1 [21]			1060 [28]
Коэффициент Зеебека, мкВ/К	140 [4]					

ограниченного объема с использованием трехмерного матричного метода. Подробности примененных подходов и приближений приведены в работах [9, 14]. Используемые в расчетах параметры материалов и ссылки, в которых приведены эти параметры, представлены в табл. 1.

Толщина поглотителя является наиболее важной характеристикой чувствительной ячейки TSPD. Мы выбирали этот параметр исходя из необходимости обеспечить высокую вероятность поглощения фотонов в поглотителе. В работе [30] показано, что вероятность поглощения фотонов с энергией 1000, 100 и 10 эВ будет превышать 0.999 в свинцовом поглотителе толщиной 1.5, 0.5 и 0.2 мкм, соответственно. На рис.2 приведены вероятности достижения фотонов с энергией 1000, 100 и 10 эВ определенных глубин в свинцовом поглотителе, которые показывают, что вероятность поглощения в верхних слоях поглотителя является довольно высокой.

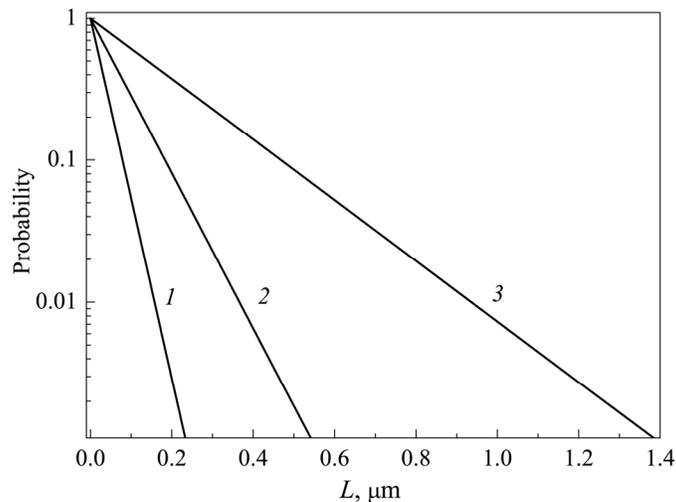


Рис.2. Вероятность достижения глубины L в свинцовом поглотителе фотона с энергией: 1 – 10 эВ, 2 – 100 эВ и 3 – 1 кэВ.

Проведем аналогичные расчеты для ниобиевого поглотителя. Используя закон Бугера–Ламберта и значения коэффициента линейного затухания Nb, для фотонов с энергиями 1000, 100 и 10 эВ, которые равны соответственно 3.218, 4.519 и 160.5 мкм^{-1} [31], нетрудно подсчитать, что вероятность поглощения фотона с энергией 1000, 100 и 10 эВ в ниобиевом поглотителе толщиной 1.5, 1 и 0.03 мкм, соответственно, будет превышать 0.99. Более тонкие ниобиевые поглотители или поглотители, изготовленные из других сверхпроводников, могут быть использованы для обеспечения поглощения фотонов с энергией менее 10 эВ с такой же высокой вероятностью.

3. Результаты и их обсуждение

3.1. Регистрация фотонов чувствительной ячейкой TSPD с сенсором CeB₆

Нашей задачей является исследование характеристик чувствительной ячейки TSPD с сенсором CeB₆ или (La, Ce)B₆, сверхпроводящими поглотителем и теплоотводом при поглощении фотонов ИК, УФ и рентгеновского диапазонов. Рассмотрим сначала результаты компьютерного моделирования процессов распространения тепла в чувствительной ячейке TSPD с сенсором CeB₆.

Табл.2. Характеристики чувствительной ячейки TSPD с ниобиевыми поглотителем и теплоотводом, термоэлектрическим сенсором CeB₆

№ рас- чета	Z ₁ , мкм	Z ₂ , мкм	Z ₃ , мкм	E, эВ	ΔT _m , 10 ⁻⁴ К	t _m , пс	V _m , мкВ	t _b , пс	R, ГГц
8 К									
NC1-8	1	1	1	100	>0.8	>513			
NC2-8	1	0.5	1	100	0.9525	891.3			
NC3-8	1	0.1	1	100	0.9089	771			
NC4-8	1	0.01	1	100	0.158	416.1			
NC5-8	2	0.01	1	100	0.0096	1858.2			
NC6-8	0.5	0.01	1	100	3.5194	62.4			
NC7-8	1	0.01	2	100	0.1583	416.1			
NC8-8	1	0.01	0.5	100	0.1583	417.3			
NC11-8	0.03	0.1	1	10	689	2.4	9.646	>500	<2
NC12-8	0.03	0.05	1	10	689	2.7	9.646	322.8	3.1
NC13-8	0.03	0.01	1	10	688	2.4	9.632	44.1	22.7
NC14-8	0.03	0.01	1	9	619	2.4	8.67	44.1	22.7
NC15-8	0.03	0.01	1	11	756	2.4	10.584	44.1	22.7
NC16-8	0.03	0.01	1	7	481	2.4	6.734	44.1	22.7
NC17-8	0.03	0.01	1	4	275	2.4	3.85	43.8	22.8
NC18-8	0.03	0.01	1	1	69	2.4	0.966	42	23.8
NC19-8	0.03	0.01	1	0.9	62	2.1	0.868	41.7	24
NC20-8	0.03	0.01	1	1.1	75.6	2.4	1.058	42	23.8
4 К									
NC1-4	1	1	1	100	0.2617	124.8			
NC2-4	1	0.5	1	100	0.1806	103.5			
NC3-4	1	0.1	1	100	0.0428	91.2			
NC4-4	1	0.01	1	100	0.0041	89.4			
NC5-4	1	2	1	100	0.5836	146.7			
NC6-4	1	4	1	100	1.1617	149.1			
NC7-4	1	0.01	2	100	0.0041	89.7			
NC8-4	1	0.01	0.5	100	0.0041	89.1			
NC10-4	1	8	1	100	2.2803	149.7			

После поглощения фотона в поглотителе чувствительной ячейки TSPD на термоэлектрическом слое возникает электрическое напряжение V , величина которого пропорциональна разности температур на границах этого слоя и коэффициенту Зеебека термоэлектрика. Как следует из табл.1 термоэлектрик CeB_6 имеет высокое значение коэффициента Зеебека в области 4–8 К. Из выбранных нами материалов при температуре 8 К сверхпроводниками являются Nb и YBCO, а при 4 К также Pb.

В табл.2 приведены результаты компьютерного моделирования процессов распространения тепла в чувствительной ячейке TSPD с сенсором CeB_6 и размерами поглотителя $X = Y = 10$ мкм (см. рис.1). Те же размеры поглотителя были использованы и во всех последующих расчетах. В таблице приведены номер расчета, толщина поглотителя Z_1 , сенсора Z_2 , теплоотода Z_3 , энергия фотона E , максимальное значение возникающей на сенсоре после поглощения фотона разности температур ΔT_m , время достижения максимальной разности температур t_m , максимальная величина возникающего на сенсоре напряжения V_m , время спада разности температур до фонового (10^{-4} К) значения t_b и скорость счета $R = 1/t_b$.

Как видно из первых восьми расчетов (NC1-8–NC8-8), при регистрации фотонов с энергией 100 эВ параметр ΔT_m принимает значения меньше фонового для всех случаев, когда толщина поглотителя равна 1 мкм, и только при $Z_1 = 0.5$ мкм параметр ΔT_m несколько больше (NC1-6). Большей величине толщины термоэлектрика Z_2 соответствуют большие значения параметра ΔT_m (NC1-8–NC4-8), что является положительной тенденцией. При этом с увеличением Z_2 увеличиваются время достижения максимума сигнала t_m и параметр t_b , что приводит к уменьшению скорости счета. Увеличение или уменьшение толщины теплоотода в 2 раза, при прочих равных условиях, не оказывает влияния на параметры ΔT_m и t_m (NC4-8, NC7-8, NC8-8). Таким образом, чувствительная ячейка с Nb-сверхпроводником и сенсором CeB_6 с рабочей температурой 8 К не является удачным выбором для регистрации УФ фотонов с энергией 100 эВ. Результаты расчетов NC1-4–NC10-4 свидетельствуют о том, что вышесказанное верно также для чувствительной ячейки Nb/ CeB_6 /Nb при рабочей температуре 4 К. Отметим вытекающий из сравнения расчетов NC1-4, NC5-4 и NC10-4 результат. Увеличивая толщину термоэлектрика Z_2 , можно увеличить параметр ΔT_m , который все-таки ненамного превышает уровень фона.

Обнадеживающие результаты были получены при исследовании процесса регистрации фотонов с энергией 0.9–11 эВ (ближний ИК–ближний УФ диапазон). Расчеты NC11-8–NC20-8 показывают, что эти фотоны может успешно регистрировать чувствительная ячейка Nb/ CeB_6 /Nb. Значения параметра ΔT_m в десятки и сотни раз превосходят фон, при этом скорость счета достигает десятков гигагерц. Сравнение характеристик расчетов NC11-8–NC13-8 для фотонов с энергией 10 эВ показывает, что при прочих равных условиях уменьшение толщины термоэлектрика с 0.1 мкм до 0.01 мкм не оказывает влияния на величину

параметра ΔT_m , однако скорость счета при этом возрастает на два порядка. Поэтому в расчетах NC13-8–NC20-8 для фотонов с энергией 0.9–11 эВ мы использовали одну и ту же величину параметра $Z_2 = 0.01$ мкм. В этих расчетах одинаковы также толщины поглотителя и теплоотвода, т. е. расчеты NC13-8–NC20-8 проведены для одной и той же конструкции чувствительной ячейки TSPD. Зависимости параметров V_m и R от энергии поглощенного фотона по результатам этих расчетов приведены на рис.3, из которого видно, что возникающее на сенсоре напряжение линейно увеличивается с увеличением энергии поглощенного фотона. Это очень важный результат, позволяющий определять энергию фотона по измеряемому в эксперименте значению параметра V_m . С уменьшением энергии фотона несколько уменьшается параметр t_b и увеличивается скорость счета, что логично, т. к. чем меньше энергия фотона, тем меньше выделяемое им в поглотителе количество тепла и меньше время, необходимое для перехода этого тепла в подложку. Аналогичные закономерности наблюдались ранее для трехслойной чувствительной ячейки с вольфрамовым абсорбером [14, 15] и сенсором FeSb₂ [32]. Можно сделать вывод, что, наблюдаемые закономерности являются общими для трехслойной конструкции чувствительной ячейки TSPD.

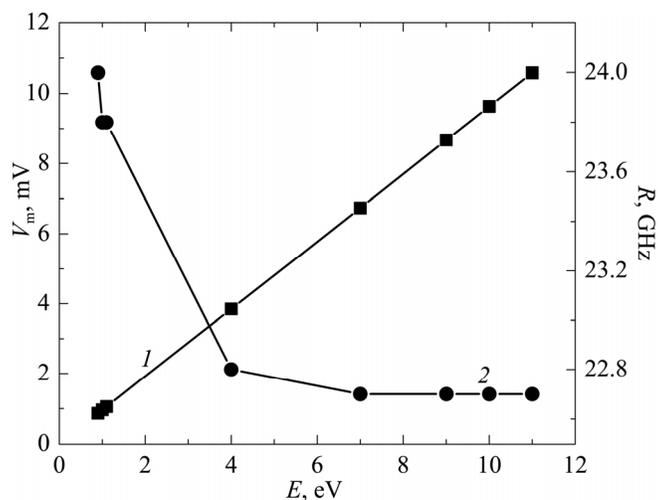


Рис.3. Зависимость параметров V_m (1) и R (2) от энергии поглощенного фотона по данным расчетов NC13-8–NC20-8.

Сравнение параметров V_m расчетов NC13-8, NC14-8 и NC19-8, NC20-8 показывает, что при разнице энергий фотонов на 10% на уровне 10 и 1 эВ параметры V_m отличаются на 0.94 и 0.1 мкВ, соответственно. В наши дни можно с легкостью экспериментально измерять значения напряжения даже на порядки ниже вышеперечисленных. Таким образом, можно утверждать, что чувствительная ячейка Nb/CeB₆/Nb обеспечивает энергетическое разрешение не хуже 1% для фотонов с

энергией как 10, так и 1 эВ.

Значения параметров V_m для расчетов NC1-4–NC10-4 (табл.2) для чувствительной ячейки Nb/CeB₆/Nb с рабочей температурой 4 К меньше фонового значения 10^{-4} К у всех расчетов кроме NC6-4 и NC10-4 для ячеек с толщиной термоэлектрического слоя 4 и 8 мкм. Однако и для этих ячеек параметр V_m ненамного превосходит фон, а параметр t_m возрастает до 149 пс. Низкие значения параметров V_m и скорости счета, получаемые для этих расчетов, позволяют сделать заключение о неперспективности использования чувствительной ячейки Nb/CeB₆/Nb с рабочей температурой 4 К для регистрации фотонов с энергией 100 эВ.

Табл.3. Характеристики чувствительных ячеек Pb/CeB₆/Pb и YBCO/CeB₆/YBCO

№ рас- чета	Z ₁ , мкм	Z ₂ , мкм	Z ₃ , мкм	E, эВ	ΔT_m , 10 ⁻⁴ К	t _m , пс	V _m , мкВ	t _b , пс	R, ГГц
Pb									
PC1-4	1	0.01	1	1000	0.091	7.2	0.001		
PC2-4	0.4	0.01	1	100	2,3	0.977	0.016	2.216	451
PC3-4	0.15	0.01	1	10	6.9	0.234	0.048	0.839	1192
PC4-4	0.1	0.01	1	1	1.805	0.116	0.013	0.266	3759
PC5-4	0.15	0.02	1	10	15.5	0.245	0.109	1.179	848
PC6-4	0.15	0.05	1	10	37	0.3315	0.259	1.805	554
PC7-4	1	0.05	1	1000	0.465	7.5	0.003		
PC8-4	1	0.5	1	1000	2.77	12.6	0.019	37.5	27
YBCO									
YC3-4	0.1	0.01	1	10	8.2	1.8	0.057	12	83.3
YC4-4	0.05	0.01	1	1	18.5	0.348	0.13	1.938	516
YC5-4	0.08	0.01	1	10	39.9	0.9	0.279	36	27.8
YC6-4	0.08	0.01	0.1	10	48	0.87	0.336	27	37
YC7-4	0.08	0.01	0.01	10	81	0.93	0.567	25.8	38.8

Характеристики чувствительных ячеек Pb/CeB₆/Pb и YBCO/CeB₆/YBCO с рабочей температурой 4 К приведены в табл.3. Обозначения столбцов такие же, как и в табл.2. Рассмотрим сначала результаты расчетов чувствительной ячейки Pb/CeB₆/Pb. По результатам расчета PC1-4 для фотона с энергией 1 кэВ значения параметр ΔT_m меньше фонового. Увеличение толщины термоэлектрика Z₂ в 5 раз (расчет PC7-4) увеличивает параметр ΔT_m , однако он остается меньше фонового значения, и только увеличив Z₂ в 50 раз (расчет PC8-4), получаем ΔT_m выше фона и скорость счета 27 ГГц. При еще большем увеличении Z₂ получим больший параметр ΔT_m , но проиграем в скорости счета.

Величина параметра ΔT_m имеет значения выше фона для расчетов РС2-4 (100 эВ), РС3-4, РС5-4, РС6-4 (10 эВ) и РС4-4 (1 эВ). При этом параметр R расчетов РС3-4 и РС4-4 достигает нескольких терагерц. Здесь также увеличением толщины Z_2 можно получить больший параметр ΔT_m , проиграв при этом в скорости счета, что демонстрируют расчеты РС3-4, РС5-4 и РС6-4 для фотонов с энергией 10 эВ.

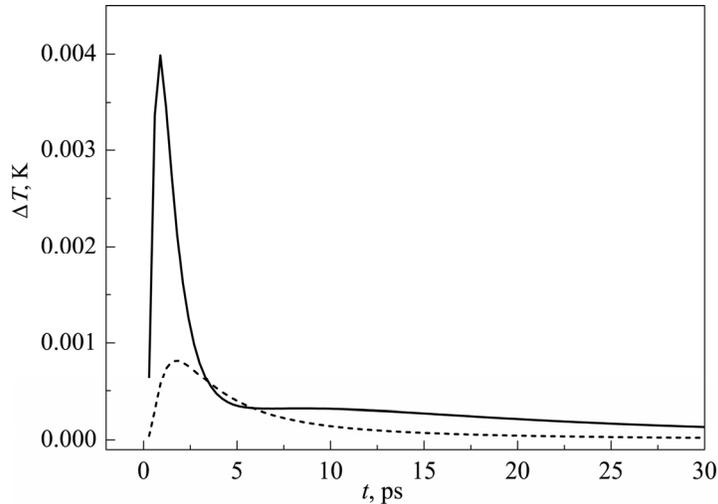


Рис.4. Временная зависимость ΔT по данным расчетов YC3-4 (пунктирная кривая) и YC5-4 (сплошная кривая).

Расчеты в нижней части табл.3 показывают, что чувствительная ячейка YBCO/CeV₆/YBCO может быть успешно применена для регистрации фотонов ИК и УФ диапазонов. Параметр ΔT_m расчетов YC3-4–YC7-4 выше фона, а скорость счета достигает десятков гигагерц. На рис.4 показана временная зависимость ΔT по данным расчетов YC3-4 и YC5-4. На обеих кривых имеем максимум отклика в области до 5 пс с начала процесса. Затем наблюдается медленный спад сигнала до фонового значения, который обусловлен материалом и толщиной теплоотвода. Если уменьшить толщину Z_3 в 10 и 100 раз (расчеты YC6-4 и YC7-4), которая для расчетов YC3-4–YC5-4 составляла 1 мкм, то можно достичь более высоких скоростей счета. Толщина Z_3 может быть значительно уменьшена, т. к. в данной конструкции чувствительной ячейки основная функция этого слоя — служить сверхпроводящим контактом. Из табл.1 видно, что при 4 К теплопроводность YBCO в 300 раз меньше, чем у сапфира, и третий слой чувствительной ячейки YBCO/CeV₆/YBCO является скорее тепловым затвором, чем теплоотводом.

3.2. Регистрация фотонов чувствительной ячейкой TSPD с сенсором (La,Ce)В₆

Как видно из табл.1, гексаборид (La,Ce)В₆ имеет высокий коэффициент Зеебека при температуре 0.5 К. Именно при этой температуре будут рассмотрены характеристики трехслойной чувствительной ячейкой TSPD с сенсором (La,Ce)В₆ и сверхпроводящими поглотителем и теплоотводом. Результаты расчетов приведены в табл.4, обозначения которой соответствуют табл.2. Рассмотрим сначала характеристики чувствительной ячейки Nb/(La,Ce)В₆/Nb. При прочих равных условиях толщина сенсора уменьшается от 1 до 0.01 мкм в расчетах NLC1–NLC4 для фотонов с энергией 100 эВ. Кривые зависимостей ΔT_m и R от толщины Z_2 представлены на рис.5. С уменьшением толщины сенсора параметр ΔT_m уменьшается, а R – возрастает. Параметр ΔT_m несколько мал при толщине сенсора 0.01 мкм, однако скорость счета достигает 222 ГГц. В любом случае, для решения конкретных задач, изменяя толщину сенсора, можно добиться больших значений как соотношения сигнал/шум, так и скорости счета.

Варьирование толщины теплоотвода (расчеты NLC7 и NLC8) не влияет на значения параметров ΔT_m и V_m , однако скорость счета имеет несколько большие значения при малых величинах Z_3 . Это не удивительно, так как теплопроводность сапфировой подложки значительно больше, чем у ниобиевого теплоотвода. Расчеты, представленные в табл.4 для фотонов с энергиями 11 эВ и меньше, выполнены для толщины поглотителя 0.03 мкм. Такая толщина ниобиевого поглотителя обеспечивает поглощение фотонов в данном диапазоне энергий с вероятностью близкой к единице. Расчеты NLC11 и NLC13 показывают, что

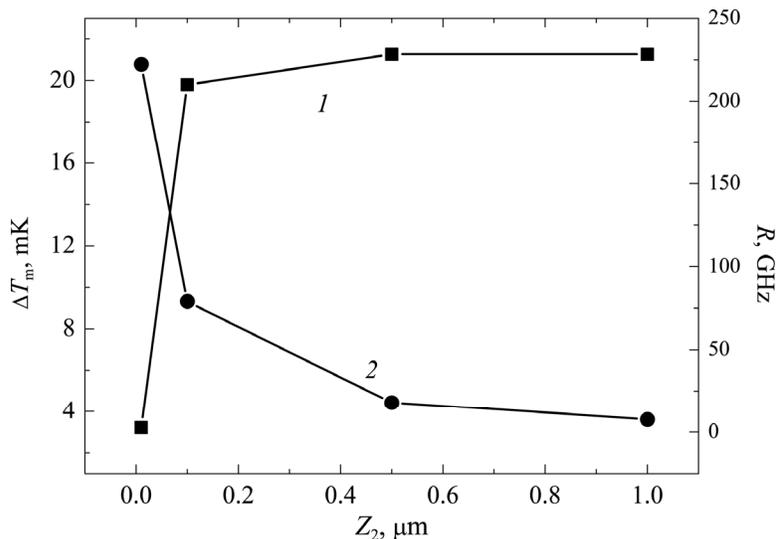


Рис.5. Зависимость параметров ΔT_m (1) и R (2) от толщины термоэлектрика (расчеты NLC1–NLC4).

уменьшение толщины сенсора приводит для фотона с энергией 10 эВ к увеличению скорости счета, поэтому в дальнейших расчетах использовалась толщина $Z_2 = 0.01$ мкм.

Расчеты NLC13–NLC15 проводились для случая поглощения фотонов с энергиями 9, 10 и 11 эВ. Параметр ΔT_m этих расчетов намного больше по сравнению со значением этого параметра для расчетов NLC1–NLC8, хотя при этом энергия фотона уменьшилась на порядок. Ситуация проясняется при учете изменения толщины поглотителя. При переходе от исследования фотонов с энергией 100 эВ на фотоны с энергией 10 эВ мы уменьшаем толщину поглотителя с 1 до 0.03 мкм. Из данных табл.4 для поглощения фотонов с энергией 9, 10 и 11 эВ значения параметра V_m равны 42.66, 47.36 и 52.14 мкВ, соответственно. Разность

Табл.4. Характеристики чувствительной ячейки сверхпроводник/(La, Ce)B₆/сверхпроводник

№ рас- чета	Z ₁ , мкм	Z ₂ , мкм	Z ₃ , мкм	E, эВ	ΔT_m , 10 ⁻⁴ К	t _m , пс	V _m , мкВ	t _b , пс	R, ГГц
Nb									
NLC1	1	1	1	100	21.27	0.936	1.878	>130	<7.7
NLC2	1	0.5	1	100	21.27	0.936	1.878	55.5	18
NLC3	1	0.1	1	100	19.8	0.708	1.683	12.6	79
NLC4	1	0.01	1	100	3.21	0.366	0.273	4.5	222.2
NLC5	2	0.01	1	100	0.2	2.1	0.017	4.8	208.3
NLC6	0.5	0.01	1	100	56.8	0.012	4.828	4.2	239.1
NLC7	1	0.01	2	100	3.2	0.33	0.272	5.1	196.1
NLC8	1	0.01	0.5	100	3.2	0.33	0.272	3.6	277.8
NC11	0.03	0.1	1	10	560.2	0.0028	47.62	2.4	416.7
NC13	0.03	0.01	1	10	557.2	0.0026	47.36	1.53	653.6
NC14	0.03	0.01	1	9	501.9	0.0024	42.66	1.5	666.7
NC15	0.03	0.01	1	11	613.4	0.0024	52.14	1.554	643.5
NC16	0.03	0.01	1	7	390.3	0.0024	33.18	1.422	703.2
NC17	0.03	0.01	1	4	223.1	0.0024	18.96	1.248	801.3
NC18	0.03	0.01	1	1	55.8	0.0024	4.743	0.822	1216
NC19	0.03	0.01	1	0.9	50.2	0.0024	4.267	0.792	1262
NC20	0.03	0.01	1	1.1	61.3	0.0024	5.211	0.846	1182
Pb									
PLC1	1	0.01	1	1000	35.7	0.648	0.304	14.61	68.5
PLC2	0.4	0.01	1	100	886.7	0.066	7.537	1.626	615
PLC3	0.15	0.01	1	10	1287	0.03	10.94	0.528	1894
PLC4	0.1	0.01	1	1	1132	0.024	9.622	0.186	5376
YBCO									
YLC3	0.1	0.01	1	10	18.8	0.12	1.6	8.13	123
YLC4	0.05	0.01	1	1	89.3	0.0354	7.59	1.92	520.8

энергий 1 эВ на уровне 10 эВ соответствует напряжению 4.7 мкВ. Регистрация сигнала с точностью 0.47 мкВ обеспечит энергетическое разрешение 0.1 эВ. Одновременно, положительным является то, что параметр R расчетов NLC13–NLC15 составляет несколько сотен гигагерц.

Расчеты NLC13–NLC20 проводились с аналогичными размерами элементов чувствительной ячейки. Наблюдаемая, также как и представленная на рис.3, линейная зависимость $V_m(E)$ показывает, что измеренный в эксперименте параметр V_m может быть использован для точного определения энергии поглощенного фотона и в случае чувствительной ячейки Nb/(La, Ce)B₆/Nb.

Согласно данным табл.4, для ИК-фотонов с энергиями 1.1, 1 и 0.9 эВ (расчеты NLC18–NLC20) параметр V_m равен 5.211, 4.743 и 4.267 мкВ, соответственно. Таким образом, разность энергий 0.1 эВ на уровне 1 эВ соответствует разности параметров V_m на 0.468 мкВ. Можно утверждать, что для ИК-фотонов точность оценки энергии фотона также может быть лучше 1%, а скорость счета чувствительной ячейки Nb/(La, Ce)B₆/Nb может достигать нескольких терагерц.

Далее рассмотрим результаты компьютерного моделирования регистрации фотонов с использованием в чувствительной ячейке сверхпроводников Pb и YBCO. Геометрические размеры чувствительных ячеек Pb/(La,Ce)B₆/Pb, YBCO/(La,Ce)B₆/YBCO и результаты расчетов представлены в табл.4. Поверхность поглотителя также имеет размеры $X = Y = 10$ мкм и материалом подложки является Al₂O₃.

Расчеты, представленные в табл.4 для фотонов с энергией 1 кэВ (PLC1)–

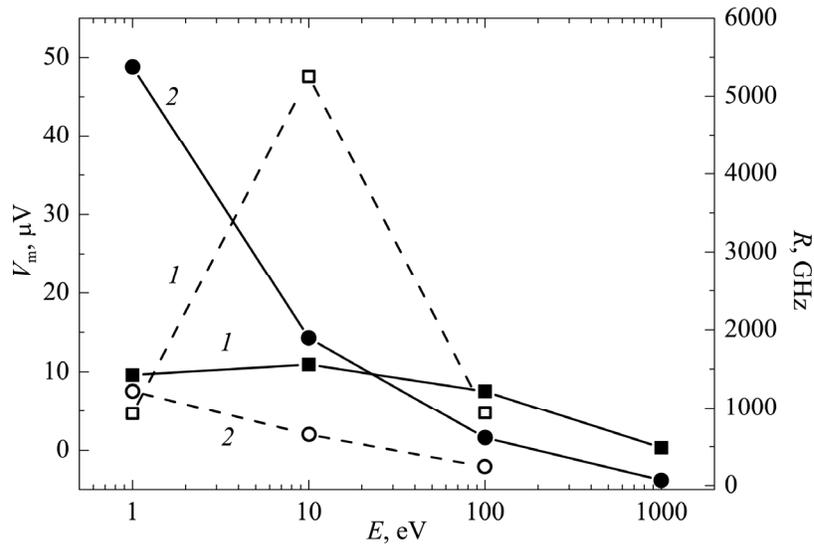


Рис.6. Зависимость от энергии фотона параметров V_m (1) и R (2) для чувствительных ячеек Nb/(La,Ce)B₆/Nb (пунктирные линии) и Pb/(La, Ce)B₆/Pb (сплошные линии).

1 эВ (PLC4), выполнены для толщин поглотителя 1–0.01 мкм. Как упоминалось выше, такие толщины свинцового поглотителя обеспечивают высокую вероятность поглощения фотонов в этом диапазоне энергий. Рассмотрение данных табл.4 для $\text{Pb}/(\text{La,Ce})\text{B}_6/\text{Pb}$ позволяет заключить, что параметры V_m и R достигают значений, которые дают возможность уверенно регистрировать одиночные фотоны с энергией в диапазоне 1–1000 эВ, обеспечивая скорость счета от десятков гигагерц до терагерц. Из сравнения параметров V_m и R для чувствительных ячеек $\text{Nb}/(\text{La,Ce})\text{B}_6/\text{Nb}$ и $\text{Pb}/(\text{La,Ce})\text{B}_6/\text{Pb}$, представленных на рис.6, видно, что скорость счета выше у $\text{Pb}/(\text{La,Ce})\text{B}_6/\text{Pb}$ для всех рассмотренных энергий, а параметр V_m выше для энергий фотонов 1 и 100 эВ. Согласно расчетам регистрации фотонов с энергией 10 эВ, параметр V_m выше для чувствительной ячейки $\text{Nb}/(\text{La,Ce})\text{B}_6/\text{Nb}$.

В табл.4 представлены также результаты компьютерного моделирования для детектирования фотонов 10 и 1 эВ с использованием сверхпроводников YBCO. Можно утверждать, что чувствительная ячейка $\text{YBCO}/(\text{La,Ce})\text{B}_6/\text{YBCO}$ также может быть использована для обнаружения УФ- и ИК-фотонов с высокой эффективностью, энергетическим разрешением и скоростью счета.

4. Заключение

На основе полученных результатов сделаны следующие выводы. Во-первых, трехслойная чувствительная ячейка TSPD, в которой в качестве термоэлектрического слоя используется гексаборид $(\text{La,Ce})\text{B}_6$ или CeB_6 , а поглотителем и теплоотводом служат сверхпроводники Nb, Pb или YBCO, может регистрировать одиночные фотоны в широком диапазоне электромагнитного спектра от ИК до рентгеновского, обеспечивая энергетическое разрешение не менее 1% и скорость счета выше десятков гигагерц. Во-вторых, соотношением энергетическое разрешение/скорость счета можно варьировать, изменяя геометрические размеры и материалы элементов чувствительной ячейки. В-третьих, принимая во внимание преимущества термоэлектрического детектора, такие как простая конструкция, высокое пространственное разрешение и отсутствие строгих требований к поддержанию рабочей температуры, можно утверждать, что термоэлектрические детекторы с многослойной чувствительной ячейкой, содержащей сверхпроводящие слои, могут быть реальными конкурентами сверхпроводящих нанопроволочных детекторов с рекордными характеристиками.

Следует отметить, что использование сверхпроводников при конструировании чувствительной ячейки TSPD, наряду с решением основной задачи – снижение электрического сопротивления измерительной цепи по сравнению с сопротивлением термоэлектрического слоя, решает проблему оптимизации конструкции контактов для подключения датчика к электронике. Отметим также, что при увеличении площади поверхности чувствительной ячейки по сравнению

с использованными в данной работе размерами может быть достигнута более высокая скорость счета.

Авторы выражают благодарность А.М. Гуляну за интерес к работе и полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. **R.H. Hadfield.** Nature Photonics, **3**, 696 (2009).
2. **T. Yamashita, S. Miki, H. Terai.** IEICE Transactions on Electronics, **E100-C**, 274 (2017).
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. **G.G. Fritz, K.S. Wood, D. van Vechten, A.L. Gyulamiryan, A.S. Kuzanyan, N.J. Giordano, T.M. Jacobs, H.-D. Wu, J.S. Horwitz, A.M. Gulian.** Proc.SPIE, **4140**, 459 (2000).
6. **D. van Vechten, K. Wood, G. Fritz, J. Horwitz, A. Gyulamiryan, A. Kuzanyan, V. Vartanyan, A. Gulian.** Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res., **444**, 42 (2000).
7. **A. Gulian, K. Wood, D. van Vechten, G. Fritz, H.-D. Wu, S. Bounnak, K. Bussman, K. Winzer, S. Kunii, V. Gurin, M. Korsukova, C. Mitterer, M. Carlsson, F. Golf, A. Kuzanyan, G. Badalyan, S. Harutyunyan, S. Petrosyan, V. Vardanyan, T. Paronyan, V. Nikoghosyan.** Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res., **A520**, 36 (2004).
8. **A.A. Kuzanyan.** Nano Studies, **9**, 93 (2014).
9. **A. Kuzanyan, V. Nikoghosyan, A. Kuzanyan.** Proc. SPIE, **9504**, 95040O (2015).
10. **A. Kuzanyan, V. Nikoghosyan, A. Kuzanyan.** Sensors & Transducers, **191**, 57 (2015).
11. **A.A. Kuzanyan, A.S. Kuzanyan, V.R. Nikoghosyan.** J. Phys. Conf. Ser., **673**, 012007 (2016).
12. **A. Kuzanyan, A. Kuzanyan, V. Nikoghosyan.** Armenian Patent, no. 2946, 2015.
13. **А.А. Кузаныян, А.С. Кузаныян, В.Р. Никогосян, В.Н. Гурин, М.П. Волков.** Известия НАН Армении, Физика, **51**, 244 (2016).
14. **A.A. Kuzanyan, A.S. Kuzanyan, V.R. Nikoghosyan.** Sensors & Transducers, **207**, 21 (2016).
15. **А.А. Кузаныян.** Известия НАН Армении, Физика, **51**, 484 (2016).
16. **A. Kuzanyan, A. Kuzanyan, V. Nikoghosyan.** Armenian Patent, no. 3043, 2016.
17. **C.P. Poole.** Handbook of Superconductivity. San Diego, Academic Press, 2000.
18. **Y. Peysson, C. Ayache, B. Salce, J. Rossat-Mignod, S. Kunii, T. Kasuya.** J. Magnetism and Magnetic Materials, **47&48**, 63 (1985).
19. **Y. Peysson, C. Ayache, B. Salce.** J. Magnetism and Magnetic Materials, **59**, 33(1986).
20. **H.A. Leupold, H.A. Boorse.** Phys. Rev., **134**, 5A (1964).
21. **S.M. Wasim, N.H. Zebouni.** Phys. Rev., **187**, 10 (1969).
22. **Л.П. Межов-Деглин.** ЖЭТФ, **77**, 733 (1979).
23. <https://www.bnl.gov/magnets/staff/gupta/cryogenic-data-handbook/Section8.pdf>
24. **K.A. Moler, D.J. Baar, R. Liang, W.N. Hardy, A. Kapitulnik.** arXiv:cond-mat/9505129v1.
25. **C. Uher.** Physical Properties of High Temperature Superconductors, D.M. Agrinsberg (Ed.). Singapore, Word Scientific, pp. 3; 159, 1992.
26. **G.T. Furukawar, T.B. Douglasr, R.E. McCoske Yr, D.C. Ginnings.** J. Research National Bureau Stand., **57**, 67 (1956).
27. http://www.phys.ufl.edu/ireu/IREU2013/pdf_reports/Allen_Scheie_FinalReport.pdf
28. **S. Alterovitz, G. Deutscher, M. Gershenson.** J. Appl. Phys., **46**, 3637 (1975).
29. <https://www.bnl.gov/magnets/staff/gupta/cryogenic-data-handbook/Section8.pdf>

30. **A.A. Kuzanyan, V.R. Nikoghosyan, A.S. Kuzanyan.** Proc. SPIE, **10229**, 102290P (2017).
31. **C.T. Chantler.** J. Phys. Chem. Ref. Data, **24**, 1 (1995).
32. **А.А. Кузаян, В.Р. Никогосян, А.С. Кузаян.** Известия НАН Армении, Физика, **52**, 341 (2017).

ՄԻԱՖՈՏՈՆ ԶԵՐՄԱԷԼԵՏՐԱԿԱՆ ԴԵՏԵԿՏՈՐԻ ԳԵՐՀԱՂՈՐԴԻՉ ՇԵՐՏԵՐ
ՊԱՐՈՒՆԱԿՈՂ ԵՌԱՇԵՐՏ ԶԳԱՅՈՒՆ ՏԱՐՐՈՒՄ ԶԵՐՄՈՒԹՅԱՆ ՏԱՐԱԾՄԱՆ
ՊՐՈՑԵՍՆԵՐԻ ՍՈՂԵԼԱՎՈՐՈՒՄ

Ա.Ա. ԿՈՒԶԱՆՅԱՆ, Վ.Ր. ՆԻԿՈՂՈՍՅԱՆ, Ա.Ս. ԿՈՒԶԱՆՅԱՆ

Ներկայացված են ջերմաէլեկտրական դետեկտորի գերհաղորդիչ շերտեր պարունակող եռաշերտ զգայուն տարրում 1–1000 էՎ էներգիայով միակի ֆոտոնների կլանման արդյունքում առաջացած ջերմության տարածման պրոցեսների համակարգչային մոդելավորման արդյունքները: Դիտարկել են CeB_6 կամ $(La,Ce)B_6$ ջերմաէլեկտրական տվիչ, Nb, Pb կամ YBCO գերհաղորդիչ ջերմատար և կլանիչ պարունակող զգայուն տարրի տարբեր երկրաչափություններ: Հաշվարկները հիմնված են սահմանափակ ծավալից ջերմության տարածման հավասարման վրա և իրականացվում են դիֆերենցիալ հավասարումների եռաչափ մատրիցային մեթոդով: Ցույց է տրված, որ զգայուն տարրի նյութերի և չափերի, ինչպես նաև դետեկտորի աշխատանքային ջերմաստիճանի փոփոխությամբ հնարավոր է ստանալ սպեկտրի տվյալ տիրույթում, պահանջվող էներգետիկ լուծաչափով և հաշվարկի արագությամբ ֆոտոնների գրանցման դետեկտոր: Նման դետեկտորը ունի մի շարք առավելություններ, որոնք թույլ են տալիս դիտարկել ջերմաէլեկտրական դետեկտորը որպես առավել հեռանկարային միաֆոտոնային դետեկտորների իրական այլընտրանք:

SIMULATION OF HEAT PROPAGATION PROCESSES IN THE DETECTION PIXEL WITH SUPERCONDUCTING LAYERS OF SINGLE-PHOTON THERMOELECTRIC DETECTOR

A.A. KUZANYAN, V.R. NIKOGHOSYAN, A.S. KUZANYAN

The results of computer simulation of heat propagation processes in the three-layer detection pixel with superconducting layers of thermoelectric detector after the absorption of single photons of 1–1000 eV energy are presented. We considered different geometries of the detection pixel consisting of CeB_6 or $(La,Ce)B_6$ thermoelectric sensor, absorber and heat sink from Nb, Pb or YBCO superconductors. The calculations based on the heat conduction equation from the limited volume are carried out by the three-dimensional matrix method for differential equations. It is shown, that by changing materials and sizes of the detection pixel elements, as well as the working temperature of the detector, it is possible to obtain detector for the registration of photons within the given spectral range with the required energy resolution and count rate. Such detector has a number of advantages, that allow to consider the thermoelectric detector as a real alternative to the most promising single photon detectors.

УДК 548.732

КРИВЫЕ КАЧАНИЯ РЕНТГЕНОВСКОЙ АСИММЕТРИЧНОЙ ДИФРАКЦИИ ЛАУЭ С ДВУМЕРНОЙ КРИВИЗНОЙ ВОЛНОВОГО ФРОНТА

М.К. БАЛЯН

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

e-mail: mbalyan@ysu.am

(Поступила в редакцию 5 октября 2017 г.)

Рассмотрена рентгеновская асимметричная дифракция Лауэ в идеальном кристалле с плоской входной поверхностью с учетом двумерной кривизны волнового фронта падающей на кристалл волны. С использованием соответствующей функции Грина изучены кривые качания в зависимости от углов отклонения от выбранного точного направления Брэгга в плоскости дифракции и в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении в приближении локально-плоской волны. Исследована зависимость кривых качания от степени асимметричности геометрии дифракции. Получены аналитические выражения для полуширин кривых качания в плоскости дифракции и в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении. Оценены требования к пространственной и временной когерентности.

1. Введение

Коэффициенты прохождения и отражения динамически дифрагированной рентгеновской плоской волны на выходной поверхности кристалла зависят от параметра отклонения от условия Брэгга, от толщины кристаллической пластинки и от степени асимметричности геометрии дифракции. При фиксированных толщине и угле асимметрии зависимость коэффициентов от углового отклонения от условия Брэгга называется кривой качания [1, 2]. Кривую качания можно получить в результате дифракции от удаленного точечного источника как распределение интенсивности по углам отклонения на выходной поверхности кристалла [3]. В работах [1–3] рассматривается зависимость кривой качания от углового отклонения от условия Брэгга в плоскости дифракции. Была разработана динамическая теория, учитывающая двумерную кривизну волнового фронта падающей волны (учитываются вторые производные амплитуд в уравнениях динамической дифракции в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении) [4, 5] и позволяющая изучить кривую качания как функцию от углового

отклонения от некоторого точного направления Брэгга в плоскости дифракции и в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении. Основываясь на работах [4, 5], такие исследования были проведены в симметричном случае Лауэ в рамках приближения локально-плоских волн [6] и в приближении плоской падающей волны [7].

В настоящей работе изучаются кривые качания с использованием дифракции волны от удаленного точечного источника с учетом двумерной кривизны волнового фронта падающего излучения в асимметричном случае Лауэ.

2. Основные формулы

Согласно работе [5], амплитуду дифрагированной волны в асимметричном случае Лауэ (рис.1) в идеальном кристалле с плоской входной поверхностью и с учетом двумерной кривизны волнового фронта падающей от точечного источника волны можно написать в виде

$$E_h(\mathbf{r}) = A e^{i\Phi_0(\mathbf{r})} \int_{-l}^l J_0 \left(\pi \frac{z}{\Lambda} \sqrt{1 - x'^2 / l^2} \right) e^{i\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{r}')} dx', \quad (1)$$

где

$$\begin{aligned} \Phi_0(\mathbf{r}) = & k \frac{\chi_0 z}{4} \left(\frac{1}{\gamma_0} + \frac{1}{\gamma_h} \right) + k \gamma_0 \Delta\theta \left(x - z \frac{1-b^2}{2b \sin 2\theta} \right) + \frac{k \gamma_0^2}{2L_s} \left(x - z \frac{1-b^2}{2b \sin 2\theta} \right)^2 + \\ & + \frac{k y^2}{2L_s} - \frac{k y^2}{2L_s^2} \left(x \sin(\theta + \alpha) + z \gamma_h \frac{(1+b)^2}{4 \cos^2 \theta} \right) - \frac{k y^4}{8L_s^3}, \end{aligned} \quad (2)$$

$$\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \beta(\mathbf{r}) x' + \frac{k x'^2 \gamma_0^2}{2L_s}, \quad (3)$$

$$\beta(\mathbf{r}) = k \gamma_0 \left(\Delta\theta - \frac{\chi_0(1-b)}{2b \sin 2\theta} \right) + \frac{k \gamma_0}{L_s} \left(x \gamma_0 - z \gamma_h \frac{1-b^2}{2 \sin 2\theta} - \operatorname{tg} \theta \frac{y^2}{2L_s} \right). \quad (4)$$

Здесь интегрирование проводится по входной поверхности кристалла Σ , θ – угол Брэгга, \mathbf{r} – координата точки наблюдения, \mathbf{r}' – координата точки на входной поверхности кристалла, $A = i(k \chi_h \gamma_0 / 2 \sin 2\theta)(E_0^i / L_s)$, $k = 2\pi / \lambda$ – волновое число, χ_0, χ_h – Фурье-коэффициенты поляризуемости кристалла для направления прохождения и для данного отражения, $\gamma_0 = \cos(\theta + \alpha)$, $\gamma_h = \cos(\theta - \alpha)$, $b = \gamma_0 / \gamma_h$ – коэффициент асимметричности, E_0^i – амплитуда падающей волны, $\Lambda = \lambda \sqrt{\gamma_0 \gamma_h} / \sqrt{\chi_h \chi_0}$ ($\operatorname{Re} \Lambda$ – экстинкционная длина), $l = z \sin 2\theta / (2\gamma_0 \gamma_h)$. Отклонение центрального луча падающей волны от точного условия Брэгга $\Delta\theta = \theta^i - \theta(\lambda) = \theta^i - \theta(\lambda_m) - \Delta\lambda \operatorname{tg} \theta / \lambda$, где $\theta(\lambda_m)$ – угол Брэгга для длины волны

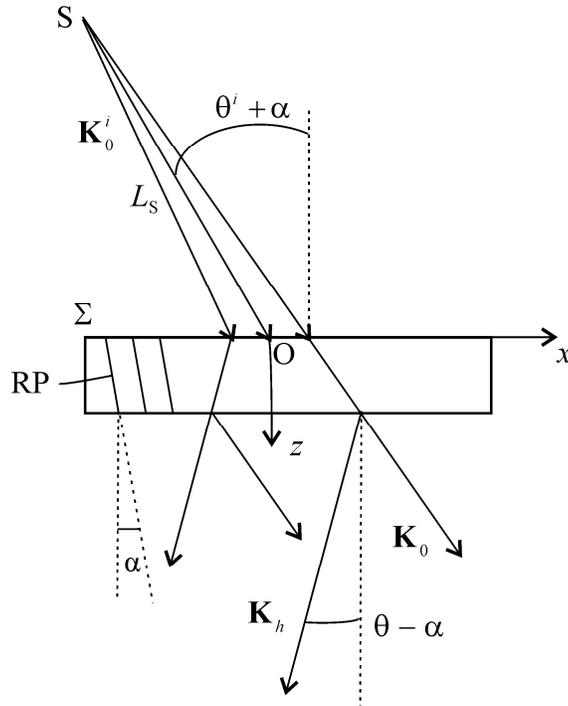


Рис.1. Схема асимметричной дифракции Лауэ: S – источник рентгеновской волны, \mathbf{K}_0^i – средний волновой вектор падающей волны, L_S – расстояние источник–кристалл, θ^i – угол между волновым вектором и отражающими плоскостями, α – угол между отражающими плоскостями и внутренней нормалью к входной поверхности Σ , RP – отражающие плоскости, Oxz – координатная система в плоскости дифракции, ось Oy направлена перпендикулярно к плоскости дифракции по закону правой системы координат, \mathbf{K}_0 и \mathbf{K}_h – волновые векторы проходящей и дифрагированной волн, удовлетворяющие точному условию Брэгга.

λ_m и λ_m – длина волны, соответствующая максимальной интенсивности в спектре падающей волны.

В выражении амплитуды (1) отличием от стандартной теории является зависимость локального параметра отклонения от условия Брэгга β не только от x , но и от координаты y .

3. Кривые качания в асимметричном случае Лауэ

Переход к локально-плоской волне осуществляется игнорированием квадратичным относительно x' членом в выражении $\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ (формула (3)). Соответствующую оценку, позволяющую такой переход, легко получить из условия $kx'^2 \gamma_0^2 / 2L_S \ll \pi$:

$$L_S \gg L_{S0}, \quad (5)$$

где $L_{s_0} = z^2 \sin^2 2\theta / (\lambda \gamma_h^2)$. После игнорирования квадратичным членом в формуле (3) и используя табличный интеграл, для амплитуды дифрагированной волны в приближении локально-плоской волны из выражения (1) получим:

$$E_h(\mathbf{r}) = i \frac{E_0^i}{L_s} \sqrt{\frac{\gamma_0}{\gamma_h}} \sqrt{\frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}}} e^{i\Phi_0} \frac{\sin \frac{\pi z}{\Lambda} \sqrt{1+p^2}}{\sqrt{1+p^2}}, \quad (6)$$

$$p(x, y, z, \alpha) = \frac{2 \sin 2\theta \Delta\Theta(x, y, z, \alpha) - \chi_0(1-b)}{2\sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}} \sqrt{\frac{\gamma_h}{\gamma_0}}}, \quad (7)$$

$$\Delta\Theta(x, y, z, \alpha) = \Delta\theta + \frac{\gamma_0}{L_s} \left(x - z \frac{1-b^2}{2b \sin 2\theta} \right) - \text{tg}\theta \frac{y^2}{2L_s^2}. \quad (8)$$

Отклонение $\Delta\Theta(x, y, z, \alpha)$ от условия Брэгга можно представить в виде суммы двух отклонений – в плоскости дифракции и в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении:

$$\Delta\Theta(x, y, z, \alpha) = \Delta\theta_{\parallel} + \Delta\theta_{\perp}, \quad (9)$$

$$\Delta\theta_{\parallel} = \Delta\theta + \frac{\gamma_0}{L_s} \left(x - z \frac{1-b^2}{2b \sin 2\theta} \right), \quad (10)$$

$$\Delta\theta_{\perp} = -\text{tg}\theta \frac{y^2}{2L_s^2}. \quad (11)$$

В том же приближении амплитуду проходящей волны можно получить, используя уравнения динамической дифракции, содержащие вторые производные амплитуд по y [4]. Согласно этим уравнениям,

$$E_0 = -\frac{1}{k^2 \chi_h} \left(\frac{\partial^2 E_h}{\partial y^2} + 2ik \frac{\partial E_h}{\partial s_h} + k^2 \chi_0 E_h \right), \quad (12)$$

где s_h – координата вдоль направления дифрагированной волны. Подставим выражение (6) в (12) и выполним необходимое дифференцирование. Учитывая условие (5), можно проигнорировать члены с производными $\partial p / \partial x$, $\partial p / \partial y$, $\partial p / \partial z$ и $\partial^2 \Phi_0 / \partial y^2$. После чего получим

$$E_0 = \frac{E_0^i}{L_s} e^{i\Phi_0} \left(\cos \frac{\pi z}{\Lambda} \sqrt{1+p^2} - i \frac{p}{\sqrt{1+p^2}} \sin \frac{\pi z}{\Lambda} \sqrt{1+p^2} \right). \quad (13)$$

Выражения для амплитуд (6) и (13) совпадают с теми же выражениями для падающей плоской волны [1, 2], а отклонение от условия Брэгга (9) дается в

зависимости от точки наблюдения. Поэтому коэффициенты прохождения и отражения будут определяться как

$$T(x, y, z, \alpha) = \frac{|E_0|^2}{(E_0^i/L_S)^2} = e^{-\mu z \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\gamma_0} + \frac{1}{\gamma_h} \right)} \left| \cos \frac{\pi z}{\Lambda} \sqrt{1+p^2} - i \frac{p}{\sqrt{1+p^2}} \sin \frac{\pi z}{\Lambda} \sqrt{1+p^2} \right|^2, \quad (14)$$

$$R(x, y, z, \alpha) = \frac{|E_h|^2 \gamma_h}{(E_0^i/L_S)^2 \gamma_0} = \frac{|\chi_h}{|\chi_{\bar{h}}|} e^{-\mu z \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\gamma_0} + \frac{1}{\gamma_h} \right)} \left| \frac{\sin \frac{\pi z}{\Lambda} \sqrt{1+p^2}}{\sqrt{1+p^2}} \right|^2, \quad (15)$$

где $\mu = k\chi_{0i}$ – линейный коэффициент поглощения кристалла, χ_{0i} – нулевая Фурье-компонента мнимой части поляризуемости кристалла. При фиксированных толщине кристалла и угле асимметричности из зависимостей (14) и (15) от координат определяются кривые качания.

Отметим, что приведенные формулы верны для σ -поляризации (фактор поляризации $C = 1$). Формулы для π -поляризации получаются заменой $\chi_h \rightarrow C\chi_h$ и $\chi_{\bar{h}} \rightarrow C\chi_{\bar{h}}$, где $C = \cos 2\theta$.

4. Полуширины кривых качания

Как известно [1, 2], полуширины кривых качания по переменной p определяются из условия $|\operatorname{Re} p| = 1$, откуда для полуширины получаем $\Delta_p = 2$. В дальнейшем, не нарушая общности, будем предполагать, что

$$\Delta\theta = \frac{\chi_{0r}(1-b)}{2 \sin 2\theta b}, \quad (16)$$

где χ_{0r} – нулевая Фурье-компонента действительной части поляризуемости кристалла. Из формулы (7) следует, что кривая качания по переменной x в плоскости дифракции сконцентрирована около точки

$$x_0 = z \frac{1-b^2}{2b \sin 2\theta}. \quad (17)$$

Тогда из $\Delta_p = 2$ и формулы (7) для полуширины кривой качания в плоскости дифракции ($y = 0$) получим

$$\Delta_{x-x_0} = \frac{2|\chi_{hr}|L_S}{\gamma_0 \sin 2\theta b^{1/2}}, \quad (18)$$

где χ_{hr} – Фурье-компонента действительной части поляризуемости кристалла

для данного отражения. Точно так же для полуширины кривой качания в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении при $x = x_0$ получим

$$\Delta_y = \frac{2\sqrt{|\chi_{hr}|}L_S}{\sin\theta b^{1/4}}. \quad (19)$$

Заметим, что точка $x = x_0$ соответствует точке выхода траектории для центрального луча, падающего в точке $(0,0,0)$ на входную поверхность. Сравнение формулы (18) и (19) показывает, что в то время как полуширины в обоих направлениях пропорциональны расстоянию L_S , в плоскости дифракции полуширина пропорциональна $|\chi_{hr}|$ и обратно пропорциональна $b^{1/2}$, а в перпендикулярном направлении пропорциональна $\sqrt{|\chi_{hr}|}$ и обратно пропорциональна $b^{1/4}$.

5. Примеры кривых качания

Рассмотрим Si(220) отражение при $\lambda = 0.71 \text{ \AA}$ (17.46 кэВ) для двух углов асимметрии $\alpha = -60^\circ$ и 60° ($b = 1.96$ и 0.51) и σ -поляризации. Для этих случаев асимметрии $\text{Re } \Lambda = 17.3 \text{ мкм}$ (данные для кристалла взяты из работы [1]). Во всех

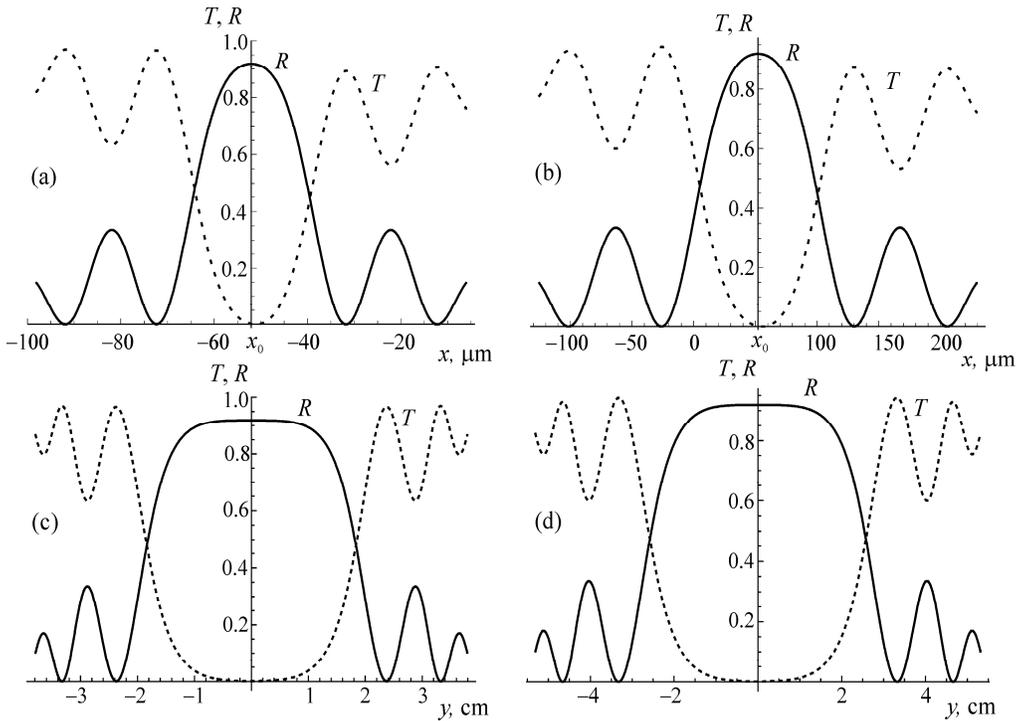


Рис.2. Кривые качания для проходящей (T) и отраженной (R) волн в плоскости дифракции (a, b) и в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении при $x = x_0$ (c, d) для $\alpha = -60^\circ$ (a, c) и $\alpha = 60^\circ$ (b, d).

случаях толщина кристалла берется как $z = 1.5 \operatorname{Re} \Lambda$, что соответствует $z = 26$ мкм. Согласно (5), соответствующие расстояния L_{s0} будут 2.84 и 0.74 м. Во всех случаях берем $L_s = 4$ м. Следует также отметить, что $\mu z = 0.04$, а $x_0 = -52$ и 52 мкм.

Кривые качания в плоскости дифракции, построенные с помощью приближения (14) и (15), показаны на рис.2а и 2б и в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении (при $x = x_0$) показаны на рис.2с и 2д.

Из выражения (17) следует, что кривые качания в плоскости дифракции смещены на x_0 , полуширина кривой качания при $\alpha = -60^\circ$ меньше, чем при $\alpha = 60^\circ$. Это согласуется с формулами (18) и (19).

Так как условие локально-плоской волны (5) наиболее точно выполняется при $\alpha = 60^\circ$, то с целью проверки точности сделанного приближения (5) на рис.3 кривые качания для отраженной волны сравниваются с более точными кривыми, вычисленными по формуле (1). Как ожидалось и видно из рис.3, приближение локально-плоской волны более точно выполняется при $\alpha = 60^\circ$ и хуже при $\alpha = -60^\circ$. На рис.4 приведены расчетные топограммы (позитивные) при $\alpha = 60^\circ$.

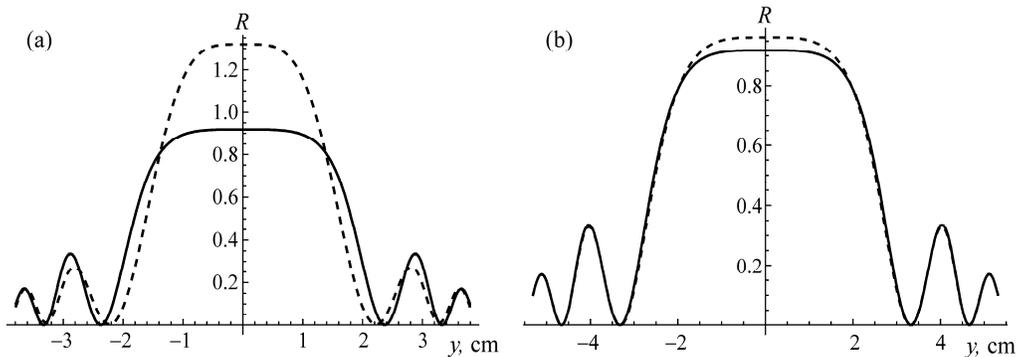


Рис.3. Сравнение кривых качания для отраженной волны в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении, вычисленных по приближенной (сплошные кривые) и точной (пунктирные кривые) формулам при $x = x_0$ для (а) $\alpha = -60^\circ$ и (б) $\alpha = 60^\circ$.

Предполагалось, что источник точечный, а падающее излучение монохроматическое. Такое допущение верно, когда выполняются условия пространственной и временной когерентности, налагаемые на падающее излучение. Оценки когерентности были даны в работе [5]. В предположении, что источник имеет одинаковые размеры в плоскости дифракции и в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении, эти условия приводят к следующим значениям для размера источника (пространственная когерентность) 10×10 , 14×14 и 20×20 мкм²

(для $\alpha = -60^\circ, 0$ и 60° , соответственно). Оценка временной когерентности приводит к значениям $\Delta\lambda/\lambda = 1.3 \times 10^{-5}$, 2×10^{-5} и 2.6×10^{-5} для случаев $\alpha = -60^\circ, 0$ и 60° , соответственно. Эти условия могут быть реализованы как с использованием синхротронного излучения и лазеров на свободных электронах, так и с помощью лабораторных источников рентгеновского излучения.

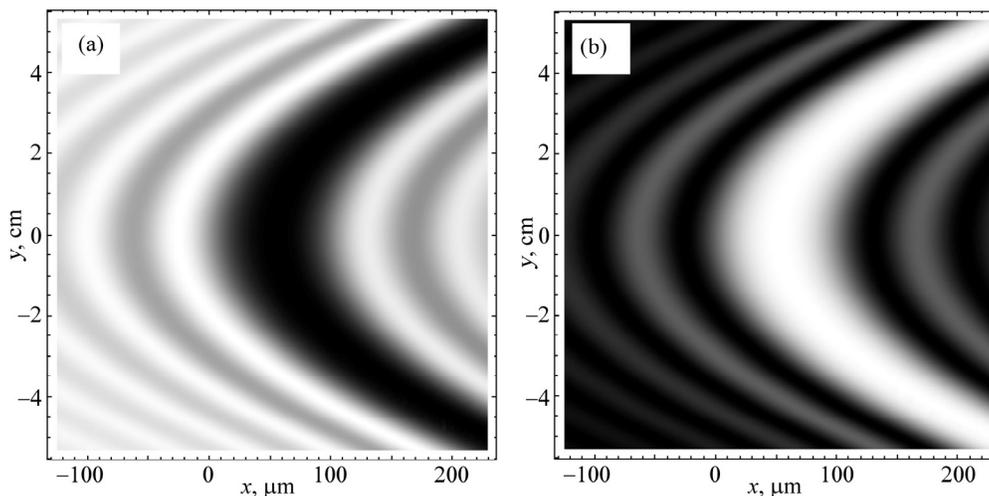


Рис.4. Расчетные топограммы для (a) проходящей и (b) дифрагированной волн при $\alpha = 60^\circ$.

5. Заключение

В общем случае интенсивности проходящей и отраженной волн на выходной поверхности кристалла при асимметричной дифракции Лауэ рентгеновской волны зависят от толщины кристаллической пластинки, от угла отклонения падающего пучка в плоскости дифракции и в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении от условия Брэгга и от угла асимметрии. При фиксированных значениях толщины пластинки и угла асимметрии для достаточно большого расстояния источник–кристалл, когда выполняется условие локально-плоской волны, зависимости коэффициентов прохождения и отражения от координат точки наблюдения на выходной поверхности кристалла в плоскости дифракции и в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении эквивалентны кривым качания по соответствующим угловым отклонениям приходящих в эту точку наблюдения лучей. Полуширины кривых качания в плоскости дифракции и в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении имеют различную зависимость от угла асимметрии.

ЛИТЕРАТУРА

1. **З.Г. Пинскер.** Рентгеновская кристаллооптика. Москва, Наука, 1982.
2. **A. Authier.** Dynamical Theory of X-Ray Diffraction. Oxford, University Press, 2001.
3. **V. Mocella, Y. Epelboin, P. Guigay.** Acta Cryst., **A56**, 308 (2000).
4. **М.К. Бальян.** Изв. НАН Армении, Физика, **49**, 62 (2014).
5. **М.К. Бальян.** Изв. НАН Армении, Физика, **49**, 130 (2014).
6. **М.К. Бальян,** Изв. НАН Армении, Физика, **49**, 446 (2014).
7. **М.К. Бальян,** Изв. НАН Армении, Физика, **52**, 102 (2017).

ՌԵՆՏԳԵՆՆԱՆ ԱՆՀԱՄԱԶՈՓ ԼԱՈՒԵ-ԴԻՖՐԱԿՑԻԱՅԻ ՃՈՃՄԱՆ ԿՈՐԵՐԸ
ԱԼԻՔԱՅԻՆ ՃԱԿԱՏԻ ԵՐԿՉՈՒՄ ԿՈՐՈՒԹՅԱՆ ՀԱՇՎԱՌՄԱՄԲ

Մ.Կ. ԲԱԼՅԱՆ

Հաշվի առնելով բյուրեղի վրա ընկնող ալիքի ալիքային ճակատի երկչափ կորությունը դիտարկված է ռենտգենյան անհամաչափ Լաուե-դիֆրակցիա հարթ մուտքի մակերևույթով կատարյալ բյուրեղում: Համապատասխան Գրինի ֆունկցիայի օգտագործմամբ տեղային-հարթ ալիքի մոտավորությամբ ուսումնասիրված են ճոճման կորերը կախված ընտրված ճշգրիտ Բրեգի ուղղությունից դիֆրակցիայի հարթության մեջ և դիֆրակցիայի հարթությանն ուղղահայաց ուղղությամբ անկյունային շեղումներից: Ուսումնասիրված է ճոճման կորերի կախումը դիֆրակցիայի երկրաչափության անհամաչափության աստիճանից: Ստացված են ճոճման կորերի կիսալայնության վերլուծական արտահայտություններ դիֆրակցիայի հարթության մեջ և դիֆրակցիայի հարթությանն ուղղահայաց ուղղությամբ: Գնահատված են ժամանակային և տարածական կոհերենտությունների պահանջները:

ROCKING CURVES OF X-RAY ASYMMETRICAL LAUE DIFFRACTION WITH TWO-DIMENSIONAL CURVATURE OF THE WAVE FRONT

M.K. BALYAN

Taking into account two dimensional curvature of the wave front of the incident beam X-ray Laue case asymmetrical diffraction in a perfect crystal with a plane entrance surface is considered. Using the corresponding Green function in the frame of locally plane wave approximation the rocking curve dependences on the angular departure from the chosen exact Bragg direction in the diffraction plane and in the perpendicular to the diffraction plane direction are investigated. The dependence of rocking curves on asymmetry degree of diffraction geometry is investigated. The analytical expressions for rocking curves half widths in the diffraction plane and in the perpendicular to diffraction plane direction are obtained. The spatial and temporal coherency requirements are estimated.

УДК 548.732

РЕНТГЕНОВСКИЙ ФАЗОВЫЙ КОНТРАСТ ПРИ ДИФРАКЦИОННОЙ ФОКУСИРОВКЕ СФЕРИЧЕСКОЙ ВОЛНЫ В СВЕРХРЕШЕТКЕ С МАЛЫМ ПЕРИОДОМ

Л.В. ЛЕВОНЯН, А.М. МАНУКЯН*

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

*e-mail: hasmikm@ysu.am

(Поступила в редакцию 27 октября 2017 г.)

Исследована возможность восстановления внутренней структуры одномерных фазовых объектов при дифракционной фокусировке рентгеновской сферической волны. В качестве кристалла-анализатора используется сильно-поглощающая клиновидная сверхрешетка с малым периодом и с ребром, параллельным вектору дифракции, при симметричной геометрии Лауэ. Показано, что без дополнительного перемещения фазового объекта вдоль направления вектора дифракции можно привести в условие фокусировки разные сателлиты. Регистрируя всю карту полученных данных, можно восстановить приобретенную в фазовом объекте добавочную фазу волны.

Изучение внутренней структуры слабопоглощающих некристаллических веществ, а также биологических объектов, проводится методом рентгеновского фазового контраста, который в настоящее время бурно развивается [1]. Задачей рентгеновского фазового контраста является не только получение изображения фазового объекта (ФО), но и его расшифровка, т. е. решение обратной задачи [2, 3].

Как известно, при падении на кристалл монохроматической сферической рентгеновской волны при геометрии Лауэ дифрагированное излучение фокусируется как внутри кристалла, так и за кристаллом – в вакууме [4–7].

Пусть перед входом в кристалл излучение от точечного источника S , находящегося на расстоянии L от кристалла, проходит через ФО, в котором неоднородности распределены одномерно (рис.1). Предполагается, что ФО слабопоглощающий, т. е. интенсивность пучка при прохождении через него практически не меняется, изменяется лишь его фаза. Координатная система выбрана следующим образом: начало координат O на поверхности кристалла есть точка падения луча под точным брэгговским углом θ_B , входная поверхность кристалла совпадает с плоскостью $z = 0$, а отражающие плоскости соот-

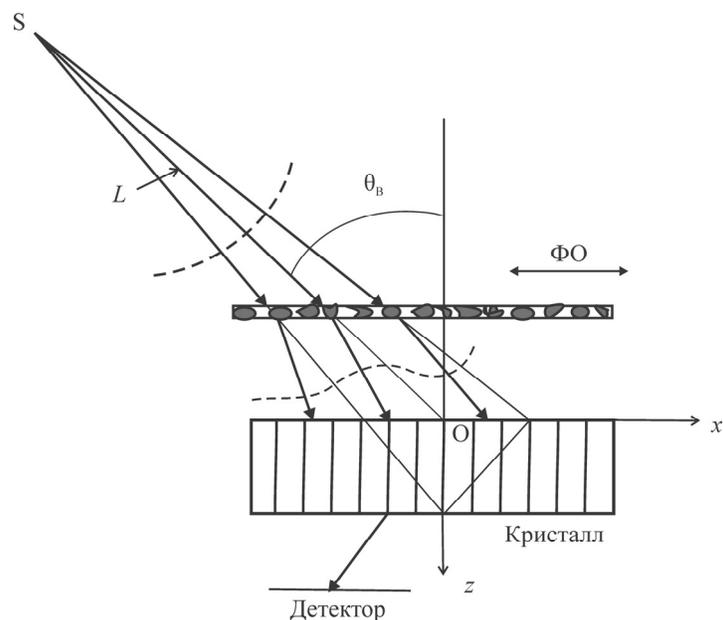


Рис.1. Схема дифракции. Пунктирными линиями изображен волновой фронт до и после ФО.

ветствуют плоскостям $x = \text{const}$, ось y перпендикулярна плоскости рассеяния.

Поскольку падающее на кристалл излучение при отсутствии ФО имеет всевозможные направления вблизи угла Брэгга, то оно фокусируется на определенной глубине внутри кристалла в зависимости от расстояния L источник–кристалл.

При прохождении через ФО условия фокусировки нарушаются, поскольку в результате рефракции на неоднородностях лучи меняют свои направления и волновой фронт деформируется. Изменение направления лучей математически описывается наличием в фазе волны члена $\varphi'(x)$, а деформирование фронта – $\varphi''(x)$, где $\varphi'(x)$ и $\varphi''(x)$ – соответственно первая и вторая производные добавочной фазовой функции $\varphi(x)$ волны, приобретенной при прохождении через ФО:

$$\varphi'(x) = (2\pi/\lambda)\Delta\theta(x).$$

Здесь $\Delta\theta(x)$ – локальное угловое смещение падающего излучения, обусловленное рефракцией на неоднородностях ФО, $\varphi''(x)$ связано с локальным изменением кривизны волнового фронта из-за рефракции в ФО и λ – длина волны излучения.

В работах [8–10] сообщалось о возможности восстановления внутренней структуры одномерных ФО при дифракционной фокусировке рентгеновской сферической волны. С этой целью в качестве кристалла-анализатора предлагалось использовать сильнопоглощающий клиновидный кристалл с ребром,

параллельным вектору дифракции, при симметричной геометрии Лауэ. При этом для каждого отдельного участка ФО для обеспечения условий фокусировки требовалось добавочное перемещение ФО вдоль направления вектора дифракции с целью компенсации величины $\Delta\theta(x)$, в то время как компенсация локального изменения кривизны волнового фронта из-за рефракции получалась на определенной координате y , т. е. в направлении, перпендикулярном плоскости рассеяния, без дополнительного перемещения ФО.

В настоящей работе для восстановления внутренней структуры ФО в качестве кристалла-анализатора предлагается использовать сильнопоглощающую клиновидную сверхрешетку с малым периодом и с ребром, параллельным вектору дифракции, при симметричной геометрии Лауэ.

Характерной особенностью дифракции рентгеновских лучей на сверхрешетках или модулированных структурах является наличие сателлитов вокруг основного дифракционного максимума, положение которого определяется усредненным по периоду сверхрешетки параметром решетки. При $z_0 \ll \bar{\Lambda}$ (z_0 – период сверхрешетки и $\bar{\Lambda}$ – усредненная по периоду сверхрешетки экстинкционная длина кристалла) дифракционная картина представляет собой систему неперекрывающихся сателлитов, угловое расстояние между которыми обратно

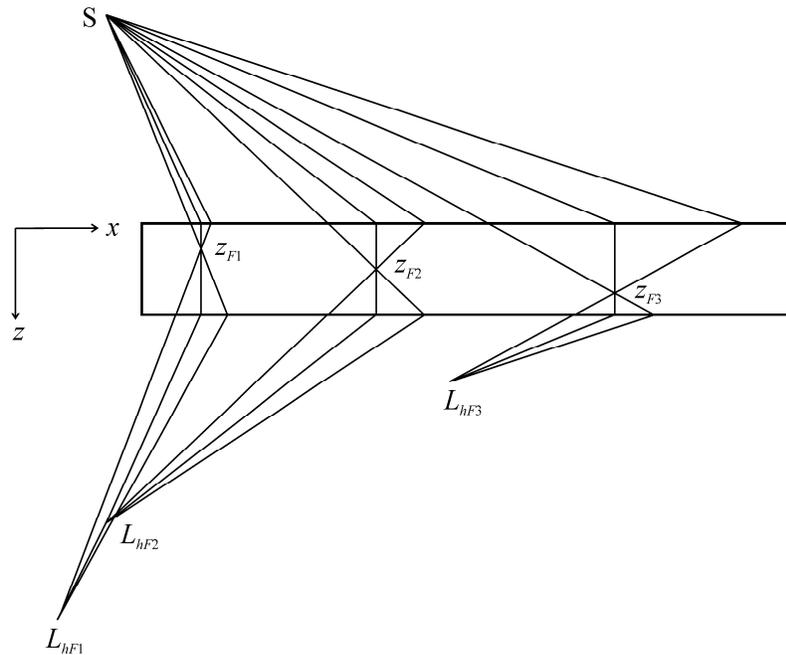


Рис.2. Геометрия дифракционной фокусировки сателлитов с разными структурными факторами: z_{F1} , z_{F2} , z_{F3} – глубины фокусных расстояний сателлитов внутри кристалла, L_{hF1} , L_{hF2} , L_{hF3} – фокусные расстояния соответствующих сателлитов вне кристалла.

пропорционально периоду сверхрешетки, а их ширины и интенсивности зависят от реальной структуры и толщины сверхрешетки [11, 12].

При использовании сверхрешетки в качестве кристалла-анализатора условие $z_0 \ll \bar{\Lambda}$ можно ослабить настолько, чтобы неперекрывающиеся дифракционные сателлиты располагались как можно ближе друг к другу.

Как показано в работах [13–15], при динамической дифракции сферической рентгеновской волны на сверхрешетке с малым периодом в зависимости от структурных факторов сверхрешетки, значения которых зависят от выбранной модели, происходит фокусировка сателлитов как на разной глубине внутри кристалла, так и на разном расстоянии от кристалла – в вакууме (рис.2). При этом фокусная глубина сателлита в кристалле прямо пропорциональна его структурному фактору, так что измерение фокусных расстояний разных сателлитов может стать основой метода определения структурных факторов сверхрешетки, что в итоге дает возможность уточнить, какая из моделей реализуется в действительности.

Если в описанной выше схеме с монокристаллом-анализатором (рис.1) монокристалл заменить на сверхрешетку, то проходящее излучение от каждого отдельного участка ФО изменит свое направление и будет фокусироваться как отдельный сателлит. Предполагается, что характеристики сверхрешетки полностью известны (угловое распределение сателлитов, их угловые ширины и интенсивности, а также фокусные расстояния). Регистрируя всю карту полученных данных, можно восстановить приобретенную в ФО добавочную фазу волны.

ЛИТЕРАТУРА

1. **В.В. Лидер, М.В. Ковальчук.** Кристаллография, **58**, 764 (2013).
2. **В.А. Бушуев, А.А. Сергеев.** Письма в ЖТФ, **25**, 1 (1999).
3. **A.V. Bronnikov.** Optics Communications, **171**, 239 (1999).
4. **А.М. Афанасьев, В.Г. Кон.** ФТТ, **19**, 1775 (1977).
5. **V.V. Aristov, V.I. Polovinkina, A.M. Afanas'ev, V.G. Kohn.** Acta Cryst., **A36**, 1002 (1980).
6. **Л.В. Левонян.** Письма в ЖТФ, **7**, 269 (1981).
7. **L.V. Levonian.** Phys. Stat. Sol. (a), **68**, k199 (1981).
8. **Л.В. Левонян.** Материалы совещания «Рентгеновская оптика – 2004». Н. Новгород, ИФМ РАН, 277–279, 2004.
9. **Л.В. Левонян.** Нано- и микросистемная техника, № 9, 18 (2005).
10. **L.V. Levonian.** Acta Cryst., **A62**, 254 (2006).
11. **D.M. Vardanyan, H.M. Manoukyan, H.M. Petrosyan.** Acta Cryst., **A41**, 212 (1985).
12. **D.M. Vardanyan, H.M. Manoukyan, H.M. Petrosyan.** Acta Cryst., **A41**, 218 (1985).
13. **Л.В. Левонян, А.М. Манукян.** Известия НАН Армении, Физика, **51**, 95 (2016).

14. **L.V. Levonyan, H.M. Manukyan.** Proceedings Intern. Conf. Electron, Positron, Neutron and X-Ray Scattering under the External Influences, 14–16 September 2015, Yerevan–Megri, Armenia, 101 (2016).
15. **L.V. Levonyan, H.M. Manukyan.** Proceedings of the Yerevan State University, Physical and Mathematical Sciences, **51**, 113 (2017).

ՌԵՆՏԳԵՆՅԱՆ ՓՈՒԼՍՅՈՒՆ ՑԱՅՏՈՒՆՈՒԹՅՈՒՆԸ ՓՈՔԸ ՊԱՐԲԵՐՈՒԹՅԱՄԲ
ԳԵՐՑԱՆՑՈՒՄ ԳՆԴԱՅԻՆ ԱԼԻՔԻ ԴԻՖՐԱԿՏԱՅԻՆ ԿԻՉԱԿԵՏՄԱՆ ԴԵՊՔՈՒՄ

Լ.Վ. ԼԵՎՈՆՅԱՆ, Հ.Մ. ՄԱՆՈՒԿՅԱՆ

Հետազոտված է միաչափ փուլային օբյեկտների ներքին կառուցվածքի վերականգնման հնարավորությունը ռենտգենյան գնդային ալիքի դինամիկական դիֆրակտային կիզակետման դեպքում: Որպես բյուրեղ-վերլուծիչ կիրառված է փոքր պարբերությամբ ուժեղ կլանող սեպաձև գերցանց, որի կողը զուգահեռ է դիֆրակցիայի վեկտորին, Լատեի համաչափ երկրաչափության դեպքում: Ցույց է տրված, որ փուլային օբյեկտն առանց դիֆրակցիայի վեկտորի ուղղությամբ լրացուցիչ տեղաշարժի, կարելի է կիզակետել տարբեր սատելիտներ: Գրանցելով ստացված տվյալների ամբողջ քարտեզը՝ կարելի է վերականգնել փուլային օբյեկտում ալիքի ձեռք բերած լրացուցիչ փուլը:

X-RAY PHASE CONTRAST AT THE DIFFRACTION FOCUSING OF SPHERICAL WAVE ON A SUPERLATTICE WITH SHORT PERIOD

L.V. LEVONYAN, H.M. MANUKYAN

The possibility of reconstructing the internal structure of the one-dimensional phase objects at the diffraction focusing of the X-ray spherical wave is investigated. As a crystal analyzer, a strongly absorbing wedge-shaped superlattice with short period and rib parallel to the diffraction vector is used for symmetric Laue geometry. It is shown that without additional moving the phase object along the direction of the diffraction vector, it is possible to bring into the focusing condition different satellites. By registering the entire map of the obtained data, it is possible to restore the additional wave phase acquired in the phase object.

УДК 541.64

ПОСТРОЕНИЕ КРИВЫХ ПЕРЕХОДА СПИРАЛЬ–КЛУБОК В ГЕТЕРОГЕННЫХ БИОПОЛИМЕРАХ НА ОСНОВЕ КРИВЫХ ПЛАВЛЕНИЯ ГОМОПОЛИМЕРОВ

А.К. АНДРИАСЯН

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

e-mail: aram.and.93@gmail.com

(Поступила в редакцию 28 ноября 2017 г.)

Рассмотрена теория перехода спираль–клубок в модели гетерополимерной ДНК. Теория основана на обобщенной модели полипептидной цепи (ОМПЦ) с применением метода отжига с ограничениями. Получено выражение для свободной энергии гетерополимера через трансфер-матрицу гомополимерной ОМПЦ с переопределенными параметрами. Получен алгоритм вычисления кривых плавления на основе гомополимерной модели.

Переход спираль–клубок в биополимерах изучается с 1960-х годов [1, 2] и до настоящего времени [3, 4]. Традиционные теории используют среднеполевое приближение в том смысле, что гамильтониан модели содержит параметры, уже усредненные по конформациям молекулы. Основные подходы к описанию гетерополимера основаны на модели Зимма–Брэгга [1, 5–8]. В предыдущих публикациях [9–14] была представлена модель, описывающая переход спираль–клубок и основанная на модели Поттса с многочастичным взаимодействием. Данная модель названа обобщенной моделью полипептидной цепи (ОМПЦ). Для описания гомополимерной задачи используется уже многократно применяемая модель ОМПЦ [9–14] в том числе и для гетерополимерного случая [14].

В настоящей работе метод отжига с ограничениями развит для аналитического описания кривых перехода в биополимерах с двумя типами повторяющихся единиц.

Согласно работе [15], свободная энергия системы с замороженной случайной последовательностью повторяющихся единиц может быть оценена на основании отожденного среднего статистической суммы с соответствующими ограничениями. Данный подход является вариационным и может быть реализован с использованием метода неопределенных множителей Лагранжа.

Рассмотрим гетерополимер, состоящий из повторяющихся единиц двух

сортов, например, для ДНК GC- и AT-пар. При этом предполагается, что сорта повторяющихся единиц выбираются статистически независимо. Свободная энергия такой системы выражается в виде

$$F = -k_B T \left\langle \ln \text{Sp} \prod_{i=1}^N G_i \right\rangle, \quad (1)$$

где $J_i = \frac{U_i}{k_B T}$, U_i – энергия образования водородной связи i -й компоненты гетерополимера, $K_i = \ln \Omega_i$ и Ω_i – число состояний i -й компоненты [10–14]. Здесь G_i – трансфер-матрица

$$G_i = \begin{pmatrix} e^{J_i} & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & e^{K_i} \\ 1 & 1 & 1 & 1 & \dots & 1 & e^{K_i} \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Введем спиновую переменную $\sigma = \pm 1$ таким образом, что

$$G(\sigma_i = 1) = G_A, \quad G(\sigma_i = -1) = G_B, \quad (3)$$

причем, $\langle \sigma_i \rangle = 2x - 1$, где x – доля повторяющихся единиц типа A . Соответственно $1 - x$ – доля повторяющихся единиц типа B . Таким образом, первичная структура будет выражена последовательностями чисел ± 1 . Тогда

$$J_i = J_0 + \sigma_i J, \quad K_i = K_0 + \sigma_i K, \quad (4)$$

где $J_0 = \frac{J_A + J_B}{2}$, $J = \frac{J_A - J_B}{2}$, $K_0 = \frac{K_A + K_B}{2}$, $K = \frac{K_A - K_B}{2}$. Согласно работе [15] и формуле (1)

$$F = -k_B T \ln \text{Sp} \left\langle x e^{-\alpha A \mu} G_A + (1 - x) e^{-\alpha B \mu} G_B \right\rangle^N, \quad (5)$$

где μ – вариационный параметр, а α – определяет ограничение, которое выбирается простейшим способом: $\alpha(\sigma) = \sum_i (\sigma_i - \langle \sigma_i \rangle)$. Отсюда, после несложных преобразований [16, 17] в термодинамическом пределе имеем

$$g(\mu) = \frac{-F(\mu)}{N k_B T} = \mu \langle \sigma_i \rangle + \ln (x e^{-\mu} + (1 - x) e^{\mu}) + \ln \lambda_1 (e^J, e^K),$$

где λ_1 – максимальное собственное число трансфер-матрицы $G(e^J, e^K)$, а

$$e^J = e^{J_0+J} \frac{1+ye^{-2J}}{1+y},$$

$$e^K = e^{K_0} \frac{xe^{-\mu+K} + (1-x)e^{\mu-K}}{xe^{-\mu} + (1-x)e^{\mu}}.$$
(6)

Значение вариационного параметра определяется соотношением

$$\frac{\partial g}{\partial \mu} = 0,$$
(7)

что приводит к уравнению

$$x - \frac{1-\theta-(1-\aleph)}{1+y} - \frac{\theta}{1+ye^{-2J}} - \frac{1-\aleph}{1+ye^{-2K}} = 0,$$
(8)

где

$$y = \frac{1-\theta}{\theta} e^{2\mu},$$
(9)

$$\theta = \frac{\partial \ln \lambda_1}{\partial K_0} - \text{степень спиральности},$$
(10)

$$\aleph = \frac{\partial \ln \lambda_1}{\partial J_0} - \text{доля спиральной конформации}.$$
(11)

Несмотря на различия выражений (10) и (11), эти кривые практически не различимы, поэтому формула (8) перепишется в виде

$$x - \frac{\theta}{1+ye^{-2J}} - \frac{1-\theta}{1+ye^{-2K}} = 0.$$
(12)

Записав выражение (6) через y , получим

$$e^J = e^{J_0+J} \frac{1+ye^{-2J}}{1+y},$$

$$e^K = e^{K_0+K} \frac{1+ye^{-2K}}{1+y}.$$
(13)

Таким образом, исключая y из выражения (12) и подставляя его значение в (13), получаем значение температуры для любого значения θ и, тем самым, можем получить зависимости $\theta(T)$.

На рис. 1 изображены кривые перехода спираль–клубок в гомополимерах, состоящих из повторяющихся единиц типа A и B , а также кривые для случайного гетерополимера (AB) при разных значениях параметров гомополимеров.

Из кривых плавления видно, что интервал перехода для гетерополимера увеличивается при увеличении разности температур $T_{MA} - T_{MB}$. Для получения

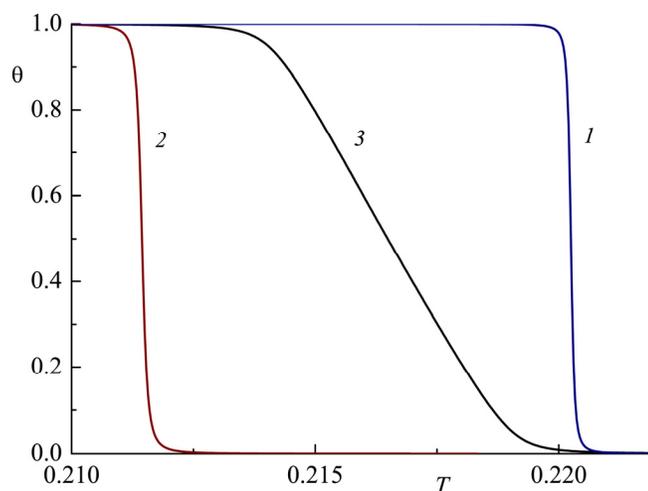


Рис.1. Кривые зависимости степени спиральности θ от температуры T при следующих параметрах теории: $Q_A = 71$, $Q_B = 51$, $U_A = 1$, $U_B = 0.8$, $x = 0.4$ и $\Delta = 4$: 1 – кривая плавления для гомополимера B , 2 – кривая плавления для гомополимера A , 3 – кривая плавления для гетерополимера, состоящего из мономеров A и B .

зависимости интервала перехода гетерополимера от разности температур гомополимеров нужно набрать статистику, что является предметом дальнейших исследований.

Таким образом, на основе приближения отжига с ограничениями в общем виде получен алгоритм вычисления кривых плавления двухкомпонентного случайного гетерополимера с различными соотношениями между компонентами. Алгоритм позволяет предсказывать точку и интервал плавления такой системы как ДНК с различным GC-составом.

Автор выражает благодарность Е.Ш. Мамасахлисову за постановку задачи и поддержку.

ЛИТЕРАТУРА

1. **D.C. Poland, H.A. Scheraga.** The Theory of Helix–Coil Transition. Academic Press, New York, 1970.
2. **Yu. Grosberg, A.R. Khokhlov.** Statistical Physics of Macromolecules. AIP, New York, 1994.
3. **T. Chalikian.** Biopolymers, **70**, 492 (2003).
4. **T. Garel, C. Monthus, H. Orland.** Europhys. Lett., **55**, 132 (2001).
5. **B.H. Zimm, P. Doty, K. Iso.** Proc. Natl. Acad. Sci. USA, **45**, 1601 (1959).
6. **B.H. Zimm, J.K. Bragg.** J. Chem. Phys., **31**, 526 (1959).
7. **B.H. Zimm.** J. Chem. Phys., **33**, 1349 (1960).
8. **B.H. Zimm, N. Rice.** Mol. Phys., **3**, 391 (1960).

9. V.F. Morozov, E.Sh. Mamasakhlisov, Sh.A. Hayryan, C.-K. Hu. *Physica A*, **281**, 51 (2000).
10. V.F. Morozov, A.V. Badasyan, A.V. Grigoryan, M.A. Sahakyan, E.Sh. Mamasakhlisov. *Biopolymers*, **75**, 434 (2004).
11. A.V. Царукян, Ш.А. Тоноян, А.В. Бадасян, А.В. Григорян, Е.Ш. Мамасахлисов, В.Ф. Морозов. *Изв. НАН Армении, Физика*, **41**, 63 (2006).
12. Ш.А. Тоноян, Т.Ю. Бурякина, А.В. Царукян, Е.Ш. Мамасахлисов, В.Ф. Морозов. *Изв. НАН Армении, Физика*, **42**, 466 (2007).
13. Ш.А. Тоноян, А.С. Мирзаханян, Г.Н. Айрапетян, А.В. Царукян, В.Ф. Морозов. *Изв. НАН Армении, Физика*, **45**, 133 (2010).
14. A.V. Badasyan, A.V. Grigoryan, E.Sh. Mamasakhlisov, A.S. Benight, V.F. Morozov. *J. Chem. Phys.*, **123**, 194701 (2005).
15. M. Serva, G. Paladin. *Phys. Rev. Lett.*, **70**, 105 (1993).
16. Ш.А. Тоноян, А.С. Мирзаханян, Е.Ш. Мамасахлисов, В.Ф. Морозов. *Изв. НАН Армении, Физика*, **48**, 350 (2013).
17. Ш.А. Тоноян, А.В. Асагрян, Е.Ш. Мамасахлисов, В.Ф. Морозов. *Изв. НАН Армении, Физика*, **49**, 209 (2014).

ՀՈՄՈՊՈԼԻՄԵՐՆԵՐԻ ՀԱԼՄԱՆ ԿՈՐԵՐԻ ՀԻՄԱՆ ՎՐԱ ՀԵՏԵՐՈԳԵՆ
ԿԵԼՍԱՊՈԼԻՄԵՐՆԵՐՈՒՄ ՊԱՐՈՒՅՐ-ԿԾԻԿ ԱՆՑՄԱՆ ԿՈՐԵՐԻ ԿԱՌՈՒՑՈՒՄԸ
Ա.Կ. ԱՆԴՐԻԱՍՅԱՆ

Հետերոպոլիմերային ԴՆԹ-ի մոդելում հետաքննվել է կարգավորված և կոնստրանտ անցման տեսությունը: Տեսությունը հիմնված է Պոլիպեպտիդային Շղթայի Ընդհանրացված Մոդելի (ՊՇԸՄ) վրա՝ սահմանափակումներով թրծման կիրառմամբ (constrained annealing): Հետերոպոլիմերի ազատ էներգիայի արտահայտությունը ստացվել է հոմոպոլիմերային ՊՇԸՄ-ի վերախմաստավորված պարամետրերով տրանսֆեր-մատրիցի օգնությամբ: Հոմոպոլիմերային մոդելի հիման վրա ստացվել է հալման կորերի հաշվարկման ալգորիթմը:

CONSTRUCTION OF HELIX–COIL TRANSITION CURVES IN HETEROGENEOUS BIOPOLYMERS BASED ON MELTING CUREVES OF HOMOPOLIMERS

A.K. ANDRIASYAN

The theory of helix–coil transition in the model of heteropolymeric DNA is considered. The theory is based on the Generalized Model of Polypeptide Chain (GMPC) using the method of constrained annealing. The free energy of heteropolymers is obtained through transfer-matrix of homopolymeric GMPC with redefined parameters. The algorithm of melting curves calculation on the basis of homopolymeric model is obtained.

ԲՈՎԱՆԴԱԿՈՒԹՅՈՒՆ

Վ.Ս. Մխիթարյան. Ռեյաստիվիստական և քվանտային մեխանիկայի հավասարումներ և որոշ խնդիրների ճշգրիտ լուծումներ.....	3
Ա.Վ. Պապոյան. Ջեեմանյան ապարնակեցնող մղման երևույթը ցիկլային ատոմական անցումներում.....	30
Դ.Ս. Սեդրակյան, Դ.Հ. Բադալյան. Ռեզոնանսային բազմուղի ցրում δ -պոտենցիալներով նանոխողովակում.....	40
Ա.Ա. Լալայան, Հ.Ս. Երիցյան, Հ.Ս. Առաքելյան, Շ.Կ. Երիցյան. Դիֆրակցիոն անփոխադարձությունը՝ ճեղքի միջով էլեկտրամագնիսական ալիքի դիֆրակցիոն անցման դեպքում	50
Ն.Ռ. Աղամալյան, Ռ.Բ. Կոստանյան, Ռ.Կ. Հովսեփյան. Nd^{3+} իոնների լյումինեսցենտ հատկությունները $Pb(MoO_4)_x(WO_4)_{1-x}$ բյուրեղներում.....	56
Վ.Ա. Հարությունյան, Դ.Բ. Հայրապետյան, Է.Ս. Ղազարյան. Միջգոտիական կլանումը եվ ֆոտոլյումինեսցենցիան գլանային CdS/HgS/CdS շերտավոր հետերոկառուցվածքում.....	65
Ա.Ս. Իգիթյան, Ն.Բ. Աղամալյան, Ս.Ի. Պետրոսյան, Ե.Ա. Կաֆադարյան. Մեմրիստիվ էֆեկտը լիթիումով լեգիրված ZnO թաղանթների հիման վրա ստացած երկշերտ կառուցվածքներում	77
Մ.Վ. Կասկով, Դ.Պ. Լյուբով, Յու.Վ. Պերշին. Կումերցիոն սեգնետոէլեկտրիկ կոնդենսատորների վոլտ-ամպերային բնութագրերը. Պրեյզախի մոդելից շեղումները	86
Ա.Ա. Կուզանյան, Վ.Ռ. Նիկողոսյան, Ա.Ս. Կուզանյան. Միաֆոտոն ջերմաէլետրական դետեկտորի գերհաղորդիչ շերտեր պարունակող եռաշերտ զգայուն տարրում ջերմության տարածման պրոցեսների մոդելավորում	96
Մ.Կ. Բալյան. Ռենտգենյան անհամաչափ Լաուե-դիֆրակցիայի ճոճման կորերը ալիքային ճակատի երկչափ կորության հաշվառմամբ.....	111
Լ.Վ. Լևոնյան, Հ.Ս. Մանուկյան. Ռենտգենյան փուլային ցայտունությունը փոքր պարբերությամբ գերցանցում գնդային ալիքի դիֆրակտային կիզակետման դեպքում.....	120
Ա.Կ. Անդրիասյան. Հոմոպոլիմերների հալման կորերի հիման վրա հետերոգեն կենսապոլիմերներում պարույր-կծիկ անցման կորերի կառուցումը.....	125

CONTENTS

V.M. Mekhitarian. Equations of Relativistic and Quantum Mechanics and Exact Solutions of Some Problems	3
A.V. Papoyan. Zeeman Depopulation Pumping Effect on Cycling Atomic Transitions	30
D.M. Sedrakian, D.H. Badalyan. Resonant Multichannel Scattering in Nanotube with δ -Potentials	40
A.A. Lalayan, H.S. Eritsyan, H.M. Arakelyan, Sh.K. Eritsyan. Diffraction Nonreciprocity in Electromagnetic Wave Diffraction on the Slit	50
N.R. Aghamalyan, R.B. Kostanyan, R.K. Hovsepyan. Luminescent Properties of Nd^{3+} Ions in $\text{Pb}(\text{MoO}_4)_x(\text{WO}_4)_{1-x}$ Crystals	56
V.A. Harutryunyan, D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan. Interband Absorbtion and Photoluminescence in the Cylindrical Layered CdS/HgS/CdS Heterostructure	65
A.S. Igityan, N.R. Aghamalyan, S.I. Petrosyan, Y.A. Kafadaryan. Memristive Effect in Two-Layered Structures Based on Lithium Doped ZnO Films	77
M.V. Katkov, D.P. Lubov, V.V. Pershin. Current–Voltage Characteristics of Commercial Ferroelectric Capacitors: Deviations from the Preisach Model	86
A.A. Kuzanyan, V.R. Nikoghosyan, A.S. Kuzanyan. Simulation of Heat Propagation Processes in the Detection Pixel with Superconducting Layers of Single-Photon Thermoelectric Detector.....	96
M.K. Balyan. Rocking Curves of X-Ray Asymmetrical Laue Diffraction with Two-Dimensional Curvature of the Wave Front.....	111
L.V. Levonyan, H.M. Manukyan. X-Ray Phase Contrast at the Diffraction Focusing of Spherical Wave on a Superlattice with Short Period.....	120
A.K. Andriasyan. Construction of Helix–Coil Transition Curves in Heterogeneous Biopolymers Based on Melting Cureves of Homopolimers.	125

СОДЕРЖАНИЕ

В.М. Мыхитарян. Уравнения релятивистской и квантовой механики и точные решения некоторых задач.....	3
А.В. Папоян. Эффект зеемановской опустошающей накачки на циклических атомных переходах	30
Д.М. Седракян, Д.А. Бадалян. Резонансное многоканальное рассеяние в нанотрубке с δ -потенциалами	40
А.А. Лалаян, О.С. Ерицян, О.М. Аракелян, Ш.К. Ерицян. Дифракционная невзаимность в дифракции электромагнитной волны на щели	50
Н.Р. Агамалян, Р.Б. Костанян, Р.К. Овсепян. Люминесцентные свойства ионов Nd^{3+} в кристаллах $\text{Pb}(\text{MoO}_4)_x(\text{WO}_4)_{1-x}$	56
В.А. Арутюнян, Д.Б. Айрапетян, Э.М. Казарян. Межзонное поглощение и фотолюминесценция в цилиндрической слоистой гетероструктуре $\text{CdS}/\text{HgS}/\text{CdS}$	65
А.С. Игитян, Н.Р. Агамалян, С.И. Петросян, Е.А. Кафадарян. Мемристивный эффект в двухслойных структурах на основе легированных литием пленок ZnO	77
М.В. Катков, Д.П. Лубов, Ю.В. Першин. Вольт–амперные характеристики коммерческих сегнетоэлектрических конденсаторов: отклонения от модели Прейзаха	86
А.А. Кузаян, В.Р. Никогосян, А.С. Кузаян. Моделирование процессов распространения тепла в чувствительной ячейке со сверхпроводящими слоями однофотонного термоэлектрического детектора	96
М.К. Баян. Кривые качания рентгеновской асимметричной дифракции Лауэ с двумерной кривизной волнового фронта.....	111
Л.В. Левонян, А.М. Манукян. Рентгеновский фазовый контраст при дифракционной фокусировке сферической волны в сверхрешетке с малым периодом	120
А.К. Андриасян. Построение кривых перехода спираль–клубок в гетерогенных биополимерах на основе кривых плавления гомополимеров	125

Заказ № 828

Тираж 150. Цена договорная.

Подписано к печати 10.01.2018. Печ. л. 8.25.

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