

ФИЗИКА • ՖԻԶԻԿԱ • PHYSICS



ИЗВЕСТИЯ
НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК АРМЕНИИ

ՏԵԴԵԿԱԳԻՐ
ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԶԳԱՅԻՆ ԱԿԱԴԵՄԻԱՅԻ

PROCEEDINGS
OF NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF ARMENIA

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
Д. Г. Саркисян
Э. Г. Шароян

ԽՄԲԱԳՐԱԿԱՆ ԿՈԼԵԳԻԱ

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. Ն. Մելիքյան
Դ. Հ. Սարգսյան
Է. Գ. Շարոյան

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
D. H. Sarkisyan
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.

ԲՈՎԱՆԴԱԿՈՒԹՅՈՒՆ

Ս.Ս. Գևորգյան, Վ.Վ. Սահակյան. Դասական մեխանիկայի առաջին սկզբունքները և վիճակագրական ֆիզիկայի հիմնադրությունները չկարգավորված սպինային համակարգի օրինակով.....	415
Ա.Յ. Ալեքսանյան, Ս.Մ. Ամիրխանյան, Ա. Բալաբեկյան, Ն.Ա. Դեմիրխիս, Հ.Ռ. Գուլբանյան, Տ.Վ. Քոթանջյան, Վ. Մանգասարյան, Վ.Ս. Պողոսով, Լ.Ա. Պողոսյան, Ս. Ֆայթաջանյան. Պղնձի միջուկներից կոբալտի ռադիոիզոտոպների ֆոտոառաջացման հետազոտումը.....	431
Գ.Հ. Նիկողոսյան. Նուկլիդների իզոպեկտոպական զույգային կորելացիաները ատոմային միջուկներում.....	443
Ժ.Ա. Աղամյան, Ս.Ա. Մուրադյան, Վ.Ռ. Օհանյան. Քվանտային խճճվածությունը սպինային երկմասնիկանի համակարգերում մագնիսական դաշտի և անհամասեռ g-ֆակտորների էֆեկտները.....	455
Հ.Վ. Բաղդասարյան, Վ.Ա. Վարդանյան, Ա.Վ. Դարյան. Ինքնազդամբ միջավայրերում էլեկտրամագնիսական ալիքների համար Հելմհոլցի հավասարման լուծումների հետազոտում ֆազային հարթության եղանակով.....	465
Գ.Գ. Դեմիրխանյան, Ռ.Բ. Կոստանյան. LaF3:Er3+ բյուրեղի սպեկտրադիտական հնարավորությունների ուսումնասիրումը կասկադային MIR լազերների ստացման համար.....	476
Ա.Ռ. Մկրտչյան, Ա.Ա. Լալաբան, Հ.Ս. Երիցյան, Ա.Լ. Մարգարյան, Շ.Կ. Երիցյան, Ժ.Բ. Խաչատրյան. Էլեկտրամագնիսական ալիքի դիֆրակցիան վակուումի և մեկից տարբեր բեկման ցուցիչով նյութի սահմանին տեղադրված էկրանի կյորանցքից.....	487
Գ.Ա. Մուրադյան, Լ.Ռ. Արզումանյան, Ա.Ժ. Մուրադյան. Կիսահաղորդչային քվանտային կետի սպոնտան ճառագայթումն առանց դիպոլային մոտավորության.....	492
Վ.Մ. Հարությունյան. Գազի զգայուն սենսորներ ցինկի օքսիդի հիման վրա.....	501
Կ.Մ. Ղամբարյան, Ա.Կ. Սիմոնյան, Վ.Մ. Հարությունյան, Մ.Կ. Ղամբարյան. CdTe-ZnTe-HgTe նյութական համակարգ: ալինդ լուծույթների համատեղելիության վերլուծություն.....	519
Ռ.Ռ. Վարդանյան, Վ.Կ. Դավաթյան, Մ.Գ. Տրավաջյան. Արևային ֆոտոէլեկտրական և ջերմային հիբրիդային համակարգերի բնութագրերի ջերմաստիճանային կախվածությունները.....	527
Հ.Ս. Նիկողոսյան, Ս.Լ. Հարությունյան, Վ.Ֆ. Մանուկյան, Գ.Հ. Նիկողոսյան. Լիցքակիրների ոչ մոնոտոն դիսպերսիան խախտված համաչափություններով չափային-քվանտացված նանոկառուցվածքներում.....	537
Հ.Պ. Սարգսյան. Ոչ գծային բազմակոմպոնենտ դիֆուզիայի դոմինանտ մեխանիզմի որոշման արժեքային եղանակի մասին.....	550

Ա.Ա. Սարգսյան, Վ.Վ. Բաղդասյան, Ն.Բ. Կնյազյան, Ռ.Կ. Հովսեփյան, Ն.Ռ. Աղամալյան, Գ.Ռ. Բադալյան. ZnO/Ag նանոկոմպոզիտի միկրոալիքային սինթեզ.....	559
Ա.Ա. Կուզանյան, Ս.Ի. Պետրոսյան, Ա.Ս. Կուզանյան, Գ.Ռ. Բադալյան. Միլիցիումի երկօքսիդի թաղանթները որպես ջերմաէլեկտրական միաֆո- տոն դետեկտորի հակաանդրադարձող շերտ կիրառումը	566
Բ.Ա. Հովհաննիսյան, Տ.Ն. Հովհաննիսյան, Ա.Հ. Մակարյան. Էլեկտրակարդիոգրա- մի հաճախա-ժամանակային վերլուծություն.....	575
Ա.Ե. Բլագով, Վ.Ռ. Քոչարյան, Ա.Ե. Մովսիսյան, Տ.Ռ. Մուրադյան, Ա.Վ. Տարգոնսկիյ, Յա.Ա. Էլիովիչ, Յու.Վ. Պիսարեվսկի, Ա.Յու. Մերեզին, Վ.Ա. Կոռժով, Մ.Վ. Կովալչուկ. X-կտրվացքով կվարցի միաբյուրեղներում ակուստիկ ալիքների գրգռման պայմաններում ինտենսիվության վերաբաշխման երևույթի առանձնահատկությունների հետազոտումը սինքրոտրոնային ճառագայթման միջոցով.....	582
A. Krasteva, E. Mariotti, Y. Dancheva, C. Marinelli, L. Marmugi, L. Stiacchini, S. Gozzini, S. Gateva, S. Cartaleva. Օպտիկական պոմպային պրոցեսի դինամիկան Rb գոլորշիով պատված բջիջներում	592
Ռ.Մ. Մարտիրոսյան, Ռ.Բ. Կոստանյան. Ակադեմիկոս Վլադիմիր Միքայելի Հարությունյան (ծննդյան 80-ամյակի կապակցությամբ)	615

CONTENTS

A.S. Gevorkyan, V.V. Sahakyan. First Principles of the Classical Mechanics and the Foundations of Statistical Mechanics on the Example of a Disordered Spin System.....	415
A.Y. Aleksanyan, S.M. Amirkhanyan, A. Balabekyan, N.A. Demekhina, H.R Gulkanyan, T.V. Kotanjyan, V. Mangasaryan, V.S. Pogosov, L.A. Poghosyan, S. Faltajanyan. The Study of Photoproduction of Cobalt Radioisotopes from Copper Nuclei.....	431
G. Nikoghosyan. Isovector Pair Correlations of Nucleons in Nuclei.....	443
Z.A Adamyan, S.A Muradyan, V.R. Ohanyan. Quantum Entanglement in Spin Dimers: Effects of a Magnetic Field and Heterogeneous g-Factors.....	455
H.V. Baghdasaryan, V.A. Vardanyan, A.V. Daryan. Phase-Plane Analysis of Solutions of the Helmholtz Equation for Electromagnetic Waves in Media with Self-Action.....	465
G.G. Demirkhanyan, R.B. Kostanyan. Spectroscopic Capabilities of LaF ₃ :Er ³⁺ Crystals for MIR Lasers Cascade Operation.....	476
A.R. Mkrtchyan, A.A. Lalayan, H.S. Yericyan, A.L. Margaryan, Sh.K. Yericyan, Zh.B. Khachatryan. Diffraction of Electromagnetic Waves from a Round Hole Located Between Vacuum and Matter with a Refraction Indexes Different from One.....	487
G.A. Muradyan, L.R. Arzumanyan, A.Zh. Muradyan. Spontaneous Emission of a Semiconductor Quantum Dot without the Dipole Approximation.....	492
V.M. Aroutiounian. Zinc Oxide Gas Sensors.....	501
K.M. Gambaryan, A.K. Simonyan, V.M. Aroutiounian, M.K. Gambaryan. CdTe–ZnTe–HgTe Material System: Solid Solutions Miscibility Analysis	519
R.R. Vardanyan, V.K. Dallakyan, M.G. Travajyan. Temperature Dependent Performance of Photovoltaic and Thermal Hybrid Systems	527
H.S. Nikoghosyan, S.L. Harutyunyan, V.F. Manukyan, G.H. Nikoghosyan. Nonmonotonic Carrier Dispersion in Dimensionally Quantized Nanostructures with Broken Symmetries.....	537
H.P. Sargsyan. On the Value Method of Determining a Dominant Mechanism of Nonlinear Multicomponent Diffusion	550
A.A. Sargsyan, V.V. Baghranyan, N.B. Knyazyan, R.K. Hovsepyan, N.R. Aghamalyan, G.R. Badalyan. Microwave Synthesis of ZnO/Ag Nanocomposite.....	559

A.A. Kuzanyan, S.I. Petrosyan, A.S. Kuzanyan, G.R. Badalyan. The Use of Silicon Dioxide Films as an Antireflection Coating for a Thermoelectric Single-Photon Detector	566
B.A. Hovhannisyan, T.N. Hovhannesyan, A.H. Makaryan. Frequency-Temporal Analysis of Electrocardiograms	575
A.E. Blagov, V.R. Kocharyan, A.E. Movsisyan, T.R. Muradyan, A.V. Targonsky, Ya.A. Eliovich, Yu.V. Pisarevsky, A.Yu. Seregin, V.A. Korzhov M.V. Kovalchuk. Study of the Peculiarities of the Effect of Redistributing Intensity in the Excitation of Acoustic Waves in X-Cut Quartz Crystals by Using Synchrotron Radiation	582
A. Krasteva, E. Mariotti, Y. Dancheva, C. Marinelli, L. Marmugi, L. Stiacchini, S. Gozzini, S. Gateva, S. Cartaleva. Dynamics of Optical Pumping Processes in Coated Cells Filled with Rb Vapour.....	592
R. Martirosyan, R. Kostanyan. Academician Vladimir V.M. Aroutiounian (on the occasion of the 80th birthday).....	615

СОДЕРЖАНИЕ

А.С. Геворкян, В.В. Саакян. Первые принципы классической механики и основы статистической механики на примере неупорядоченной спиновой системы.....	415
А.Ю. Алексанян, С.М. Амирханян, А. Балабекян, Н.А. Демехина, Г.Р. Гулканян, Т.В. Котанджян, В. Мангасарян, В.С. Погосов, Л.А. Погосян, С. Фалтаджанян. Изучение фотообразования радиоизотопов кобальта из ядер меди.....	431
Г.Г. Никогосян. Изовекторные парные корреляции нуклонов в атомных ядрах	443
Ж.А. Адамян, С.А. Мурадян, В.Р. Оганян. Квантовая запутанность в спиновых димерах: эффекты магнитного поля и неоднородных g-факторов.....	455
О.В. Багдасарян, В.А. Варданян, А.В. Дарьян. Анализ решений уравнения Гельмгольца для электромагнитных волн в средах с самовоздействием методом фазовой плоскости.....	465
Г.Г. Демирханян, Р.Б. Костанян. Спектроскопические возможности кристаллов $\text{LaF}_3:\text{Er}^{3+}$ для каскадных MIR лазеров.....	476
А.Р. Мкртчян, А.А. Лалаян, О.С. Ерицян, А.Л. Маргарян, Ш.К. Ерицян, Ж.Б. Хачатрян. Дифракция электромагнитной волны от круглого отверстия, расположенного между вакуумом и веществом с отличным от единицы коэффициентом преломления	487
Г.А. Мурадян, Л.Р. Арзуманян, А.Ж. Мурадян. Спонтанное излучение полупроводниковой квантовой точки вне дипольного приближения..	492
В.М. Арутюнян. Газовые сенсоры из оксида цинка.....	501
К.М. Гамбарян, А.К. Симонян, В.М. Арутюнян, М.К. Гамбарян. Материальная система CdTe-ZnTe-HgTe : анализ смешиваемости твердых растворов.....	519
Р.Р. Варданян, В.К. Даллакян, М.Г. Траваджян. Температурно-зависимые характеристики солнечных фотоэлектрических и тепловых гибридных систем	527
Г.С. Никогосян, С.Л. Арутюнян, В.Ф. Манукян, Г.Г. Никогосян. Немонотонная дисперсия носителей в размерно-квантованных наноструктурах с нарушенными симметриями.....	537
Г.П. Саркисян. О ценностном методе определения доминирующего механизма нелинейной многокомпонентной диффузии	550

А.А. Саргсян, В.В. Баграмян, Н.Б. Князян, Р.К. Овсепян, Н.Р. Агамалян, Г.Р. Бадалян. Микроволновый синтез нанокompозита ZnO/Ag	559
А.А. Кузанын, С.И. Петросян, А.С. Кузанын, Г.Р. Бадалян. Использование пленок диоксида кремния в качестве антиотражающего покрытия термоэлектрического однофотонного детектора	566
Б.А. Оганисян, Т.Н. Оганесян, А.О. Макарян. Частотно-временной анализ электрокардиограмм	575
А.Е. Благов, В.Р. Кочарян, А.Е. Мовсисян, Т.Р. Мурадян, А.В. Таргонский, Я.А. Элиович, Ю.В. Писаревский, А.Ю. Серегин, В.А. Коржов М.В. Ковальчук. Изучение особенностей эффекта перераспределения интенсивности при возбуждении акустических волн в кристаллах кварца х-среза с помощью синхротронного излучения.....	582
А. Крастева, Э. Мариотти, Й. Данчева, К. Маринелли, Л. Мармуги, Л. Стачини, С. Годзини, С. Гатева, С. Карталева. Динамика процесса оптической накачки в ячейках с покрытием, заполненных парами Rb.....	592
Р.М. Мартиросян, Р.Б. Костанян. Академик Владимир Михайлович Арутюнян (к 80-летию со дня рождения)	615

Заказ № 1045

Тираж 150. Цена договорная.

Подписано к печати 15.10.2020. Печ. л. 13.25.

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

ПЕРВЫЕ ПРИНЦИПЫ КЛАССИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ И ОСНОВЫ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ НА ПРИМЕРЕ НЕУПОРЯДОЧЕННОЙ СПИНОВОЙ СИСТЕМЫ

А.С. ГЕВОРКЯН^{1,2*}, В.В. СААКЯН¹

¹Институт проблем информатики и автоматизации, НАН Армении, Ереван, Армения

²Институт химической физики, НАН Армении, Ереван, Армения

*e-mail: g_ashot@sci.am

(Поступила в редакцию 12 сентября 2019 г.)

Мы изучаем классическую многокомпонентную неупорядоченную 3D спиновую систему с учетом температуры среды в рамках модели ближайших соседей. Последнее позволяет 3D задачу с кубической решеткой свести к 1D задаче спинового стекла Гейзенберга со случайным окружением. Используя уравнения движения Гамильтона, получено рекуррентное уравнение, связывающее три спина в последовательных узлах 1D решетки с учетом влияния случайного окружения. Это уравнение, вместе с соответствующими условиями локального минимума энергии в узлах, позволяет узел за узлом построить устойчивые спин-цепочки и, соответственно, вычислить все параметры статистического ансамбля (СА) из первых принципов классической механики (ППКМ) без использования каких-либо дополнительных предположений, в частности, основной аксиомы статистической механики – равновероятности статистических состояний. На примере 1D модели спинового стекла Гейзенберга детально изучены особенности нового подхода и построена статистическая механика системы без использования стандартного представления для статистической суммы (СС), построенного в рамках гипотезы Гиббса.

1. Введение

Статистическая механика (СМ), несомненно, является одной из наиболее изученных и успешно используемых областей современной физики. Тем не менее, ее основные постулаты и основанные на них концепции остаются предметом постоянных дискуссий спустя много лет после ее основания (см., например, [1]). Чтобы прояснить ряд фундаментальных аксиом и понятий статистической физики необходимо провести сравнительный анализ результатов точно решаемой модели статистической физики в рамках стандартного представления СС с результатами, полученными из первых принципов классической механики. Напомним, что широкий класс явлений в физике, химии, материаловедении, биологии, экологических и социальных структурах, науке nano масштабных структур,

нейронной сети, эволюции, организационной динамике, комплексной оптимизации, гуманных логических системах и т. д., математически хорошо описывается с помощью моделей спиновых стекол [2–11]. Как было показано в работах [12–15], проблема спиновых стекол, даже в случае термодинамического равновесия, часто является NP-сложной задачей, которая связана с расходимостью в симуляциях Монте-Карло [16]. В последнее время в статистической физике происходит быстрый рост числа работ по методам комбинаторной оптимизации [17–19]. В частности, ряд неупорядоченных статистических систем был сформулирован как комбинаторные задачи, для которых доступны быстрые алгоритмы [20–21]. Отметим, что комбинаторные методы и соответствующие алгоритмы часто используются для моделирования спиновых стекол, особенно при изучении таких явлений, как фазовые переходы, где они дали ценную информацию по вопросам, которые трудно исследовать с помощью традиционных методов, например, с помощью моделирования Монте-Карло [12].

Несмотря на многочисленные исследования, существует ряд актуальных вопросов в области спиновых стекол и неупорядоченных спиновых систем в целом, решение которых чрезвычайно важно как с точки зрения развития теории, так и приложений. Ниже мы перечислим ряд из них:

1. Моделирование спиновых стекол вдали от термодинамического равновесия. Очевидно, что в таких случаях мы не можем ввести температуру среды и, соответственно, написать и использовать стандартное представление для статистической суммы (СС).
2. Даже если предположить, что спиновое стекло находится в состоянии термодинамического равновесия и для него СС можно записать в стандартном виде, вопрос изучения метастабильных состояний остается открытым. Напомним, что методы моделирования Монте-Карло позволяют изучать спиновые системы только в основном состоянии, тогда как реальная статистическая система, тем более спиновые стекла, всегда находится в метастабильных состояниях, т.е. в состоянии, где характеризующие параметры спинового стекла задаются некоторыми распределениями.
3. При определении СС априори предполагается, что общий вес нефизических спиновых конфигураций (НСК) в пространстве конфигурации равен нулю, что никак не доказанное утверждение, а в ряде случаев может быть неверным предположением. Напомним, что под НСК мы подразумеваем такие спиновые цепочки, которые, основываясь на первых принципах классической механики, являются неустойчивыми.
4. Вычислительная сложность спиновых стекол часто относится к классу NP-сложных задач. Это обстоятельство требует разработки новых эффективных алгоритмов для численного моделирования спиновых стекол, что

так или иначе приводит к проблеме редукции NP-сложной задачи к P задаче.

Очевидно, что вышеперечисленные проблемы, на которые мы хотим получить четкие ответы, требуют разработки принципиально новых подходов и вычислительных алгоритмов. В этой статье мы преследуем две основные цели:

- Сформулировать классическую 3D задачу неупорядоченной многокомпонентной спиновой системы (спины с разными длинами) и показать возможность ее редукции к 1D задаче спинового стекла Гейзенберга со случайным окружением.
- Доказать возможность моделирования 1D задачи спинового стекла Гейзенберга (точно решаемая задача [22]) из первых принципов классической механики (ППКМ) и вычисления всех параметров СА в конечных температурах с помощью P алгоритма (см. также [23]).

2. Кубическая модель спинового стекла Гейзенберга с учетом температуры среды

Для изучения конденсированной фазы при низких температурах, вблизи точки фазового перехода, часто используется классические 2D (см. [24–29]) и 3D (см. [30–37]) модели Гейзенберга в рамках стандартного представления СС. В данной работе мы ставим задачу смоделировать аморфные соединения- спиновые стекла структуры типа SiO_2 (см. рис. 1). Отметим, что этот класс материалов – не ферромагнит и не антиферромагнит, однако, состоит из молекул, которые обладают жесткими дипольными моментами, случайно ориентированными в 3D пространстве, и, соответственно, образуют неупорядоченные системы магнитных атомов.

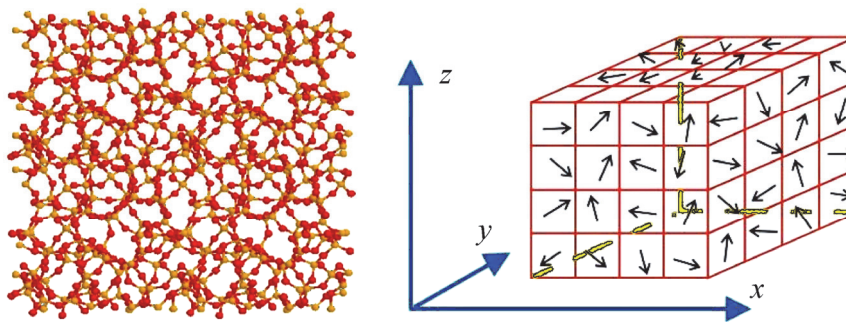


Рис. 1. Левая картинка – смоделированное на суперкомпьютере аморфное соединение- SiO_2 стекло (см. [17]), где красные точки изображают атомы силиция- Si а желтоватые точки изображают атомы кислорода- O. На правой картинке кубическая решетка, где в каждой ячейке изображен случайно ориентированный в 3D пространстве вектор постоянной (единичной) длины, который изображает дипольный момент молекулы SiO_2 .

Рассмотрим классический 3D гамильтониан Гейзенберга с кубической симметрией:

$$H_0 = - \sum_{\langle i,j \rangle}^N J_{i,j} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j, \quad \mathbf{s}_i, \mathbf{s}_j \in R^3, \quad (1)$$

где $i, j = (1, \dots, N) = \overline{1, N}$, символ $\langle . \rangle$ обозначает суммирование, которое производится только по ближайшим соседям (узлам) 3D решётки, а $J_{i,j}$ константа обменного взаимодействия между i и j спинами, которая – случайная величина и ее распределение будет найдено в результате численного моделирования, $N = L_x \times L_y \times L_z = L^3$ обозначает число узлов в решетке, а L – длина решетки по одному из измерений (расстояние между двумя ближайшими узлами предполагаем равным 1, т.е. $N_x = N_y = N_z = L$). Если предположить, что в узлах решетки магнитные частицы (спины) совершают тепловые колебания, гамильтониан системы можно написать в виде:

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_i} - \sum_{\langle i,j \rangle}^N J_{i,j} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j, \quad (2)$$

$\mathbf{p}_i = m_i \dot{\mathbf{s}}_i$ обозначает импульс частицы в i -ом узле (m_i – масса частицы, которая считается равной 1), который обладает спином $\mathbf{s}_i$, кроме того, вектор скорости $\dot{\mathbf{s}}_i = \partial \mathbf{s}_i / \partial t$ будем считать случайно ориентированным в R^3 , а t обозначает время. Конечную спиновую систему в 3D пространстве условно можно представить в виде множества случайно взаимодействующих одномерных спиновых цепочек со случайно ориентированными в R^3 спинами. Учитывая приближение ближайших соседей, лежащее в основе представления (1)–(2), 3D спиновую систему можно рассматривать как множество невзаимодействующих 1D спиновых цепочек со случайными «окружениями». Напомним, что каждая спиновая цепочка окружена четырьмя ближайшими неупорядоченными спиновыми цепочками, с которыми она взаимодействует случайно (см. рис.2). Гамильтониан 1D спиновой цепочки со случайным окружением можно представить в виде суммы:

$$H(N_x) = H^{(1)}(N_x) + H^{(2)}(N_x), \quad (3)$$

где сделаны следующие обозначения:

$$\begin{aligned} H^{(1)}(N_x) &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_x} \dot{\mathbf{s}}_i^2 - \sum_{i=1}^{N_x} J_{i,i+1} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_{i+1}, \\ H^{(2)}(N_x) &= - \sum_{i=1}^{N_x} \mathbf{U}_i \cdot \mathbf{s}_i, \quad \mathbf{U}_i = \sum_{i_\sigma=1}^4 J_{i,i_\sigma} \mathbf{s}_{i_\sigma}. \end{aligned} \quad (4)$$

Подставляя (3) в классические уравнения Гамильтона [38]:

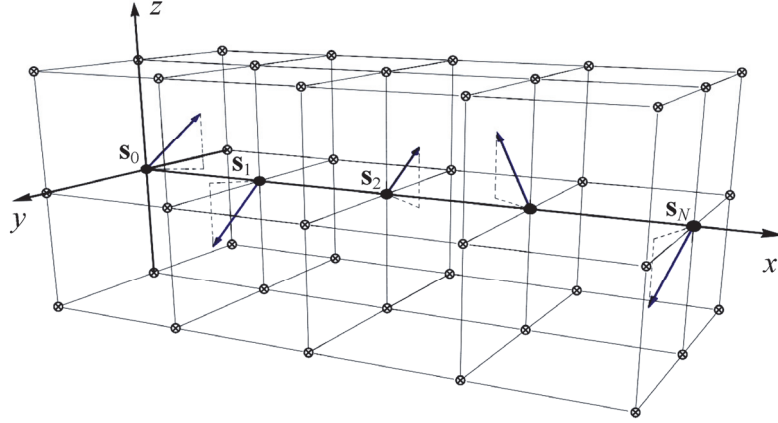


Рис.2. Одномерная неупорядоченная спин-цепочка (начала спинов на оси $0x$ показаны знаком $\bullet$) в окружении случайно ориентированных и взаимодействующих спинов (начала спинов окружения показаны знаком $\otimes$).

$$\dot{\mathbf{r}}_i = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i}, \quad \dot{\mathbf{p}}_i = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_i}, \quad (5)$$

сделав замены $\mathbf{r}_i \rightarrow \mathbf{s}_i$ и $\mathbf{p}_i \rightarrow \dot{\mathbf{s}}_i$, для системы спин-цепочки с окружением получим уравнение:

$$\ddot{\mathbf{s}}_i = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{s}_i} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{s}_i} [J_{i-1,i} \mathbf{s}_{i-1} \cdot \mathbf{s}_i + J_{i,i+1} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_{i+1} + \mathbf{U}_i \cdot \mathbf{s}_i]. \quad (6)$$

Учитывая то, что спины локализованы вблизи узлов $1D$ -решетки и совершают квазипериодические тепловые колебания $\xi_i(t)$ ($\xi_i = (x_i, y_i, z_i)$), а так же то, что нас будут интересовать статистические свойства спиновой системы на временных масштабах $\Delta t \gg \tau_0$, (τ_0 – характерный период спиновых колебаний вблизи узлов решетки), мы можем усреднить уравнение (6) на масштабе периода τ_0 . Очевидно, что в этом случае будут иметь место равенства $\langle \ddot{x}_i \rangle_{\tau_0} = \langle \ddot{y}_i \rangle_{\tau_0} = \langle \ddot{z}_i \rangle_{\tau_0} = 0$, используя которые, уравнение (6) можно написать в следующем виде:

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{s}_i} [J_{i-1,i} \mathbf{s}_{i-1} \cdot \mathbf{s}_i + J_{i,i+1} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_{i+1} + \mathbf{U}_i \cdot \mathbf{s}_i] = 0. \quad (7)$$

Переходя от (6) к уравнению (7), мы накладываем ограничение на константу $J_{i,i+1}$:

$$|J_{i,i+1}| \geq \beta^{-1}, \quad \beta = 1/(k_B T), \quad (8)$$

где k_B и T – соответственно, постоянная Больцмана и температура среды. Внося в алгоритм вычисления – это дополнительное условие, мы тем самым будем учитывать влияние температуры среды на статистику системы. Проводя несложные

вычисления с использованием уравнения (7), можно показать, что усредненный гамильтониан $\bar{H} = \langle H \rangle_{\tau_0}$ в i -ом узле будет иметь локальный экстремум, если в $(i+1)$ -ом узле спин определяется следующим выражением:

$$\mathbf{s}_{i+1} = \frac{1}{J_{i,i+1}} \times \left\{ \left[\left(J_{i-1,i} \mathbf{s}_{i-1} + \mathbf{U}_i \right) \mathbf{s}_i \pm \sqrt{J_{i,i+1}^2 - \left\| \mathbf{s}_i \times \left(J_{i-1,i} \mathbf{s}_{i-1} + \mathbf{U}_i \right) \right\|^2} \right] \cdot \mathbf{s}_i - J_{i-1,i} \mathbf{s}_{i-1} + \mathbf{U}_i \right\}, \quad (9)$$

где константа обменного взаимодействия $J_{i,i+1}^2 \geq \left\| \mathbf{s}_i \times \left(J_{i-1,i} \mathbf{s}_{i-1} + \mathbf{U}_i \right) \right\|^2$.

Для стабильности спиновой цепочки необходимо, чтобы каждый спин находился в состоянии локального минимума энергии. Последнее эквивалентно тому, чтобы гамильтониан $\bar{H}$, как функция многих переменных, в каждом узле решетки имел локальный минимум. Это возможно если у гессiana функции $\bar{H}$:

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & a_{32} & a_{33} & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{N-1 \ N-1} & a_{N-1 \ N} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{N \ N-1} & a_{N \ N} \end{pmatrix}, \quad (9a)$$

$$a_{ii} = \begin{pmatrix} a_{ii}^{xx} & a_{ii}^{xy} \\ a_{ii}^{yx} & a_{ii}^{yy} \end{pmatrix}, \quad a_{ij} = \begin{pmatrix} a_{ij}^{xx} & a_{ij}^{xy} \\ a_{ij}^{yx} & a_{ij}^{yy} \end{pmatrix},$$

диагональные миноры положительны; $\det(\mathbf{M}_{1,j}) > 0, \forall j = \overline{1, N}$. Элементы $a_{ij} \in M$ в (9a) являются матрицами размера 2×2 (см. (9a)), и определяются с помощью выражений:

$$a_{ij}^{xx} = \partial^2 \bar{H} / \partial x_i \partial x_j, \quad a_{ij}^{xy} = a_{ij}^{yx} = \partial^2 \bar{H} / \partial x_i \partial y_j, \quad a_{ij}^{yy} = \partial^2 \bar{H} / \partial y_i \partial y_j.$$

Другими словами, размер матрицы $\mathbf{M}$ на самом деле $(2N) \times (2N)$.

3. Рекуррентные уравнения для построения спин-цепочки без окружения

Для демонстрации эффективности и точности предложенного подхода рассмотрим наиболее простой случай, когда $\mathbf{U}_i = 0$ и $\|\mathbf{s}_i\| = 1 \ \forall i \in \overline{1, N}$, что соответствует тому, что 1D спин цепочки не взаимодействуют в ансамбле (идеальный ансамбль), и кроме того, все спины – случайно ориентированные единичные

вектора. С учетом сказанного из (9) можно получить следующие рекуррентные уравнения для определения экстремального значения гамильтониана в i -ом узле [23]:

$$\begin{aligned} J_{i-1,i}(x_{i-1} - x_i z_i^{-1} z_{i-1}) + J_{i,i+1}(x_{i+1} - x_i z_i^{-1} z_{i+1}) &= 0, \\ J_{i-1,i}(y_{i-1} - y_i z_i^{-1} z_{i-1}) + J_{i,i+1}(y_{i+1} - y_i z_i^{-1} z_{i+1}) &= 0, \end{aligned} \quad (10)$$

где x_i и y_i – соответствующие проекции вектора $\mathbf{s}_i$, кроме того, $z_i = (1 - x_i^2 - y_i^2)^{1/2} > 0$.

Решая уравнения (10) относительно переменных x_{i+1} и y_{i+1} , мы получаем:

$$x_{i+1} = C_x / J_{i,i+1}, \quad y_{i+1} = C_y / J_{i,i+1}, \quad (11)$$

где константы C_x и C_y определяются с помощью следующих выражений:

$$\begin{aligned} C_{x(y)} &= (A_{x(y)} - B_{x(y)}(C \pm D))(1 + B_x^2 + B_y^2)^{-1}, \\ D &= (1 - A_x^2 - A_y^2 + B_x^2 + B_y^2 - C), \\ A_\xi &= \xi_i z_i^{-1} z_{i-1} - \xi_{i-1}, \quad B_{x(y)} = \xi_i z_i^{-1} q_i, \quad C = A_x B_y - A_y B_x. \end{aligned}$$

Теперь важно установить условия для нахождения решений уравнения (11), которые удовлетворяют условию локального минимума в узлах 1D решетки.

Пусть спиновая цепочка состоит из числа N спинов $(\mathbf{s}_1, \dots, \mathbf{s}_N)$, где первый и последний спины 1D цепочки, $\mathbf{s}_1$ и $\mathbf{s}_N$, предполагается заданы, исходя из других физических принципов. Тогда гессиан гамильтониана $\bar{H}$ (см. (9a)) может быть упрощен и записан в следующем виде:

$$M = \begin{pmatrix} \gamma_1 + \gamma_2 & -\gamma_2 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ -\gamma_2 & \gamma_2 + \gamma_3 & -\gamma_3 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & -\gamma_3 & \gamma_3 + \gamma_4 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \gamma_{N-2} + \gamma_{N-1} & -\gamma_{N-1} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -\gamma_{N-1} & \gamma_{N-1} + \gamma_N \end{pmatrix}, \quad (12)$$

где $\gamma_i = J_{i-1,i} \mathbf{s}_{i-1} \cdot \mathbf{s}_i$.

Чтобы в 1D спин-цепочке спины находились в состояниях локального минимума энергии необходимо, чтобы все диагональные миноры матрицы (12) были положительными. Используя тождество Шура к матрице (12), можно привести ее к диагональному виду, а определитель, соответственно, можно факторизовать:

$$\det(M_{i,j}) = r_1 \cdot r_2 \cdots r_N = \prod_{k=1}^N r_k > 0, \quad (13)$$

что эквивалентно следующим условиям:

$$\begin{aligned} r_k > 0, \quad k = \overline{1, N}, \quad r_1 = \gamma_1 + \gamma_2, \\ r_k = \gamma_k + \gamma_{k+1} - \gamma_k^2 r_{k-1}^{-1}, \quad r_0^{-1} = 0. \end{aligned} \quad (14)$$

Таким образом, с помощью решения (11) и с учетом условий (8) и (14), мы можем построить устойчивые спиновые цепочки, шаг за шагом, методом их «выращивания». Отметим, что условие (8) учитывает влияние температуры среды на образование спин-цепочки.

4. Неупорядоченная спин-цепочка как ветвь поддерева Фибоначи

Решения (11), удовлетворяющие неравенствам (14) в зависимости от знака параметра

$$\delta_i = \gamma_{i+1} - r_i = \frac{\gamma_i \delta_{i-1}}{\gamma_i - \delta_{i-1}},$$

где $\delta_0^{-1} = 0$, могут быть двух типов:

1. Пусть корень в (9) положительный; $\sqrt{J_{i,i+1}^2 - J_{i-1,i}^2 |\mathbf{s}_{i-1} \times \mathbf{s}_i|^2} > \delta_i$. Тогда возможны два случая; а) $\sqrt{\dots} > \delta_i$ при $\delta_i \geq 0$, и, соответственно, б) $\sqrt{\dots} > \delta_i$ при $\delta_i < 0$. В случае а) для константы обмена мы имеем условие $|J_{i,i+1}| \geq \sqrt{\delta_i^2 + J_{i-1,i}^2 |\mathbf{s}_{i-1} \times \mathbf{s}_i|^2}$, в то время как в случае б) это условие имеет следующий вид $|J_{i,i+1}| > |J_{i-1,i} \mathbf{s}_{i-1} \times \mathbf{s}_i|$. Исходя из этого анализа можно заключать, что в рассматриваемом случае есть только одно решение, которое мы обозначим через $\mathbf{s}_{i+1}^+$ (ниже будет называться царица-queen).
2. Когда же в решении (9) корень имеет отрицательное значение, т.е. $-\sqrt{J_{i,i+1}^2 - J_{i-1,i}^2 |\mathbf{s}_{i-1} \times \mathbf{s}_i|^2} > \delta_i$, тогда, чтобы существовало хоть одно решение, параметр δ_i должен быть отрицательным $\delta_i < 0$. Аналогичные рассуждения для константы обмен очевидно приводят к следующим условиям; $|J_{i,i+1}| \leq \sqrt{\delta_i^2 + J_{i-1,i}^2 |\mathbf{s}_{i-1} \times \mathbf{s}_i|^2}$ и $|J_{i,i+1}| \geq |J_{i-1,i} \mathbf{s}_{i-1} \times \mathbf{s}_i|$, при $\delta_i < 0$. В этом случае кроме решения $\mathbf{s}_{i+1}^+$, возможно так же решение $\mathbf{s}_{i+1}^-$ (ниже будет называться тунец-drone).

Важно отметить, что решения «+» и «-» характеризуются следующим образом: если предыдущим решением является царица, т.е. «+» тогда на следующем шаге встречается два разных решения «+» и «-» тогда как после решения тунейдец s_{i+1}^- встречается только одно решение – царица, т.е. «+». В частности, при расчете незамкнутой на себя спиновой цепочки предполагается, что заданы начальные данные или ориентации первых двух спинов и константа связи между ними. Отметим, что предполагается, что два спина, первый и последний, находятся в состоянии локального минимума на основании других физических принципов (назовем это краевым эффектом). Учитывая вышесказанное, мы можем провести последовательные расчеты стабильных спиновых цепочек. Как было доказано в работе [23], даже в простейшем одномерном случае задача спинового стекла Гейзенберга с точки зрения вычисления является NP-сложной задачей. В

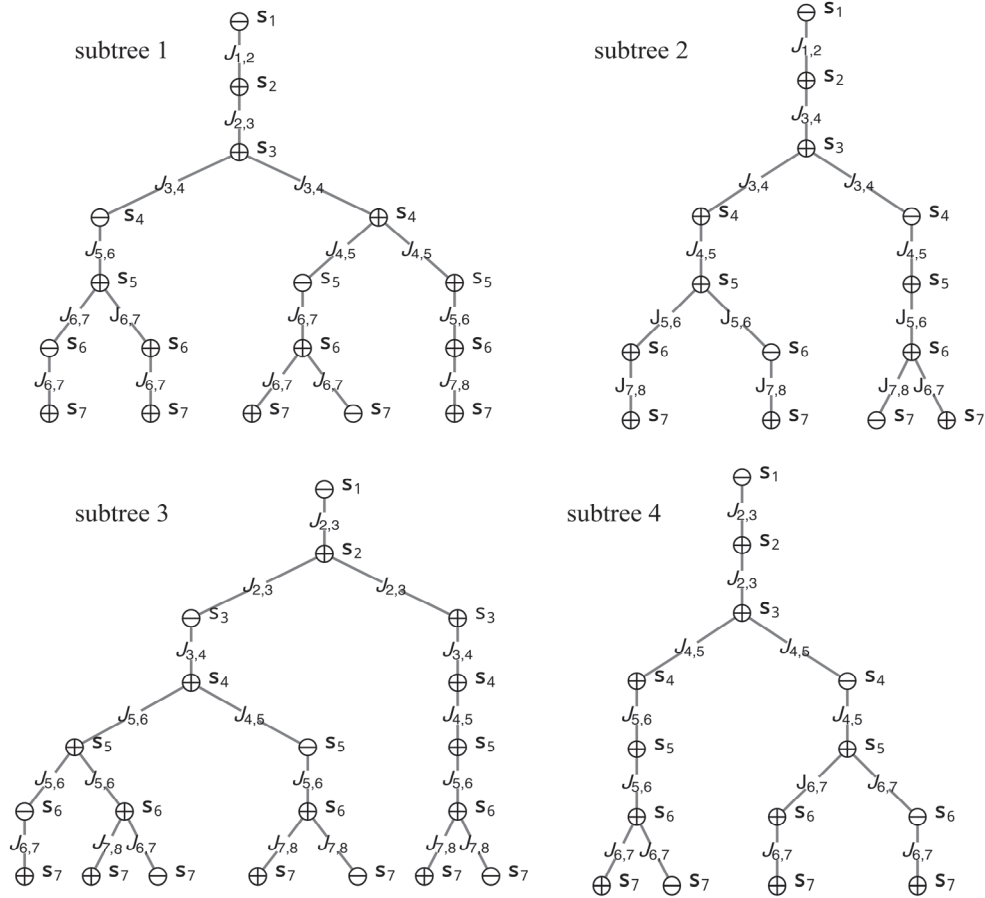


Рис.3. Четыре различных поддеревьев Фибоначчи (графы) – $G_i(n)$, где $i = 1, 4$, каждое из которых имеет высоту $n = 7$. Все эти графы получены из одних начальных данных в результате шести независимых расчетов. Значения s_i и $J_{i,j}$ на разных графах в зависимости от n могут быть совершенно разными.

частности, как показывают численные расчеты, из одних и тех же начальных данных (из одного «корня»), при вычислении каждый раз получается не одна спиновая цепочка, а новое поддерево Фибоначчи или граф $G_i(n)$, где $i=1, \dots, N=\overline{1, N}$ обозначает номер графа, а « n » соответственно, его высоту (см. рис.3). Следовательно, когда мы говорим об ансамбле спиновых цепочек, мы подразумеваем множество графов $\{G(n)\}_N$. Математическое ожидание ветвлений графа $G_i(n)$ в зависимости от его высоты n легко можно рассчитать по следующей формулам:

$$M(n) = M(n-1) \lfloor 2\zeta_n \rfloor = \lfloor 2^{m(n)} \rfloor, \quad \eta(n) = 1 + n^{-1} \sum_{k=1}^n \log_2(\zeta_k) > 0, \quad (15)$$

где $M(n-1)$ – число ветвлений графа на шаге $(n-1)$, а $\lfloor \cdot \rfloor$ обозначает целую часть величины, ζ_n – случайный коэффициент из интервала $[0.5, 1]$. Напомним, что для упрощения формулы (17) опущено обозначение номера поддерева « i ». Отметим, что каждый граф $G_i(n) \cong \{g_j(n), j \in M\}$, где $g_j(n)$ является случайной строкой с длиной « n » и характеризуется колмогоровской сложностью [39–40]. Подчеркнем, что каждый граф $G_i(n)$, в зависимости от n , может быть интерпретирован как дискретно развивающийся случайный процесс. Математическое ожидание случайной величины f , характеризующей ансамбль $\{G(n)\}_N$, можно рассчитать по формуле:

$$E[f] = \bar{f} = \sum_{i=1}^N \omega_i \bar{f}_i / \sum_{i=1}^N \omega_i, \quad \omega_i = N_i / \bar{N}, \quad (16)$$

где N_i и $\bar{N}$ обозначают количество строк графа $G_i(n)$ и общее количество строк в ансамбле, соответственно. В (16) параметр $\bar{f}_i = \sum_{G_i(n)} f$ обозначает математическое ожидание случайной величины f на графе $G_i(n)$, которая вычисляется аналогично $E[f]$. Напомним, что выражение (16) является основой для вычисления статистических распределений разных параметров ансамбля.

5. Численный эксперимент «идеального ансамбля» 1D спин-цепочек

Мы будем рассматривать ансамбль невзаимодействующих спин цепей или «идеальный ансамбль». Для моделирования задачи нам нужно задать начальные условия в виде большого количества независимых спиновых конфигураций, что эквивалентно большому набору случайно выбранных начальных данных (корней), т.е. первых двух спинов и соответствующих констант связи между ними

$$\hat{\Omega} = \{\Omega_1^l = (\mathbf{s}_1^l, \mathbf{s}_2^l; J_{1,2})_1, \dots, \Omega_N^l = (\mathbf{s}_1^l, \mathbf{s}_2^l; J_{1,2})_N\}.$$

В работе [23] для модели спинового стекла Гейзенберга подробно исследованы условия, при которых вычислительная NP сложная задача с заданной точностью алгоритмически редуцируется к P задаче. Как показано, для такой редукции основным условием является статистическое равновесие в ансамбле, которое для свободного от внешнего воздействия ансамбля эквивалентно изотропному и однородному распределению проекций спинов в 3D пространстве. Как показывают расчеты по формулам (11), с учетом неравенств (14), уже для ансамбля, состоящего из 50 и более спин-цепей, такое равновесие имеет место. На рис.4 показаны картинки, на которых отчетливо видны изотропность и однородность распределений проекций спинов в 3D пространстве, что эквивалентно установлению статистического равновесия в ансамбле при температуре $T = 0$. Как следует из вычислений, это равновесие практически не нарушается с увеличением температуры среды (см. условие (8)), точнее, при увеличении температуры плотность точек уменьшается, но изотропность распределений практически не нарушается еще очень долго. В данной работе выведены все необходимые формулы для создания высокопроизводительного алгоритма, позволяющего осуществить все необходимые вычисления, характеризующие статистическую систему магнитных атомов, включая оценку величины параметра $l = \langle \mathbf{s}_i \rangle_T^2$ – степени неупорядоченности системы, где $\langle \dots \rangle_T$ обозначает термодинамическое усреднение, а $\langle \dots \rangle$ – усреднение по расположению магнитных атомов [41]. Напомним, что под системой магнитных атомов мы подразумеваем ферромагниты, антиферромагниты, а также отличный от них широкий класс аморфных материалов, в которых атомы обладают магнитными моментами (жесткими

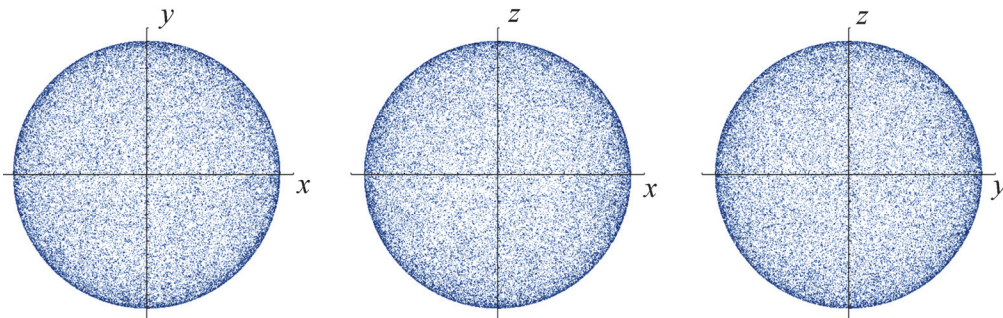


Рис.4. На рисунках точками обозначены вершины проекций 3D спинов ансамбля при температуре $T = 0$, где расстояние каждой точки до центра круга обозначает величину соответствующей проекции. Как видно, в ансамбле состоящего из 2×10^3 спин-цепей длиной 30 точки распределены почти равномерно и изотропно.

диполями), и которые в ряде условий играют ключевую роль в формировании тех или иных нетривиальных свойств статистической системы. Предлагаемый подход универсален и после уточнения дополнительного условия, специфичного для среды, пригоден для изучения перечисленных материалов.

6. Заключение

В работе развит новый подход для исследования классической многокомпонентной неупорядоченной 3D спиновой системы с кубической решеткой, учитывающий температуру среды. Показана возможность сведения 3D задачи к 1D задаче пространственных спинов со случайным окружением. Получено рекуррентное уравнение (9) и условия (9а), позволяющие минимизировать Гамильтониан во всех узлах 1D решетки, за исключением первого и последнего. Развитое представление дает возможность создавать новые высокопроизводительные Р алгоритмы для моделирования широкого класса статистических систем типа НСС из первых принципов классической механики. Последнее создает необходимые условия для построения всех статистических параметров и соответствующих распределений системы без использования стандартного представления СС в рамках гипотезы Гиббса.

Для демонстрации эффективности и точности развитого подхода подробно исследован простейший случай 1D спинового стекла Гейзенберга без окружения (идеальный ансамбль) с использованием решения (11) и условия Сильвестра (14). Показано, что из каждого набора начальных данных (из одного корня) при каждом вычислении вырастает новое поддерево Фибоначи рис.3, у которого отдельные ветки-колмогоровские строки описывают стабильные 1D спиновые цепи. Как показывают вычисления, условие (8), отражающее

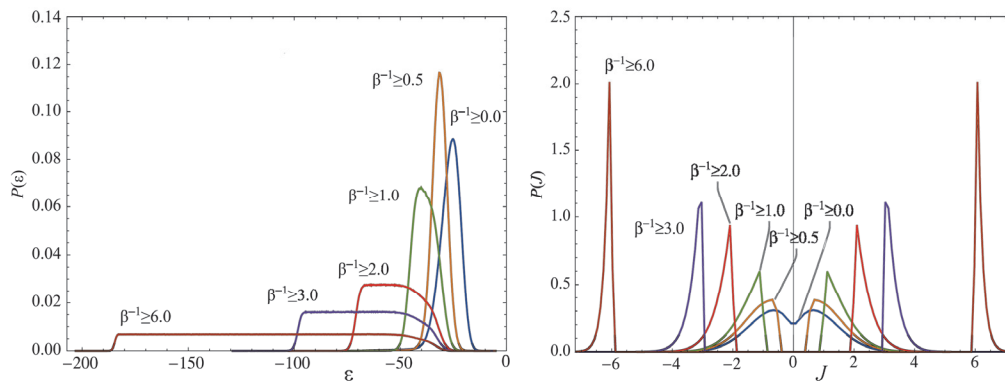


Рис.5. На левой картинке кривые распределения энергий в ансамбле при разных температурах. На правой картинке – распределения констант спин-спиновой связи для разных значений температуры среды.

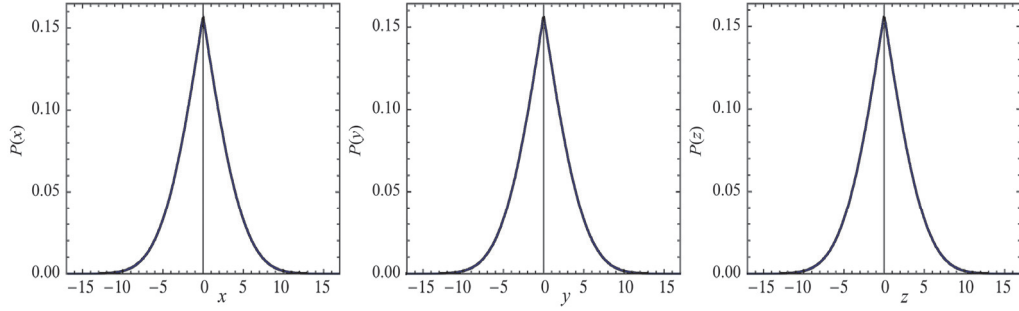


Рис.6. Распределения поляризации в ансамбле спиновых цепочек по разным осям. Как и следовало ожидать, они симметричны и от температуры практически не зависят.

температуру среды, влияет на формирование поддерева Фибоначчи и, соответственно, на характеризующее статистический ансамбль множество $\{G(n)\}_N$. Зависимость распределений ряда основных параметров ансамбля представлена на рисунках 4–6. В работе подробно исследован параметр неупорядоченности спиновой системы в зависимости от температуры (см. рис.7).

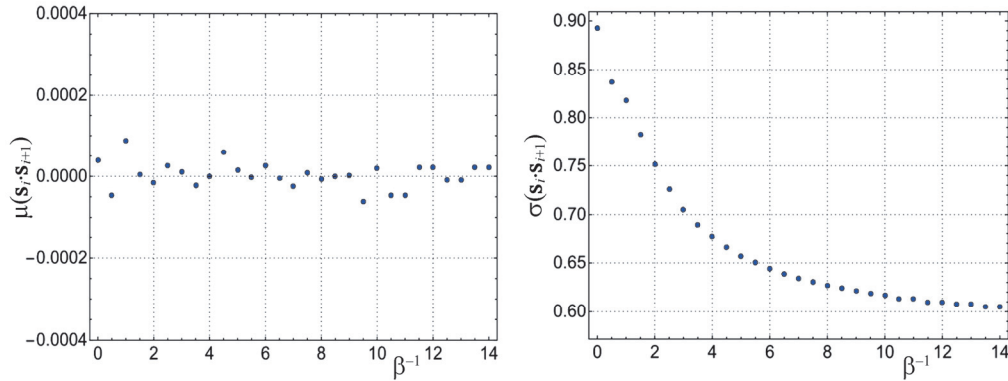


Рис.7. Слева на графике показано поведение среднего значения угла между спинами ближайших соседей $\mu(s_i \cdot s_{i+1})$ в зависимости от температуры. Как видно из распределения точек, оно практически не зависит от температуры. На правом графике показано поведение параметра неупорядоченности системы от температуры. Видно, что с уменьшением температуры среды величина параметра $\sigma(s_i \cdot s_{i+1}) = l = \langle s_i^2 \rangle_T$ растет, т. е., система упорядочивается.

Отметим, что идея построения статистической механики из первых принципов классической механики базируется на алгоритмическом подходе, целью которого является вычисление статистических параметров системы и их распределений без дополнительных, и часто неочевидных, аксиом. Напомним, что одной из основополагающих аксиом стандартной СМ является равновероятность

статистических состояний, которая отсутствует в логической схеме построений развитого представления. Другими словами, основываясь на данной работе и предыдущих исследованиях авторов (см. [23]), очевидно, что в пределе статистического равновесия можно построить все параметры и статистические распределения неупорядоченной спиновой системы из первых принципов классической механики без использования стандартного представления СС.

В конце перечислим ряд основных достижений развитого подхода:

- Подход позволяет обойти все перечисленные выше трудности стандартного представления статистической механики и построить его основной объект – СС в виде 1D интеграла по распределению энергии спиновых цепей, используя вычисления из первых принципов КМ [23].
- Разработанное представление в пределе статистического равновесия является асимптотически точным и поэтому может использоваться также для исследования статистических ансамблей, далеких от термодинамического равновесия или где температура не определена.
- Идеи, лежащие в основе разработанного подхода, являются достаточно универсальными и позволяют обобщить рассматриваемую модель и адаптировать ее для изучения более сложных и реалистичных статистических систем, с учетом их многомерности и влияния внешних полей.

ЛИТЕРАТУРА

1. **S. Popescu, A.J. Short, A. Winter.** Nature Physics, **2**, 754 (2006).
2. **K. Binder, A. Young.** Rev. Mod. Phys., **58**, 801 (1986).
3. **M. Mezard, G. Parisi, M. Virasoro.** Spin Glass Theory and Beyond, World Scientific, 1987.
4. **A. Young.** Spin Glasses and Random Fields, World Scientific, 1998.
5. **R. Fisch, A. Harris.** Phys. Rev. Let., **47**, 620 (1981).
6. **C. Ancona-Torres, et al.** Phys. Rev. Let., **101**(5), 057201 (2008).
7. **A. Bovier.** Statistical Mechanics of Disordered Systems: A Mathematical Perspective, Cambridge Series in Statistical and Probabilistic Mathematics, Cambridge: Cambridge University Press, 2006.
8. **Y. Tu, J. Tersoff, G. Grinstein.** Phys. Rev. Let., **81**, 2490 (1998).
9. **K. Chary, G. Govil.** NMR in Biological Systems: From Molecules to Human, Springer, 2008.
10. **E. Baake, M. Baake, H. Wagner.** Phys. Rev. Let., **78**, 559 (1997).
11. **A.S. Gevorgyan, H.G. Abajyan.** Physics of Particles and Nuclei Letters, **9**(6-7), 530 (2012).
12. **F. Liers, et al.** Phys. Rev. B, **68**, 094406 (2003).
13. **J.C. Angles, et al.** Mathl. Comput. Modeling, **26**(8-10), 1 (1997).

14. **C. Papadimitriou.** Computational Complexity (1st Ed.). Addison-Wesley. Section 2.7, 1993.
15. **H.R. Lewis, C. Papadimitriou.** Elements of the Theory of Computation (1st Ed.). Prentice-Hall. Section 4.6, 1981.
16. **N. Metropolis et al.** J. Chem. Phys., **21**(6), 1087 (1953).
17. **B. Hayes.** Am. Scient., **85**, 108 (1997).
18. **R. Monasson, et al.** Nature (London), **400**, 133 (1999).
19. **O. Dubois, R. Monasson, B. Selman, R. Zecchina.** Theoretical Computer Science, **265**, 3 (2001).
20. **M.J. Alava et al.** In Phase Transitions and Critical Phenomena, ed. by C. Domb, J. Lebowitz, New York: Academic Press, 2001.
21. **A.K. Hartmann, H. Rieger.** Optimization Algorithms in Physics, Berlin: While-VCH, 2001.
22. **C.J. Thompson.** Phase Transitions and Critical Phenomena, Academic Press, **1**, 177-226 (1972).
23. **A.S. Gevorkyan, V.V. Sahakyan,** Phys. Atomic Nuclei, **80**(2), 366 (2017).
24. **E. Dagotto, A. Moreo,** Phys. Rev. Lett., **63**, 2148 (1989).
25. **E. Manousakis.** Rev. Mod. Phys., **63**, 1 (1991).
26. **H. Rosner, R.R.P. Singh, W.H. Zheng, J. Oitmaa, W.E. Pickett.** Phys. Rev. B, **67**, 014416 (2003).
27. **J. Sirker, Z. Weihong, O.P. Sushkov, J. Oitmaa.** Phys. Rev. B, **73**, 184420 (2006).
28. **H.H. Wen, G. Mu, L. Fang, H. Yang, X. Zhu.** Europhys. Lett., **82**, 17009 (2008).
29. **M. Rotter, M. Tegel, D. Johrendt.** Phys. Rev. Lett., **101**, 107006 (2008).
30. **R. Schmidt, J. Schulenburg, J. Richter, D.D. Betts.** Phys. Rev. B, **66**, 224406 (2002).
31. **J. Oitmaa, W. Zheng.** Phys. Rev. B, **69**, 064416 (2004).
32. **K. Majumdar, T. Datta.** J. Phys.: Condens. Matter, **21**, 406004 (2009).
33. **M.R. Pantic, D.V. Kapor, S.M. Radosevic, P.M. Mali.** Sol. St. Comm., **182**, 55 (2014).
34. **J. Richter, P. Muller, A. Lohmann, H.-J. Schmidt.** Phys. Proc., **75**, 813 (2015).
35. **P. Muller, J. Richter, A. Hauser, D. Ihle.** Eur. Phys. J. B, **88**, 159 (2015).
36. **D.J.J. Farnell et al.** Phys. Rev. B, **93**, 235123 (2016); **B.-Z. Mi.** Sol. St. Comm., **239**, 20 (2016).
37. **B.-Z. Mi.** Sol. St. Comm., **251**, 79 (2017).
38. **E.T. Whittaker.** A Treatise on the Analytical Dynamicals of Particles and Rigid Bodies. With an Introduction to the Problem of Three Bodies, Cambridge University Press, 1988.
39. **A.N. Kolmogorov.** IEEE Transactions on Information Theory, **14**(5), 662 (1968).
40. **M. Li, P. Vitányi.** An introduction to Kolmogorov complexity and its applications, New York: Springer-Verlag, 1997.
41. **И.Я. Коренблит, Е.Ф. Шендер,** Спиновые стекла и неэргодичность, УФН, **157**(2), 267 (1989).

ԴԱՍԱԿԱՆ ՄԵԽԱՆԻԿԱՅԻ ԱՌԱՋԻՆ ՍԿԶԲՈՒՆՔՆԵՐԸ ԵՎ ՎԻՃԱԿԱԳՐԱԿԱՆ
ՖԻԶԻԿԱՅԻ ՀԻՄՆԱԴՐՈՒՅԹՆԵՐԸ ԶԿԱՐԳԱՎՈՐՎԱԾ ՍՊԻՆԱՅԻՆ
ՀԱՄԱԿԱՐԳԻ ՕՐԻՆԱԿՈՎ

Ս.Ս. ԳԵՎՈՐԳՅԱՆ, Վ.Վ. ՍԱՀԱԿՅԱՆ

Մենք ուսումնասիրում ենք բազմաբաղադրիչ չկարգավորված դասական 3D սպինային համակարգը՝ հաշվի առնելով միջավայրի ջերմաստիճանը, մոտակա հարևաններ մոդելի շրջանակներում: Վերջինս թույլ է տալիս խորանարդ համաչափությամբ 3D խնդիրը հանգեցնել պատահական շրջակայքով Հայզենբերգի 1D սպինային ապակու խնդրին: Օգտագործելով Համիլթոնի շարժման հավասարումները, ստացված է հետադարձային հավասարում, որը կապում է 1D ցանցի հաջորդական հանգույցներում երեք սպինները՝ հաշվի առնելով պատահական շրջակայքի ազդեցությունը: Այս հավասարումը, ցանցի հանգույցներում տեղային նվազագույն էներգիայի որոշման պայմանների հետ միասին, թույլ է տալիս հանգույց առ հանգույց կառուցել կայուն սպինային շղթաներ և, համապատասխանաբար, դասական մեխանիկայի առաջին սկզբունքներից ելնելով հաշվարկել վիճակագրական անսամբլի բոլոր պարամետրերը՝ առանց որևէ լրացուցիչ ենթադրություններ օգտագործելու, մասնավորապես, վիճակագրական մեխանիկայի հիմնական կանխավարկածի – վիճակագրական վիճակների հավասարահավանականության: Հեյզենբերգի 1D սպինային ապակու մոդելի օրինակի վրա, մանրամասն ուսումնասիրված են նոր մոտեցման առանձնահատկությունները և համակարգի վիճակագրական մեխանիկան կառուցված է առանց օգտագործելու վիճակագրական գումարի սովորական պատկերացումը:

FIRST PRINCIPLES OF THE CLASSICAL MECHANICS AND
THE FOUNDATIONS OF STATISTICAL MECHANICS
ON THE EXAMPLE OF A DISORDERED SPIN SYSTEM

A.S. GEVORKYAN, V.V. SAHAKYAN

We study the classical multicomponent disordered 3D spin system taking into account the temperature of the medium in the framework of the model of nearest neighbors. The latter allows the 3D problem with a cubic lattice to reduce to the 1D Heisenberg spin glass problem with a random environment. Using the Hamilton equations of motion, a recurrent equation is obtained that connects three spins in successive nodes of 1D lattice, taking into account the influence of a random environment. This equation, together with the corresponding conditions of a local minimum energy in nodes, allows to construct node-by-node a stable spin chains and, accordingly, to calculate all parameters of a statistical ensemble from the first principles of classical mechanics, without using any additional assumptions, in particular, the main axiom of statistical mechanics – the equiprobability of statistical states. Using the example of 1D Heisenberg spin glass model, the features of the new approach are studied in detail and the statistical mechanics of the system are constructed without using the standard representation of the partition function.

ИЗУЧЕНИЕ ФОТООБРАЗОВАНИЯ РАДИОИЗОТОПОВ КОБАЛЬТА ИЗ ЯДЕР МЕДИ

А.Ю. АЛЕКСАНИЯН¹, С.М. АМИРХАНИЯН¹, А. БАЛАБЕКЯН²,
Н.А. ДЕМЕХИНА¹, Г.Р. ГУЛКАНИЯН¹, Т.В. КОТАНДЖЯН^{1*},
В. МАНГАСАРЯН², В.С. ПОГОСОВ¹,
Л.А. ПОГОСЯН¹, С. ФАЛТАДЖАНИЯН²

¹Национальная научная лаборатория им. А.И. Алиханяна, Ереван, Армения

²Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

*e-mail: tigran.kotanjyan@mail.yerphi.am

(Поступила в редакцию 14 ноября 2019 г.)

На линейном ускорителе электронов ННЛА (ЕрФИ) исследован процесс фотообразования ряда радиоизотопов из ядер меди при граничных энергиях тормозных фотонов $E_{\gamma}^{\max} = 21, 30$ и 40 МэВ. Измерены выходы ^{61}Co , ^{60}Co , ^{58}Co , ^{57}Co по отношению к выходу радиоизотопа ^{61}Cu , которые при $E_{\gamma}^{\max} = 40$ МэВ равны, соответственно, $(2.6 \pm 0.3) \times 10^{-2}$, $(2.67 \pm 0.04) \times 10^{-2}$, $(9.3 \pm 0.6) \times 10^{-2}$ и $(0.76 \pm 0.04) \times 10^{-2}$. Показано, что предсказания модели TALYS, а также заложенной в программный пакет GEANT4 модели находятся в противоречии (особенно в случае кода GEANT4) с измеренными относительными выходами. Наблюдена монотонно убывающая энергетическая зависимость отношения взвешенных по спектру тормозных фотонов сечений реакций $^{65}\text{Cu}(\gamma, \alpha)^{61}\text{Co}$ и $^{63}\text{Cu}(\gamma, 2n)^{61}\text{Cu}$, подобная измеренной ранее энергетической зависимости отношения сечений электроядерных реакций $^{65}\text{Cu}(e, e' + \alpha)^{61}\text{Co}$ и $^{63}\text{Cu}(e, e' + 2n)^{61}\text{Cu}$. Измерено также отношение выходов ^{61}Co и ^{64}Cu , которое при $E_{\gamma}^{\max} = 21, 30$ и 40 МэВ, составило, соответственно, $(2.6 \pm 0.2) \times 10^{-3}$, $(3.8 \pm 0.6) \times 10^{-3}$ и $(3.2 \pm 0.4) \times 10^{-3}$; полученное при $E_{\gamma}^{\max} = 21$ МэВ значение $(2.6 \pm 0.2) \times 10^{-3}$ не противоречит общей тенденции зависимости этого отношения от атомного номера Z , измеренного ранее при $E_{\gamma}^{\max} = 23$ МэВ для более тяжелых ядер в диапазоне от $Z = 47$ до $Z = 82$.

1. Введение

Знание сечений фотоядерных реакций образования нейтронов, протонов и α -частиц при энергиях фотонов E_{γ} до несколько десятков МэВ необходимо для применения в различных областях фундаментальной и прикладной физики. Пополнение банка существующих экспериментальных данных [1,2,3,4,5], необходимых для усовершенствования теоретических моделей, предназначенных для описания этих реакций, продолжается и в настоящее время. Сравнительно мало изучены, как экспериментально, так и теоретически, процессы фотообразования

α -частиц. Их описание по сравнению с фотообразованием нуклонов осложнено тем, что в настоящее время отсутствуют достоверные оценки вероятности предформирования α -частицы в ядерной материи. Согласно существующим представлениям, фотообразование α -частиц может происходить по следующим основным механизмам: прямое выбивание сформированного в ядре α -кластера; вылет из возбужденного ядра α -кластера, сформировавшегося на предравновесной стадии реакции; распад на α -частицу достигшего теплового равновесия компаунд-ядра (см., напр., [6]). Для проверки и уточнения используемых в теоретических моделях подходов относительно вкладов указанных механизмов, их зависимости от энергии налетающего фотона, от массового числа A и атомного номера Z ядра-мишени, необходимо дальнейшее накопление экспериментальных данных по (γ, α) реакциям, особенно на средне-легких ядрах с $A < 100$, для которых имеющиеся данные весьма скудны и плохо согласуются между собой (см. [7,8,9] и приведенные в них ссылки). Настоящая работа посвящена изучению фотообразования α -частиц (без сопровождения или с сопровождением одного или более нейтронов) на ядрах меди с образованием ряда радиоизотопов кобальта. Облучение медных мишеней тормозными фотонами было произведено на линейном ускорителе ННЛА [10] при энергиях электронов $E_e = 21, 30$ и 40 МэВ. Гамма-спектроскопический анализ облученных мишеней проводился, в основном, при помощи низкофоновой экспериментальной установки в подземной лаборатории ННЛА [11].

Методика эксперимента описана в Разделе 2. Результаты эксперимента и их сравнение с предсказаниями моделей TALYS и GEANT4 представлены в Разделе 3. Основные выводы представлены в Заключение.

2. Методика эксперимента

2.1. Установка

Эксперимент проводился на пучке линейного ускорителя электронов при начальных энергиях $E_e = 21, 30$ и 40 МэВ (с разбросом по энергии около 2–3%). Выведенный из ускорителя пучок электронов через отклоняющий магнит и два цилиндрических коллиматора попадал на стопку мишеней (см. Рис.1). Первый коллиматор с внутренним диаметром 14 мм и длиной 32 мм (на рисунке не показан) был изготовлен из стали, а второй – с внутренним диаметром 10 мм и длиной 17 мм – из алюминия. На выходе из первого коллиматора средний ток электронов составлял примерно 1 мкА. Непосредственно после второго коллиматора были расположены вольфрамовый радиатор толщиной 2 мм и диаметром 12 мм и алюминиевый поглотитель толщиной 20 мм и диаметром 12 мм, после чего следовали три мишени диаметром 12 мм: две мишени из натуральной меди, и расположенная между ними мишень из кристалла BGO ($\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$) толщиной

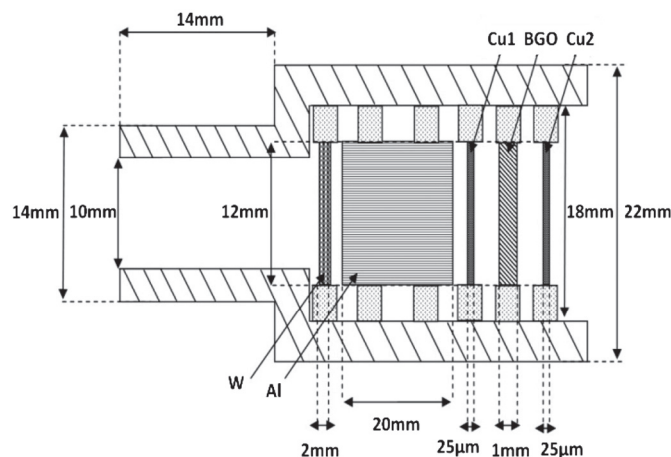


Рис.1. Схематическое изображение облучаемой установки. На рисунке масштабы по вертикали и горизонтали разные.

1 мм, предназначенная для изучения фотонейтронных реакций на ядре висмута (см. [13]). Толщина медных мишеней при $E_e = 21, 30$ и 40 МэВ составляла, соответственно, 60, 25 и 50 мкм. Содержание примесей в медных мишенях, определенное при помощи рентгенофлуоресцентного анализа, оказалось менее 1%.

Тормозной спектр фотонов вычислялся при помощи пакета GEANT4 [14]. Кроме основного вклада в спектр от вольфрамового радиатора, учитывались также тормозные фотоны, образованные в стальном и алюминиевом коллиматорах, алюминиевом замедлителе, в первой медной и в BGO мишенях. В качестве иллюстрации на Рис.2 представлены спектры тормозных фотонов, образованных в вольфрамовом радиаторе и в стальном и алюминиевом коллиматорах и падающих на первую медную мишень при $E_e = 30$ МэВ. В расчетах учитывался энергетический разброс пучка электронов.

2.2. Измерения

Гамма-спектроскопические измерения проводились, в основном, с помощью низкофоновой установки на основе сверхчистого германиевого детектора HPGe GCD-20180, установленного в подземной лаборатории ННЛА. Лаборатория расположена в Аванском соляном руднике на глубине 650 метров водного эквивалента. Детектор окружен защитой из радиационно-чистых блоков свинца и меди для подавления влияния внешнего фона. Для предотвращения попадания радона установка окружалась полиэтиленовым мешком, который продувался азотом. В случае необходимости подавления фона, вызванного мюонами космического излучения, использовался также вето-детектор из пластического сцинтиллятора, расположенный над установкой. Чувствительный объем кристалла германия составляет 101.2 см^3 .

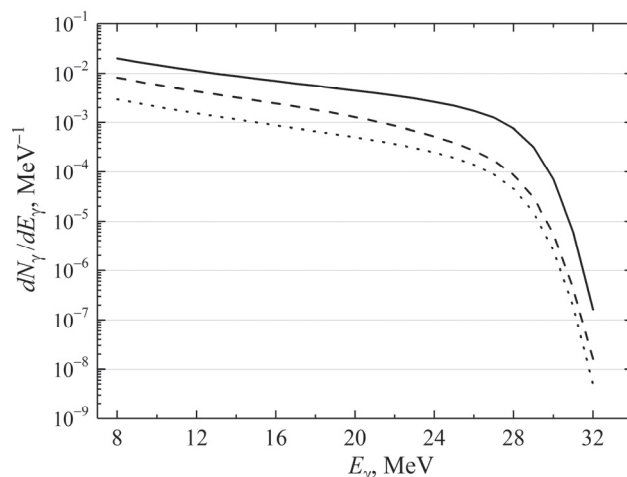


Рис.2. Рассчитанные по программе GEANT4 спектры падающих на первую медную мишень тормозных фотонов на один первичный электрон, генерируемых на вольфрамовом радиаторе (сплошная кривая), на алюминиевом коллиматоре (пунктирная кривая) и на стальном коллиматоре (точечная кривая) при $E_{\gamma}^{\max} = 30$ МэВ.

Подробное описание подземной гамма-спектроскопической установки и методики ее калибровки представлено в работе [13]. Эффективность регистрации γ -квантов измерялась с использованием стандартных калибровочных источников ^{60}Co , ^{137}Cs , ^{226}Ra , ^{232}Th , а также определялась моделированием с помощью пакета GEANT4 (версия 10.4) [14]. Обработка γ -спектров проводилась по программе LSRM SpectraLine 1.5.5182. В случае значительного наложения двух или более спектральных линий применялась специально созданная программа, в которой подгонка спектра осуществлялась суперпозицией двух или нескольких гауссовых функций и монотонной фоновой функции. При определении площади фотопика полного поглощения учитывалась поправка, связанная с истинным совпадением разных линий. Эта поправка при измерениях на расстоянии 105 мм от источника до крышки германиевого кристалла не превышала нескольких процентов, а при измерениях на расстоянии 1 мм она доходила, например для фотопиков изотопа ^{60}Co , до 17%. При расположении источника на расстояниях 1 мм и 105 мм, эффективность регистрации для $E_{\gamma} = 1.333$ МэВ составила, соответственно, 2.1% и 0.12%, а энергетическое разрешение при этой энергии - примерно 1.8 кэВ.

В таблице 1 приведены кинематические пороги и кулоновские барьеры [15] исследуемых нами фотоядерных реакций, а также периоды полураспада образованных радиоизотопов.

Измерения гамма-спектров сравнительно короткоживущих продуктов (^{61}Co , ^{61}Cu , ^{64}Cu) проводились в наземном помещении в течение нескольких часов

Табл.1. Кинематические пороги (E_{th}) и кулоновские барьеры (B_c) исследуемых реакций и периоды полураспада ($T_{1/2}$) образованных радиоизотопов

Реакции	E_{th} , MeV	B_c , MeV	$T_{1/2}$
$^{65}\text{Cu}(\gamma, n) ^{64}\text{Cu}$	9.9	–	12.701 h
$^{63}\text{Cu}(\gamma, 2n) ^{61}\text{Cu}$	19.7	–	3.339 h
$^{65}\text{Cu}(\gamma, \alpha) ^{61}\text{Co}$	6.8	6.4	1.649 h
$^{63}\text{Cu}(\gamma, 2p) ^{61}\text{Co}$	17.3	3.4	1.649 h
$^{63}\text{Cu}(\gamma, ^3\text{He}) ^{60}\text{Co}$	18.9	6.7	1925.28 d
$^{65}\text{Cu}(\gamma, \alpha n) ^{60}\text{Co}$	16.1	6.5	1925.28 d
$^{63}\text{Cu}(\gamma, \alpha n) ^{58}\text{Co}$	16.2	6.5	70.86 d
$^{63}\text{Cu}(\gamma, \alpha 2n) ^{57}\text{Co}$	24.8	6.5	271.74 d

через полчаса после облучения мишеней, а для долгоживущих изотопов – в течение более длительного времени, до нескольких месяцев в подземной лаборатории. В наземных измерениях использовалась установка на базе сверхчистого германиевого детектора (HPGe) Ortec GEM15P4-70. При наземных измерениях облученные мишени располагались на расстоянии 105 мм от крышки германиевого кристалла, а в подземных измерениях – на расстояниях 1мм и 105 мм. Для определения выходов приведенных выше радионуклидов были использованы

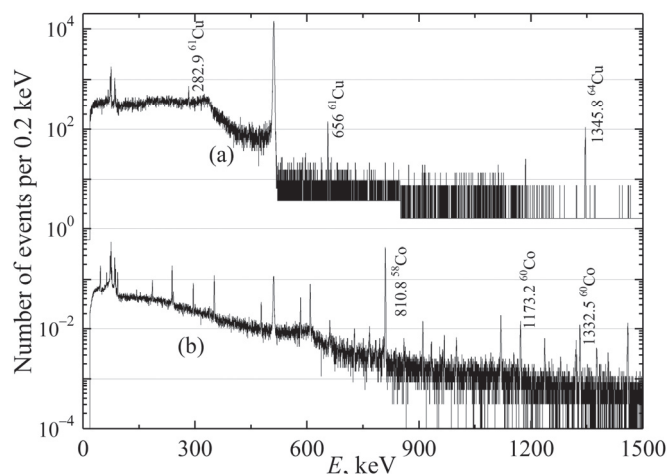


Рис.3. Приведённые к единому времени измерения (15 минут) γ -спектры от медной мишени, измеренные спустя, соответственно, (a) 1 день, и (b) 100 дней после ее облучения при $E_{\gamma}^{\max} = 30$ МэВ.

следующие гамма-линии, энергии (кэВ) и относительные интенсивности (%) которых составляют [16] для ^{61}Cu : 67.4 (4.2%), 283.0 (12.2%), 656.0 (10.8%), 908.6 (1.1%), 1185.2 (3.7%); для ^{64}Cu : 1345.8 (0.475%); для ^{57}Co : 122.1 (85.6%), 136.5 (10.7%); для ^{58}Co : 810.8 (99.5%); для ^{60}Co : 1173.2 (99.82%), 1332.5 (99.98%); для ^{61}Co : 67.4 (84.7%), 908.6 (3.6%). Следует подчеркнуть, что обе линии ^{61}Co содержат значительную или доминирующую примесь от тех же линий изотопа ^{61}Cu , вклад которого определялся по другим его линиям (см. выше) и вычитывался из площади фотопиков при энергиях 67.4 и 908.6 кэВ.

В качестве примера на Рис.3 представлены приведённые к единому времени измерения (15 минут) γ -спектры от медной мишени, измеренные в подземной лаборатории спустя, соответственно, (а) 1 день, и (б) 110 дней после ее облучения тормозными фотонами при $E_{\gamma}^{\text{max}} = 30$ МэВ. На Рис.4 представлен γ -спектр от медной мишени, измеренный в подземной лаборатории в течении 90 часов, спустя 410 дней после ее облучения тормозными фотонами при $E_{\gamma}^{\text{max}} = 40$ МэВ. Видно, что фоновые условия в подземной лаборатории предоставляют возможность достоверной идентификации γ -линий исследуемых радиоизотопов.

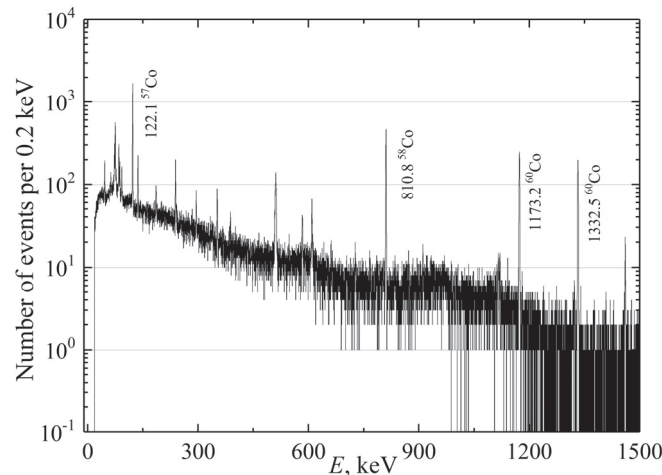


Рис.4. γ -спектр от медной мишени, измеренный в течении 90 часов спустя 410 дней после ее облучения при $E_{\gamma}^{\text{max}} = 40$ МэВ.

Идентификация образованных изотопов кобальта проводилась по характерным энергиям гамма-линий, их относительным интенсивностям I_{γ} и периоду полураспада $T_{1/2}$. На рисунке 5 приведена кривая распада изотопа ^{58}Co , образованного в результате облучения медной мишени при $E_{\gamma}^{\text{max}} = 40$ МэВ. Полученное фитированием значение периода полураспада $T_{1/2} = 71.1 \pm 1.3$ дней близко к табличному значению $T_{1/2} = 70.9$ дней. Достоверность измерений подтверждалось также тем, что значения выходов данного изотопа, полученные с использованием различных гамма-линий, в пределах ошибок измерения находились в согласии.

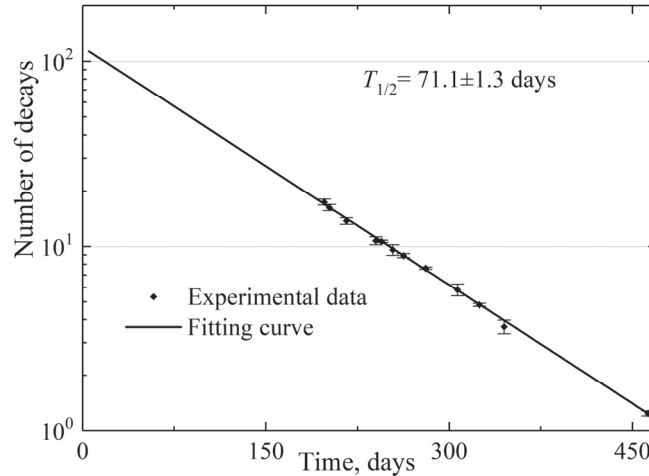


Рис.5. Кривая распада для изотопа ^{58}Co (при $E_\gamma = 810.8$ кэВ), образованного в результате облучения медной мишени при $E_\gamma^{\text{max}} = 40$ МэВ.

3. Результаты измерений

Значение площади фотопика полного поглощения для гамма-линии данного радиоизотопа, полученное в результате спектроскопического анализа, использовалось для оценки его выхода Y , который в данной работе определяется как количество ядер этого радиоизотопа, образованных в мишени за секунду её облучения тормозными фотонами. Величина Y связана с используемым иногда в литературе выходом y , нормированным на средний ток I_e первичных электронов следующим образом: $y = Y/I_e$ (см. напр. [17]). Выходы Y рассчитывались по следующей формуле:

$$Y = \frac{S \cdot (t_R / t_L) \cdot \lambda}{I_\gamma \cdot \varepsilon_\gamma \cdot (1 - e^{-\lambda t_e}) \cdot e^{-\lambda t_c} \cdot (1 - e^{-\lambda t_R})}, \quad (1)$$

где S – площадь фотопика полного поглощения, ε_γ – эффективность регистрации γ – кванта, I_γ – относительная интенсивность γ -линии, λ – постоянная распада данного радиоизотопа, t_e – время облучения, t_c – время между концом облучения и началом измерений (время остывания), t_R и t_L – реальное и живое время гамма-спектроскопического измерения.

С другой стороны, выход Y может быть представлен как $Y = I_e \cdot \nu_t \cdot \sigma_w$, где ν_t – количество ядер рассматриваемого типа на единицу площади мишени, а σ_w – взвешенное сечение, получаемое путем свертывания функции возбуждения $\sigma(E_\gamma)$ реакции со спектром $W(E_\gamma, E_e)$ тормозных фотонов:

$$\sigma_w = \int \sigma(E_\gamma) W(E_\gamma, E_e) dE_\gamma. \quad (2)$$

Измеренные выходы дочерних радиоизотопов ^{64}Cu , ^{61}Cu , ^{61}Co , ^{60}Co , ^{58}Co

Табл.2. Выходы Y и относительные выходы $Y/Y(^{61}\text{Cu})$ изотопов меди и кобальта при $E_{\gamma}^{\text{max}} = 40$ МэВ

	^{64}Cu	^{61}Cu	^{61}Co	^{60}Co	^{58}Co	^{57}Co
$Y, \text{сек}^{-1}$	$(1.45 \pm 0.05) \times 10^7$	$(1.82 \pm 0.01) \times 10^6$	$(4.7 \pm 0.5) \times 10^4$	$(4.88 \pm 0.07) \times 10^4$	$(1.7 \pm 0.1) \times 10^5$	$(1.38 \pm 0.08) \times 10^4$
$Y/Y(^{61}\text{Cu})$	7.97 ± 0.25	1	$(2.6 \pm 0.3) \times 10^{-2}$	$(2.67 \pm 0.04) \times 10^{-2}$	$(9.3 \pm 0.6) \times 10^{-2}$	$(0.76 \pm 0.04) \times 10^{-2}$
$Y/Y(^{61}\text{Cu})$ (TALYS)	7.92	1	4.03×10^{-2}	1.46×10^{-2}	6.48×10^{-2}	0.34×10^{-2}
$Y/Y(^{61}\text{Cu})$ (GEANT4)	3.70	1	3.7×10^{-3}	1.3×10^{-3}	4.1×10^{-3}	0.17×10^{-3}

и ^{57}Co при $E_{\gamma}^{\text{max}} = 40, 30$ и 21 МэВ приведены, соответственно, в таблицах 2, 3 и 4. Приведенные ошибки выходов соответствуют статистическим погрешностям определения площади фотопика S . Суммарная систематическая ошибка, обусловленная погрешностями других величин, входящих в выражение (1), заключена в пределах от 8% до 15%. Вклад последних практически исчезает в относительных выходах, отнормированных на выход одного из изотопов. Отнормированные на выход изотопа ^{61}Cu относительные выходы $Y/Y(^{61}\text{Cu})$ с их статистическими ошибками приведены в таблицах 2, 3 и 4. Следует отметить, что данные, касающиеся долгоживущих радиоизотопов ^{57}Co и ^{60}Co , получены благодаря низкофоновым условиям, присутствующим в подземной лаборатории, где проводились измерения. Там же они сравниваются с предсказаниями моделей, используемых в программах TALYS [6] и GEANT4 [14]. При получении предсказаний были использованы заложенные в эти модели функции возбуждения $\sigma(E_{\gamma})$, а также соотношение (2) для взвешенного сечения σ_w и связь последнего с выходом Y . Как видно, предсказания обеих моделей находятся в противоречии с

Табл.3. Выходы Y и относительные выходы $Y/Y(^{61}\text{Cu})$ изотопов меди и кобальта при $E_{\gamma}^{\text{max}} = 30$ МэВ

	^{64}Cu	^{61}Cu	^{61}Co	^{60}Co	^{58}Co
$Y, \text{сек}^{-1}$	$(7.94 \pm 0.86) \times 10^5$	$(6.97 \pm 0.51) \times 10^4$	$(3.02 \pm 0.33) \times 10^3$	$(9.19 \pm 1.47) \times 10^2$	$(4.52 \pm 0.28) \times 10^3$
$Y/Y(^{61}\text{Cu})$	11.4 ± 1.0	1	$(4.3 \pm 0.4) \times 10^{-2}$	$(1.32 \pm 0.16) \times 10^{-2}$	$(6.48 \pm 0.42) \times 10^{-2}$
$Y/Y(^{61}\text{Cu})$ (TALYS)	14.3	1	6.56×10^{-2}	1.24×10^{-2}	2.41×10^{-2}
$Y/Y(^{61}\text{Cu})$ (GEANT4)	6.73	1	5.5×10^{-4}	2.5×10^{-4}	2.5×10^{-4}

Табл.4. Выходы Y и относительные выходы $Y/Y(^{61}\text{Cu})$ изотопов меди и кобальта при $E_\gamma^{\text{max}} = 21$ МэВ

	^{64}Cu	^{61}Cu	^{61}Co
$Y, \text{сек}^{-1}$	$(3.39 \pm 0.07) \times 10^6$	$(4.24 \pm 0.15) \times 10^4$	$(8.7 \pm 0.6) \times 10^3$
$Y/Y(^{61}\text{Cu})$	80.0 ± 3.3	1	$(2.0 \pm 0.2) \times 10^{-1}$
$Y/Y(^{61}\text{Cu})$ (TALYS)	391.4	1	9.53×10^{-1}
$Y/Y(^{61}\text{Cu})$ (GEANT4)	553.5	1	2.0×10^{-3}

экспериментальными данными, особенно в случае кода GEANT4, предсказания которого сильно занижены по сравнению с измеренными значениями. В частности, для отношения выходов реакций $^{63}\text{Cu}(\gamma, \alpha 2n)^{57}\text{Co}$ и $^{63}\text{Cu}(\gamma, 2n)^{61}\text{Cu}$ при $E_\gamma^{\text{max}} = 40$ МэВ получено значение $(0.76 \pm 0.04) \times 10^{-2}$, что значительно превышает модельные предсказания. Эти и приведенные в таблицах 2–4 данные могут оказаться полезными при усовершенствовании модельных представлений, используемых для описания одночастичных и многочастичных реакций с α -частицей в конечном состоянии.

Отношение выходов $R_Y(^{61}\text{Co}/^{61}\text{Cu}) = Y(^{61}\text{Co})/Y(^{61}\text{Cu})$ связано с отношением $R_\sigma(^{61}\text{Co}/^{61}\text{Cu}) = \sigma_w(^{61}\text{Co})/\sigma_w(^{61}\text{Cu})$ взвешенных сечений реакций $^{65}\text{Cu}(\gamma, \alpha)^{61}\text{Co}$ и $^{63}\text{Cu}(\gamma, 2n)^{61}\text{Cu}$ следующим образом: $R_\sigma = R_Y \cdot R_c$, где $R_c = 0.691/0.309$ представляет собой отношение содержаний изотопов ^{63}Cu и ^{65}Cu в естественной меди.

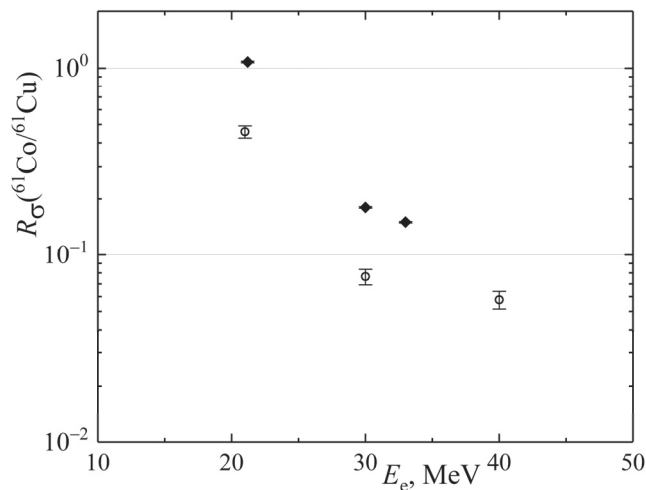


Рис.6. Энергетическая зависимость отношения $R_\sigma(^{61}\text{Co}/^{61}\text{Cu})$ для фотоядерных (полый круг – настоящая работа) и электроядерных (неполый круг – работа [18]) реакций.

Энергетическая зависимость отношения $R_{\alpha}(^{61}\text{Co}/^{61}\text{Cu})$ в области $E_e = 21\text{--}40$ МэВ, как видно из рисунка 6, имеет монотонно убывающий характер. Интересно отметить, что подобная зависимость имеет место и для отношения сечений электро-ядерных реакций $^{65}\text{Cu}(e, e' + \alpha)^{61}\text{Co}$ и $^{63}\text{Cu}(e, e' + 2n)^{61}\text{Cu}$ [18], однако для последних это отношение примерно в 2.5 раза больше полученных нами значений для фотоядерных реакций (см. Рис.6). Для объяснения этого различия, по-видимому, необходимы дальнейшие исследования.

Было измерено также отношение выходов ^{61}Co и ^{64}Cu , которое при $E_{\gamma}^{\max} = 21, 30$ и 40 МэВ оказалось равным, соответственно, $R_{\gamma}(^{61}\text{Co} / ^{64}\text{Cu}) = (2.6 \pm 0.2) \times 10^{-3}$, $(3.8 \pm 0.6) \times 10^{-3}$ и $(3.2 \pm 0.4) \times 10^{-3}$. Следует заметить, что эти значения значительно меньше, чем получаемое на основе данных работы [9] значение $R_{\gamma}(^{61}\text{Co} / ^{64}\text{Cu}) = (4.5 \pm 0.5) \cdot 10^{-3}$ при $E_{\gamma}^{\max} = 23$ МэВ. Отметим, что фотообразование ^{61}Co практически полностью обусловлено реакцией $^{65}\text{Cu}(\gamma, \alpha)^{61}\text{Co}$, особенно при $E_{\gamma}^{\max} = 21$ МэВ, при которой вклад конкурирующей реакции $^{63}\text{Cu}(\gamma, pp)^{61}\text{Co}$ в величину $R_{\gamma}(^{61}\text{Co} / ^{64}\text{Cu})$ составляет не более чем 10^{-4} [19,20]. Поэтому можно считать, что величина $R_{\gamma}(^{61}\text{Co} / ^{64}\text{Cu})$ практически равна отношению выходов реакций $(\gamma, \alpha) / (\gamma, n)$ на изотопе ^{65}Cu . На Рис.7 приведено измеренное нами отношение $R_{\gamma}(^{61}\text{Co} / ^{64}\text{Cu})$ при $E_{\gamma}^{\max} = 21$ МэВ совместно с данными работы [12], полученными при $E_{\gamma}^{\max} = 23$ МэВ для более тяжелых ядер с атомными номерами от $Z = 47$ до $Z = 82$. Как видно, наблюдаемый в [12] характер Z – зависимости $R_{\gamma}(^{61}\text{Co} / ^{64}\text{Cu})$ качественно сохраняется и при значительно меньших значениях Z ($Z = 29$). Эту зависимость можно качественно описать степенной функцией $f(Z) = (12.5/Z)^{7.2}$ (линия на Рис.7).

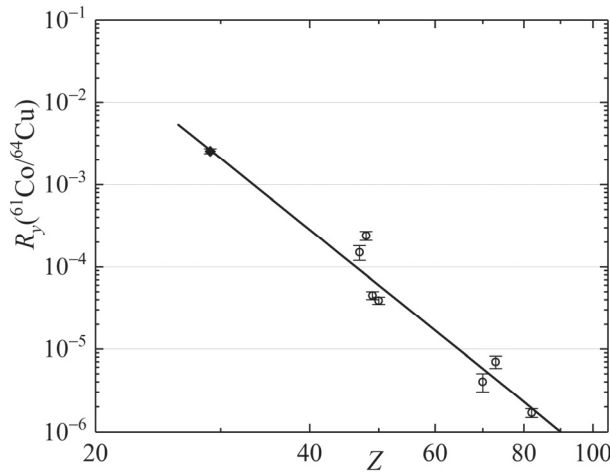


Рис.7. Отношение $R_{\gamma}(^{61}\text{Co}/^{64}\text{Cu})$ при $E_{\gamma}^{\max} = 21$ МэВ (неполый круг) и $E_{\gamma}^{\max} = 23$ МэВ (полый круг), измеренное в [12] для более тяжелых ядер с атомными номерами от $Z = 47$ до $Z = 82$.

4. Заключение

На линейном ускорителе электронов ННЛА исследован процесс фотообразования ряда радиоизотопов из ядер меди при граничных энергиях тормозных фотонов $E_{\gamma}^{\max} = 21, 30$ и 40 МэВ. Измерены выходы ^{61}Co , ^{60}Co , ^{58}Co , ^{57}Co по отношению к выходу радиоизотопа ^{61}Cu . Показано, что предсказания модели TALYS, а также заложенной в программный пакет GEANT4 модели находятся в противоречии (особенно в случае кода GEANT4) с результатами измерения, что указывает на необходимость внесения уточнений в заложенные в обе модели функции возбуждения соответствующих реакций. Энергетическая зависимость отношения R_{σ} взвешенных сечений реакций $^{65}\text{Cu}(\gamma, \alpha)^{61}\text{Co}$ и $^{63}\text{Cu}(\gamma, 2n)^{61}\text{Cu}$ в области $E_e = 21\text{--}40$ МэВ имеет монотонно убывающий характер, подобно тому, что наблюдалось для отношения сечений электроядерных реакций $^{65}\text{Cu}(e, e' + \alpha)^{61}\text{Co}$ и $^{63}\text{Cu}(e, e' + 2n)^{61}\text{Cu}$ [18], однако для последних это отношение примерно в 2.5 раза больше, чем для фотоядерных реакций. Измерено также отношение выходов реакций $^{65}\text{Cu}(\gamma, \alpha)^{61}\text{Co}$ и $^{65}\text{Cu}(\gamma, n)^{64}\text{Cu}$; при $E_{\gamma}^{\max} = 21$ МэВ оно оказалось равным $R_y(^{61}\text{Co}/^{64}\text{Cu}) = (2.6 \pm 0.2) \times 10^{-3}$ и не противоречащим общей тенденции Z – зависимости этого отношения, измеренного в [12] при $E_{\gamma}^{\max} = 23$ МэВ для более тяжелых ядер с атомными номерами от $Z = 47$ до $Z = 82$. Показано, что эта зависимость в широкой области от $Z = 29$ до $Z = 82$ может быть качественно описана степенной функцией $f(Z) = (12.5/Z)^{7.2}$. Полученные данные могут оказаться полезными при усовершенствовании модельных представлений, используемых для описания одночастичных и многочастичных реакций с α -частицей в конечном состоянии.

Авторы выражают благодарность персоналу линейного ускорителя ЕрФИ за обеспечение пучками электронов для облучения экспериментальной установки.

ЛИТЕРАТУРА

1. Handbook on Photonuclear Data for Applications Cross-sections and Spectra, IAEA-TECDOC-1178, IAEA, Vienna, 2000.
2. Nuclear Reaction Database (EXFOR), Lomonosov Moscow State University, Skobeltsyn Institute of Nuclear Physics, <http://cdfc.sinp.msu.ru/exfor>, 2014.
3. USA National Nuclear Data Center database “CSISRS and EXFOR Nuclear reaction experimental data”, <https://www.nndc.bnl.gov/exfor/> (2014).
4. IAEA Nuclear Data Section “Experimental Nuclear Reaction Data (EXFOR)”, <https://www-nds.iaea.org/exfor/exfor.htm> (2014).
5. A.R. Balabekyan et al., J. Contemp. Phys. (Armenian Ac. Sci.), **55**, 1 (2020).
6. A.J. Koning, S. Hilaire, M.C. Duijvestijn. International Conference on Nuclear Data for Science and Technology, 211 (2007).
7. K. Masumoto, T. Kato, N. Suzuki, Nucl. Instr. Methods, **157**, 567 (1978).

8. **А.Д. Антонов и др.** ЯФ, **51**, 305 (1990).
9. **А.Д. Антонов и др.** ЯФ, **53**, 14 (1991).
10. **А. Сирунян и др.** Известия НАН Армении, Физика, **53**, 363 (2018).
11. **A.A.Vasenko et al.** Mod. Phys. Lett. A, **5**, 1299 (1990).
12. **S.A. Karamian.** Phys. At. Nucl., **77**, 1429 (2014).
13. **A.S. Hakobyan et al.** J. Contemp. Phys. (Armenian Ac. Sci.), **55**, 111 (2020).
14. **J. Allison, K. Amako, J. Apostolakis, et al.** Nucl. Instrum.Methods Phys. Res. A, **835** 186 (2016).
15. **R. Bass.** Nucl. Phys. A, **231**, 45 (1974).
16. Chart of Nuclides, <https://www.nndc.bnl.gov/nudat2/>
17. **S.S. Belyshev et al.** Eur. Phys. J. A, **51**, 67 (2015).
18. **M.N. Martins, E. Wolyneec, M.C.A. Campos.** Phys. Rev. C, **26** 1936 (1982).
19. **M.L.P. Antunes, M.N. Martins.** Phys. Rev. C, **52**, 1484 (1995).
20. **V.V. Varlamov et al.** Bulletin of the Russian Academy of Sciences. Physics, **80**(3), 317 (2016).

THE STUDY OF PHOTOPRODUCTION OF COBALT RADIOISOTOPES FROM COPPER NUCLEI

A.Y. ALEKSANYAN, S.M. AMIRKHANYAN, A. BALABEKYAN, N.A. DEMEKHINA,
H.R. GULKANYAN, T.V. KOTANJYAN, V. MANGASARYAN,
V.S. POGOSOV, L.A. POGHOSYAN, S. FALTAJANYAN

The process of photoproduction of a series of radioisotopes from copper nuclei at the bremsstrahlung end-point energies $E_{\gamma}^{\max} = 21, 30$ and 40 MeV was studied at the AANL (YerPhI) linear electron accelerator. The relative yields of ^{61}Co , ^{60}Co , ^{58}Co , ^{57}Co with respect to the ^{61}Cu are measured; in particular, at $E_{\gamma}^{\max} = 40$ MeV they are equal to, respectively, $(2.6 \pm 0.3) \times 10^{-2}$, $(2.67 \pm 0.04) \times 10^{-2}$, $(9.3 \pm 0.6) \times 10^{-2}$ и $(0.76 \pm 0.04) \times 10^{-2}$. It is shown that the predictions of the TALYS model, as well as the model inserted in the GEANT4 software package are in contradiction (especially in the case of the GEANT4 code) with the measured relative yields. A continuously decreasing energy dependence was observed for the ratio of unfolded (weighted with the bremsstrahlung spectrum) cross sections of reactions $^{65}\text{Cu}(\gamma, \alpha)^{61}\text{Co}$ и $^{63}\text{Cu}(\gamma, 2n)^{61}\text{Cu}$, similarly to that observed earlier for the ratio of cross sections of electronuclear reactions $^{65}\text{Cu}(e, e' + \alpha)^{61}\text{Co}$ и $^{63}\text{Cu}(e, e' + 2n)^{61}\text{Cu}$. The ratio of the ^{61}Co and ^{64}Cu yields is also measured, being equal to $(2.6 \pm 0.2) \times 10^{-3}$, $(3.8 \pm 0.6) \times 10^{-3}$ и $(3.2 \pm 0.4) \times 10^{-3}$, respectively, at $E_{\gamma}^{\max} = 21$ MeV, 30 MeV and 40 MeV; its value $(2.6 \pm 0.2) \cdot 10^{-3}$ at $E_{\gamma}^{\max} = 21$ MeV is consistent with the general trend of the dependence of this ratio on the atomic number Z , measured recently at $E_{\gamma}^{\max} = 23$ MeV for heavier nuclei with atomic numbers from $Z = 47$ to $Z = 82$.

ИЗОВЕКТОРНЫЕ ПАРНЫЕ КОРРЕЛЯЦИИ НУКЛОНОВ В АТОМНЫХ ЯДРАХ

Г.Г. НИКОГОСЯН*

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

*e-mail: gor.nikoghosyan@ysumail.am

(Поступила в редакцию 24 июня 2020 г.)

Получено конечное бозонное представление фермионных операторов. Построен коллективный гамильтониан для описания парных возбуждений и анализирована коллективная потенциальная энергия. Коллективные моды, связанные с добавлением и удалением пар частиц, отделены от множества ядерных степеней свободы.

1. Введение

Парные корреляции играют особую роль в понимании ряда свойств атомных ядер (спектр возбуждения ядер с четными массовыми числами A , моменты инерции деформированных ядер, плотность одночастичных уровней нечетных деформированных ядер и т.д.) [1–4]. На сегодняшний день изучение парных корреляций в ядрах продолжает оставаться предметом активных исследований. Наиболее интересно понять относительную роль изовекторных ($T=1$) и изоскалярных ($T=0$) парных корреляций для ядер с $N \approx Z$ [5,6]. Важным понятием в теории парных корреляций является поле спаривания [7]. Парные корреляции формируют средний потенциал, действующий на нуклоны $U_{\text{pair}} = \Delta \times \sum_{\nu>0} a^+(\bar{\nu}) a^+(\nu)$, где $a^+(\nu)$ – оператор рождения нуклона в состоянии ν , который создает две нуклоны в состояниях, связанных операцией отражения времени. Δ – параметр деформации и дается выражением $\Delta = G < \sum_{\nu>0} a(\nu) a(\bar{\nu}) >$, где G – константа парного взаимодействия. Парный потенциал не сохраняет число частиц. Оператор парного потенциала неэрмитов, следовательно, параметр деформации Δ является комплексной величиной. Фаза параметра деформации есть фазовый угол φ , который связан с оператором числа частиц следующим образом $\hat{N} = < \hat{N} > + 2i \partial / \partial \varphi$.

Например, для основного состояния ядра ^{208}Pb деформация Δ флуктуирует около значения 0 и возбуждения носят вибрационный характер. Когда в

незаполненной оболочке находятся много частиц, тогда среднее значение параметра деформации превышает флуктуации и система находится под воздействием статического парного поля. В этом случае коллективные движения соответствуют вращению в фазовом пространстве (парное вращение) и движению, которое описывает флуктуации в величине параметра деформации.

Известно, что в реакциях двинуклонной передачи матричные элементы для переходов в основные состояния ядер значительно превышают матричные элементы переходов в чистые $(j^2)J = 0$ конфигурации. Например, в реакциях $^{208}\text{Pb}(t, p)^{210}\text{Pb}$ и $^{208}\text{Pb}(p, t)^{206}\text{Pb}$ основные состояния возбуждаются намного сильнее, чем любые другие 0^+ – состояния. Следовательно, можно рассматривать основные состояния ядер ^{206}Pb и ^{210}Pb как коллективные возбуждения ядра ^{208}Pb . Эти возбуждения получили название «парных» [8,9,10].

Целью настоящей работы является построение коллективного гамильтониана для изучения парных возбуждений. Наиболее удобным для этой цели является метод бозонных разложений [11,12,13,14].

Коллективные возбуждения, наблюдаемые в сложных фермионных системах, например, в тяжелых ядрах, имеют сходство с видами возбуждений, которые демонстрируют простые бозонные системы. Это означает, что коллективные возбуждения фермионных систем, которые имеют сложную структуру и относятся к многомерному фермионному базису, могут быть описаны с помощью бозонных базисов малой размерности. Проблема, которая возникает при микроскопическом подходе, заключается в следующем: нужно перейти от фермионного базиса к бозонному базису таким образом, чтобы интересующие нас коллективные состояния лежали в определенном подпространстве бозонного пространства.

При микроскопическом изучении коллективного подпространства необходимо установить однозначное соответствие между фермионными операторами $a_1^+ a_2^+$ и операторами идеальных бозонов $b_{12}^+ (b_{12}^+ = -b_{21}^+)$. Пусть $|n\rangle$ образуют ортонормированный базис в фермионном пространстве. Полное число бозонных состояний, которые можно построить с помощью операторов b_{12}^+ , значительно превышает число фермионных состояний. В бозонном пространстве можно выделить подпространство, образуемое ортонормированными состояниями $|n\rangle$, число которых совпадает с числом фермионных состояний $|n\rangle$. Это подпространство называется физическим. Остальная часть бозонного пространства называется нефизическим, поскольку состояния $|u\rangle$ (состояния нефизического бозонного пространства) не имеют ничего общего с фермионной системой. Условие полноты бозонного пространства записывается в виде

$$|0\rangle\langle 0| + \sum_{n \neq 0} |n\rangle\langle n| + \sum_u |u\rangle\langle u| = 1.$$

2. Бозонные представления фермионных операторов

Представим гамильтониан системы в виде

$$H = H_0 + H_{\text{int}}, \quad (1)$$

где

$$\begin{aligned} H_0 &= \sum_{j,m,\tau} (E_j - \lambda) a_{jm\tau}^+ a_{jm\tau}, \\ H_{\text{int}} &= - \sum_{JMT\tau} G_T^J (A_{T\tau}^{JM})^+ A_{T\tau}^{JM}, \end{aligned} \quad (2)$$

H_0 – гамильтониан оболочечной модели в представлении вторичного квантования, H_{int} – гамильтониан парного взаимодействия. Оператор $(A_{T\tau}^{JM})^+$ имеет вид

$$(A_{T\tau}^{JM})^+ = \sum_j \sqrt{j+1/2} (A_{T\tau}^{JM}(j))^+, \quad (3)$$

где

$$(A_{T\tau}^{JM}(j))^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{m,m',t,t'} C_{jmm'}^{JM} C_{1/2t1/2t'}^{T\tau} a_{jmt}^+ a_{jm't'}^+.$$

Здесь J, M – угловой момент и его проекция, T, τ – изоспин и проекция изоспина. Гамильтониан (1) включает остаточные парные взаимодействия нуклонов, которые находятся в одинаковых одночастичных состояниях. Такие состояния характеризуются квантовыми числами углового момента j и его проекцией m . Остальные квантовые числа опущены для краткости. Поскольку мы будем рассматривать состояния ядер, получающихся в результате добавления или удаления пар частиц от исходного ядра, то в качестве исходного удобно выбрать ядро с замкнутыми подоболочками. Разобьем совокупность одночастичных состояний на две группы: состояния, которые расположены выше поверхности Ферми (частичные состояния j_+) и состояния – расположенные ниже поверхности Ферми (дырочные состояния j_-). После введения операторов рождения и уничтожения частиц и дырок

$$a_{jm}^+ = \begin{cases} c_{jm}^+, j \in j_+ \\ (-1)^{j-m+1/2-t} c_{j-m-t} = \tilde{c}_{jm}, j \in j_- \end{cases} \quad (4)$$

получим

$$(A_{T\tau}^{JM})^+ = \sum_{j_+} \sqrt{j_+ + 1/2} (A_{T\tau}^{JM}(j_+))^+ - \sum_{j_-} \sqrt{j_- + 1/2} \tilde{A}_{T\tau}^{JM}(j_-), \quad (5)$$

где

$$\begin{aligned} \tilde{A}_{T\tau}^{JM}(j_-) &= (-1)^{J-M-T-\tau} A_{T-\tau}^{J-M}(j_-), \\ (A_{T\tau}^{JM}(j_{\pm}))^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum C_{j_{\pm}m_{\pm}m'}^{JM} C_{1/2t1/2t'}^{T\tau} c_{j_{\pm}mt}^+ c_{j_{\pm}m't'}^+. \end{aligned} \quad (6)$$

Окончательно, гамильтониан (1) принимает форму

$$\begin{aligned}
H = & \sum_{j_+, m\tau} (E_{j_+} - \lambda) c_{j_+, m\tau}^+ c_{j_+, m\tau} + \sum_{j_-, m\tau} (\lambda - E_{j_-}) c_{j_-, m\tau}^+ c_{j_-, m\tau} \\
& - \sum_{JMT\tau} G_T^J \left(\sum_{j_+} \sqrt{j_+ + 1/2} (A_{T\tau}^{JM}(j_+))^+ - \sum_{j_-} \sqrt{j_- + 1/2} \tilde{A}_{T\tau}^{JM}(j_-) \right) \\
& \times \left(\sum_{j'_+} \sqrt{j'_+ + 1/2} A_{T\tau}^{JM}(j'_+) - \sum_{j'_-} \sqrt{j'_- + 1/2} (\tilde{A}_{T\tau}^{JM}(j'_-))^+ \right). \quad (7)
\end{aligned}$$

Ниже мы используем бозонные представления Дайсона. Эти разложения конечные, следовательно, не возникают проблемы, связанные со сходимостью рядов. Однако бозонные разложения Дайсона не сохраняют свойство эрмитовости в стандартной бозонной метрике. Но на практике не возникают сложности, поскольку собственные значения бозонного образа фермионного гамильтониана остаются действительными, если гамильтониан диагонализирован в физическом бозонном подпространстве.

Бозонные представления Дайсона имеют вид [15,16,17]

$$c_{j_+, m\tau}^+ c_{j_+, m'\tau'}^+ \rightarrow b_{m\tau, m'\tau'}^+(j_+) - \sum_{m_1 m_2 l_1 l_2} b_{m\tau, m_1 l_1}^+(j_+) b_{m'\tau', m_2 l_2}^+(j_+) b_{m_1 l_1 m_2 l_2}(j_+), \quad (8)$$

$$c_{j_+, m'\tau'} c_{j_+, m\tau} \rightarrow b_{m\tau m'\tau'}(j_+), \quad (9)$$

$$c_{j_-, m\tau}^+ c_{j_-, m'\tau'}^+ \rightarrow b_{m\tau m'\tau'}^+(j_-), \quad (10)$$

$$c_{j_-, m'\tau'} c_{j_-, m\tau} \rightarrow b_{m\tau m'\tau'}(j_-) - \sum_{m_1 m_2 l_1 l_2} b_{m_1 l_1, m_2 l_2}^+(j_-) b_{m'\tau', m_2 l_2}(j_-) b_{m\tau m_1 l_1}(j_-), \quad (11)$$

$$c_{j_\pm, m\tau}^+ c_{j_\pm, m\tau} \rightarrow 2 \sum_{m_1 l_1} b_{m\tau m_1 l_1}^+(j_\pm) b_{m\tau m_1 l_1}(j_\pm). \quad (12)$$

Здесь операторы бозонов $b_{m\tau m'\tau'}^+(j)$ и $b_{m\tau m'\tau'}(j)$ удовлетворяют коммутационным соотношениям

$$[b_{m\tau m'\tau'}(j), b_{m_1 l_1 m_2 l_2}^+(j)] = \delta_{mm_1} \delta_{\tau\tau_1} \delta_{m'm_2} \delta_{\tau'\tau_2} - \delta_{mm_2} \delta_{\tau\tau_2} \delta_{m'm_1} \delta_{\tau'\tau_1}. \quad (13)$$

Сравнивая соотношения (8) и (9) или (10) и (11), легко заметить, что в стандартной бозонной метрике, в котором скалярное произведение бозонных операторов определяется формулой

$$(b_\alpha, b_\beta^+) = \delta_{\alpha\beta}, \quad (14)$$

бозонные образы операторов в (8) и (9) или в (10) и (11) не связаны операцией эрмитовой сопряженности. Можно перейти к новому бозонному представлению, которое сохраняет соотношение эрмитовости в стандартной бозонной метрике с помощью неунитарной матрицы $\hat{U}$, которая сохраняет бозонные коммутационные соотношения. Новое бозонное представление имеет вид

$$(\hat{U})^{-1} \hat{O}_D \hat{U}, \quad (15)$$

где оператор $\hat{U}$ связано с метрическим оператором $\hat{F}$ соотношением

$$\hat{U} = (\hat{F})^{1/2}. \quad (16)$$

Оператор $\hat{F}$ определяет новую бозонную метрику

$$\langle \Phi_\beta, \Phi_\alpha \rangle = \langle \Phi_\beta, \hat{F} \Phi_\alpha \rangle. \quad (17)$$

Следовательно, соотношение эрмитовости сохраняется

$$\langle \Phi_\beta, (\hat{O})_D^\dagger \Phi_\alpha \rangle = \langle \hat{O}_D \Phi_\beta, \Phi_\alpha \rangle. \quad (18)$$

Здесь оператор $\hat{O}_D$ есть бозонный образ дайсоновского типа бифермионного оператора.

Введем оператор бозона с определенным угловым моментом и изоспином

$$(b_{T\tau}^{JM}(j_\pm))^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{m,m',t,t'} C_{jmjm}^{JM} C_{1/2t1/2t'}^{T\tau} b_{m,t,m',t'}^+(j_\pm). \quad (19)$$

В терминах операторов $(b_{T\tau}^{JM}(j_\pm))^+$ и $b_{T\tau}^{JM}(j_\pm)$ гамильтониан (7) принимает форму

$$\begin{aligned} H = & \sum_{j_+} 2(E_{j_+} - \lambda) \sum_{JMT\tau} b_{T\tau}^{+JM}(j_+) b_{T\tau}^{JM}(j_+) + \sum_{j_-} 2(\lambda - E_{j_-}) \sum_{JMT\tau} b_{T\tau}^{+JM}(j_-) b_{T\tau}^{JM}(j_-) - \\ & - \sum_{JMT\tau} G_T^J \left(\sum_{j_+} b_{T\tau}^{+JM}(j_+) \sqrt{j_+ + 1/2} + \sum_{j_-} \tilde{b}_{T\tau}^{JM}(j_-) \sqrt{j_- + 1/2} \right) \\ & \times \left(\sum_{j'_+} b_{T\tau}^{JM}(j'_+) \sqrt{j'_+ + 1/2} + \sum_{j'_-} \tilde{b}_{T\tau}^{+JM}(j'_-) \sqrt{j'_- + 1/2} \right) \\ & + 2 \sum_{JMT\tau} G_T^J \left(F_{T\tau}^{JM}(+) + F_{T\tau}^{JM}(-) \right) \\ & \times \left(\sum_{j_+} b_{T\tau}^{JM}(j_+) \sqrt{j_+ + 1/2} + \sum_{j_-} \tilde{b}_{T\tau}^{+JM}(j_-) \sqrt{j_- + 1/2} \right), \end{aligned} \quad (20)$$

где

$$\begin{aligned} F_{T\tau}^{JM}(+) = & \sum P_{T_1 T_2 T_3 T'}^{J_1 J_2 J_3 J'} \sqrt{j_+ + 1/2} \begin{Bmatrix} j_+ & j_+ & J \\ j_+ & j_+ & J_3 \\ J_1 & J_2 & J' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} 1/2 & 1/2 & T \\ 1/2 & 1/2 & T_3 \\ 1/2 & 1/2 & T' \end{Bmatrix} \\ & \times \left((b_{T_1}^{+J_1}(j_+) b_{T_2}^{+J_2}(j_+))_{T'}^{J'} \tilde{b}_{T_3}^{J_3}(j_+) \right)_{T\tau}^{JM}, \\ F_{T\tau}^{JM}(-) = & \sum P_{T_1 T_2 T_3 T'}^{J_1 J_2 J_3 J'} \sqrt{j_- + 1/2} \begin{Bmatrix} j_- & j_- & J \\ j_- & j_- & J_3 \\ J_1 & J_2 & J' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} 1/2 & 1/2 & T \\ 1/2 & 1/2 & T_3 \\ 1/2 & 1/2 & T' \end{Bmatrix} \\ & \times \left(b_{T_3}^{+J_3}(j_-) (\tilde{b}_{T_1}^{J_1}(j_-) \tilde{b}_{T_2}^{J_2}(j_-))_{T'}^{J'} \right)_{T\tau}^{JM}. \end{aligned} \quad (21)$$

Здесь

$$P_{T_1 T_2 T_3 T'}^{J_1 J_2 J_3 J'} = \sqrt{(2J_1 + 1)(2J_2 + 1)(2J_3 + 1)(2J' + 1)(2T_1 + 1)(2T_2 + 1)(2T_3 + 1)(2T' + 1)},$$

а, $\{....\} \rightarrow 9j$ символ.

Гамильтониан (20) содержит квадратичный по бозонным операторам член и слагаемое, которое пропорционально четвертой степени бозонных операторов.

3. Построение коллективного гамильтониана

При рассмотрении изовекторных парных корреляций в гамильтониане (20) оставим только операторы бозонов с квантовыми числами $(T = 1)$ и $(J = 0)$. Для определения коллективной изовекторной моды диагонализирем квадратичную по бозонам часть гамильтониана. В случае отсутствия статических парных корреляций можно использовать операторы фононов или операторы коллективной координаты и импульса. Но когда константа парного взаимодействия достаточно велика (случай статических парных корреляций), используются только операторы коллективной координаты и импульса для диагонализации квадратичного гамильтониана.

Введем операторы коллективной координаты и импульса

$$z_{1\tau}^+ = \sum_{j_+} w_{j_+} b_{1\tau}^{+00}(j_+) + \sum_{j_-} w_{j_-} \tilde{b}_{1\tau}^{00}(j_-), \quad (22)$$

$$p_{1\tau}^+ = -i \left(\sum_{j_+} v_{j_+} b_{1\tau}^{00}(j_+) - \sum_{j_-} v_{j_-} \tilde{b}_{1\tau}^{00}(j_-) \right). \quad (23)$$

Квадратичный коллективный гамильтониан представим в виде

$$H_{coll}^2 = \frac{1}{2B} \sum_{\tau} p_{1\tau}^+ p_{1\tau} - \frac{C}{2} \sum_{\tau} z_{1\tau}^+ z_{1\tau}. \quad (24)$$

Операторы координаты и импульса удовлетворяют коммутационным соотношениям

$$\begin{aligned} [p_{1\tau}, z_{1\tau'}] &= -i\delta_{\tau\tau'}, \\ [p_{1\tau}, p_{1\tau'}] &= [z_{1\tau}, z_{1\tau'}] = 0. \end{aligned} \quad (25)$$

Из (25) получаем следующие соотношения ортонормированности

$$\begin{aligned} \sum_{j_+} w_{j_+} v_{j_+} + \sum_{j_-} w_{j_-} v_{j_-} &= 1, \\ \sum_{j_+} w_{j_+}^2 + \sum_{j_-} w_{j_-}^2 &= 0, \\ \sum_{j_+} v_{j_+}^2 + \sum_{j_-} v_{j_-}^2 &= 0. \end{aligned} \quad (26)$$

Коэффициенты $w_{j_{\pm}}$ и $v_{j_{\pm}}$ находятся с помощью процедуры диагонализации квадратичного гамильтониана

$$\begin{aligned} [H_2, z_{1\tau}^+] &= \frac{-i}{2B} p_{1\tau}, \\ [H_2, p_{1\tau}] &= \frac{-iC}{2} z_{1\tau}^+. \end{aligned} \quad (27)$$

Коэффициенты $w_{j_{\pm}}$ и $v_{j_{\pm}}$ даются выражениями

$$\begin{aligned} w_{j_+} &= G \sqrt{j_+ + 1/2} \frac{W 2(E_{j_+} - \lambda) + V/2B}{[2(E_{j_+} - \lambda)]^2 + \gamma}, \\ w_{j_-} &= G \sqrt{j_- + 1/2} \frac{-W 2(\lambda - E_{j_-}) + V/2B}{[2(\lambda - E_{j_-})]^2 + \gamma}, \\ v_{j_+} &= G \sqrt{j_+ + 1/2} \frac{-WC/2 + V 2(E_{j_+} - \lambda)}{[2(E_{j_+} - \lambda)]^2 + \gamma}, \\ v_{j_-} &= G \sqrt{j_- + 1/2} \frac{WC/2 + V 2(\lambda - E_{j_-})}{[2(\lambda - E_{j_-})]^2 + \gamma}, \end{aligned} \quad (28)$$

где

$$\begin{aligned} W &= \sum_{j'_+} \sqrt{j'_+ + 1/2} w_{j'_+} - \sum_{j'_-} \sqrt{j'_- + 1/2} w_{j'_-}, \\ V &= \sum_{j'_+} \sqrt{j'_+ + 1/2} v_{j'_+} + \sum_{j'_-} \sqrt{j'_- + 1/2} v_{j'_-}. \end{aligned} \quad (29)$$

Выше $G = G_1^0$, константа изовекторного взаимодействия.

Подставляя выражения (28) в соотношения (29) получается система уравнений

$$W(1 - \Sigma_+) - V \frac{G}{2B} \Sigma_- = 0, \quad W \frac{GC}{2} \Sigma_- + V(1 + \Sigma_+) = 0, \quad (30)$$

где

$$\begin{aligned} \Sigma_+ &= G \left\{ \sum_{j_+} (j_+ + 1/2) \frac{2(E_{j_+} - \lambda)}{[2(E_{j_+} - \lambda)]^2 + \gamma} + \sum_{j_-} (j_- + 1/2) \frac{2(\lambda - E_{j_-})}{[2(\lambda - E_{j_-})]^2 + \gamma} \right\}, \\ \Sigma_- &= \left\{ \sum_{j_+} (j_+ + 1/2) \frac{1}{[2(E_{j_+} - \lambda)]^2 + \gamma} - \sum_{j_-} (j_- + 1/2) \frac{1}{[2(\lambda - E_{j_-})]^2 + \gamma} \right\}. \end{aligned} \quad (31)$$

Система уравнений (30) имеет нетривиальное решение, при $\Sigma_+ = 1$ и $\Sigma_- = 0$, которые приводят к уравнениям для $C/(4B) = \gamma$ и λ

$$\begin{aligned}\frac{1}{G} &= \sum_{j_+} (j_+ + 1/2) \frac{2(E_{j_+} - \lambda)}{[2(E_{j_+} - \lambda)]^2 + \gamma} + \sum_{j_-} (j_- + 1/2) \frac{2(\lambda - E_{j_-})}{[2(\lambda - E_{j_-})]^2 + \gamma}, \\ 0 &= \sum_{j_+} (j_+ + 1/2) \frac{1}{[2(E_{j_+} - \lambda)]^2 + \gamma} - \sum_{j_-} (j_- + 1/2) \frac{1}{[2(\lambda - E_{j_-})]^2 + \gamma}.\end{aligned}\quad (32)$$

Подставляя выражения (28) в соотношения ортонормированности (26), получаем соотношения для V и W

$$\begin{aligned}V &= \frac{1}{G} \sqrt{\frac{B}{S_+^2 + S_-^2 \gamma}} (\sqrt{S_+^2 + S_-^2 \gamma} + S_+), \\ W &= \frac{1}{G} \sqrt{\frac{1}{C} \frac{1}{S_+^2 + S_-^2 \gamma}} (\sqrt{S_+^2 + S_-^2 \gamma} - S_+), \\ S_+ &= \sum_{j_+} \left(j_+ + \frac{1}{2}\right) \frac{2(E_{j_+} - \lambda)}{([2(E_{j_+} - \lambda)]^2 + \gamma)^2} + \sum_{j_-} \left(j_- + \frac{1}{2}\right) \frac{2(\lambda - E_{j_-})}{([2(\lambda - E_{j_-})]^2 + \gamma)^2}, \\ S_- &= \sum_{j_+} \left(j_+ + \frac{1}{2}\right) \frac{1}{([2(E_{j_+} - \lambda)]^2 + \gamma)^2} - \sum_{j_-} \left(j_- + \frac{1}{2}\right) \frac{1}{([2(\lambda - E_{j_-})]^2 + \gamma)^2}.\end{aligned}\quad (33)$$

Как было отмечено, гамильтониан содержит квадратичный по бозонным операторам член и слагаемое, которое пропорционально четвертой степени бозонных операторов. Квадратичный (гармонический) коллективный гамильтониан дается выражением (24). Для построения ангармонической части гамильтониана сделаем дополнительное предположение. Поскольку, как следует из (33), S_- дается разностью сумм по j_+ и j_- , то S_- намного меньше чем S_+ . В дальнейшем мы предполагаем, что $S_- = 0$. Следовательно, как видно из (33), $W = 0$. Используя это приближение, для последнего слагаемого в скобках в (24), получим

$$\left(\sum_{j_+} b_{1\tau}^{00}(j_+) \sqrt{j_+ + 1/2} + \sum_{j_-} \tilde{b}_{1\tau}^{+00}(j_-) \sqrt{j_- + 1/2} \right) = V z_{1\tau}. \quad (34)$$

По аналогии с предположением $S_- = 0$ ($W = 0$) мы пренебрегаем коэффициентами, которые даются разностью сумм по j_+ и j_- , т.е.

$$\begin{aligned}\sum_{j_+} \frac{v_{j_+} w_{j_+}^2}{\sqrt{j_+ + 1/2}} - \sum_{j_-} \frac{v_{j_-} w_{j_-}^2}{\sqrt{j_- + 1/2}} &\approx 0, \\ \sum_{j_+} \frac{v_{j_+}^2 w_{j_+}}{\sqrt{j_+ + 1/2}} - \sum_{j_-} \frac{v_{j_-}^2 w_{j_-}}{\sqrt{j_- + 1/2}} &\approx 0, \\ \sum_{j_+} \frac{w_{j_+}^3}{\sqrt{j_+ + 1/2}} - \sum_{j_-} \frac{w_{j_-}^3}{\sqrt{j_- + 1/2}} &\approx 0.\end{aligned}\quad (35)$$

Окончательно, для ангармонической части коллективного гамильтониана получим

$$H_{coll}^4 = 3\sqrt{3}G \frac{Q_+}{S_+^2} \sum_{T=0,2} \sqrt{2T+1} \begin{Bmatrix} 1/2 & 1/2 & 1 \\ 1/2 & 1/2 & 1 \\ 1 & 1 & T \end{Bmatrix} \left[\alpha \sum_{\tau} \left((z^+ z^+)_T \tilde{z} \right)_{1\tau} z_{1\tau} + 2 \sum_{\tau} \left((z^+ p)_T \tilde{p}^+ \right)_{1\tau} z_{1\tau} - \sum_{\tau} \left((pp)_T \tilde{z} \right)_{1\tau} z_{1\tau} \right], \quad (36)$$

где

$$\alpha = \frac{1}{\gamma_0} \left(\frac{S_+}{Q_+} + \gamma \right), \gamma_0 = \frac{C_0}{4B}, C_0 > 0, \gamma = \frac{C}{4B}, \quad (37)$$

$$Q_+ = \sum_{j_+} \left(j_+ + \frac{1}{2} \right) \frac{2(E_{j_+} - \lambda)}{\left([2(E_{j_+} - \lambda)]^2 + \gamma \right)^3} + \sum_{j_-} \left(j_- + \frac{1}{2} \right) \frac{2(\lambda - E_{j_-})}{\left([2(\lambda - E_{j_-})]^2 + \gamma \right)^3}.$$

Обозначения (37) введены так, чтобы обезразмерить $z_{1\mu}$ и $p_{1\mu}$.

Учитывая обозначения (37), для квадратичного коллективного гамильтониана (24) получим

$$H_{coll}^2 = \sqrt{\gamma_0} \left(\sum_{\mu} p_{\mu}^+ p_{\mu} - \frac{\gamma}{\gamma_0} \sum_{\mu} z_{\mu}^+ z_{\mu} \right). \quad (38)$$

Для анализа коллективной потенциальной энергии удобно перейти во внутреннюю систему координат

$$z_{1\tau} = \sum_{K=0,\pm 1} D_{\tau K}^{1*}(\psi_1, \psi_2, \psi_3) a_K, \quad (39)$$

где

$$a_1 = a_{-1} = \frac{\Delta e^{i\varphi}}{\sqrt{2}} \sin \vartheta, \quad a_0 = \Delta e^{i\varphi} \cos \vartheta, \quad (40)$$

$D_{\tau K}^{1*}(\psi_1, \psi_2, \psi_3)$ – функции Вигнера, ψ_1, ψ_2, ψ_3 – углы Эйлера, описывающие вращение в изотопическом пространстве. Во внутренней системе координат спаривание характеризуется двумя параметрами Δ и ϑ . Используя условие унитарности функций Вигнера

$$\sum_{M=-J}^J D_{MM'}^J(\alpha, \beta, \gamma) D_{MM'}^{J*}(\alpha, \beta, \gamma) = \delta_{M\tilde{M}'}, \quad (41)$$

$$\sum_{M'=-J}^J D_{MM'}^{J*}(\alpha, \beta, \gamma) D_{MM'}^J(\alpha, \beta, \gamma) = \delta_{MM'},$$

и ряд Клебша-Гордана

$$D_{M_1 N_1}^{J_1}(\alpha, \beta, \gamma) D_{M_2 N_2}^{J_2}(\alpha, \beta, \gamma) = \sum_{J=|J_1-J_2|}^{J_1+J_2} \sum_{MN} C_{J_1 M_1 J_2 M_2}^{JM} D_{MN}^J(\alpha, \beta, \gamma) C_{J_1 N_1 J_2 N_2}^{JN}, \quad (42)$$

для коллективной потенциальной энергии получим

$$V = V_2 + V_4 = -\frac{\gamma}{\gamma_0} \Delta^2 + G\alpha \frac{Q_+}{S_+^2} \Delta^4 \left[1 - \frac{1}{2} \cos^2(2\vartheta) \right]. \quad (43)$$

Коллективная потенциальная энергия имеет минимум при $\vartheta = 0$ в интервале $0 \leq \vartheta \leq \pi/4$.

Для спектроскопических факторов реакций двухнуклонной передачи получается следующее выражение

$$B_\tau(s; 1, 2) = \langle 2 | A_{s1\tau}^\dagger | 1 \rangle = \text{sign}(\langle 2 | A_{s1\tau}^\dagger | 1 \rangle) \sqrt{\langle 2 | A_{s1\tau}^\dagger | 1 \rangle_b \langle 2 | A_{s1\tau} | 1 \rangle_b}, \quad (44)$$

где $\langle 2 | A_{s1\tau}^\dagger | 1 \rangle_b$ означает усреднение коллективной части бозонного образа оператора $A_{s1\tau}^\dagger$ по коллективным состояниям $|1\rangle_b, |2\rangle_b$.

В табл.1 приведены энергии различных мод возбуждения, рассчитанные для ядра Ni^{56} при $G = 0.5$ МэВ и соответствующие спектроскопические факторы реакций двухнуклонной передачи.

Среди всех мод возбуждения моды, соответствующие нижайшим энергиям, являются коллективными. Как видно из таблицы, спектроскопические факторы имеют одинаковые знаки в случаях коллективных мод 1_- и 1_+ .

Табл.1. Энергии фононов, соответствующие различным модам возбуждения и соответствующие спектроскопические факторы

$k\pm$	$w_{k\pm}$, MeV	$2s_{1/2}$	$1d_{3/2}$	$1f_{7/2}$	$2p_{3/2}$	$1f_{5/2}$	$2p_{1/2}$	$1g_{9/2}$
4_-	13.8	-0.769	-0.081	-0.029	0.006	0.007	0.004	0.007
3_-	13.06	0.56	-0.556	-0.124	0.023	0.026	0.015	0.027
2_-	10.87	0.258	0.775	-0.435	0.055	0.059	0.034	0.061
1_-	3.07	0.224	0.367	0.992	0.32	0.31	0.176	0.282
1_+	3.07	0.141	0.217	0.422	0.83	0.582	0.324	0.413
2_+	8.30	0.03	0.046	0.08	-0.632	0.678	0.337	0.196
3_+	10.17	0.002	0.004	0.006	-0.023	-0.467	0.884	0.022
4_+	14.19	0.026	0.038	0.063	-0.133	-0.29	-0.179	0.935

4. Заключение

В настоящей работе получено конечное бозонное разложение для гамильтониана с изовекторными остаточными взаимодействиями. Эти разложения конечные, следовательно, не возникают проблемы, связанные со сходимостью рядов разложения. Дано краткое обсуждение вопроса о том, как можно перейти к новому представлению, которое в отличие от представления Дайсона, сохраняет соотношение эрмитовости. Получено выражение для коллективного гамильтониана и отделены коллективные степени свободы. Построено выражение для коллективной потенциальной энергии путем перехода во внутреннюю систему координат. Были рассчитаны энергии различных мод возбуждения и соответствующие спектроскопические факторы реакций двухнуклонных передач.

ЛИТЕРАТУРА

1. **A. Bohr, B.R. Mottelson, D.Pines.** Phys. Rev., **110**, 936 (1958).
2. **V.G. Soloviev.** Nucl. Phys., **9**, 655 (1958/59).
3. **V.G. Zelevinsky, R.A. Broglia** (Eds.). Fifty years of Nuclear BCS, Singapore, World Scientific, 2013.
4. **D.M. Brink, R.A. Broglia.** Nuclear Superfluidity: Pairing in finite System, Cambridge University Press, 2005.
5. **S. Frauendorf, A.O. Macchiavelli.** Prog. Part. Nucl. Phys., **78**, 24 (2014).
6. **X.-H. Fan, X. Shang, J.-M. Dong, W. Zuo.** Phys. Rev. C, **99**, 065804 (2019).
7. **A. Bohr.** Nuclear structure, Dubna. Symposium (1968), Vienna, International Atomic Energy Agency, 1968.
8. **R.V. Jolos.** Phys. Lett. B, **30**, 390 (1969).
9. **D.R. Bes, R.A. Broglia.** Nucl. Phys., **80**, 289 (1966).
10. **B. Sorensen.** Nucl. Phys. A, **134**, 1 (1969).
11. **Р.В. Джолос, В. Рыбарска.** Физ. Элем.Част. и Атом. Ядра, **3**, 739 (1972).
12. **A. Klein, E.R. Marshalek.** Rev. Mod.Phys., **63**, 375 (1991).
13. **B. Sorensen.** Nucl. Phys. A, **97**, 1 (1967).
14. **В.Г. Соловьев.** Теория атомного ядра: квазичастицы и фононы, М., Энергоатомиздат, 1989.
15. **G. Nikoghosyan, E.A. Kolganova, R.V. Jolos.** Bulg. J. Phys., **44**, 443 (2017).
16. **G. Nikoghosyan, E.A. Kolganova, D.A. Sazonov, R.V. Jolos.** Eur. Phys. J. A, **55**, 189 (2019).
17. **Р.В. Джолос, В.Г. Картавенко, Е.А. Колганова.** Физ. элем. част. и атом. ядра, **49**, 229 (2018).

ՆՈՒԿԼՈՆՆԵՐԻ ԻԶՈՎԵԿՏՈՐԱԿԱՆ ԶՈՒՅԳԱՅԻՆ
ԿՈՐԵԼԱՑԻԱՆԵՐԸ ԱՏՈՄԱՅԻՆ ՄԻՋՈՒԿՆԵՐՈՒՄ

Գ. Հ. ՆԻԿՈՂՈՍՅԱՆ

Ստացված են ֆերմիոնային օպերատորների վերջավոր բոզոնային ներկայացումները: Կառուցված է զույգային զրգռումների դինամիկան նկարագրող կոլեկտիվ համիլտոնիանը և ուսումնասիրված է կոլեկտիվ պոտենցիալ էներգիան: Զույգերի ավելացմամբ և վերացմամբ պայմանավորված կոլեկտիվ մոդերը անջատված են միջուկի ազատության աստիճանների բազմությունից:

ISOVECTOR PAIR CORRELATIONS OF NUCLEONS IN NUCLEI

G. NIKOGHOSYAN

A finite boson representation of fermion operators is obtained. The collective Hamiltonian for description of dynamics of the pairing modes is constructed and the collective potential energy is considered. The collective pair addition and pair removal modes are separated from the variety of nuclear degrees of freedom.

КВАНТОВАЯ ЗАПУТАННОСТЬ В СПИНОВЫХ ДИМЕРАХ: ЭФФЕКТЫ МАГНИТНОГО ПОЛЯ И НЕОДНОРОДНЫХ g-ФАКТОРОВ

Ж.А. АДАМЯН^{1,2*}, С.А. МУРАДЯН¹, В.Р. ОГАНЯН¹

¹Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

²Институт синхротронных исследований КЕНДЛ, Ереван, Армения

*e-mail: zhirayrad99@gmail.com

(Поступила в редакцию 27 февраля 2020 г.)

В работе рассматриваются двухкомпонентные системы модели Гейзенберга со спином-1/2 и смешанным спином-(1/2,1) и их квантовая запутанность, в частности зависимость запутанности от различных характеристик системы и внешнего магнитного поля. Квантовая запутанность в этой работе определяется двумя разными методами, а именно – «Отрицательность» и «Совпадение». Рассматривается зависимость соответствующих величин от множителей Ланде спинов, постоянных анизотропии системы и обменного взаимодействия частиц.

1. Введение

Квантовая запутанность, как одна из самых интригующих особенностей квантовой теории, в последнее время привлекает все больше внимания, поскольку она является ценным ресурсом в квантовой коммуникации и обработке информации [1–5]. Она лежит в основе схем квантовой телепортации [6–11], квантовых вычислений [12–14] и квантовой криптографии [15–17]. С другой стороны, понимание квантовой запутанности привело к прогрессу в изучении свойств черных дыр методами квантовой теории поля. Более того, запутанность обеспечивает новую перспективу для понимания квантовых фазовых переходов и коллективных явлений в физике многих тел и конденсированных сред. Запутанность является, пожалуй, самой фундаментальной, согласно Шредингеру, характеристикой, отличающей квантовую физику от классического мира. Гейзенберговские системы спиновых цепочек предоставляют довольно удобные условия для создания запутанных состояний и управления ими [18–21]. Было предложено создать квантовый компьютер с использованием цепочки Гейзенберга в различных системах, таких как квантовые точки [22], электронный спин [23], сверхпроводники [24]. Поэтому представляет большой интерес изучение запутанности в различных спиновых системах.

В этой работе рассматриваем две системы модели Гейзенберга: спин-1/2

полностью анизотропный XYZ димер с двумя разными, но изотропными множителями Ланде, и Z анизотропный димер со смешанным спином- $(1/2,1)$. В работе решается задача отыскания оптимальных параметров для создания запутанных состояний и управления ими посредством магнитного поля.

2. Основные характеристики исследуемых систем

2.1. Гейзенберговская спин-1/2 двухчастичная система

Для спин-1/2 двухчастичной системы Гамильтониан будет иметь следующий вид [25]:

$$H = J((1 + \gamma)S_1^x S_2^x + (1 - \gamma)S_1^y S_2^y + \Delta S_1^z S_2^z) + D_z(S_1^x S_2^y - S_1^y S_2^x) - B(g_1 S_1^z + g_2 S_2^z), \quad (1)$$

где $S_{1,2}^{x,y,z}$ компоненты спин-1/2 оператора, g_1, g_2 множители Ланде соответственно первой и второй частиц, J обменное взаимодействие между частицами, Δ и γ постоянные Z и XY анизотропии, B магнитное поле направленное по оси z .

Для собственных значений и собственных функций гамильтониана имеем следующие выражения

$$\varepsilon_{1,2} = -\frac{J\Delta}{4} \mp \frac{1}{2}\sqrt{B^2 g_-^2 + D_z^2 + J^2}, \quad (2)$$

$$\varepsilon_{3,4} = \frac{J\Delta}{4} \mp \frac{1}{2}\sqrt{B^2 g_+^2 + J^2 \gamma^2}, \quad (3)$$

$$\Psi_{1,2} = \frac{1}{\sqrt{1 + A_{\mp}^2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + A_{\mp}|\downarrow\uparrow\rangle), \quad (4)$$

$$\Psi_{3,4} = \frac{1}{\sqrt{1 + B_{\mp}^2}}(|\uparrow\uparrow\rangle + B_{\mp}|\downarrow\downarrow\rangle), \quad (5)$$

где введены следующие обозначения

$$A_{\mp} = \frac{Bg_- \mp \sqrt{B^2 g_-^2 + J^2 + D_z^2}}{\sqrt{J^2 + D_z^2}}, \quad (6)$$

$$B_{\mp} = \frac{Bg_+ \mp \sqrt{B^2 g_+^2 + J^2 \gamma^2}}{J\gamma}, \quad (7)$$

$$g_{\pm} = g_1 \pm g_2. \quad (8)$$

Зависимость собственных значений энергии от магнитного поля показана на Рис.1. Как видно из графика, существует значение магнитного поля, при котором наблюдается переход между основными состояниями Ψ_1 и Ψ_3 . Исходя из того, что собственные значения и собственные функции гамильтониана симметричны

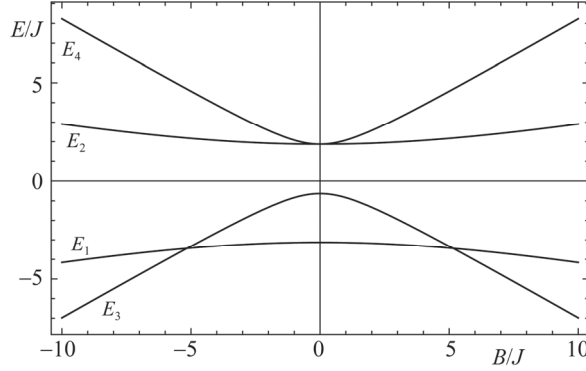


Рис.1. Зависимость собственных значений энергии от магнитного поля при $\Delta = 0.5$, $\gamma = 0.5$, $D = 0.1$, $J = 5$, $g_1 = 1$, $g_2 = 0.5$.

по отношению к знаку магнитного поля, будем рассматривать только положительные поля. Значение критического поля дается следующим выражением

$$B_c = \frac{\sqrt{2g_1g_2\Gamma_- + J\Delta\{(g_1^2 + g_2^2)J\Delta + \sqrt{4g_1^2g_2^2(g_1^2 + g_2^2)\Gamma_- + 2g_1g_2\Gamma_+} + (g_1^2 - g_2^2)^2J^2\Delta^2\}}}{2\sqrt{2}g_1g_2}, \quad (9)$$

где

$$\Gamma_{\pm} = D_z^2 + J^2(1 \pm \gamma^2). \quad (10)$$

Из выражений (4) и (5) видим, что при $g_- = 0$ получаются состояния $\Psi_{1,2} = 2^{-1/2}(|\uparrow\downarrow\rangle \pm |\downarrow\uparrow\rangle)$ а при $g_+ = 0$ состояния $\Psi_{3,4} = 2^{-1/2}(|\uparrow\uparrow\rangle \pm |\downarrow\downarrow\rangle)$. В этих случаях зависимость от магнитного поля отсутствует.

2.2. Гейзенберговская двухчастичная система со смешанными спинами

Для Гамильтониана двухчастичной системы со смешанными спинами имеем

$$H = J(S_1^x\mu_2^x + S_1^y\mu_2^y + \Delta S_1^z\mu_2^z) + D(\mu^z)^2 - B(g_1S_1^z + g_2\mu_2^z), \quad (11)$$

где $S_1^{x,y,z}$ компоненты спин-1/2 оператора а $\mu_2^{x,y,z}$ спин-1 оператора.

Для собственных значений и собственных функций гамильтониана получим следующие выражения

$$\varepsilon_{1,2} = \frac{1}{2}J\Delta + D \mp \frac{B}{2}(g_1 + 2g_2), \quad (12)$$

$$\varepsilon_{3,4} = -\frac{1}{4}(J\Delta - 2D + 2g_2B) \mp \frac{1}{4}\sqrt{(J\Delta - 2D - 2g_-B)^2 + 8J^2}, \quad (13)$$

$$\varepsilon_{5,6} = -\frac{1}{4}(J\Delta - 2D - 2g_2B) \mp \frac{1}{4}\sqrt{(J\Delta - 2D + 2g_-B)^2 + 8J^2}, \quad (14)$$

$$\Psi_{1,2} = |\mp 1/2, \mp 1\rangle, \quad (15)$$

$$\Psi_{3,4} = C_1^\pm | -1/2, 1 \rangle \mp C_1^\mp | 1/2, 0 \rangle, \quad (16)$$

$$\Psi_{5,6} = C_2^\pm | \frac{1}{2}, -1 \rangle \mp C_2^\mp | -\frac{1}{2}, 0 \rangle, \quad (17)$$

где введены следующие обозначения

$$C_1^\pm = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 \pm \frac{J\Delta - 2D - 2g_- B}{\sqrt{(J\Delta - 2D - 2g_- B)^2 + 8J^2}} \right)}, \quad (18)$$

$$C_2^\pm = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 \pm \frac{J\Delta - 2D + 2g_- B}{\sqrt{(J\Delta - 2D + 2g_- B)^2 + 8J^2}} \right)}. \quad (19)$$

Заметим, что при $g_- = 0$ состояния системы не зависят от магнитного поля. Состояния $\Psi_{3,4}$ имеют вид $| -1/2, 1 \rangle \mp | 1/2, 0 \rangle$ при условии $g_- = (2D - J\Delta)/(2B)$, а состояния $\Psi_{5,6} = | 1/2, -1 \rangle \mp | -1/2, 0 \rangle$ при $g_- = (J\Delta - 2D)/(2B)$. На Рис.2 представлена зависимость собственных значений энергии от магнитного поля.

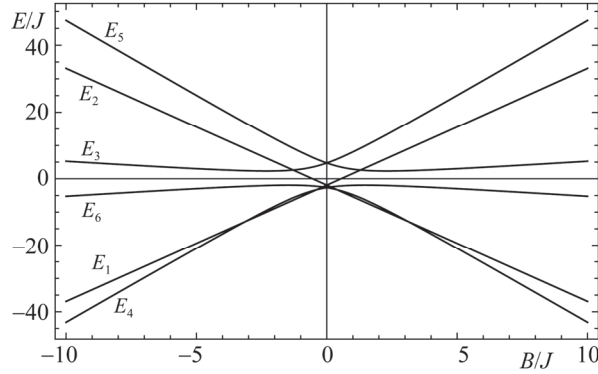


Рис.2. Зависимость собственных значений энергии от магнитного поля при $\Delta = 0.8$, $D = 0.1$, $J = -5$, $g_1 = 1$, $g_2 = -4$.

Система может находиться в одном из $\Psi_{1,2}, \Psi_4, \Psi_6$ основных состояний. Для перехода между состояниями Ψ_1, Ψ_4 критическое магнитное поле

$$B_c^{1,4} = \frac{\Gamma \pm \sqrt{8g_1g_2J(J - 2\Delta D - J\Delta^2) + \Gamma^2}}{4g_1g_2}, \quad (20)$$

где

$$\Gamma = 2Dg_1 + \Delta g_1J + 2\Delta g_2J. \quad (21)$$

Для перехода между состояниями Ψ_2, Ψ_6 имеем

$$B_c^{2,6} = -B_c^{1,4}. \quad (22)$$

3. Квантовая запутанность

Существуют различные методы для вычисления квантовой запутанности. В этой работе меру запутанности мы будем рассчитывать с помощью величин «совпадение» и «отрицательность».

Метод «совпадение» можно использовать только для систем с полуцелым спином а «отрицательность» для систем как с полуцелым, так и целым спинами [26].

3.1. Совпадение

Обозначим меру запутанности «совпадение» буквой C . Тогда

$$C = \max(0, \lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4), \quad (23)$$

где λ_i собственные значения матрицы R в порядке убывания. R вычисляется по формуле.

$$R = \sqrt{\sqrt{\rho} \tilde{\rho} \sqrt{\rho}}, \quad (24)$$

$$\tilde{\rho} = (\sigma_y \otimes \sigma_y) \rho^* (\sigma_y \otimes \sigma_y), \quad (25)$$

где ρ матрица плотности, а ρ^* ее комплексное сопряжение.

В случае квантовой запутанности – при температуре системы $T = 0$, матрица плотности для разных состояний зависит только от собственных функций данного состояния и задается следующей формулой [27,28]

$$\rho_i = |\Psi_i\rangle\langle\Psi_i|. \quad (26)$$

3.2. Отрицательность

Обозначим меру запутанности «отрицательность» переменной Ne . Тогда

$$Ne = \sum_{i=1} |\mu_i|, \quad (27)$$

где μ_i – отрицательные собственные значения ρ_1^T , транспонирования матрицы плотности по отношению к одной подсистеме [29]

$$\langle i_1, j_2 | \rho_1^T | k_1, l_2 \rangle = \langle k_1, j_2 | \rho | i_1, l_2 \rangle. \quad (28)$$

4. Результаты

4.1. Спин-1/2 димер

Рассмотрим зависимость запутанности от g_2 при некоторых фиксированных значениях остальных параметров системы и магнитного поля.

Предполагая отсутствие квантовых переходов получим, что

максимальная запутанность для Ψ_1 соответствует точке $g_2 = g_1$, а для Ψ_3 – $g_2 = -g_1$. Отдаляясь от точек максимума запутанность будет монотонно убывать.

Зависимость же от магнитного поля при фиксированных параметрах системы следующая – запутанность имеет максимальное значение в точке $B = 0$ и убывает с ростом магнитного поля. Максимальное значение запутанности $C_{\max} = 0.5$ обусловлено свойствами данной системы.

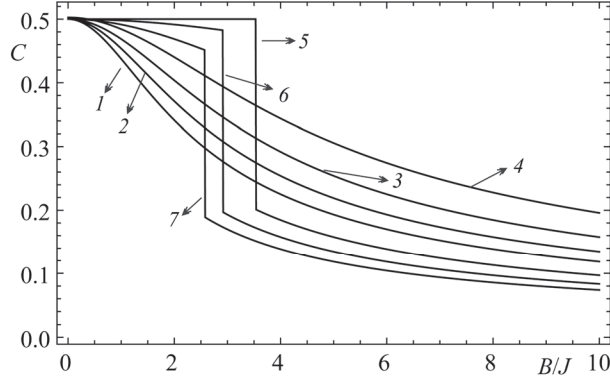


Рис.3. Зависимость совпадение от магнитного поля при $\Delta = 0.5$, $D = 0.1$, $\gamma = 0.5$, $J = 5$, $g_1 = 1$, где кривые 1–7 соответствуют значениям $g_2 = -2; -1.5; -1; -0.5; 1; 1.5; 2$.

Теперь рассмотрим зависимость C от магнитного поля для нескольких значений g_2 причем в этот раз учтем также квантовые переходы (см. Рис.3). Для отрицательных g_2 имеем, что система находится в состоянии Ψ_1 вне зависимости от магнитного поля. Максимальное значение достигается только в точке $B = 0$.

Для положительных же g_2 имеем переход $\Psi_1 \mapsto \Psi_3$ в критической точке, которая, вообще говоря, зависит от значения g_2 . Максимум достигается до перехода при выполнении вышеупомянутых условий; переходу соответствует скачок

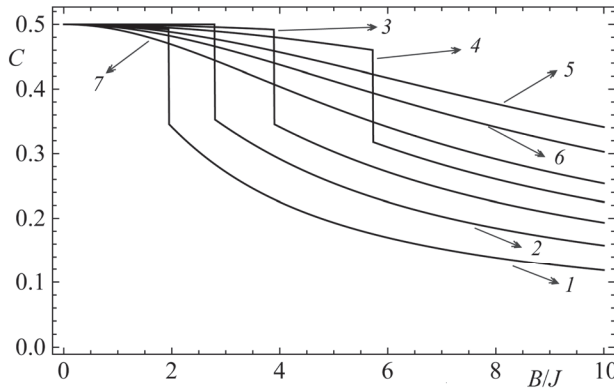


Рис.4. Зависимость совпадение от магнитного поля при $\Delta = 0.5$, $D = 0.1$, $\gamma = 2$, $J = 5$, $g_1 = 1$ где кривые 1–7 соответствуют значениям $g_2 = -2; -1; -0.5; -0.2; 0.2; 0.5; 1$.

вниз, после которого запутанность идет на спад.

Рассмотрим другой случай (см. Рис.4). Здесь для отрицательных g_2 имеет место переход $\Psi_3 \mapsto \Psi_1$. Максимум достигается до него, при $B = 0$ и $g_2 = -1$. При положительных g_2 система находится в состоянии Ψ_3 . Уменьшению g_2 соответствует возрастание запутанности.

4.2. Спин-(1/2,1) димер

Как и в предыдущем случае, сначала пренебрежем квантовыми переходами и рассмотрим зависимость запутанности от g_2 при фиксированных значениях остальных параметров системы и магнитного поля.

Видим, что для Ψ_4 максимальная запутанность системы достигается при условии $g_2 = g_1 - (J\Delta - 2D)/(2B)$ а для Ψ_6 — $g_2 = g_1 - (J\Delta - 2D)/(2B)$. А с ростом магнитного поля запутанность монотонно убывает от максимального значения $Ne_{max} = 0.5$.

Теперь рассмотрим зависимость Ne от магнитного поля для нескольких значений g_2 (см. Рис.5). В этом случае при отрицательных g_2 система находится в состоянии Ψ_6 . При положительных же g_2 имеем переход $\Psi_4 \mapsto \Psi_1$. Максимальное значение запутанности для $\Psi_{4,6}$ при данных параметрах соответствует условию $g_2 = 1 \mp 0.9/B$ соответственно.

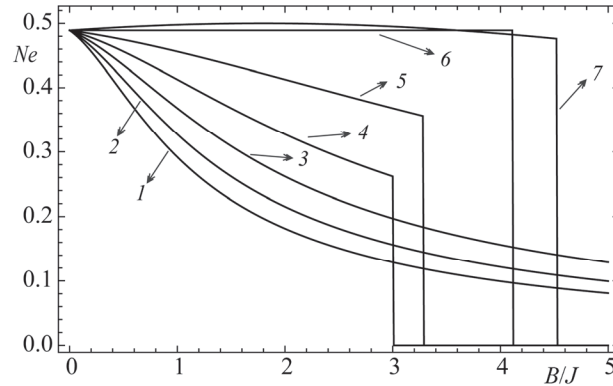


Рис.5. Зависимость отрицательности от магнитного поля при $\Delta = 0.8$, $D = 0.3$, $J = 3$, $g_1 = 1$, где кривые 1–7 соответствуют значениям $g_2 = -4; -3; -2; 3; 2; 1; 0.5$.

На Рис.6 при $g_2 < -2.2$ имеем переходы $\Psi_6 \mapsto \Psi_2 \mapsto \Psi_6$. При $-2.2 < g_2 < 0$ система находится в состоянии Ψ_6 . При положительных g_2 происходит переход $\Psi_4 \mapsto \Psi_1$. Максимальное значение запутанности для $\Psi_{4,6}$ для данных параметров достигается при $g_2 = 1 \pm 2.3/B$ соответственно.

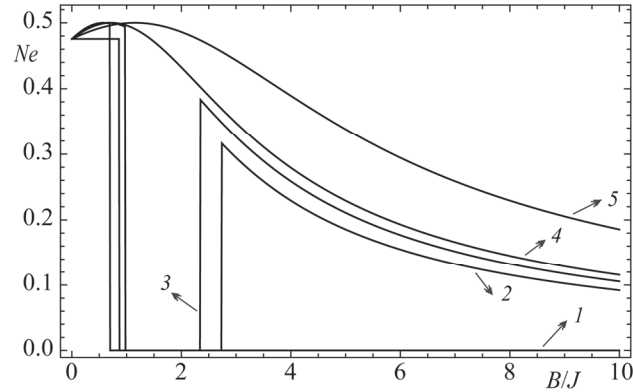


Рис.6. Зависимость отрицательности от магнитного поля при $\Delta = 0.8$, $D = 0.3$, $J = -5$, $g_1 = 1$, где кривые 1–5 соответствуют значениям $g_2 = 1; -3; -2.5; -2.2; -1$.

При заданных параметрах можно контролировать систему с помощью магнитного поля и достичь максимального значения запутанности при поле $B = \pm(J\Delta - 2D)/(2g_-)$ для состояний $\Psi_{4,6}$ соответственно.

5. Заключение

В данной работе была рассмотрена задача оптимизации и манипуляции квантовой запутанностью в двухспиновых квантовых системах, квантовых димерах. Были проанализированы две простейшие системы, димер со спинами $1/2$ и смешанный димер со спинами 1 и $1/2$.

В случае димера со смешанным спином воздействие любых заданных параметров системы можно компенсировать некоторым магнитным полем и таким образом получить максимальное возможное для системы значение запутанности.

В случае антиферромагнетика при повышении значения магнитного поля обе системы переходят в состояние с меньшей запутанностью. Для ферромагнетиков же при положительном g_1 существуют некоторые отрицательные значения g_2 , при которых система переходит в состояние с большей запутанностью.

Это свойство весьма важно, так как указывает на весьма нетривиальный факт возможности реализации запутанных состояний в спиновых системах с чисто ферромагнитным взаимодействием между частицами. Запутанность возникает в этом случае из-за различия в знаках g -факторов, которое приводит к не коммутативности оператора магнитного момента и гамильтониана системы.

Авторы благодарны Н.С. Ананикяну и Л.Н. Ананикяну за плодотворные обсуждения, а так же А.Г. Саргсяну, М.Г. Асатрян, А.С. Котанджян за помощь в подготовке текста.

ЛИТЕРАТУРА

1. **L. Amico, R. Fazio, A. Osterloh, V. Vedral.** Rev. Mod. Phys., **80**, 517 (2008).
2. **O. Gühne, G. Tóth.** Phys. Reports, **474**, 1 (2009).
3. **C.H. Bennett, D.P. DiVincenzo, J.A. Smolin, W.K. Wootters.** Phys. Rev. A, **54**, 3824 (1996).
4. **C.H. Bennett, G. Brassard, S. Popescu, B. Schumacher, J.A. Smolin, W.K. Wootters.** Phys. Rev. Lett., **76**, 722 (1996).
5. **A.K. Ekert.** Nature (London), **358**, 14 (1992).
6. **C.H. Bennett, G. Brassard, C. Crépeau, R. Jozsa, A. Peres, W.K. Wootters.** Phys. Rev. Lett., **70**, 1895 (1993).
7. **D. Bouwmeester, J.W. Pan, K. Mattle, M. Eibl, H. Weinfurter, A. Zeilinger.** Nature (London), **390**, 575 (1997).
8. **J. Cho, H.-W. Lee.** Phys. Rev. Lett., **95**, 160501 (2005).
9. **X.-M. Jin, J.-G. Ren, B. Yang, Z.-H. Yi, F. Zhou, X.-F. Xu, S.-K. Wang, D. Yang, Y.-F. Hu, S. Jiang, T. Yang, H. Yin, K. Chen, C.-Z. Peng, J.-W. Pan.** Nature Photonics, **4**, 376 (2010).
10. **M. Baur, A. Fedorov, L. Steffen, S. Filipp, M.P. da Silva, A. Wallraff.** Phys. Rev. Lett., **108**, 040502 (2012).
11. **G. Björk, A. Laghaout, U.L. Andersen.** Phys. Rev. A, **85**, 022316 (2012).
12. **P. Kok, W.J. Munro, K. Nemoto, T.C. Ralph, J.P. Dowling, G.J. Milburn.** Rev. Mod. Phys., **79**, 135 (2007).
13. **J. Kim, J.-S. Lee, S. Lee, C. Cheong.** Phys. Rev. A, **62**, 022312 (2000).
14. **A. Brodutch, D.R. Terno.** Phys. Rev. A, **83**, 010301(R) (2011).
15. **V. Vedral, E. Kashefi.** Phys. Rev. Lett., **89**, 037903 (2002).
16. **M. Sasaki et al.** Optics Express, **19**, 10387 (2011).
17. **A. Avella, G. Brida, I.P. Degiovanni, M. Genovese, M. Gramegna, P. Traina.** Phys. Rev. A, **82**, 062309 (2010).
18. **S. Bose,** Phys. Rev. Lett., **91**, 207901 (2003).
19. **N.S. Ananikyan, L.N. Ananikyan, L.A. Chakhmakhchyan, O. Roja.** Journal of Physics: Condensed Matter, **24**, 25 (2012).
20. **V.S. Abgaryan.** J. Contemp. Phys. (Armenian Ac. Sci.), **49**, 249 (2014).
21. **L.N. Ananikyan, H.A. Lazaryan.** J. Contemp. Phys. (Armenian Ac. Sci.), **46**, 184 (2011).
22. **G. Burkard, D. Loss, D.P. DiVincenzo,** Phys. Rev. A, **59**, 2070 (1999).
23. **B.E. Kane.** Nature, **393**, 133 (1998).
24. **R. Vrijen, E. Yablonovitch, K. Wang, H.W. Jiang, A. Baladin, V. Roychowdhury, T. Mor, D. DiVincenzo.** Phys. Rev. A, **62**, 012306 (2000).
25. **V. Ohanyan, O. Rojas, J. Strecka, S. Bellucci,** Phys. Rev. B, **92**, 214423 (2015).
26. **R. Horodecki, P. Horodecki, M. Horodecki, K. Horodecki.** Rev. Mod. Phys., **81**, 865 (2009).
27. **W.K. Wootters.** Phys. Rev. Lett., **80**, 2245 (1998).
28. **L. Amico, A. Osterloh, F. Plastina, R. Fazio, G.M. Palma.** Phys. Rev. A, **69**, 022304 (2004).
29. **G. Vidal, R.W. Werner.** Phys. Rev. A, **65**, 032314 (2002).

ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ԽՃՃՎԱԾՈՒԹՅՈՒՆԸ ՍՊԻՆԱՅԻՆ ԵՐԿՄԱՍՆԻԿԱՆԻ
ՀԱՄԱԿԱՐԳԵՐՈՒՄ ՄԱԳՆԻՍԱԿԱՆ ԴԱՇՏԻ
ԵՎ ԱՆՀԱՄԱՍԵՌ g -ՖԱԿՏՈՐՆԵՐԻ ԷՖԵԿՏՆԵՐԸ

Ժ.Ա. ԱԴԱՄՅԱՆ, Ս.Ա. ՄՈՒՐԱԴՅԱՆ, Վ.Ռ. ՕՀԱՆՅԱՆ

Տվյալ աշխատանքում կուսումնասիրվեն սպին-1/2 և խառը սպին-(1/2,1) Հայզենբերգի մոդելի երկմասնիկանի համակարգերը ու նրանց քվանտային խճճվածությունը, մասնավորապես խճճվածության կախումը համակարգի տարբեր բնութագրերից և արտաքին մագնիսական դաշտից: Աշխատանքում քվանտային խճճվածության կարգը որոշվում է երկու տարբեր մեթոդներով՝ "negativity" և "concurrence": Քնարկվում է համապատասխան մեծությունների կախումը սպինների Լանդեի g -ֆակտորներից, համակարգի անիզոտրոպության հաստատուններից և մասնիկների փոխանակային էներգիայից:

QUANTUM ENTANGLEMENT IN SPIN DIMERS: EFFECTS
OF A MAGNETIC FIELD AND HETEROGENEOUS g -FACTORS

Z.A ADAMYAN, S.A MURADYAN, V.R. OHANYAN

In the work, the spin-1/2 Heisenberg dimer, the mixed spin-(1/2,1) Heisenberg dimer and their quantum entanglement are considered, particularly the dependence of the entanglement on the system characteristics and the external magnetic field. The quantum entanglement in this work is determined using two different methods, namely "Negativity" and "Concurrence". The dependence of the corresponding quantities on spins' Landé g -factors, system anisotropy constants and exchange constant is discussed.

АНАЛИЗ РЕШЕНИЙ УРАВНЕНИЯ ГЕЛЬМГОЛЬЦА ДЛЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН В СРЕДАХ С САМОВОЗДЕЙСТВИЕМ МЕТОДОМ ФАЗОВОЙ ПЛОСКОСТИ

О.В. БАГДАСАРЯН¹, В.А. ВАРДАНИЯН², А.В. ДАРЬЯН^{3*}

¹Национальный политехнический университет Армении, Ереван, Армения

²Российско–Армянский университет, Ереван, Армения

³Национальная научная лаборатория им. А.И. Алиханяна, Ереван, Армения

*e-mail: daryan.ara@gmail.com

(Поступила в редакцию 26 февраля 2020 г.)

В данной статье описывается применение метода фазовой плоскости для анализа поведения стационарных плоских гармонических электромагнитных волн. Метод фазовой плоскости позволяет качественно описать все возможные решения нелинейного дифференциального уравнения Гельмгольца без проведения численного интегрирования. Представлены все типы фазовых портретов для волн в средах с самодействием и обсуждается их физическая интерпретация. Рассмотрение проводится на модели кубической нелинейности без уточнения физического механизма нелинейности. Обсуждаются особенности нелинейного случая. Описано явление самоограничения мощности передаваемой волны в среде с отрицательной нелинейностью.

1. Введение

Метод фазовой плоскости – это графический метод, позволяющий качественно анализировать поведение систем, описываемых дифференциальными уравнениями второго порядка [1,2]. Под фазовой плоскостью понимается плоскость, каждая точка которой однозначно определяет состояние (фазу) системы.

Основным преимуществом метода фазовой плоскости является его применимость к анализу как линейных, так и нелинейных систем. Некоторые важные свойства нелинейных систем, которые невозможно или трудно исследовать аналитически, поддаются качественному исследованию и интерпретации путём графического анализа на фазовой плоскости.

Метод фазовой плоскости в теории распространения электромагнитных волн был разработан в рамках метода единого выражения (МЕВ) [3,4]. Метод единого выражения разработан для решения стационарной краевой задачи в электродинамике. Поле в МЕВ представляется в виде единого выражения,

которое полностью описывает результирующую амплитуду и фазу электромагнитной волны и, следовательно, не требует выполнения принципа суперпозиции, в отличие от обычного подхода в виде суперпозиции встречных волн. Таким образом, метод пригоден для анализа волновых процессов в средах с самовоздействием [3,4], включая анализ методом фазовой плоскости [4–6].

Хотя метод фазовой плоскости для колебательных систем хорошо развит, его применение к волновым системам требует собственного подхода. Причина в том, что в случае колебательных систем анализируется временное поведение амплитуды, а фазовые координаты представляют собой амплитуду колебания и его производную по времени, тогда как в случае волновых систем анализируется пространственное поведение амплитуды и, соответственно, фазовые координаты являются амплитудой колебаний и их производной по пространственной координате. Поэтому аналогия с теорией колебаний не помогает выявить связь фазовых портретов с физическими условиями протекания волновых процессов и объяснить их особенности. В данной статье описан метод построения и анализа фазовых портретов стационарных плоских гармонических электромагнитных волн в средах с самовоздействием. Представлены все типы фазовых портретов для волн в средах с кубической нелинейностью и обсуждена их физическая интерпретация.

2. Метод фазовой плоскости в МЕВ

Распространение плоской гармонической волны в среде с диэлектрической проницаемостью ε описывается уравнением Гельмгольца, которое в одномерном случае имеет вид:

$$\frac{d^2 \dot{E}_x(z)}{dz^2} + k_0^2 \varepsilon \dot{E}_x(z) = 0, \quad (1)$$

где $k_0 = \omega/c$ – волновое число в свободном пространстве, комплексная функция $\dot{E}_x(z)$ – линейно поляризованная вдоль оси x составляющая электрического поля, распространяющегося вдоль оси z . Временная зависимость вида $e^{i\omega t}$ подразумевается, но не участвует в дальнейшем анализе. Диэлектрическая проницаемость среды ε является действительной величиной для сред без усиления и без потерь. В случае сред с самовоздействием диэлектрическая проницаемость зависит от интенсивности волны.

Решение волнового уравнения в МЕВ представляется в виде [3,4]:

$$\dot{E}(z) = U(z) \cdot \exp(-iS(z)), \quad (2)$$

где $U(z)$ и $S(z)$ – реальные величины, описывающие пространственные распределения амплитуды и фазы, соответственно. Подставив (2) в уравнение Гельмгольца (1), получим систему дифференциальных уравнений для $U(z)$ и $S(z)$:

$$\frac{dU}{dk_0 z} = Y, \quad (3)$$

$$\frac{dY}{dk_0 z} = \frac{R^2 - \varepsilon(U^2)U^4}{U^3}, \quad (4)$$

где

$$P = U(z)^2 \frac{dS(z)}{dk_0 z} \quad (5)$$

постоянная, пропорциональная плотности потока энергии в среде [3–6].

Система уравнений (3,4) даёт возможность проведения качественного анализа методом фазовой плоскости [4–6]. Чтобы получить фазовые траектории $Y(U)$ системы, необходимо исключить координату z . Это можно сделать, разделив уравнение (4) на (3) после чего получаем:

$$\frac{dY}{dU} = \frac{P^2 - \varepsilon(U^2) \cdot U^4}{U^3 \cdot Y}. \quad (6)$$

Интегрируя (6), получаем уравнение фазовых траекторий:

$$Y^2 + \frac{P^2}{U^2} + 2 \int \varepsilon(U^2) U \cdot dU = C, \quad (7)$$

где C – постоянная интегрирования, которая определяет конкретную траекторию в фазовом портрете.

Координаты особых точек (U_s, Y_s) , то есть точек, в которых направление касательной к фазовой траектории не определено [1,2], в нашем случае даются соотношением:

$$\begin{cases} P^2 = \varepsilon(U_s^2) \cdot U_s^4, \\ Y_s = 0. \end{cases} \quad (8)$$

Фазовый портрет представляет собой семейство фазовых траекторий, описываемых уравнением (7) для фиксированного P и различных значений параметра C , включая особые точки (8).

Интегрирование (3) вдоль фазовой траектории дает неявную зависимость U от z :

$$(z - z_0)k_0 = \int_{U_0}^U \frac{dU}{Y(U)}, \quad (9)$$

где функция $Y(U)$ определяется формулой (7).

Физическая интерпретация фазовых портретов волн в самодействующих средах не всегда очевидна. Поэтому сначала рассмотрим фазовые портреты волн в линейных однородных средах. Физическая интерпретация в этом случае довольно проста, поскольку все решения волнового уравнения в линейных

однородных средах хорошо известны. Это рассмотрение послужит основой для анализа фазовых портретов в случае самовоздействия электромагнитных волн.

3. Фазовые портреты систем, описывающих волны в линейных однородных средах

3.1. Случай нулевого потока энергии ($P = 0$)

Если $P = 0$, то из (5) следует, что на участках, где $U(z) \neq 0$ наблюдаются синхронные колебания в среде. В точках, где $U(z) = 0$ и $Y(z) \neq 0$, фаза меняется на π . Уравнение фазовых траекторий (7) в случае $P = 0$ и $\varepsilon = \text{const}$ принимает форму

$$Y^2 + \varepsilon U^2 = C, \quad (10)$$

и координаты (8) особой точки:

$$U_s = 0, Y_s = 0. \quad (11)$$

Форма фазовых траекторий (10) зависит от знака диэлектрической проницаемости. Это эллипсы (если $\varepsilon > 0$) или гиперболы (если $\varepsilon < 0$). Поэтому мы обсудим эти случаи по-отдельности.

Случай $P = 0$, $\varepsilon > 0$. Фазовый портрет в среде с положительной диэлектрической проницаемостью состоит из эллипсов с особой точкой типа «центр» в нулевой точке, как показано на рисунке 1. Эллипсам соответствуют стоячие волны, образованные суперпозицией двух встречных волн с равными амплитудами. Каждый эллипс соответствует определенной амплитуде волны в соответствии с величиной константы C . Один виток вдоль фазовой траектории соответствует длине волны λ . Длина волны в линейном случае не зависит от амплитуды волны. Это свойство аналогично изохронизму маятника [1]. Волны в нелинейной среде не обладают этим свойством. Изменение знака U при пересечении оси Y означает изменение фазы на π в узлах электрического поля. Особая точка типа «центр» соответствует отсутствию поля.

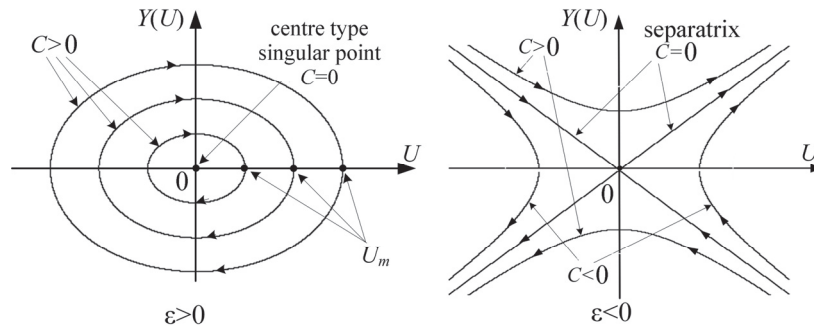


Рис.1. Фазовый портрет системы (3,4) для линейной однородной среды без потерь или усиления в случае $P = 0$.

Случай $P = 0$, $\varepsilon < 0$. Фазовый портрет в однородных средах с отрицательной диэлектрической проницаемостью состоит из двух пар гипербол (рис.1). Сепаратрисы – это прямые, проходящие через особую точку типа «седло» (0.0). Поскольку амплитуда U и ее производная Y не ограничены на фазовых траекториях, фазовые траектории имеют физический смысл только в ограниченной области фазового пространства.

В случае $C \neq 0$ ограниченная область фазового пространства означает ограниченный сегмент в физическом пространстве, то есть на оси z . Таким образом, фазовые траектории волн с $C \neq 0$ имеют место только в слоях конечной толщины. Физически эти траектории реализуются путем падения волн с одинаковыми амплитудами с обеих сторон слоя. При этом поле в среде является суперпозицией экспоненциально убывающих полей. Выбор режима осуществляется путем установления граничных условий на соответствующей фазовой траектории [4–6].

В случае $C = 0$ любой отрезок фазовой траектории (сепаратрисы), содержащий особую точку, соответствует неограниченному отрезку на оси z , поскольку интеграл (9) расходится. Таким образом, сепаратриса может быть реализована как в ограниченном слое, так и в полупространстве. Последнее соответствует полному отражению от полупространства с отрицательной диэлектрической проницаемостью, где поле экспоненциально уменьшается до нуля при $z \rightarrow \infty$.

3.2. Случай ненулевого потока энергии ($P \neq 0$)

Для линейной среды ($\varepsilon = \text{const}$) из (7) имеем следующее выражение для фазовых траекторий:

$$Y^2 + \frac{P^2}{U^2} + \varepsilon U^2 = C. \quad (12)$$

Координаты особых точек для этого случая получаются из (8):

$$U_s = \pm \sqrt[4]{P^2 / \varepsilon}, \quad Y_s = 0. \quad (13)$$

Случай $P \neq 0$, $\varepsilon > 0$. Фазовый портрет в среде с положительной диэлектрической проницаемостью ($\varepsilon > 0$) состоит из пар замкнутых кривых и двух особых точек типа «центр», как показано на рис.2 (показана правая ветвь). Левая и правая ветви каждой фазовой траектории описывают волны с противоположными знаками (сдвиг фазы на π).

Замкнутые траектории соответствуют суперпозиции встречных волн с разными амплитудами. Здесь, в отличие от случая стоячих волн ($P = 0$), один оборот вдоль фазовой траектории соответствует расстоянию, равному половине длины волны. Особая точка соответствует волне с постоянной амплитудой U_s , из чего следует, что в этом случае мы имеем бегущую волну. Действительно, из

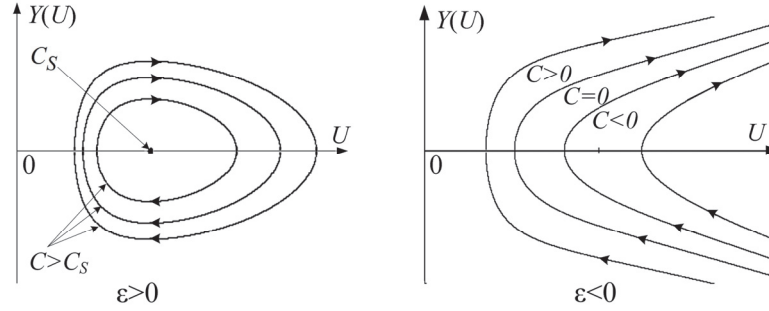


Рис.2. Фазовый портрет системы (3,4) для линейной однородной среды без потерь или усиления в случае $P \neq 0$.

(5), учитывая (4), получаем фазовое распределение: $S(z) = -k_0 \sqrt{\varepsilon} \cdot z$ (или $S(z) = k_0 \sqrt{\varepsilon} \cdot z$).

Случай $P \neq 0$, $\varepsilon < 0$. Как видно из (13), в случае отрицательной диэлектрической проницаемости особой точки нет, т.е. нет бегущей волны. Фазовый портрет состоит из пар разомкнутых кривых (Рис.2, показана правая ветвь). Поскольку значения U и Y на фазовых траекториях не ограничены, фазовые траектории имеют физический смысл только в ограниченной области фазового пространства. Любой конечный отрезок фазовой траектории соответствует ограниченному интервалу z . Это указывает на то, что в средах с отрицательной диэлектрической проницаемостью случай $P \neq 0$ возможен только в слоях конечной толщины.

4. Фазовые портреты систем, описывающих волны в изначально однородных средах с кубической нелинейностью

Зависимость диэлектрической проницаемости от напряженности поля в случае кубической нелинейности имеет вид

$$\varepsilon = \varepsilon_0 + \varepsilon_2 U^2, \quad (14)$$

где ε_0 – начальная диэлектрическая проницаемость среды (при $U = 0$), а ε_2 – параметр нелинейности среды.

Уравнение фазовых траекторий и координат особых точек U_s , Y_s получим из (7) и (8) с учетом (14):

$$Y^2 + \frac{P^2}{U^2} + \varepsilon_0 U^2 + \varepsilon_2 \frac{U^4}{2} = C, \quad (15)$$

$$P^2 - \varepsilon_0 U_s^4 - \varepsilon_2 U_s^6 = 0, \quad (16)$$

$$Y_s = 0. \quad (17)$$

Положение особых точек и тип фазового портрета в случае среды с кубической нелинейностью зависят от значения P и знаков ε_0 и ε_2 . Все возможные случаи даны в таблице 1, которая содержит координаты, число и типы особых

Табл.1.

Sign of $\varepsilon, \varepsilon_0$	Picture number	Flow	Singular points			$\varepsilon(U_S)$
			Coordinates	number	type	
$\varepsilon_0 > 0, \varepsilon_2 > 0$	Fig.1, $P = 0$	$P = 0$	$U_S = 0, Y_S = 0$	1	center	$\varepsilon = \varepsilon_0$
	Fig.2, $P \neq 0$	$P \neq 0$	$U_S = \pm a, Y_S = 0$	2	center	$\varepsilon > 0$
$\varepsilon_0 < 0, \varepsilon_2 < 0$	Fig.1, $P = 0$	$P = 0$	$U_S = 0, Y_S = 0$	1	saddle	$\varepsilon = \varepsilon_0$
	Fig.2, $P \neq 0$	$P \neq 0$	-----	0	-----	-----
$\varepsilon_0 < 0, \varepsilon_2 > 0$	Fig.3	$P = 0$	$U_{S0} = 0, Y_S = 0$ $U_S = \pm \phi, Y_S = 0$	1 2	saddle center	$\varepsilon = \varepsilon_0$ $\varepsilon = 0$
		$P \neq 0$	$U_S = \pm a, Y_S = 0$	2	center	
$\varepsilon_0 > 0, \varepsilon_2 < 0$	Fig.4	$P = 0$	$U_{S0} = 0, Y_S = 0$ $U_S = \pm \phi, Y_S = 0$	1 2	center saddle	$\varepsilon = \varepsilon_0$ $\varepsilon = 0$
		$P < \gamma$	$U_{S0} = \pm a, Y_S = 0$ $U_S = \pm b, Y_S = 0$	2 2	center saddle	$0 < \varepsilon < \varepsilon_0$ $0 < \varepsilon < \varepsilon_0$
		$P = \gamma$	$U_S = \pm \phi, Y_S = 0$	2	cusp	$\varepsilon = \varepsilon_0/3$
		$P > \gamma$	-----	0	-----	-----
	Fig.5	$P = \gamma$	$U_S = \pm \phi, Y_S = 0$	2	cusp	$\varepsilon = \varepsilon_0/3$

точек, а также значение диэлектрической проницаемости в особой точке.

В таблице приняты следующие обозначения: $\phi = \sqrt{-\varepsilon_0 / \varepsilon_2}$, $\varphi = \sqrt{-2\varepsilon_0 / 3\varepsilon_2}$, $\gamma = \sqrt{\varepsilon_0^3 / 3\varepsilon_2^2}$, a и b являются положительными решениями уравнения (16). Каждому случаю, указанному в таблице 1 соответствует конкретный тип фазового портрета. Для всех портретов с $P \neq 0$ на рисунках показана только правая ветвь, соответствующая $U > 0$.

4.1. Случай сред с $\varepsilon_0 > 0, \varepsilon_2 > 0$ и $\varepsilon_0 < 0, \varepsilon_2 < 0$

Фазовые портреты в этих случаях топологически сходны с соответствующим портретом в линейной среде (рис.1,2). Это связано с соотношением знаков ε_0 и ε_2 , при котором увеличение амплитуды не может изменить знак диэлектрической проницаемости, что изменило бы тип фазового портрета. Все разъяснения, касающиеся физического смысла траекторий в линейном случае, действительны и в этом случае. Распределение амплитуд в нелинейных средах в этих случаях описывается эллиптическими функциями Якоби [4].

4.2. Случай среды с $\varepsilon_0 < 0, \varepsilon_2 > 0$

При $P = 0$ фазовые траектории стоячих волн при малых U (рис.3) напоминают фазовые портреты для линейных сред с $\varepsilon < 0$ (рис.1). При достаточно большом U диэлектрическая проницаемость становится положительной, и поведение поля такое же, как в линейной среде с $\varepsilon > 0$ (рис.1). Все фазовые траектории

локализованы в ограниченной области фазового пространства.

Каждая фазовая траектория, за исключением сепаратрисы и особых точек, описывает периодические стоячие волны в z , которые могут быть реализованы как в ограниченной, так и в неограниченной области физического пространства. Стоячие волны в ограниченной области физического пространства реализуются в результате падения волн с обеих сторон среды. Особая точка типа «центр» описывает синхронные колебания с постоянной амплитудой во всей среде.

Любой сегмент сепаратрисы, содержащий особую точку, соответствует неограниченному отрезку на оси z , то есть описывает полное отражение волны от нелинейного полупространства. Если $C < 0$, наблюдаются две одинаковые моды стоячих волн (для каждого значения C) с противоположными фазами. Пространственный период зависит от значения C , в отличие от волн в линейных средах. Если $C > 0$, существует одна мода стоячей волны с периодическим изменением знака (сдвигом фазы на π) вдоль оси z . Выбор режима осуществляется путем установления граничных условий на соответствующей фазовой траектории [4–6].

При $P \neq 0$ фазовые траектории (рис.3) не обладают какой-либо интересной особенностью и имеют физическую интерпретацию, как в линейном случае с $\varepsilon > 0$ (рис.1). Если $C > C_1$, среда превращается в многослойную структуру со знакопеременной диэлектрической проницаемостью. Особая точка C_S указывает на существование бегущей волны.

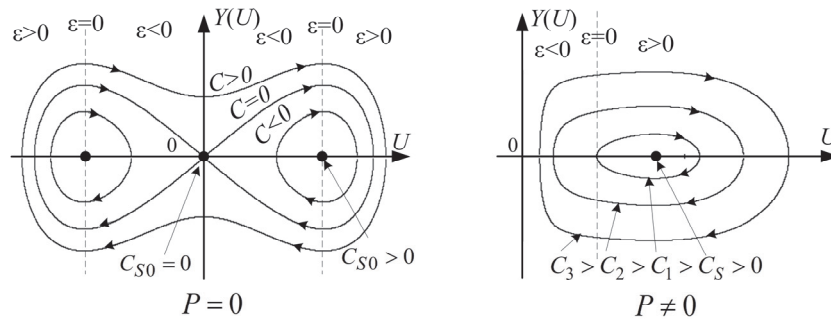


Рис.3. Фазовый портрет системы (3,4) для среды с кубической нелинейностью, когда $\varepsilon_0 < 0$, $\varepsilon_2 > 0$.

4.3. Случай среды с $\varepsilon_0 > 0$, $\varepsilon_2 < 0$

Этот случай является наиболее сложным, в котором возможны четыре типа фазового портрета в зависимости от значения P (см. Табл.1).

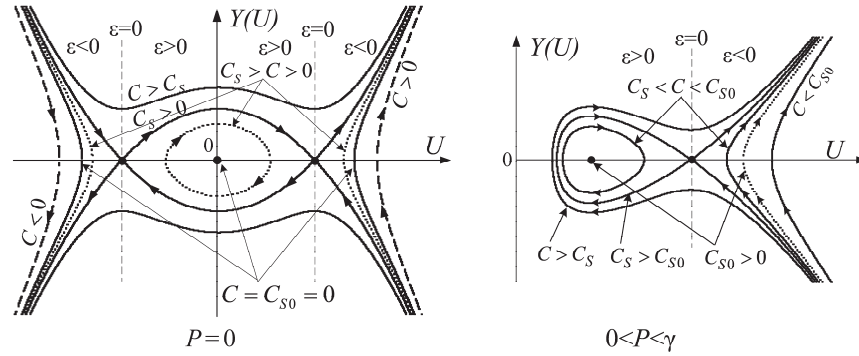


Рис.4. Фазовые портреты системы (3,4) для среды с кубической нелинейностью, когда $\varepsilon_0 > 0$, $\varepsilon_2 < 0$ в случаях $P = 0$ и $0 < P < \gamma$.

При $P = 0$ фазовые траектории стоячих волн (рис.4) при малых амплитудах поля аналогичны фазовым траекториям стоячих волн в линейной среде с $\varepsilon > 0$ (рис.1). Для больших амплитуд они аналогичны фазовым траекториям стоячих волн в линейной среде с $\varepsilon < 0$ (рис.1) и поэтому имеют физический смысл только в ограниченной области фазового пространства. Любой сегмент сепаратрисы, включающий особую точку, соответствует синхронным колебаниям асимптотически ($z \rightarrow \infty$) постоянной амплитуды.

Стоячие волны реализуются путем падения волн с одинаковой амплитудой на обе стороны ограниченной области физического пространства. Падающие волны малой амплитуды, которые не могут изменить знак диэлектрической проницаемости, возбуждают синхронные колебания с периодическим изменением амплитуды $U(z)$ (пунктирная линия $C_s > C > 0$). Диэлектрическая проницаемость остается положительной. Увеличение амплитуды падающих волн приводит к появлению сегмента сепаратрисы типа глаза. Если прикладываются большие амплитуды, мы попадаем на траекторию с $C < 0$ (пунктирная линия) с аperiodическим поведением. Уменьшая амплитуду, мы сначала достигаем траектории с $C = 0$. Дальнейшее уменьшение приводит к расходящимся ветвям сепаратрисы. Фазовые траектории с $C > C_s$ соответствуют граничным условиям с большими значениями U и Y .

При малых потоках энергии ($0 < P < \gamma$) наблюдается периодическое или аperiodическое распределение амплитуды поля (рис.4). Особая точка типа «центр» описывает бегущую волну, а особая точка типа «седло» описывает асимптотически ($z \rightarrow \infty$) бегущую волну. Если падающая волна имеет малую амплитуду, то мы остаемся в области с $\varepsilon > 0$ и получаем траектории, аналогичные траекториям для сред с $\varepsilon > 0$ (рис.2). Увеличение U преобразует траекторию в замкнутую сепаратрису.

Начиная с достаточно большой амплитуды U , мы попадаем на пунктирную траекторию или правее. Это дает аperiodическое поведение поля.

Уменьшение U превращает траекторию в расходящиеся ветви сепаратрисы. Любым отрезком сепаратрисы, содержащий особую точку, соответствует частичному отражению волны от полупространства.

Выбор режима осуществляется путем установления граничных условий на соответствующей фазовой траектории [4–6]. Наличие разных траекторий с одним и тем же значением C означает возможность бистабильности.

При $P = \gamma$ наблюдается только аperiодическое распределение поля (рис.5) и возникает особая точка типа «клюв». Все траектории могут быть реализованы только в ограниченной области физического пространства. Исключение составляют сегменты сепаратрисы, содержащие особую точку. Этот случай соответствует падению волны на нелинейное полупространство. Здесь нет полного отражения, как в случае линейной среды с $\varepsilon < 0$. Причина этого в том, что вдоль оси z из-за нелинейности устанавливается определенное распределение диэлектрической проницаемости.

При $P > \gamma$ (рис.5) особой точки нет и, соответственно, нет фазовой траектории, соответствующей неограниченной области физического пространства. Это приводит к заключению, что когда волна падает на нелинейное полупространство, происходит самоограничение потока энергии значением $P = \gamma$. Это явление было проанализировано путем прямого интегрирования системы дифференциальных уравнений (3,4) и получено согласие с качественным анализом [4].

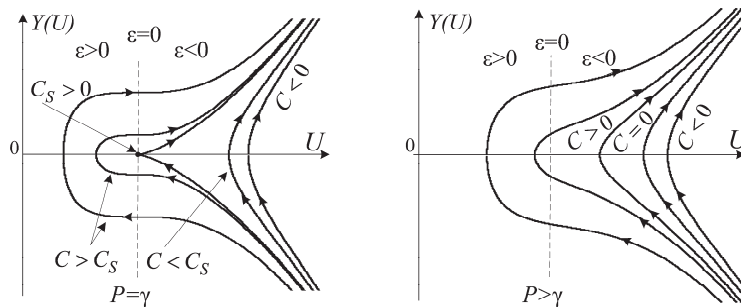


Рис.5. Фазовые портреты системы (3,4) для среды с кубической нелинейностью, когда $\varepsilon_0 > 0$, $\varepsilon_2 < 0$ в случаях $P = \gamma$, и $P > \gamma$.

5. Заключение

Анализ волновых процессов методом фазовой плоскости, разработанным в рамках МЭВ, показал свою полезность для нахождения и интерпретации всех возможных мод плоских электромагнитных волн в нелинейных средах с самодействием. Анализ показал наличие в нелинейном случае мод стоячей волны с постоянной амплитудой вдоль координаты. Они соответствуют особой точке

типа «центр» в средах с положительной нелинейностью. В средах с отрицательной нелинейностью особая точка типа седло описывает синхронные колебания с асимптотически ($z \rightarrow \infty$) постоянной амплитудой.

При наличии потока энергии бегущие волны соответствуют особым точкам, как и в линейном случае. Но в нелинейном случае существуют также фазовые портреты с особыми точками типа седло (для малых потоков) и типа клюва (для потоков $P = \gamma$). Они описывают асимптотически ($z \rightarrow \infty$) бегущую волну. В среде с отрицательной нелинейностью наблюдается также явление самоограничения потока энергии прошедшей волны величиной $P = \gamma$.

Во всех рассмотренных случаях требуемый режим может быть реализован путем установления граничных условий в некоторой точке на соответствующей фазовой траектории.

ЛИТЕРАТУРА

1. **А.А. Андронов, А.А. Витт, С.Э. Хайкин.** Теория колебаний, Москва: Наука, 1981. 568с.
2. **D.W. Jordan, P. Smith.** Nonlinear Ordinary Differential Equations, Oxford, 2007.
3. **H.V. Baghdasaryan, T.M. Knyazyan.** Optical and Quantum Electronics, **31**, 1059 (1999).
4. **H.V. Baghdasaryan.** Basics of the Method of Single Expression: New Approach for Solving Boundary Problems in Classical Electrodynamics. Monograph. Yerevan, Chartaraget, 2013, 164 p.
5. **H.V. Baghdasaryan, T.M. Knyazyan, A.A. Mankulov.** ICTON 2004, Conference Proceedings, 319, Poland, 2004.
6. **A.V. Daryan, H.V. Baghdasaryan, T.M. Knyazyan.** IRPhE2014, Proceedings of the International Conference on “Microwave and THz Technologies and Applications”, Armenia, Aghveran, “Gitutun”, 106, 2014.

PHASE-PLANE ANALYSIS OF SOLUTIONS OF THE HELMHOLTZ EQUATION FOR ELECTROMAGNETIC WAVES IN MEDIA WITH SELF-ACTION

H.V. BAGHDASARYAN, V.A. VARDANYAN, A.V. DARYAN

This article describes the application of the phase plane method for analyzing the behavior of stationary plane harmonic electromagnetic waves. The phase plane method allows a qualitative description of all possible solutions of Helmholtz nonlinear differential equation without performing numerical integration. All types of phase portraits for waves in the media with self-action are presented and their physical interpretation is discussed. Consideration is performed on the model of cubic nonlinearity without specifying the physical mechanism of nonlinearity. Peculiarities of the nonlinear case are discussed. The phenomenon of self-limitation of the transmitted wave power in a medium with negative nonlinearity is described.

СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЕ ВОЗМОЖНОСТИ КРИСТАЛЛОВ $\text{LaF}_3:\text{Er}^{3+}$ ДЛЯ КАСКАДНЫХ MIR ЛАЗЕРОВ

Г.Г. ДЕМИРХАНЫАН^{1,2*}, Р.Б. КОСТАНЫАН²

¹Армянский государственный педагогический университет
им. Абовяна, Ереван, Армения

²Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак, Армения

*e-mail: gdemirkhanyan@gmail.com

(Поступила в редакцию 3 июля 2020 г.)

Проведено теоретическое исследование спектроскопических свойств низкофононного кристалла $\text{LaF}_3:\text{Er}^{3+}$, определяющее их лазерные возможности в средней инфракрасной области длин волн (2.62–4.97 мкм). Построены волновые функции штарковских подуровней мультиплетов $^4\text{S}_{3/2}$, $^4\text{F}_{9/2}$, $^4\text{I}_{9/2}$, $^4\text{I}_{11/2}$, и $^4\text{I}_{13/2}$ иона Er^{3+} в LSJM-представлении. Вычислены силы линий косвенных электродипольных и магнитодипольных межштарковских переходов, рассчитаны основные спектроскопические и кинетические характеристики оптического спектра примесного иона.

1. Введение

Кристаллы фторида лантана, легированные ионами группы редких земель ($\text{LaF}_3:\text{Er}^{3+}$), имея низкочастотный фононный спектр ($\omega_m \cong 300 \div 350 \text{ см}^{-1}$), являются одним из перспективных кандидатов лазерных материалов для получения генерации в средней инфракрасной (MIR) области длин волн [1]. Целенаправленный поиск материалов для MIR – лазеров имеет особое практическое значение, поскольку они являются составной частью оптической лидарной системы. Последний может быть использован для сбора важных данных о химическом составе атмосферы: выявления концентраций, содержащихся в атмосфере токсичных соединений CO_2 , CH_4 , CO , NO_2 , SO_2 и т.д. [2]. Оптические спектры примесного поглощения и излучения кристалла $\text{LaF}_3:\text{Er}^{3+}$ исследованы в [3–6]. В частности, в [4] определены энергетические уровни примесного иона (Рис.1), проведен стандартный анализ Джадда–Офелта спектров поглощения, определены параметры интенсивности ($\Omega_2 = 1.07 \times 10^{-20} \text{ см}^2$, $\Omega_4 = 0.28 \times 10^{-20} \text{ см}^2$, $\Omega_6 = 0.63 \times 10^{-20} \text{ см}^2$). В [3] вычислены вероятности косвенных электродипольных (КЭД) и магнитодипольных (МД) межмультиплетных переходов, определены времена жизни возбужденных мультиплетов.

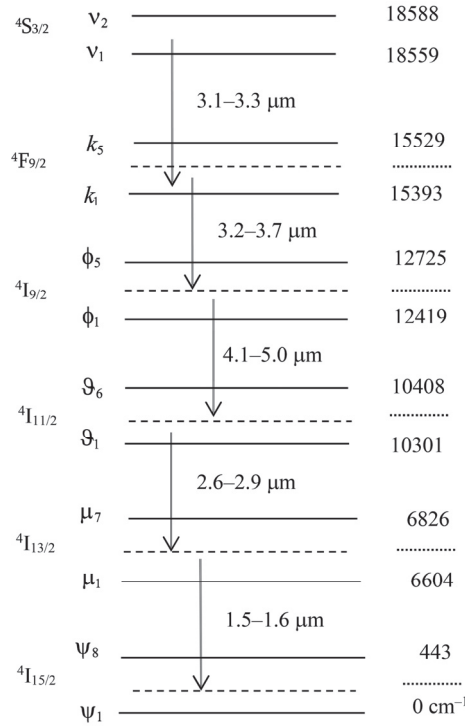


Рис.1. Схема энергетических уровней $\text{LaF}_3\text{--Er}^{3+}$.

В настоящей работе приведены результаты количественных вычислений основных спектроскопических характеристик кристалла $\text{LaF}_3\text{:Er}^{3+}$, определяющие их лазерный потенциал в диапазоне длин волн 2.62–4.97 мкм. Расчеты проведены с учетом штарковской структуры оптического спектра примесного иона.

2. Волновые функции штарковских подуровней

Как известно, в кристаллическом поле (КП) вырожденные мультиплетные состояния свободного иона Er^{3+} расщепляются на крамерсовские дублеты, при этом волновая функция v -ого штарковского состояния, в приближении слабого КП (LSJM представление), строится в виде линейной комбинации

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

где L и S – угловой и спиновый моменты, M – проекция полного углового момента J , $a_{JM}^{(v)}$ – численные коэффициенты. Полагая, что в матрице кристалла $\text{LaF}_3\text{:Er}^{3+}$ точечная симметрия ближайшего окружения примесного иона D_{3h} [6], гамильтониан КП, в рамках приближения точечных зарядов, можно записать в виде:

$$\hat{H}_{CF} = \alpha_J B_{20} \hat{O}_{20} + \beta_J B_{40} \hat{O}_{40} + \gamma_J B_{60} \hat{O}_{60} + \gamma_J B_{60} \hat{O}_{60}, \quad (2)$$

где α_J , β_J и γ_J – постоянные Стивенса, значения которых для иона Er^{3+} приведены в приложении [8], B_{kq} – параметры КП, численные значения которых, определенные из условия наилучшего согласия расчетных и экспериментальных значений штарковских расщеплений мультиплетных состояний, приведены в [6]: $B_{20} = 141$, $B_{40} = 145$, $B_{60} = 48.3$, $B_{66} = 430$ (в см^{-1}), $\hat{O}_{kq}$ – эквивалентные операторы, матричные элементы которых табулированы в [9]. Волновые функции штарковских состояний, построенные путем внутримultipлетной диагонализации потенциала КП (2) на основе базисных функций неприводимых представлений точечной группы D_{3h} [7], приведены в приложении.

3. Спектроскопические характеристики кристалла $\text{LaF}_3:\text{Er}^{3+}$

При теоретическом исследовании спектроскопических свойств примесных кристаллов наиболее удобной величиной является сила линии межштарковского перехода $i \rightarrow f$ [10]:

$$S_{i \rightarrow f} = \chi_{ed} S_{i \rightarrow f}^{ed} + \chi_{md} S_{i \rightarrow f}^{md}, \quad (3)$$

где первое слагаемое соответствует КЭД

$$S_{i \rightarrow f}^{(ied)} = \sum_{t=2,4,6} \Omega_t A_t^{(ied)}(i \rightarrow f) \left| \langle f \| U_t \| i \rangle \right|^2, \quad (4)$$

а второе – МД переходам

$$S_{i \rightarrow f}^{(md)} = A_{i \rightarrow f}^{(md)} \cdot S_{md}. \quad (5)$$

В (3)–(5) введены следующие обозначения: $\chi_{ed} = n(n^2 + 2)^2/9$ и $\chi_{md} = n^3$ – поправки локального КП (n – коэффициент преломления на длине перехода), Ω_t ($t = 2, 4, 6$) – параметры интенсивности, $\langle i \| u_t \| f \rangle$ – приведенный матричный элемент неприводимого единичного оператора u_t ранга t , явное выражение которого приведено в работах [10, 11], $A_t^{(ied)}(i \rightarrow f)$ и $A_{i \rightarrow f}^{(md)}$ – коэффициенты межштарковского КЭД и МД переходов [11–13]:

$$A_t^{(ied)}(i \rightarrow f) = \sum_{m=-t}^t \left| \sum_{M_i, M_f} (-1)^{J_f - M_f} a_{J_f, M_f}^{*(f)} a_{J_i, M_i}^{(i)} \begin{pmatrix} J_f & t & J_i \\ -M_f & m & M_i \end{pmatrix} \right|^2, \quad (6)$$

$$A_{i \rightarrow f}^{(md)} = \frac{1}{2J_f + 1} \cdot \sum_m \left| \sum_{M_i, M_f} (-1)^{J_f - M_f} a_{J_f, M_f}^{*(f)} a_{J_i, M_i}^{(i)} \begin{pmatrix} J_f & 1 & J_i \\ -M_f & m & M_i \end{pmatrix} \right|^2, \quad (7)$$

S_{md} – сила линии межmultipлетного МД перехода [3, 11], $\begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}$ – $3j$ символ.

Приведенные матричные элементы рассчитаны, используя вычисленные в [8] значения генеалогических коэффициентов иона Er^{3+} ($4f^{11}$):

$$\left| \left\langle {}^4I_{11/2} \| u_2 \| {}^4I_{13/2} \right\rangle \right|^2 = 0.0332, \quad \left| \left\langle {}^4I_{11/2} \| u_4 \| {}^4I_{13/2} \right\rangle \right|^2 = 0.1706, \quad (8a)$$

$$\left| \left\langle {}^4I_{11/2} \| u_6 \| {}^4I_{13/2} \right\rangle \right|^2 = 1.0915,$$

$$\left| \left\langle {}^4I_{9/2} \| u_2 \| {}^4I_{11/2} \right\rangle \right|^2 = 0.0021, \quad \left| \left\langle {}^4I_{9/2} \| u_4 \| {}^4I_{11/2} \right\rangle \right|^2 = 0.0690, \quad (8b)$$

$$\left| \left\langle {}^4I_{9/2} \| u_6 \| {}^4I_{11/2} \right\rangle \right|^2 = 0.1520,$$

$$\left| \left\langle {}^4F_{9/2} \| u_2 \| {}^4I_{9/2} \right\rangle \right|^2 = 0.122, \quad \left| \left\langle {}^4F_{9/2} \| u_4 \| {}^4I_{9/2} \right\rangle \right|^2 = 0.0061, \quad (8c)$$

$$\left| \left\langle {}^4F_{9/2} \| u_6 \| {}^4I_{9/2} \right\rangle \right|^2 = 0.0203,$$

$$\left| \left\langle {}^4S_{3/2} \| u_2 \| {}^4F_{9/2} \right\rangle \right|^2 = 0, \quad \left| \left\langle {}^4S_{3/2} \| u_4 \| {}^4F_{9/2} \right\rangle \right|^2 = 0.0001, \quad (8d)$$

$$\left| \left\langle {}^4S_{3/2} \| u_6 \| {}^4F_{9/2} \right\rangle \right|^2 = 0.0228.$$

Значения сил линий, поперечных сечений и вероятностей спонтанных межштарковских переходов $\nu_i({}^4S_{3/2}) \rightarrow k_f({}^4F_{9/2})$, $k_i({}^4F_{9/2}) \rightarrow \phi_f({}^4I_{9/2})$, $\phi_i({}^4I_{9/2}) \rightarrow \vartheta_f({}^4I_{11/2})$ и $\vartheta_i({}^4I_{11/2}) \rightarrow \mu_f({}^4I_{13/2})$, рассчитанные при $n = 1.6$, приведены в табл.1–4.

Из Табл.1 видно, что сила межмультиплетного перехода ${}^4S_{3/2} \rightarrow {}^4F_{9/2}$ мала ($5.34 \times 10^{-22} \text{ см}^2$), чем и обусловлен пренебрежимо малый вклад этого перехода в процесс распада уровня ${}^4S_{3/2}$ [3]. Сила КЭД межмультиплетного

Табл.1. Спектроскопические характеристики спектральных линий межштарковских переходов $\nu({}^4S_{3/2}) \rightarrow k({}^4F_{9/2})$

переход	λ , мкм	$S_{i \rightarrow f}$, 10^{-23} см^2	$^* \sigma \Gamma_{\text{см}^{-1}}$, 10^{-20} см^2	$A_{i \rightarrow f}$, с^{-1}
$\nu_1 \rightarrow k_1$	3.159	3.6238	0.2809	0.083
$\rightarrow k_2$	3.205	3.2645	0.2437	0.072
$\rightarrow k_3$	3.213	1.3330	0.1015	0.029
$\rightarrow k_4$	3.244	2.5503	0.1928	0.054
$\rightarrow k_5$	3.300	2.5743	0.1921	0.052
$\nu_2 \rightarrow k_1$	3.130	1.6964	0.1329	0.040
$\rightarrow k_2$	3.176	2.0557	0.1574	0.046
$\rightarrow k_3$	3.184	3.9857	0.3060	0.089
$\rightarrow k_4$	3.213	2.7695	0.2063	0.060
$\rightarrow k_5$	3.269	2.8571	0.2139	0.059

* Γ – ширина соответствующей спектральной линии в см^{-1}

Табл.2. Спектроскопические характеристики спектральных линий межштарковских переходов $k(^4F_{9/2}) \rightarrow \phi(^4I_{9/2})$

переход	λ , мкм	$S_{i \rightarrow f}$, 10^{-23} cm^2	* $\sigma \Gamma_{\text{cm}^{-1}}$, 10^{-20} cm^2	$A_{i \rightarrow f}$ s^{-1}
$k_1 \rightarrow \phi_1$	3.362	11.8418	0.7963	0.2256
$\rightarrow \phi_2$	3.499	19.7870	1.2779	0.3335
$\rightarrow \phi_3$	3.587	12.1305	0.7259	0.1894
$\rightarrow \phi_4$	3.720	4.5166	0.2974	0.0688
$\rightarrow \phi_5$	3.748	4.9003	0.2988	0.0679
$k_2 \rightarrow \phi_1$	3.311	9.6590	0.6594	0.1925
$\rightarrow \phi_2$	3.444	3.8915	0.2558	0.0691
$\rightarrow \phi_3$	3.529	21.2723	1.2935	0.3494
$\rightarrow \phi_4$	3.658	13.1575	1.4646	0.1939
$\rightarrow \phi_5$	3.685	5.6359	0.3461	0.0817
$k_3 \rightarrow \phi_1$	3.303	10.3476	0.7062	0.2062
$\rightarrow \phi_2$	3.434	7.1027	0.4679	0.1272
$\rightarrow \phi_3$	3.519	34.6767	2.2264	0.5745
$\rightarrow \phi_4$	3.647	12.7538	0.7900	0.1895
$\rightarrow \phi_5$	3.674	19.9460	1.2285	0.2916
$k_4 \rightarrow \phi_1$	3.271	15.7104	1.0853	0.3247
$\rightarrow \phi_2$	3.400	8.9743	0.5966	0.1650
$\rightarrow \phi_3$	3.483	8.6124	0.5593	0.1477
$\rightarrow \phi_4$	3.609	20.6727	1.2947	0.3175
$\rightarrow \phi_5$	3.635	13.7814	0.8558	0.2065
$k_5 \rightarrow \phi_1$	3.215	15.9011	1.1155	0.3442
$\rightarrow \phi_2$	3.340	8.7884	0.5946	0.1704
$\rightarrow \phi_3$	3.420	8.1437	0.5381	0.1471
$\rightarrow \phi_4$	3.541	20.7252	1.3207	0.3376
$\rightarrow \phi_5$	3.566	14.2210	0.9006	0.2258

* Γ – ширина соответствующей спектральной линии в cm^{-1}

перехода $^4F_{9/2} \rightarrow ^4I_{9/2}$ составляет $6.54 \times 10^{-21} \text{ cm}^2$, что для вероятности спонтанного радиационного перехода приводит к значению 1.1 s^{-1} (Табл.2), согласующемуся с значением, полученным в [3]: $A_{ed} = 1.2 \text{ s}^{-1}$.

Табл.3. Спектроскопические характеристики спектральных линий межштарковских переходов $\phi(^4I_{9/2}) \rightarrow \mathfrak{G}(^4I_{11/2})$

переход	λ , мкм	$S_{i \rightarrow f}$, 10^{-23} cm^2	* $\sigma \Gamma_{\text{cm}^{-1}}$, 10^{-20} cm^2	$A_{i \rightarrow f}$, s^{-1}
$\phi_1 \rightarrow \mathfrak{G}_1$	4.721	66.2793	3.4488	0.4555
$\rightarrow \mathfrak{G}_2$	4.744	166.4830	8.6254	1.1296
$\rightarrow \mathfrak{G}_3$	4.787	4.3895	0.2254	0.0289
$\rightarrow \mathfrak{G}_4$	4.819	42.0707	2.1483	0.2732
$\rightarrow \mathfrak{G}_5$	4.852	9.4657	0.4797	0.0600
$\rightarrow \mathfrak{G}_6$	4.973	4.2481	0.2099	0.0250
$\phi_2 \rightarrow \mathfrak{G}_1$	4.476	26.0803	1.4294	0.2096
$\rightarrow \mathfrak{G}_2$	4.596	24.0186	1.3135	0.1909
$\rightarrow \mathfrak{G}_3$	4.535	44.4508	2.4091	0.3455
$\rightarrow \mathfrak{G}_4$	4.564	82.3669	4.4352	0.6277
$\rightarrow \mathfrak{G}_5$	4.593	90.2827	4.8296	0.6746
$\rightarrow \mathfrak{G}_6$	4.701	26.9390	1.4076	0.1875
$\phi_3 \rightarrow \mathfrak{G}_1$	4.340	7.8409	0.4434	0.0693
$\rightarrow \mathfrak{G}_2$	4.359	5.0287	0.2829	0.0438
$\rightarrow \mathfrak{G}_3$	4.396	185.8530	10.3694	1.5765
$\rightarrow \mathfrak{G}_4$	4.423	3.1428	0.1746	0.0263
$\rightarrow \mathfrak{G}_5$	4.450	83.7593	4.6209	0.6868
$\rightarrow \mathfrak{G}_6$	4.552	8.4148	0.4544	0.0646
$\phi_4 \rightarrow \mathfrak{G}_1$	4.160	120.5810	7.1160	1.2103
$\rightarrow \mathfrak{G}_2$	4.177	37.1515	2.1817	0.3676
$\rightarrow \mathfrak{G}_3$	4.211	3.5114	0.2047	0.0340
$\rightarrow \mathfrak{G}_4$	4.235	63.8633	3.6971	0.6054
$\rightarrow \mathfrak{G}_5$	4.261	22.2426	1.2817	0.2079
$\rightarrow \mathfrak{G}_6$	4.354	2.4183	0.1363	0.0212
$\phi_5 \rightarrow \mathfrak{G}_1$	4.125	27.6117	1.6407	0.2832
$\rightarrow \mathfrak{G}_2$	4.143	4.5983	0.2724	0.0468
$\rightarrow \mathfrak{G}_3$	4.175	5.9414	0.3497	0.0592
$\rightarrow \mathfrak{G}_4$	4.200	22.0277	1.2871	0.2148
$\rightarrow \mathfrak{G}_5$	4.225	31.3596	1.8238	0.3015
$\rightarrow \mathfrak{G}_6$	4.316	202.6050	11.5128	1.8159

* Γ – ширина соответствующей спектральной линии в cm^{-1}

Табл.4. Спектроскопические характеристики спектральных линий межштарковских переходов $9(^4I_{11/2}) \rightarrow \mu(^4I_{13/2})$

переход	λ , мкм	$S_{i \rightarrow f}$, 10^{-23} cm^2	* $\sigma \Gamma_{\text{cm}^{-1}}$, 10^{-20} cm^2	$A_{i \rightarrow f}$, s^{-1}
$9_1 \rightarrow \mu_1$	2.705	243.1820	20.4526	8.9275
$\rightarrow \mu_2$	2.724	104.0750	8.6588	3.7371
$\rightarrow \mu_3$	2.754	50.3983	4.1065	1.7511
$\rightarrow \mu_4$	2.777	22.7269	1.8401	0.7644
$\rightarrow \mu_5$	2.795	21.3236	1.7108	0.7095
$\rightarrow \mu_6$	2.819	3.8441	0.3027	0.1239
$\rightarrow \mu_7$	2.878	21.9667	1.6920	0.6645
$9_2 \rightarrow \mu_1$	2.698	19.2238	1.5785	0.7057
$\rightarrow \mu_2$	2.717	162.9140	13.5351	5.8498
$\rightarrow \mu_3$	2.747	12.9032	1.0395	0.4483
$\rightarrow \mu_4$	2.769	178.6010	14.5659	6.0720
$\rightarrow \mu_5$	2.787	38.4929	3.0897	1.2807
$\rightarrow \mu_6$	2.811	27.0332	2.1520	0.8804
$\rightarrow \mu_7$	2.869	28.3668	2.1938	0.8671
$9_3 \rightarrow \mu_1$	2.684	75.0195	6.2943	2.8162
$\rightarrow \mu_2$	2.703	40.3716	3.3758	1.4821
$\rightarrow \mu_3$	2.732	212.8830	17.6765	7.5604
$\rightarrow \mu_4$	2.755	26.2279	2.1255	0.9113
$\rightarrow \mu_5$	2.772	84.4569	6.9061	2.8713
$\rightarrow \mu_6$	2.796	18.5120	1.4647	0.6094
$\rightarrow \mu_7$	2.854	10.0976	0.7931	0.3152
$9_4 \rightarrow \mu_1$	2.674	4.4131	0.3682	0.1675
$\rightarrow \mu_2$	2.693	12.8300	1.0699	0.4763
$\rightarrow \mu_3$	2.722	24.0152	1.9632	0.8623
$\rightarrow \mu_4$	2.744	89.8604	7.4216	3.1565
$\rightarrow \mu_5$	2.762	72.3305	5.9300	2.4859
$\rightarrow \mu_6$	2.786	229.2190	18.5289	7.6265
$\rightarrow \mu_7$	2.843	34.8710	2.7329	1.0002
$9_5 \rightarrow \mu_1$	2.664	7.6162	0.6385	0.2924
$\rightarrow \mu_2$	2.682	54.2900	4.5359	2.0380
$\rightarrow \mu_3$	2.712	77.5617	6.4740	2.8160
$\rightarrow \mu_4$	2.734	57.1257	4.7432	2.0288
$\rightarrow \mu_5$	2.751	160.1360	13.1543	5.5639
$\rightarrow \mu_6$	2.775	89.4245	7.3273	3.0402
$\rightarrow \mu_7$	2.831	21.3726	1.6796	0.6814
$9_6 \rightarrow \mu_1$	2.629	51.4941	4.2540	1.9770
$\rightarrow \mu_2$	2.647	26.2572	2.1238	0.9857
$\rightarrow \mu_3$	2.675	23.0353	1.8611	0.8363
$\rightarrow \mu_4$	2.697	26.2061	2.0799	0.9307
$\rightarrow \mu_5$	2.714	23.9994	1.8930	0.8339
$\rightarrow \mu_6$	2.737	32.7152	2.5604	1.1122
$\rightarrow \mu_7$	2.792	284.0730	22.1554	9.0565

* Γ – ширина соответствующей спектральной линии в cm^{-1}

Отметим, что в [3] рассмотрены перемешанные по орбитальным и спин-овым моментам мультиплетные состояния с фиксированным значением полного углового момента. В результате снимается запрет на магнитодипольный переход ${}^4F_{9/2} \rightarrow {}^4I_{9/2}$, что приводит к увеличению вероятности суммарного радиационного перехода до $A_{\text{tot}} = 3.6 \text{ с}^{-1}$. Заметим, что аналогичное расхождение возможна во всех случаях, когда межмультиплетные магнитодипольные переходы запрещены. При отсутствии же запрета на магнитодипольные переходы, как в случае ${}^4I_{11/2} \rightarrow {}^4I_{13/2}$ перехода, налицо хорошее совпадение рассчитанного значения вероятности радиационного перехода, 16.2 с^{-1} (Табл.4), с значением, полученным в [3]– 16.1 с^{-1} .

4. Заключение

Полученные значения поперечных сечений и вероятностей спонтанных межштарковских переходов дают возможность выявить лазерные возможности (в том числе, условия эффективной каскадной генерации) кристалла $\text{LaF}_3:\text{Er}^{3+}$. Так при возбуждении на длине волны 0.52 мкм возможна квазитрехуровневая генерация по нижеприведенной схеме

$$\begin{aligned} {}^4I_{15/2} \xrightarrow{0.52\mu\text{m}} {}^2H_{11/2} \rightsquigarrow \nu_{1,2}({}^4S_{3/2}) \xrightarrow{3.213\mu\text{m}} k_{3,4}({}^4F_{9/2}) \rightsquigarrow k_1({}^4F_{9/2}) \xrightarrow{3.50\mu\text{m}} \phi_2({}^4I_{9/2}) \rightsquigarrow, \\ \rightsquigarrow \phi_1({}^4I_{9/2}) \xrightarrow{4.74\mu\text{m}} \vartheta_2({}^4I_{11/2}) \rightsquigarrow \vartheta_{1,2}({}^4I_{11/2}) \xrightarrow{2.716-2.742\mu\text{m}} \mu_2({}^4I_{13/2}) \rightsquigarrow \mu_1({}^4I_{13/2}), \end{aligned}$$

или ее отдельного фрагмента.

Приложение

Табл.5. Коэффициенты Стивенса нижних мультиплетов иона Er^{3+}

${}^{2S+1}L_J$	J	α_J	β_J	γ_J
4I_J	$\frac{15}{2}$	$\frac{2^2}{3^2 \cdot 5^2 \cdot 7}$	$\frac{2}{3^2 \cdot 5 \cdot 7 \cdot 11 \cdot 13}$	$\frac{2^3}{3^3 \cdot 7 \cdot 11^2 \cdot 13^2}$
	$\frac{13}{2}$	$\frac{1}{5^2 \cdot 13}$	$\frac{2^2}{3^2 \cdot 5 \cdot 11^2 \cdot 13}$	$\frac{1}{3^3 \cdot 11^2 \cdot 13^2}$
	$\frac{11}{2}$	$\frac{2^3 \cdot 17}{3 \cdot 7 \cdot 11^2 \cdot 13}$	$\frac{2 \cdot 17 \cdot 47}{3^3 \cdot 5 \cdot 7 \cdot 11^3 \cdot 13}$	$\frac{2^5 \cdot 5 \cdot 19}{3^4 \cdot 7 \cdot 11^3 \cdot 13^2}$
	$\frac{9}{2}$	$\frac{7}{3^2 \cdot 11^2}$	$\frac{2^3 \cdot 17}{3^3 \cdot 11^3 \cdot 13}$	$\frac{5 \cdot 17 \cdot 19}{3^3 \cdot 7 \cdot 11^3 \cdot 13^2}$
4F_J	$\frac{9}{2}$	$\frac{157}{2^5 \cdot 3^4 \cdot 7}$	$-\frac{1}{2^2 \cdot 3 \cdot 7^2 \cdot 11}$	$\frac{163}{2^4 \cdot 3^5 \cdot 7^2 \cdot 11 \cdot 13}$

Табл.6. Волновые функции штарковских состояний иона Er^{3+} в LaF_3

$^4\text{S}_{3/2} :$	$v_2 = \left \frac{3}{2} \pm \frac{3}{2} \right\rangle$
	$v_1 = \pm \left \frac{3}{2} \pm \frac{1}{2} \right\rangle$
$^4\text{F}_{9/2} :$	$k_5 = 0.7178 \left \frac{9}{2} \mp \frac{7}{2} \right\rangle + 0.6962 \left \frac{9}{2} \pm \frac{5}{2} \right\rangle$
	$k_4 = -0.6962 \left \frac{9}{2} \mp \frac{7}{2} \right\rangle + 0.7178 \left \frac{9}{2} \pm \frac{5}{2} \right\rangle$
	$k_3 = \pm 0.9723 \left \frac{9}{2} \mp \frac{9}{2} \right\rangle \pm 0.2338 \left \frac{9}{2} \pm \frac{3}{2} \right\rangle$
	$k_2 = \mp 0.2338 \left \frac{9}{2} \mp \frac{9}{2} \right\rangle \pm 0.9723 \left \frac{9}{2} \pm \frac{3}{2} \right\rangle$
	$k_1 = \left \frac{9}{2} \pm \frac{1}{2} \right\rangle$
$^4\text{I}_{9/2} :$	$\phi_5 = \pm 0.9332 \left \frac{9}{2} \mp \frac{9}{2} \right\rangle \pm 0.3595 \left \frac{9}{2} \pm \frac{3}{2} \right\rangle$
	$\phi_4 = 0.8487 \left \frac{9}{2} \mp \frac{7}{2} \right\rangle + 0.5288 \left \frac{9}{2} \pm \frac{5}{2} \right\rangle$
	$\phi_3 = \left \frac{9}{2} \pm \frac{1}{2} \right\rangle$
	$\phi_2 = \mp 0.3595 \left \frac{9}{2} \mp \frac{9}{2} \right\rangle \pm 0.9332 \left \frac{9}{2} \pm \frac{3}{2} \right\rangle$
	$\phi_1 = -0.5288 \left \frac{9}{2} \mp \frac{7}{2} \right\rangle + 0.8487 \left \frac{9}{2} \pm \frac{5}{2} \right\rangle$
$^4\text{I}_{11/2} :$	$\vartheta_6 = \pm 0.9947 \left \frac{11}{2} \mp \frac{11}{2} \right\rangle \pm 0.1032 \left \frac{11}{2} \pm \frac{1}{2} \right\rangle$
	$\vartheta_5 = 0.2235 \left \frac{11}{2} \mp \frac{9}{2} \right\rangle + 0.9747 \left \frac{11}{2} \pm \frac{3}{2} \right\rangle$
	$\vartheta_4 = \pm 0.4153 \left \frac{11}{2} \mp \frac{7}{2} \right\rangle \pm 0.9097 \left \frac{11}{2} \pm \frac{5}{2} \right\rangle$
	$\vartheta_3 = \mp 0.1032 \left \frac{11}{2} \mp \frac{11}{2} \right\rangle \pm 0.9947 \left \frac{11}{2} \pm \frac{1}{2} \right\rangle$
	$\vartheta_2 = \pm 0.9097 \left \frac{11}{2} \mp \frac{7}{2} \right\rangle \mp 0.4153 \left \frac{11}{2} \pm \frac{5}{2} \right\rangle$
	$\vartheta_1 = 0.9747 \left \frac{11}{2} \mp \frac{9}{2} \right\rangle - 0.2235 \left \frac{11}{2} \pm \frac{3}{2} \right\rangle$

Табл.6. (продолжение)

${}^4I_{13/2}$	$\mu_7 = 0.0146 \left \frac{13}{2} \mp \frac{11}{2} \right\rangle + 0.1063 \left \frac{13}{2} \pm \frac{1}{2} \right\rangle + 0.9942 \left \frac{13}{2} \pm \frac{13}{2} \right\rangle$
	$\mu_6 = 0.6695 \left \frac{13}{2} \mp \frac{7}{2} \right\rangle + 0.7428 \left \frac{13}{2} \pm \frac{5}{2} \right\rangle$
	$\mu_5 = \pm 0.5067 \left \frac{13}{2} \mp \frac{9}{2} \right\rangle \pm 0.8621 \left \frac{13}{2} \pm \frac{3}{2} \right\rangle$
	$\mu_4 = 0.7428 \left \frac{13}{2} \mp \frac{7}{2} \right\rangle - 0.6695 \left \frac{13}{2} \pm \frac{5}{2} \right\rangle$
	$\mu_3 = -0.3538 \left \frac{13}{2} \mp \frac{11}{2} \right\rangle - 0.9295 \left \frac{13}{2} \pm \frac{1}{2} \right\rangle + 0.1046 \left \frac{13}{2} \pm \frac{13}{2} \right\rangle$
	$\mu_2 = \pm 0.8621 \left \frac{13}{2} \mp \frac{9}{2} \right\rangle \mp 0.5067 \left \frac{13}{2} \pm \frac{3}{2} \right\rangle$
	$\mu_1 = -0.9352 \left \frac{13}{2} \mp \frac{11}{2} \right\rangle + 0.3532 \left \frac{13}{2} \pm \frac{1}{2} \right\rangle - 0.0240 \left \frac{13}{2} \pm \frac{13}{2} \right\rangle$

ЛИТЕРАТУРА

1. **B.M. Walsh, H.R. Lee, N.P. Barnes.** J. Luminescence, **169**, 400, (2016).
2. **F.K. Tittel, D. Richter, A. Fried.** Mid-infrared laser applications in spectroscopy, Solid-State Mid-Infrared Laser Sources, Springer–Verlag, 2003.
3. **M.J. Weber.** Phys. Rev., **157**(2), 262 (1967).
4. **W.T. Carnal.** Energy Level Structure and Transition Probabilities in the Spectra of the Trivalent Lanthanides in LaF₃, H. Crosswhite and H. M. Crosswhite Department of Physics. The Johns Hopkins University, 1995.
5. **W.T. Carnall, G.L. Goodman, K. Rajnak, R.S. Rana.** J. Chem. Phys., **90**(7), 3443 (1989).
6. **D.E. Онопко.** Optics and Spectroscopy, **24**, 301 (1968).
7. **А.М. Леушин.** Таблицы функций, преобразующихся по неприводимым представлениям кристаллографических точечных групп, М., Наука, 1968.
8. **А.Г. Демирханян, А.Р. Мкртчян, А.Г. Бадалян.** Ученые записи АГПУ, **2**, 38 (2015).
9. **А. Абрагам, Б. Блини.** Электронный парамагнитный резонанс переходных ионов, т. 2, М., Мир, 1972.
10. **G.G. Demirkhanyan.** Laser Physics, **16**, 1054 (2005).
11. **G.G. Demirkhanyan, R.B. Kostanyan.** Proceedings SPIE, **7998**, 799805 (2011).
12. **Г.Г. Демирханян, Э.П. Коканян, А.Г. Демирханян.** Изв. НАН Армении, Физика, **50**, 338 (2015).
13. **Э.П. Коканян, Г.Г. Демирханян, А.Г. Демирханян.** Изв. НАН Армении, Физика, **53**, 301 (2018).

LaF₃:Er³⁺ ԲՅՈՒՐԵՂԻ ՍՊԵԿՏՐԱԴԻՏԱԿԱՆ ՀՆԱՐԱՎՈՐՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ
ՈՒՍՈՒՄՆԱՍԻՐՈՒՄԸ ԿԱՍԿԱԴԱՅԻՆ MIR ԼԱԶԵՐՆԵՐԻ ՍՏԱՑՄԱՆ ՀԱՄԱՐ

Գ.Գ. ԴԵՄԻՐԽԱՆՅԱՆ, Ռ.Բ. ԿՈՍՏԱՆՅԱՆ

Միջին ինֆրակարմիր տիրույթում (2.62–4.97 մկմ) ցածր ֆոնոնային LaF₃:Er³⁺ բյուրեղների լազերային հնարավորությունները բացահայտելու նպատակով ուսումնասիրված են նրանց սպեկտրադիտական հատկությունները: Կառուցված են ⁴S_{3/2}, ⁴F_{9/2}, ⁴I_{9/2}, ⁴I_{11/2}, և ⁴I_{13/2} մուլտիպլետների Շտարկյան ենթամակարդակների ալիքային ֆունկցիաները՝ LSJM-պատկերմամբ: Հաշվարկված են անուղղակի էլեկտրեդիպոլային և մագնիսադիպոլային միջշտարկյան անցումների ուժերը, որոշված են խառնուրդային իոնի օպտիկական սպեկտրի հիմնական սպեկտրադիտական և կինետիկական բնութագրերը:

SPECTROSCOPIC CAPABILITIES OF LaF₃:Er³⁺ CRYSTALS
FOR MIR LASERS CASCADE OPERATION

G.G. DEMIRKHANYAN, R.B. KOSTANYAN

A theoretical study of the spectroscopic properties of low-phonon LaF₃:Er³⁺ crystals, determining their laser capabilities in the mid-infrared wavelength range (2.62–4.97 μm), was carried out. The wave functions of the Stark sublevels of ⁴S_{3/2}, ⁴F_{9/2}, ⁴I_{9/2}, ⁴I_{11/2}, and ⁴I_{13/2} of Er³⁺ ion by LSJM-representation are constructed. The line strengths of the indirect electric dipole and magnetic dipole inter-Stark transitions are calculated and the main spectroscopic and kinetic characteristics of the optical spectrum of the impurity ion are determined.

ДИФРАКЦИЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ ВОЛНЫ ОТ КРУГЛОГО ОТВЕРСТИЯ, РАСПОЛОЖЕННОГО МЕЖДУ ВАКУУМОМ И ВЕЩЕСТВОМ С ОТЛИЧНЫМ ОТ ЕДИНИЦЫ КОЭФФИЦИЕНТОМ ПРЕЛОМЛЕНИЯ

А.Р. МКРТЧЯН¹, А.А. ЛАЛАЯН^{2*}, О.С. ЕРИЦЯН^{1,2},
А.Л. МАРГАРЯН¹, Ш.К. ЕРИЦЯН², Ж.Б. ХАЧАТРЯН^{1,2}

¹Институт прикладных проблем физики НАН Армении, Ереван, Армения

²Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

*e-mail: alalayan@ysu.am

(Поступила в редакцию 25 декабря 2019 г.)

Исследована дифракция электромагнитной волны от круглого отверстия на непрозрачном экране в ситуации, когда по разные стороны экрана не вакуум, как обычно рассматривается, а с одной стороны расположена преломляющая среда и с другой – вакуум. Выявлены особенности дифракции, обусловленные тем, что среда, в которую проникает волна из вакуума, обладает показателем преломления, отличным от единицы. Рассмотрен также случай дифракции в анизотропной среде, обладающей свойством двулучепреломления.

1. Введение

Дифракция электромагнитной волны на бесконечном экране с щелью или круглым отверстием, как известно, рассматривается в оптике в случае, когда перед экраном, а также после экрана расположен вакуум [1,2]. Что касается дифракции в материальных средах, то в таком случае это явление обычно рассматривается в ситуациях, когда она обусловлена не ограничением фронта волны (дифракция от краев щелей или отверстий), а, в основном, периодичностью неоднородностей самой среды, в которой распространяется волна [3–5].

В работе [6] рассмотрена Фраунгоферова дифракция плоской волны на бесконечной щели, когда по обе стороны экрана со щелью – не вакуум, а среды с разными значениями показателя преломления (одной из которых может быть и вакуум). Показано, в частности, что в такой ситуации имеет место невзаимность прохождения электромагнитной волны через щель. Учет данного явления имеет важное практическое значение при создании оптических систем, у которых имеется неэквивалентность взаимно противоположных направлений прохождения электромагнитных волн [7–8].

В настоящей работе рассматривается дифракция на круглом отверстии в материальной среде, при этом рассмотрены случаи, когда вакуум граничит через отверстие либо с изотропной, либо анизотропной однородной средой.

2. Расчет интенсивности дифрагированной электромагнитной волны

В основу расчета влияния показателя преломления среды, куда проникает дифрагированное излучение, на картину дифракции на круглом отверстии положена известная формула [9]

$$dI = I_0 \frac{J_1^2(ak\theta)}{\theta^2} d\theta, \quad (1)$$

где I_0 – интенсивность излучения волны, падающей на круглое отверстие радиуса a , θ – угол отклонения дифрагированной волны от направления нормали к экрану (см. Рис.1), J_1^2 – функция Бесселя первого порядка, – телесный угол, в котором распространяются лучи в интервале направлений $(\theta, \theta + d\theta)$.

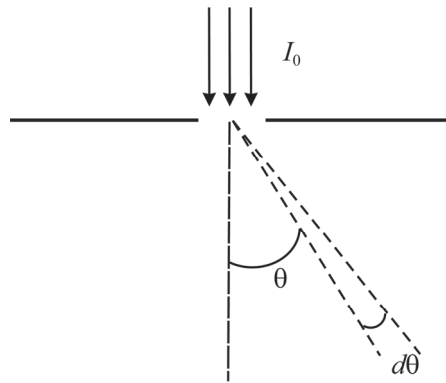


Рис.1. Схема дифракции электромагнитной волны на круглом отверстии.

При переходе от случая, когда за экраном вакуум, к случаю материальной среды, в формуле (1) меняется модуль волнового вектора k , и соответственно величина показателя преломления n .

Отметим, что в выражении (1) интеграл аналитически не вычисляется. На Рис.2 представлена зависимость I от a , приведенной в величинах длины волны λ , полученная численными методами, которая демонстрирует, что с ростом радиуса отверстия интенсивность волны за щелью растет, при этом форма этой кривой зависит от величины показателя преломления n .

Из вида выражения (1) следует ожидать также изменения углового распределения полной интенсивности дифрагированной волны при изменении величины показателя преломления.

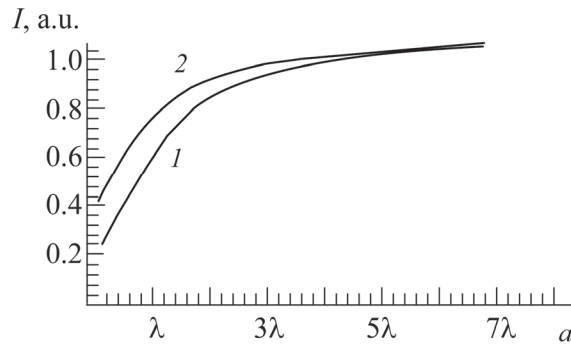


Рис.2. Зависимость интенсивности дифрагированной волны I от радиуса круглого отверстия a . Кривая 1 соответствует случаю $n = 1$, кривая 2 – случаю $n = 2$.

На рис.3 представлены расчетные зависимости углового распределения интенсивности дифрагированной волны при различных значениях величины показателя преломления в случае, когда за экраном – изотропная среда. Как видно из рисунка наблюдается заметное изменение углового распределения интенсивности дифрагированной волны при изменении показателя преломления.

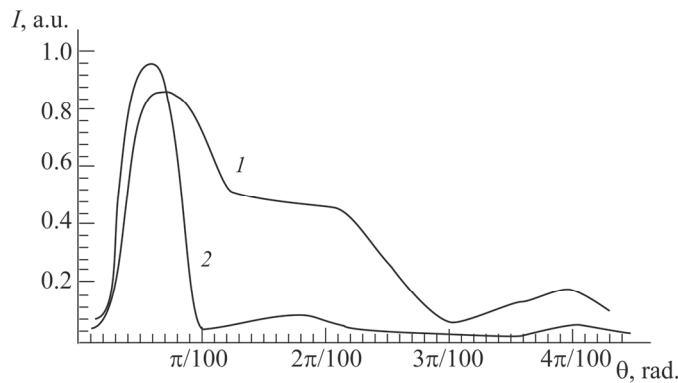


Рис.3. Угловое распределение интенсивности дифрагированной волны. Кривая 1 соответствует случаю $n = 1$, кривая 2 – случаю $n = 2$.

Исходя из полученного результата можно, отметить, что в случае размещения демонстрационного экрана за щелью, можно будет наблюдать хорошо известную дифракционную картину, состоящую из набора дифракционных колец, однако в отличие стандартной ситуации воздуха (вакуума) с $n = 1$ по обе стороны от отверстия, в рассматриваемом случае дистанция между интерференционными кольцами и распределение интенсивности между ними будут уже зависеть от значения показателя преломления среды.

Как видно из рисунка, наблюдается заметное изменение углового распределения интенсивности дифрагированной волны при изменении показателя преломления.

Вызывает также несомненный интерес случай дифракции, когда за экраном с апертурой размещена одноосная анизотропная среда с оптической осью, параллельной плоскости экрана. В этом случае при малых углах дифракции формулу (1) необходимо записать в отдельности для обыкновенной и необыкновенной волн:

$$\begin{aligned} dI_o &= I_{o0} \frac{J_1^2(a\omega c^{-1}n_o\theta)}{\theta^2} d\theta, \\ dI_e &= I_{e0} \frac{J_1^2(a\omega c^{-1}n_e\theta)}{\theta^2} d\theta, \end{aligned} \quad (2)$$

ограничиваясь случаем, когда изменением показателя преломления необыкновенной волны при отклонении дифрагированного необыкновенного луча от перпендикулярности к оптической оси можно пренебречь.

Таким образом, в данном случае, при размещении демонстрационного экрана за щелью, можно будет наблюдать сложную дифракционную картину, состоящую из двух наборов дифракционных колец, сформированных отдельно обыкновенной и необыкновенной волнами. Как следствие, детальное фотометрирование полученной дифракционной картины дает возможность анализа оптической анизотропии различных сред с использованием простой оптической схемы. Отметим, что исследование и анализ анизотропных сред с применением стандартных рефрактометров является достаточно сложной технической задачей.

3. Заключение

В настоящей работе исследовано явление дифракции на круглом отверстии в экране, расположенной между двумя средами, отличающимися своими показателями преломления. Проведен численный расчет интенсивности дифрагированной волны в указанной оптической системе. Исследованы особенности дифракционной картины в зависимости от показателя преломления среды, в том числе проанализирован случай двулучепреломляющей среды. Показано, что в зависимости от показателя преломления среды, куда проникает дифрагированное излучение, дифракционная картина меняется, а в присутствии двулучепреломления получаются два семейства дифрагированных колец.

Рассмотренное в настоящей работе явление может быть использовано для разработки новых оптических систем и элементов для исследования и анализа как изотропных так и анизотропных оптических материалов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Государственного комитета по науке МОН РА в рамках проекта № 18Т-1С395.

ЛИТЕРАТУРА

1. **M. Born, E. Wolf**, Principles of Optics, 4th ed., Pergamon Press, 1968.
2. **R. Vaganov, B. Katzenelenbaum**, Osnovy teorii difraktsii (Bases of the diffraction theory), Moscow: Nauka, 1982.
3. **B.C. Kress, P. Meyrueis**, Applied Digital Optics: From Micro-Optics to Nanophotonics, John Wiley & Sons, 2009.
4. **V.A. Belyakov**, Diffraction Optics of complex-Structure Periodic Media, New York: Springer, 1992.
5. **О.С. Ерицяң**. Изв. НАН Армении, Физика, **37**, 244 (2002).
6. **А.А. Лалаян, О.С. Ерицяң, О.М. Аракелян, Ш.К. Ерицяң**. Изв. НАН Армении, Физика, **53**, 50 (2018).
7. **И.А. Андропова, Г.Б. Малыкин**. УФН, **172**(8), 849 (2002).
8. **С.И. Назаров**. Наука и образование (МГТУ им. Н.Э. Баумана). Электронный журнал, № 9, 479 (2013).
9. **Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц**. Теория поля. Наука, Физматгиз., 1967.

ԷԼԵԿՏՐԱՄԱԳՆԻՍՏԱԿԱՆ ԱԼԻՔԻ ԴԻՖՐԱԿՑԻԱՆ ՎԱԿՈՒՈՒՄԻ
ԵՎ ՄԵԿԻՑ ՏԱՐԲԵՐ ԲԵԿՄԱՆ ՑՈՒՑԻՉՈՎ ՆՅՈՒԹԻ
ՍԱՀՄԱՆԻՆ ՏԵՂԱԴՐՎԱԾ ԷԿՐԱՆԻ ԿԼՈՐ ԱՆՑՔԻՑ

Ա.Ռ. ՄԿՐՏՉՅԱՆ, Ա.Ա. ԼԱԼԱԸԱՆ, Հ.Ս. ԵՐԻՑՅԱՆ,
Ա.Լ. ՄԱՐԳԱՐՅԱՆ, Շ.Կ. ԵՐԻՑՅԱՆ, Ժ.Բ. ԽԱՉԱՏՐՅԱՆ

Հետազոտվել է էլեկտրամագնիսական ալիքի դիֆրակցիան անթափանց էկրանի կլոր անցքից, երբ էկրանի երկու կողմերում ոչ թե վակուում է, ինչպես սովորաբար, այլ մի կողմում բեկող միջավայր է, մյուս կողմում՝ վակուում: Բացահայտված են դիֆրակցիայի որոշ առանձնահատկություններ, որոնք պայմանավորված են նրանով, որ այն միջավայրն, ուր ալիքը թափանցում է վակուումից, մեկից տարբեր բեկման ցուցիչ ունի: Քննարկված է նաև այն դեպքը, երբ միջավայրը օժտված է երկբեկման հատկությամբ:

DIFFRACTION OF ELECTROMAGNETIC WAVES FROM A ROUND HOLE LOCATED BETWEEN VACUUM AND MATTER WITH A REFRACTION INDEXES DIFFERENT FROM ONE

A.R. MKRTCHYAN, A.A. LALAYAN, H.S. YERICYAN,
A.L. MARGARYAN, Sh.K. YERICYAN, Zh.B. KHACHATRYAN

The diffraction of an electromagnetic wave from a round hole on an opaque screen is studied in a situation where there is no vacuum on the opposite sides of the screen, as is usually considered, but on one side there is a refractive medium and on the other a vacuum. The diffraction peculiarities due to the fact that the medium into which the wave penetrates from the vacuum have a refractive index different from one are revealed. The case of diffraction in an anisotropic medium with the property of birefringence is also considered.

СПОНТАННОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ КВАНТОВОЙ ТОЧКИ ВНЕ ДИПОЛЬНОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ

Г.А. МУРАДЯН, Л.Р. АРЗУМАНЯН, А.Ж. МУРАДЯН*

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

*e-mail: muradyan@ysu.am

(Поступила в редакцию 3 июня 2020 г.)

Спонтанное излучение сферической полупроводниковой квантовой точки рассмотрено без применения дипольного приближения. Показано, что при этом дипольно-запрещенное излучение неглубокой потенциальной ямы с одним электронным уровнем становится более интенсивным, чем дипольно-разрешенное излучение более глубокой потенциальной ямы, и что углубление потенциала приближает режим дипольного излучения. Показано также, что от сферической квантовой точки может быть получено цилиндрически симметричное анизотропное излучение, если для актов излучения фотонов направление оси квантования сохранить неизменной.

1. Введение

Квантовая точка (КТ) – это полупроводниковый нанокристалл, встроенный в другой полупроводниковый материал, который может ограничивать электроны или другие носители во всех трех измерениях [1–3]. Состоит из $10^3 - 10^5$ атомов. Физические свойства КТ отличаются от объемной среды из-за волновой природы квантовой механики. Теоретическое моделирование КТ обычно выполняется на основе потенциальной ямы, обычно сферической по форме [4,5]. При изменении размеров КТ уровни энергии электрона и дырки смещаются в противоположные стороны.

Если под внешним воздействием электрон вырывается из атома, он перемещается по всей наночастице (экситон Ванье-Мотта), создавая в спектре полосу проводимости. Падая обратно на внешнюю орбиту вокруг атома, на валентную зону, он испускают свет [6,7].

Квантовые эффекты сферического КТ характеризуются радиусом R потенциальной сферы и эффективным боровским радиусом a_B экситона. Если R значительно превосходит a_B , то это слабый или экситонный режим. Тогда электрон-дырочная пара ведет себя как экситон, а конфайнмент квантует движение центра масс экситона. В другом случае, когда R немного превосходит a_B , режим

становится сильным или индивидуальным. Тогда взаимодействие электрона и дырки с ограничивающим потенциалом значительно больше, чем их кулоновское взаимодействие. Поэтому электрон и дырка рассматриваются как независимые частицы, которые по отдельности образуют дискретную структуру энергетических уровней [8]. Неоднократные экспериментальные исследования подтвердили теоретические представления о слабом и сильном конфайнменте, а масштабные достижения полупроводниковой технологии КТ позволяет использовать их в широком спектре прикладных и фундаментальных задач естественных наук [9–12].

Одной из важных задач в этой области является разработка однофотонных источников света [13,14], в частности, для нужд квантовой телепортации и квантовой криптографии [15,16]. Рабочий механизм, спонтанное излучение, обычно рассматривается в дипольном приближении [11], в котором экспоненциальный фактор e^{ikr} заменяется единицей при выполнении объемного интегрирования. Размер КТ чаще всего лежит в диапазоне 2–10 нм и в видимой области света, величина kr изменяется от нуля до значений $3 \div 6 \times 10^{-2}$. Естественно, это не влияет существенно на дипольно-разрешенные переходы, но вопрос о дипольно-запрещенных переходах остается открытым. Данная статья посвящена освещению этого вопроса.

2. Сферически симметричная квантовая точка

Будем, как обычно, заменить КТ сферически симметричной прямоугольной потенциальной ямой (нанометрического радиуса R). Характерная высота стенок (U_0) при этом конечна и достигает до нескольких электрон-вольт. Решение стационарного уравнения Шредингера внутри и снаружи сферической потенциальной ямы хорошо известно [17] и может быть представлено в следующем виде:

$$\Psi_{lm}(r, \theta, \varphi) = A e^{im\varphi} P_l^m(\cos \theta) \frac{J_{l+1/2}(\chi r)}{\sqrt{\chi r}}, \quad 0 \leq r < R,$$

$$\Psi_{lm}(r, \theta, \varphi) = B e^{im\varphi} P_l^m(\cos \theta) \frac{K_{l+1/2}(\kappa r)}{\sqrt{\kappa r}}, \quad r > R,$$

где r, θ, φ – сферические координаты, l, m – орбитальное и магнитное квантовые числа, A, B – нормировочные коэффициенты, $P_l^m(\cos \theta)$ – ассоциированный полином Лежандра, $J_{l+1/2}(\chi r)$ и $K_{l+1/2}(\kappa r)$ – функция Бесселя и модифицированная функция Бесселя полуцелого порядка соответственно, $\chi = \sqrt{2ME} / \hbar$ и $\kappa = \sqrt{2M(U_0 - E)} / \hbar$ – энергетические параметры задачи размерности волнового вектора, M и $E < U_0$ – масса и энергия электрона или образованной им дырки. Энергетический спектр потенциальной ямы определяется из

соотношения

$$\sqrt{E} J_{l+3/2}(\sqrt{E}) K_{l+1/2}(U_0 - E) = \sqrt{U_0 - E} J_{l+1/2}(\sqrt{E}) K_{l+3/2}(U_0 - E),$$

где сделан $\chi R \rightarrow \sqrt{E}$, $\kappa R \rightarrow \sqrt{U_0 - E}$ переход к безразмерным величинам. Он равносильен тому, что энергия E и глубина потенциала U_0 в дальнейшем измеряются в единицах «энергии отдачи» электрона $E_r = \hbar^2/2MR^2$. Значения E при некоторых значениях U_0 представлены в табл.1. Они будут использованы в пункте 4 при расчете скорости спонтанного излучения Γ . Масса дырки при этом будет считаться 6 раз больше эффективной массы электрона, а для последнего будет выбрано значение $0.05 m_e$, где m_e – масса свободного электрона.

Табл.1. Значения энергии связанных состояний электрона E в потенциале квантовой точки при разных глубинах потенциальной ямы U_0 и орбитального квантового числа l .

Глубина потенциала U_0	Квантовое число l	Энергия связанного состояния электрона E
5	0	4.07
12	0	5.68
	1	10.88
25	0	6.74, 24.07
	1	13.53
	2	21.65
42	0	7.35, 28.31
	1	14.90, 40.68
	2	24.26
	3	35.14

3. Спонтанное излучение

Динамику процесса спонтанного излучения (распада возбужденного состояния) КТ рассмотрим в одноэлектронном приближении в рамках теории Вайскопфа-Вигнера. Поле спонтанного фотона при этом описывается аппаратом вторичного квантования, использующим операторы рождения и уничтожения фотона $a_{\mathbf{k},\lambda}^+$ и $a_{\mathbf{k},\lambda}$ соответственно с волновым вектором $\mathbf{k}$ и поляризацией λ . Полупроводниковый микрокристалл, содержащий электрон и дырку, аппроксимируется изотропной непрерывной средой с диэлектрической постоянной ϵ . Поляризационный заряд, индуцированный на поверхности, игнорируется [18].

Наша главная задача здесь – уточнение на основе упрощенной модели существенных признаков, вносимых нарушением дипольного приближения, которые могут служить отправной точкой для анализа в реальных материалах. Спонтанное излучение описывается двухуровневой схемой взаимодействия.

Электрон из возбужденного состояния зоны проводимости самопроизвольно спускается вниз и занимает вакантное (дырочное) состояние валентной зоны. Излученный при этом фотон имеет некую частоту ω в районе оптического перехода, сферические углы (θ, φ) относительно оси квантования и величину волнового вектора $k = \sqrt{\varepsilon} \omega / c$.

Взаимодействующая система КТ и вторично-квантованное поле спонтанного излучения вне дипольного приближения описывается суммарным гамильтонианом

$$H = H_{\text{dot}} + H_{\text{rad}} + H_{\text{int}},$$

где

$$H_{\text{rad}} = \sum_{\mathbf{k}, \lambda=1,2} \hbar \omega_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}, \lambda}^+ a_{\mathbf{k}, \lambda}$$

-гамильтониан квантованного поля частоты $\omega_{\mathbf{k}}$ и волнового вектора $\mathbf{k} = \sqrt{\varepsilon} \omega_{\mathbf{k}} \mathbf{n} / c$,

$$H_{\text{int}} = \frac{e}{M} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \cdot \hat{\mathbf{p}} = -i \frac{e \hbar}{M} \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{2 \varepsilon_0 \omega_{\mathbf{k}} V}} (\mathbf{e}_{\mathbf{k}, \lambda} a_{\mathbf{k}, \lambda} e^{i \mathbf{k} \mathbf{r}} + \mathbf{e}_{\mathbf{k}, \lambda}^* a_{\mathbf{k}, \lambda}^+ e^{-i \mathbf{k} \mathbf{r}}) \cdot \nabla \quad (1)$$

-гамильтониан взаимодействия, где V – объем квантования, $\mathbf{e}_{\mathbf{k}, \lambda}$ – единичный вектор поляризации фотона, ∇ – набла оператор Гамильтона, M – масса электрона в зоне проводимости или масса дырки в валентной зоне. Заметим, что широко применяемое дипольное приближение относится к гамильтониану взаимодействия, в котором выполняется подстановка $e^{\pm i \mathbf{k} \mathbf{r}} \rightarrow 1$.

В дальнейшем обсуждении мы будем считать, что состояние зоны проводимости, из которой происходит спонтанное излучение, имеет там самую низкую энергию. Это $l = 0$ состояние. В табл.1 для каждого значения глубины U_0 ему соответствует первая строка. Волновую функцию обозначим $\psi(\mathbf{r})$. Конечное состояние валентной зоны КТ оставим в принципе произвольным, а соответствующую волновую функцию с неким l обозначим $\phi_l(\mathbf{r})$. Полная волновая функция системы «КТ+фотон» записывается в виде

$$\Psi(t) = a(t) \psi(\mathbf{r}) e^{-i E_e t} |0\rangle + \sum_{\mathbf{k}, \lambda} b_{\mathbf{k}, \lambda}(t) \phi_l(\mathbf{r}) e^{-i E_h t - i \omega_{\mathbf{k}} t} |1_{\mathbf{k}, \lambda}\rangle, \quad (2)$$

для коэффициентов состояния которого уравнение Шредингера гласит:

$$\frac{\partial a(t)}{\partial t} = \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \beta_{\mathbf{k}, h} \langle \phi_l(\mathbf{r}) | e^{-i \mathbf{k} \mathbf{r}} \mathbf{e}_{\mathbf{k}, \lambda}^* \cdot \nabla | \psi(\mathbf{r}) \rangle^* e^{-i (\omega_{\mathbf{k}} - \omega_{0 \rightarrow l}) t} b_{\mathbf{k}, \lambda}(t), \quad (3)$$

$$\frac{\partial b_{\mathbf{k}, \lambda}(t)}{\partial t} = -\beta_{\mathbf{k}, e} \langle \phi_l(\mathbf{r}) | e^{-i \mathbf{k} \mathbf{r}} \mathbf{e}_{\mathbf{k}, \lambda} \cdot \nabla | \psi(\mathbf{r}) \rangle e^{i (\omega_{\mathbf{k}} - \omega_{0 \rightarrow l}) t} a(t), \quad (4)$$

где $\omega_{0 \rightarrow l} = (E_e - E_{l, h}) / \hbar$ – частота оптического перехода и введены обозначения

$$\beta_{\mathbf{k},e} = \frac{e}{M_e} \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega_{\mathbf{k}}V}}, \quad \beta_{\mathbf{k},h} = \frac{e}{M_h} \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega_{\mathbf{k}}V}}, \quad \beta_{\mathbf{k}} = \sqrt{\beta_{\mathbf{k},e}\beta_{\mathbf{k},h}}.$$

Суммирование по волновому вектору подразумевает предел континуума (т. е. когда объем квантования $V \rightarrow \infty$):

$$\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int_0^\infty k^2 dk \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi.$$

Ось квантования z при этом направлена вдоль константы для данной реализации вектора

$$\boldsymbol{\eta} = \langle \psi(\mathbf{r}) | e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda} \cdot \nabla | \varphi_l(\mathbf{r}) \rangle.$$

Согласно стандартной процедуре решения уравнений типа (3) и (4) в приближении Вайскопфа-Вигнера формально интегрируется уравнение (4), подставляется в уравнение (3) и к его правой части применяется асимптотическое представление

$$\int_0^\infty e^{-i(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_{0 \rightarrow l})\tau} d\tau = \pi \delta(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_{0 \rightarrow l}) - iP \left(\frac{1}{\omega_{\mathbf{k}} - \omega_{0 \rightarrow l}} \right),$$

где δ – дельта-функция Дирака, а знак P – главная часть Коши. Последняя приводит к незначительному частотному смещению и пренебрегается. Амплитуда возбужденного состояния в этом случае затухает экспоненциально,

$$a(t) = \exp \left\{ -\frac{\Gamma}{2} t \right\}, \quad (5)$$

скорость затухания которого (частотная ширина энергетического уровня) задается формулой

$$\Gamma = 2\pi \sum_{\mathbf{k},\lambda} \beta_{\mathbf{k},\lambda}^2 \left| \langle \varphi_l(\mathbf{r}) | e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}^* \cdot \nabla | \psi(\mathbf{r}) \rangle \right|^2 \delta(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_{0 \rightarrow l}),$$

а амплитуда излучения фотона $(\mathbf{k}, \lambda)$ имеет вид

$$b_{\mathbf{k},\lambda}(t) = -i\beta_{\mathbf{k},e} \frac{\langle \varphi_l(\mathbf{r}) | e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}^* \cdot \nabla | \psi(\mathbf{r}) \rangle}{\omega_{\mathbf{k}} - \omega_{0 \rightarrow l} + i\Gamma/2}, \quad (6)$$

отличающийся от стандартного на множитель $e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ в объемном интеграле матричного элемента.

4. Численные результаты

Точное выражение (6) без дипольного приближения отменяет правила отбора оптического перехода по угловому моменту электрона и тем самым дает возможность ввести в круг интересов области дипольно-запрещенные переходы, используя, например, зависимость скорости и углового распределения излучения от глубины потенциальной ямы. Скорость спонтанного распада между

дискретными уровнями энергии при разных потенциальных глубинах, взятых из табл.1, представлен в табл.2. При выполнении расчетов для всех переходов длина волны излучения была выбрана одинаковой, равной 0.54 мкм (что соответствует зеленому цвету). Это достигался выбором радиуса КТ, соответствующие значения которого приведены во второй столбце таблицы в нанометрах. Параметр kR , характеризующий отклонение от дипольного приближения, принимает небольшие значения, оставаясь в пределах $0.05 \div 0.16$. Как и следовало ожидать, влияние на разрешенные дипольные переходы незначительно. Но это не относится к дипольно-запрещенным переходам. Согласно табл.2 в относительно неглубокой потенциальной яме дипольно-запрещенный переход при $U_0 = 5$ имеет более высокую скорость спонтанного излучения, чем дипольно-разрешенные переходы в более глубоких потенциальных ямах. Данные таблицы также показывают быстрое снижение скорости распада при дипольно-запрещенных переходах с углублением захватывающего потенциала. Тем не менее, они обеспечивают достаточно богатый спектр скоростей близких порядков, которые могут быть использованы в корреляционных и статистических исследованиях квантовой информации, требующих наличие нескольких близких переходов в том же самом образце.

Табл.2. Значения скорости распада населенности Γ от самого низкого энергетического уровня квантовой точки с $l' = 0$ на дырочные уровни квантовой точки для разных глубин потенциальной ямы U_0 и орбитального квантового числа l . В скобках приведены значения дипольного приближения

Глубина потенциала КТ U_0	Радиус КТ R , нм	Квантовое число l'	Скорость распада населенности Γ , Гц
5	4.30	0	$3.82 \cdot 10^8$ (0)
12	5.14	0	22.80 (0)
	7.21	1	$5.50 \cdot 10^7$ ($5.41 \cdot 10^7$)
25	5.61	0	0.06 (0)
	10.59	0	$1.51 \cdot 10^8$ (0)
	7.94	1	$1.071 \cdot 10^4$ ($1.077 \cdot 10^4$)
	10.04	2	$2.21 \cdot 10^6$ (0)
42	5.85	0	$3.38 \cdot 10^{-5}$ (0)
	11.48	0	64.56 (0)
	8.33	1	2.29 (2.30)
	13.77	1	$1.518 \cdot 10^{10}$ ($1.513 \cdot 10^{10}$)
	10.63	2	43.29 (0)
	12.80	3	713.00 (0)

Теперь обратимся к другой стороне проблемы-к угловому распределению спонтанного излучения. Хорошо известно, что излучение колеблющегося диполя неизотропно: оно отсутствует в направлении диполя и достигает максимального значения в плоскости, перпендикулярной к оси диполя. Такую закономерность можно проследить в формуле для скорости спонтанного излучения, если представить ее в виде интеграла по элементарным телесным углам $d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta$, то есть

$$\Gamma = \int \Gamma(\theta) d\Omega = 2\pi \int_0^\pi \Gamma(\theta) \sin \theta d\theta,$$

где $\Gamma(\theta)$ – вероятность излучения в единицу времени в единичный конусообразный телесный угол вокруг полярного угла θ , определенного относительно направления вектора η . Он совпадает с дипольным моментом оптического перехода в дипольном приближении, а $\Gamma(\theta)$ повторяет указанный выше закон неизотропного распределения.

С другой стороны, спонтанное излучение от сферической КТ должно быть сферически-симметричным, если, как в приведенном выше описании, производится усреднение по поляризациям регистрируемого фотона и магнитным квантовым числам начального (электронного) и конечного (дырочного) состояний КТ. Разрешение кажущегося несоответствия между двумя выводами заключается в том, что направление вектора η , как направление оси квантования, от одной реализации спонтанного испускания фотона к другой реализации меняется случайным образом. В квантовой теории угловая анизотропия записывается относительно оси квантования, но направление самой оси беспорядочно флуктуирует при разных реализациях, что делает спонтанное излучение статистически изотропным. Отсюда интересный вывод – анизотропное спонтанное излучение, особенно важное для однофотонных источников света, может быть получено при сохранении направления оси квантования для всех реализаций. Кроме стационарных внешних полей, для фиксации направления оси квантования можно использовать, по нашему мнению, лазерные импульсы той же линейной поляризации, которые возбуждают электрон из валентной зоны в зону проводимости КТ и тем самым подготавливают исходное состояние для дальнейшего процесса спонтанного излучения. В этих условиях угловое распределение $\Gamma(\theta)$ становится экспериментально выполнимым и возникает вопрос о перспективности его применения в однофотонных источниках света при оптических переходах, разрешенных, а также запрещенных дипольным правилом выбора $|l' - l| = 1$. Численные расчеты показывают, что сделанные разрешенными переходы $l = 0 \rightarrow l' = 0$ практически повторяют закон углового распределения $\sin^2 \theta$. При других переходах, $l' = 2, 3, \dots$, распределение заметно меняется, но остается примерно в угловых размерах дипольного случая. $\Gamma(\theta)$ для перехода $l = 0 \rightarrow l' = 3$ представлен на Рис. Полное пространственное распределение излучения образуется вращением картины рис.1 относительно оси квантования (симметрии).

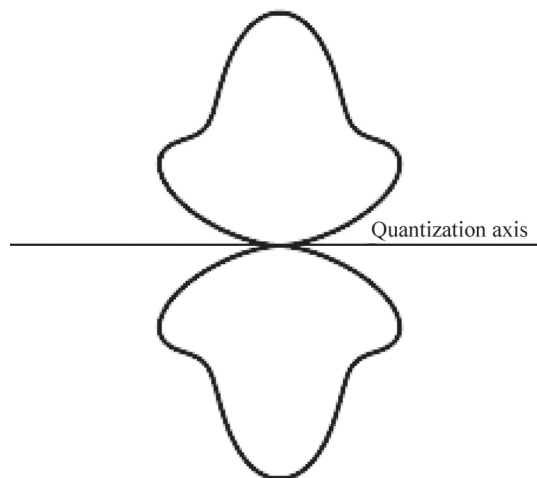


Рис. Полярная угловая зависимость спонтанного излучения на дипольно-запрещенном переходе $l = 0 \rightarrow l' = 3$ (последняя строка табл.2).

5. Заключение

Спонтанное излучение в «искусственных» атомах - полупроводниковых КТ – является основным механизмом генерации одиночных фотонов для экспериментального изучения фундаментальных вопросов квантовой оптики и применения их в квантовых информационных технологиях. Сформированные здесь задачи представляют ряд требований к источникам фотонов, в частности, к их частотному спектру и скорости испускания фотонов. В данной работе показано, что эта задача может быть частично решена с помощью сферического полупроводникового КТ размерами $5 \div 15$ нм, путем привлечения оптических переходов, освобожденных от запретов из-за выхода за пределы дипольного приближения.

Работа выполнена при финансовой поддержке комитета науки министерства образования, науки, культуры и спорта РА в рамках лаборатории исследования и моделирования квантовых явлений ЕГУ.

ЛИТЕРАТУРА

1. M.G. Bawendi, M.L. Steigerwald, L.E. Brus. Annu. Rev. Phys. Chem., **41**, 477 (1990).
2. W. Zhoua, J.J. Coleman. Current Opinion in Solid State and Materials Science, **20**, 352 (2016).
3. Д.А. Багдасарян, Д.Б. Айрапетян, А.А. Саркисян, Э.М. Казарян, А. Медвид. Изв. НАН Армении, Физика, **52**, 177 (2017).
4. Y. Kayanuma. Phys. Rev. B, **38**, 9797 (1988).
5. A. Sivakami, K. Navaneethakrishnan. Physica E, **40**, 649 (2008).
6. I.J. Luxmoore, E.D. Ahmadi, N.A. Wasley, A M. Fox, A.I. Tartakovskii, A.B. Krysa, M.S. Skolnick. Appl. Phys. Lett., **97**, 181104 (2010).
7. С.В. Карпов, С.В. Микушев. Физика Твёрдого Тела, **52**, 1627 (2010).

8. **R. Nedzinskas, V. Karpus, B. Cechavicius, J. Kavaliauskas, G. Valusis.** Phys. Scr., **90**, 065801 (2015).
9. **C. Schneider, P. Gold, C.-Y. Lu, S. Höfling, J.-W. Pan, M. Kamp.** arXiv:1502.00160v1.
10. **Д.А. Багдасарян, Э.С. Акопян, Д.Б. Айрапетян, А.А. Саркисян, Э.М. Казарян,** Изв. НАН Армении, Физика, **54**, 61 (2019).
11. **W.W. Chow, F. Jahnke.** Progress in Quantum Electronics, **37**, 109 (2013).
12. **A.L. Vartanian, A.A. Kirakosyan, K.A. Vardanyan.** Superlattices and Microstructures, **122**, 548 (2018).
13. **B. Lounis, M. Orrit.** Rep. Prog. Phys., **68**, 1129 (2005).
14. **G.S. Buller, R.J. Collins.** Meas. Sci. Technol., **21**, 012002 (2010).
15. **A. Kuhn, M. Hennrich, G. Rempe.** Phys. Rev. Lett., **89**, 067901 (2002).
16. **Y. Masuoto, T. Takagahara.** Semiconductor Quantum Dots: Physics, Spectroscopy and Applications. Berlin, Springer, 2002.
17. **S. Flugge.** Practical Quantum Mechanics. Berlin-Heidelberg, Springer-Verlag, 1974, Problem 63.
18. **L.E. Brus.** J. Chem. Phys., **80**, 4403 (1984).

**ԿԻՍԱՀԱՐՈՐԴՉԱՅԻՆ ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ԿԵՏԻ ՍՊՈՆՏԱՆ ՃԱՌԱԳԱՅԹՈՒՄՆ
ԱՌԱՆՅ ԴԻՊՈԼԱՅԻՆ ՄՈՏԱՎՈՐՈՒԹՅԱՆ**

Գ.Ա. ՄՈՒՐԱԴՅԱՆ, Լ.Ռ. ԱՐԶՈՒՄԱՆՅԱՆ, Ա.Ժ. ՄՈՒՐԱԴՅԱՆ

Գնդաձև կիսահաղորդչային քվանտային կետի սպոնտան ճառագայթումը քննարկվել է առանց դիպոլային մոտավորության կիրառման: Ցույց է տրվել, որ այդ դեպքում մեկ էլեկտրոնային մակարդակով ծանծաղ պոտենցիալային հորի դիպոլային արգելված ճառագայթումը դառնում է ավելի ինտենսիվ, քան ավելի խորը պոտենցիալ հորի դիպոլային թույլատրելի ճառագայթումը, և որ պոտենցիալի խորացումը մոտեցնում է դիպոլային մոտավորությունը: Ցույց է տրվում նաև, որ գնդաձև քվանտային կետից կարելի է ստանալ գլանաձև սիմետրիկ անիզոտրոպային ճառագայթում, եթե ֆոտոնների ճառագայթման ակտերի համար քվանտավորման առանցքի ուղղությունը պահպանվի անփոփոխ:

**SPONTANEOUS EMISSION OF A SEMICONDUCTOR QUANTUM DOT
WITHOUT THE DIPOLE APPROXIMATION**

G.A. MURADYAN, L.R. ARZUMANYAN, A.Zh. MURADYAN

Spontaneous emission of a spherical semiconductor quantum dot is considered without applying the dipole approximation. It is shown that the dipole-forbidden radiation of a shallow potential well with one electron level becomes more intense than the dipole-permitted radiation of a deeper potential well, and that the potential deepening makes closer the dipole approximation. It is also shown that a cylindrical symmetric anisotropic radiation can be obtained from a spherical quantum dot if the direction of the quantization axis is kept unchanged for photon emission acts.

ГАЗОВЫЕ СЕНСОРЫ ИЗ ОКСИДА ЦИНКА

В.М. АРУТЮНЯН*

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

*e-mail: kisahar@ysu.am

(Поступила в редакцию 12 мая 2020 г.)

В обзоре литературы обсуждаются результаты исследований газовых сенсоров на основе оксида цинка. Упомянуты возможности и технологии для изготовления таких датчиков. Рассмотрены легированные и легированные примесями и углеродными нанотрубками сенсоры ZnO, а также датчики на основе нанонитей и квантовых точек. Показаны возможности снижения рабочей (операционной) температуры нагрева рабочего тела сенсоров с сохранением достаточно высокой чувствительности к газам. Недавно разработанные ZnO сенсоры работают сегодня при комнатной температуре (без предварительного нагрева их рабочего тела) в отсутствие ультрафиолетового освещения сенсора и под ним.

1. Введение

Научные работы и патенты о полупроводниковых газовых сенсорах публикуются сегодня во многих научных журналах, материалах совещаний и т.д. Ограничимся лишь ссылками на четыре книги, опубликованные в данной области [1–4]. Информацию о доступных на рынке сенсорах, изготовленных на основе оксидов металлов и произведенных в США и Японии, можно найти на сайтах www.figarosensor.com, www.honeywell.com, www.sinkera.com и т. д. Все упомянутые газовые датчики нуждаются в существенном предварительном нагреве рабочего тела полупроводника, то есть в достаточно заметном потреблении электрической энергии. Отсутствие селективности и долговременной стабильности также часто ограничивают их применение. Диапазон рабочих (операционных) температур (ОТ) коммерческих газовых датчиков составляет несколько сотен градусов Цельсия. Основной проблемой при их широкомасштабном применении сегодня является необходимость в разработке полупроводниковых газовых сенсоров, работающих в закрытом помещении. К тому же, требуется обеспечение низкой температуры рабочего тела сенсора (еще лучше отсутствие его предварительного нагрева) и использование малогабаритных датчиков оксидов металлов, функционализированных (декорированных) различными примесями или нанотрубками, покрытых покрытиями из

благородных металлов. Применение нано размерных сенсоров обеспечило увеличение их удельной поверхности и некоторые дополнительные преимущества, но и повышение их стоимости. Кроме того, современные датчики должны быть дешевыми и обеспечивать возможность их включения в микроэлектронные схемы.

В настоящее время широко исследуется газочувствительность тонкопленочных структур из различных металл оксидных материалов (SnO_2 , ZnO , TiO_2 , WO_3 , In_2O_3 , CuO , NiO , Fe_2O_3 , Co_3O_4 , V_2O_5 , ZnO-SnO_2 и др.) [1–7]. Среди оксидов металлов ZnO зарекомендовала себя как один из лучших кандидатов для применения в области анализаторов газа благодаря своим превосходным свойствам, настраиваемым такими параметрами как чувствительность (отклик), селективность и стабильность, а также хорошая надежность в дополнение к нетоксичной природе окисла, контролируемой морфологии, прозрачности в видимом диапазоне, довольно высокой подвижности электронов, экономической эффективности и биосовместимости. Напомним, что оксид цинка (ZnO) имеет ширину запрещенной зоны 3.37 эВ. Он привлек широкое внимание ученых [8–16] и имеет потенциальное применение в качестве УФ-фотоприемников [10], светодиодов [13], солнечных элементов [14], варисторов, люминофора для цветных дисплеев, тепловых зеркал, пьезоэлектрических устройств, микроэлектронных схем на основе поверхностных акустических волн и т. д. [15,16 и т.д.]. В последние десятилетия ZnO использовались в качестве катализаторов из-за его особых электрических, оптических и каталитических свойств. Концепция газовых сенсоров, использующих тонкие пленки ZnO , была впервые предложена Сейямой и др. [15].

2. Нелегированные и легированные примесями и углеродными нанотрубками ZnO сенсоры

Газовые датчики на основе нелегированной окиси цинка ZnO имеют такие существенные недостатки, как высокая ОТ (обычно между 300 и 500°C), низкая селективность по газу и сравнительно низкая чувствительность к газу. Чтобы преодолеть эти существенные недостатки проведен большой объем исследований. Одной из критических проблем в устройствах газовых сенсоров на основе оксидов металлов является контроль электронных и структурных свойств материалов с целью изменения чувствительных свойств. Существуют различные методы для изменения этих свойств. Известно, что рутений в матрице оксида олова действует как окислительный катализатор для углеводородов для достижения значительной степени чувствительности и селективности. Поэтому интересным подходом является модификация метал оксидных поверхностей с использованием катализаторов из благородных металлов, таких как Pt, Ru и Pd (см., например, [4,6]). Другим способом улучшения характеристик сенсоров является

соответствующее легирование оксидов металлов различными металлическими примесями. Тонкие пленки ZnO, легированные алюминием, были изготовлены в [16,17] на стеклокерамических подложках методом высокочастотного магнетронного распыления. Полученные тонкие пленки ZnO <Al> имеют наноразмерные зерна (~20–30 нм). Структура стеклокерамика/ZnO <Al>/Pt показала высокую чувствительность к водороду, но уже потребовался прогрев рабочего тела до 400°C. Исследования показали, что эта структура имеет времена быстрого реагирования и восстановления. Мы показали, что в отличие от многих других метал оксидных материалов, используя наши легированные алюминием пленки ZnO можно реализовать датчики водорода с очень низкой ОТ предварительного нагрева рабочего тела. Полученная структура удовлетворяет основным требованиям к газовым сенсорам. Анализ литературы в [16] показал, что наностержневые ZnO сенсоры для обнаружения этанола и водорода имеют ОТ 350°C [18], сенсоры на нанопроволоках ZnO для обнаружения этанола – 300°C [19], тонкопленочные датчики ZnO для обнаружения метана [20] и этанола [21] – 150–350°C, Fe₂O₃-ZnO сенсоры для обнаружения NH₃ – 350°C [22], датчики ZnO для обнаружения сжиженного нефтяного газа – 400°C [23], ZnFe₂O₄ сенсоры для определения этанола и ацетона – 300°C [24]. Результаты двух других исследований пленок ZnO, легированных алюминием, изложены в [25,26]. Предварительный нагрев рабочего тела датчиков NO_x, о которых сообщалось в [27], составлял 100–300°C.

Тонкопленочные датчики паров пероксида водорода, изготовленные из легированной лантаном ZnO, были изготовлены методом высокочастотного магнетронного распыления [28]. Датчики из легированной лантаном окиси цинка продемонстрировали достаточно высокую реакцию на 10 ppm (ч/млн паров) пероксида водорода при ОТ 220°C. Установлено, что зависимость отклика от концентрации паров пероксида водорода имеет линейный характер для изготовленных структур при ОТ 150°C, что может быть использовано для определения концентрации паров пероксида водорода. Отклик таких детекторов паров перекиси водорода резко возрос после такой температуры предварительного нагрева рабочего тела (рис.1) [27].

Индий был добавлен для увеличения сопротивления ZnO и снижения рабочей температуры 3D- ZnO датчика. Наибольшая чувствительность и селективность по отношению к газообразному этанолу при 250°C наблюдалась для ZnO 5 ат.% легированной индием. Отклик был примерно в три раза выше, чем у чистого ZnO при 285°C, что, вероятно, было связано с уникальной трехмерной упорядоченной макропористой морфологией ZnO:In, увеличенной площадью поверхности и более высокой концентрацией носителей электронов [29]. Датчики Mn/ZnO/Au/ZnO, Ag/Al-ZnO для ацетона и формальдегида при ОТ =

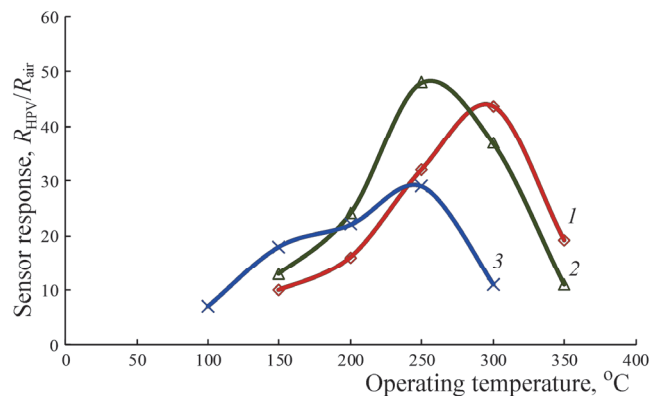


Рис.1. Зависимость реакции на 1800 ppm пероксида водорода от рабочей температуры для $\text{Zn}_{0.9929}\text{La}_{0.0071}\text{O}$ сенсора на Al_2O_3 подложке с пленками толщиной 80 нм (1) и 210 нм (2) и для датчика с пленкой $\text{Zn}_{0.9853}\text{La}_{0.0147}\text{O}$, нанесенной на мультисенсорную платформу (3) [27].

240–275°C описаны в [30–33]. Пористый ацетоновый сенсор ZnO с полимерными коллоидами и OT = 300°C предложен в [34].

3. Сенсоры на нанонитях и квантовых точках

Мы обсудим ниже размерные эффекты в малогабаритных сенсорах. Использование последних очень важно для современных микроэлектроники и измерительной техники. На сегодня известны следующие наносенсоры: нулевой размерности (0D); одномерные нанонити (стержни) (1D) и нанопроволоки (NWs); двумерные (2D) нанолиты и пленки; трехмерные (3D) пористые наноструктуры; трехмерные (3D) наноструктуры и функционализированные (декорированные) нанотрубками. ZnO нановолокна, нанопластины, наноцветки были успешно синтезированы с помощью простых гидроспиновых, гидротермальных путей и других методов [4]. Одномерные (1D) наноматериалы, включая нанопроволоки, нановолокна, нанонити и нанотрубки, привлекли большое внимание к сенсорным приложениям из-за их уникальной морфологии и большого отношения поверхности сенсора к его объему [35].

Значительное улучшение параметров чувствительных к водороду ZnO нановолокон в результате образования гетеропереходов между окислом NiO и нанопроволокой ZnO, декорированных наночастицами WO_3 , продемонстрировано в работах [36]. Сенсор на основе 1D-оксида цинка, легированного фтором (1D-FZO), описан в [47]. В работе [38] сообщено об изготовлении чувствительного к сероводороду (H_2S) сенсора, изготовленного на основе квантовой точки (КТ) ZnO диаметром менее 4 нм. Средний размер зерна QD был вдвое ниже длины Дебая. Высокая чувствительность (отклик) – отношение сопротивления сенсора в воздухе к его сопротивлению в газовой среде ($R_{\text{air}}/R_{\text{gas}}$) – была равна

75 и 567 при комнатной температуре и нагреве рабочей среды сенсора 90°C, соответственно. СВЧ гидролизная технология изготовления кристаллической матрицы из ZnO нанонитей была предложена в [43] для реализации сенсора угарного газа CO с привлечением явления фотолюминесценции при комнатной температуре.

Нанотрубки – перспективные наноструктуры для изготовления высокочувствительных и селективных газовых сенсоров из-за их обширной площади поверхности. Фактически, мезо- и наноразмерные поры, сформированные на различных поверхностях нанотрубок во время синтеза, могут значительно улучшить характеристики для обнаружения газа, облегчая проникновение газа в самые глубокие части чувствительного устройства.

В Ереванском государственном университете в [6, 16, 40] было показано что функционализация толстоплёночных структур многослойных углеродных нанотрубок (MWCNT)/SnO₂ с рутениевым катализатором приводит к значительному увеличению сигнала отклика на пары метанола, этанола, ацетона, толуола и изобутана. Структуры были получены методами золь-гель и гидротермального синтеза, а также их сочетанием. В таких функционализированных нанокомпозитах, которые можно рассматривать как твердые растворы оксидов металлов и других материалов, протекают сложные явления. Сегодня невозможно пока представить полную картину, но мы должны принять во внимание следующее: MWCNT имеют огромную удельную поверхность и наноразмерную структуру, которая обнажает большое количество участков, с которыми могут реагировать газы. Обнаружение различных газов может быть обеспечено при низких температурах предварительного нагрева рабочего тела датчика. Необходимо учесть, что электропроводность MWCNT трубок значительно выше по сравнению с электропроводностью оксидов металлов. Например, реакция датчиков SnO₂/MWCNT на пропилен гликоль (PG), диметил фосфат (DMF) и формальдегид (FA) в сравнении с ОТ показана на рис.2. Зависимости времени отклика и

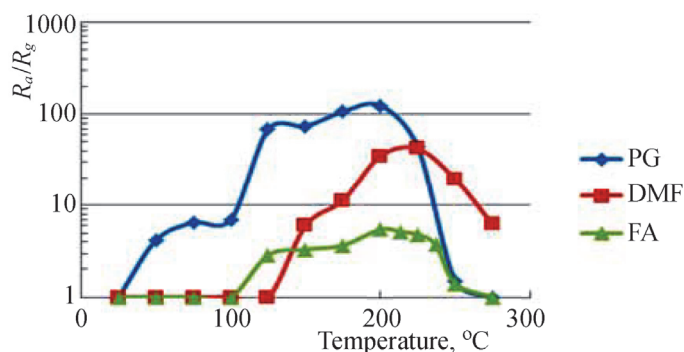


Рис.2. Отклик датчиков SnO₂ / MWCNT на пропиленгликоль (PG), диметилфосфат (ДМФА) и формальдегид (ФА) на ОТ.

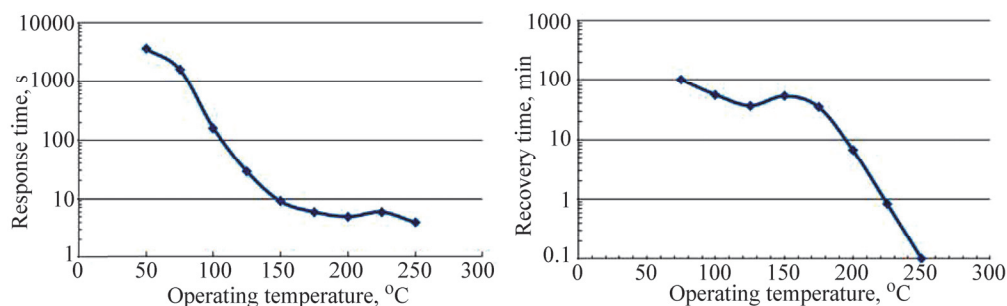


Рис.3. Время срабатывания и восстановления датчика пара $\text{SnO}_2/\text{MWCNT PG}$ в зависимости от ОТ.

восстановления от ОТ показаны на рис.3,4. Следовательно, введение нанотрубок приводит к снижению сопротивления чувствительных метал оксидных материалов и открывает возможности для просачивания носителей заряда в объем. Поскольку SnO_2 и ZnO имеют проводимость n-типа, а MWCNTs – p-типа, в таких гибридных пленках имеется два обедненных слоя. Первая область обеднения расположена на поверхности оксида металла, а вторая – на границе раздела частиц оксида металла и MWCNT. Образование наноканалов и гетеропереходов приводит к повышенной чувствительности к газу таких гибридизированных газовых датчиков, тогда как уменьшение работы выхода (высота барьера) или увеличение проводимости чувствительного к оксиду металла слоя приводят к улучшению характеристик газового датчика при низких ОТ [41,42]. Очевидно, что обсуждаемые здесь возможные механизмы требуют дальнейших экспериментальных и теоретических исследований. Обратим внимание, что наибольшая чувствительность была достигнута для SnO_2 , загруженного 0.25% MWCNT. Чрезмерное добавление MWCNT в композит чрезмерно снижает сопротивление датчика. При избыточном добавлении MWCNT увеличивающееся количество электронов на границе зерен уменьшает сопротивление и снижает чувствительность датчиков металлоксид + MWCNT. Сходное поведение также сообщают Шарма и др. [43]

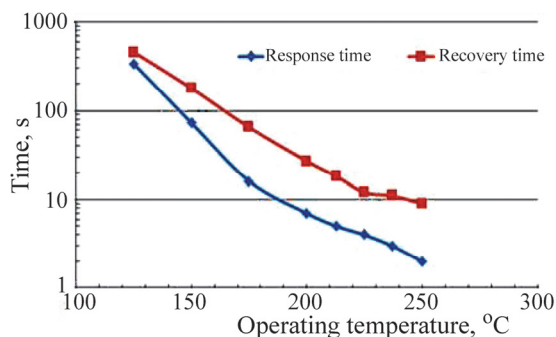


Рис.4. Время восстановления датчика пара $\text{SnO}_2/\text{MWCNT PG}$ в зависимости от ОТ.

при взаимодействии с газом NO_2 . Отклик на пары ацетона также увеличился до 72% после добавления 0.25% MWCNT. Отметим, что наносенсоры к пероксиду водорода из $\text{SnO}_2/\text{MWCNT}$ были описаны также в [44–48] и ZnO/CNT -в [49].

Наноцветочные ZnO сенсоры ацетона и полые микросферные ZnO сенсоры этанола с большой ОТ предложены в [50–52]. ZnO сенсор с трехмерной иерархической мезопористой морфологией с высокой пористостью и большим отношением поверхности к объему считается хорошим кандидатом для применения в газоанализаторах. Лупан и др. [53] изготовили пористые трехмерные гибридные ZnO тетраподы пламенным методом. Они использовали различные металлические (Fe , Cu , Al) микрочастицы с ZnO . Датчик на основе ZnO/CuO ($\text{ZnO}:\text{Cu}$ 20: 1) показал хороший резистивный отклик при температуре 350°C для 100 ppm этанола. Ачария и др. [54] изготовили трехмерные пористые $\text{PdO}-\text{ZnO}$ наноцветки используя метод жидкофазного осаждения. Такие $\text{PdO}-\text{ZnO}$ структуры имели отличные времена отклика и восстановления для различных паров спирта (0.5–700 ppm). Вероятно, их улучшенная селективность связана с образованием гетеропереходов и более низкими энергиями активации адсорбции метанола. Ван и соавт. [55] предложили трехмерную упорядоченную макропористую ZnO наноструктуру с большой площадью поверхности. Такие основанные на ZnO гетероструктуры ядро-оболочка показали более высокий газовый отклик на формальдегид по сравнению с другими сенсорами. Это можно объяснить увеличением кинетического диаметра всех обнаруженных сенсорами в следующем порядке: формальдегид (0.243 нм) < аммиак (0.29 нм) < метанол (0.363 нм) < этанол (0.453 нм) < ацетон (0.46 нм) < толуол (0.525 нм) [56]. Кроме того, сенсоры аммиака на основе ZnO имели низкий отклик. Каточ с соавт. [57] изготовили двухслойные полые волокна TiO_2/ZnO на полимерных волокнах с использованием метода нанесения атомного слоя. Они имели превосходную чувствительность к

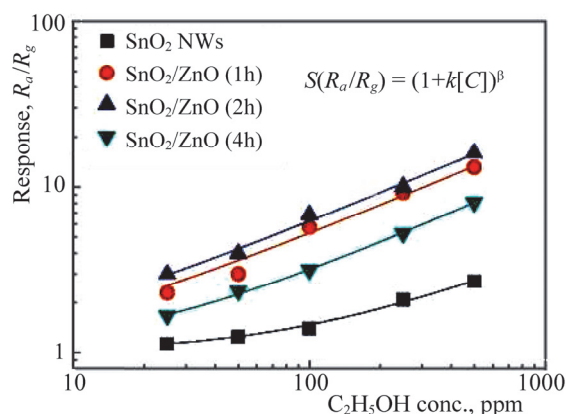


Рис.5. Отклик нанопроволок SnO_2 и датчиков иерархической наноструктуры SnO_2/ZnO к этанолу в зависимости от концентрации газообразного этанола.

угарному газу и другим восстановительным газам. Сенсор малой концентрации водорода на основе нанокompозита восстановленного оксида графена rGO/ZnO с платиной был предложен в [58]. Полученный тройной композит rGO/ZnO/Pt продемонстрировал высокую чувствительность к водороду – почти в 7.5 и 3.0 раза выше, чем у сенсоров из беспримесной ZnO и ZnO/rGO, соответственно. Чувствительные к этанолу свойства сенсоров на базе иерархических наноструктур SnO₂/ZnO систематически исследовались и сравнивались (рис.5) с таковыми для сенсоров из наночастиц только двуокиси олова в [59]. Результаты показали, что иерархические наноструктуры обеспечили заметно большие отклик к этанолу и их селективность по сравнению с этими их параметрами для NH₃, CO, H₂, CO₂ и LPG. Газочувствительные свойства ZnO, SnO₂ и WO₃ сенсоров к аммиаку были

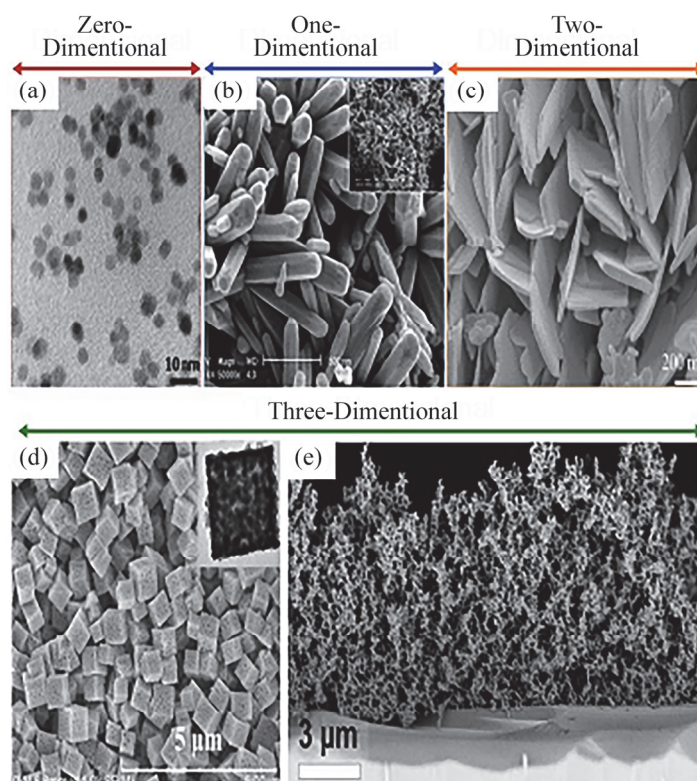


Рис.6. (а) Типичное изображение КТ ZnO, полученных методом мокрого синтеза, основанным на щелочном активированном гидролизе и конденсации растворов ацетата цинка [62]. (b) СЭМ-изображения пучков нанонитей ZnO, синтезированных при 150°C в течение 4 часов [63]. (c) СЭМ-изображение нанопластин ZnO, полученных простым методом смешанного гидротермального синтеза [64]. (d) СЭМ-изображения вымытых кислотой пористых микрокубов SnO₂ после прокаливания при 900°C в течение 2 часов. На вставке: ПЭМ-изображение полученных пористых микрокубов SnO₂ [65]. (e) ультрапористая пленка ZnO, полученная методом пиролиза с пламенным распылением [66].

сравнены в [60]. Было обнаружено, что отклики и времена восстановления SnO_2 и WO_3 нанопроволочных (NW) сенсоров аммиака сопоставимы, но они имеют лучшую чувствительность к аммиаку, чем такие сенсоры из ZnO NW. SnO_2 NWs сенсор имел самую низкую ОТ.

Из-за очень высокой токсичности ацетона предложено использовать тонкослойные наночастицы $\text{ZnO}/\text{SnO}_2/\text{Yb}_2\text{O}_3$ [61].

Типичные ПЭМ и СЭМ изображения КТ, нанонитей, наноллистов, микрокубов и ультрапористой пленки показаны на рисунке 6 [34,62–66].

4. ZnO сенсоры без предварительного нагрева их рабочего тела

Недавно разработаны сенсоры на основе твердых растворов ZnO с различными оксидами металлов или графена, которые не нуждаются в предварительном нагреве их рабочего тела, т.е. чувствительны к газам при комнатной температуре.

Наноструктурированная пленка NiO (р-тип)/пористая (n-тип) ZnO , быстро измеряющая концентрацию этанола при комнатной температуре, была изготовлена Ченом и др. [67]. Толстая пленка ZnO с пористостью 98% и толщиной около 120 нм была нанесена на стеклянную подложку. Распыленные нанокластеры NiO проникали в ZnO и образовывали гетеропереход. В результате, такой наносенсор с платиновыми электродами показал повышенную чувствительность уже к 10 ppb этанола при комнатной температуре. Мезопористые ZnO нанопластины были использованы для изготовления датчика влажности и фотоприемника, работающего при комнатной температуре [68]. Сенсоры этанола, чувствительные при комнатной температуре (29°C), был изготовлены в [69] на основе вертикально выровненных нанонитей ZnO с наночастицами CuO . Выравнивание по вертикали нанонитей ZnO , а также модификация ее поверхности наночастицами CuO увеличили эффективную площадь поверхности сенсора. Образование р- $\text{CuO}/\text{n-ZnO}$ гетеропереходов на границе раздела является причиной улучшения характеристик при комнатной температуре. В дополнение к этанолу изготовленное устройство было способно обнаруживать при комнатной температуре присутствие таких восстановительных газов как сероводород и аммиак, но отклик был меньше.

Толстая пленка из чистой ZnO , полученная методом трафаретной печати, была практически нечувствительна к NH_3 , но модифицированные двуокисью марганца пленки ZnO оказались чувствительными и высокоселективными к аммиаку при комнатной температуре. Была обнаружена высокая чувствительность к низкой концентрации (50 ppm) газа. Перекрестная чувствительность не наблюдалась даже к высоким концентрациям других опасных и загрязняющих газов. Влияние поверхностной микроструктуры и концентраций MnO_2 на

чувствительность, селективность, отклик и восстановление сенсора в присутствии NH_3 и других газов было изучено и обсуждено в [70]. Высокоселективный сенсор аммиака при комнатной температуре, использующий нанесенную на стеклянной подложке методом распылительного пиролиза тонкую пленку оксида цинка, описан в [71]. Время отклика и восстановления составляло 20 и 25 с, соответственно, с высоким откликом 233 по отношению к 25 ppm NH_3 .

Известно, что в присутствии NO_2 и O_3 может вызвать различные проблемы со здоровьем человека. Например, чрезмерное вдыхание NO_2 в концентрации, превышающей 1 ppm, может вызвать заболевания легких и серьезное повреждение дыхательной системы. Длительное воздействие концентрации 375 ppb озона и выше может вызывать как острые, так и хронические заболевания верхних дыхательных путей или хронические респираторные и сердечные заболевания. Поэтому необходимо продолжить разработку газовых датчиков для обнаружения и идентификации окисляющих газов (NO_2 и O_3) уже при их низких концентрациях.

Газочувствительные свойства NO_2 в проводящих полимерных нагруженных золотом композиционных материалах из наночастиц ZnO при комнатной температуре были исследованы при применениях аммиачного зондирования [72]. Такие нанокompозитные гибридные тонкие пленки продемонстрировали высокий отклик при 2.2 до 200 ppb NO_2 , но практически не реагировали на CO или $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ и имели очень малый отклик на NH_3 при комнатной температуре.

Нанонити (NR) и нанопроволоки (NW) ZnO выращивались на чипе легким гидротермальным методом и использовались для создания датчика газа NO_2 при комнатной температуре [73]. Результаты показывают, что диаметр NR и NW ZnO является доминирующим параметром при оценке их NO_2 газочувствительных характеристик при комнатной температуре.

Гибридный композит $\text{Zn}_2\text{SnO}_4\text{-RGO}$, содержащий наночастицы Zn_2SnO_4 и иммобилизованный восстановленный оксид графена RGO, был разработан в лаборатории проф. У. Ваймара [74] как высокочувствительный газочувствительный материал для высокоселективного обнаружения окисляющих газов (NO_2 и O_3) на ppb-уровне. Заметим, что селективные датчики окислительного газа имеют большое значение для мониторинга загрязнения окружающей среды. Кроме того, озон имеет значительно меньшую энергию диссоциации (1.1–1.3 эВ), чем кислород (5.1 эВ) [75,76]. Многие оксиды металлов были тщательно исследованы для обнаружения O_3 [77–79]. Однако такие датчики имеют очевидный недостаток - высокие рабочие температуры (150–300°C). Следовательно, чувствительные к O_3 свойства датчиков на основе гибридов оксидов металлов и RGO требуют дальнейшего улучшения.

Полупроводник RGO p-типа является приемлемой двумерной (2D) подложкой для закрепления наночастиц оксида металла для измерения газа при

комнатной температуре благодаря наличию на его поверхности кислород-содержащих групп, которые действуют как центры адсорбции для молекул газа [80,81]. В настоящее время сообщается о многих новых результатах, связанных с RGO, модифицированными оксидом металла SnO_2 , In_2O_3 и Co_3O_4 , которые применяются для улучшения характеристик обнаружения газа NO_2 [82–87]. Среди многих оксидов металлов Zn_2SnO_4 n-типа получил значительный интерес из-за его высокой подвижности электронов, большой электропроводности и широкой ширины запрещенной зоны (3.6 эВ), что делает его пригодным для применения в газовых сенсорах [88,89]. Когда Zn_2SnO_4 образует гетеропереход с RGO, электроны могут переходить из Zn_2SnO_4 в RGO. В результате, эффективный электронный контакт между Zn_2SnO_4 и RGO помогает улучшить характеристики обнаружения газа. Сообщалось, что датчики Zn_2SnO_4 нанопроволоки и NO_2 нанонити имеют ОТ при 200–300°C [90–92], иерархический – RGO-100°C [93], Zn_2SnO_4 -RGO-30°C [74], но ZnO, PbS и двумерный WS_2 и MoS_2 -RGO являются датчиками NO_2 при комнатной температуре [74]. Пределы обнаружения составляют 0.05–0.15 ppm. В [74] сотрудники лаборатории профессора У. Веймара разработали гибридный материал, содержащий наночастицы Zn_2SnO_4 и иммобилизованный восстановленный оксид графена (Zn_2SnO_4 -RGO). Чувствительность сенсоров на основе Zn_2SnO_4 -RGO к NO_2 была исследована при различной относительной влажности. Обратите внимание, что датчики на основе гибридов RGO и Zn_2SnO_4 -RGO имеют поведение p-типа. Влияние влажности на чувствительные свойства NO_2 не было изучено ранее. Сенсоры на основе гибридов Zn_2SnO_4 -RGO также продемонстрировали высокие значения отклика до 3.62 для 1 ppm NO_2 при 50°C при относительной влажности 80%, что намного выше, чем у чистого RGO (1.31). Превосходные сенсорные характеристики в основном связаны с синергетическим эффектом нанонитей Zn_2SnO_4 и RGO. Датчики на основе Zn_2SnO_4 -RGO показали повышенную чувствительность к NO_2 (от 5.97 до 1 ppm NO_2). Обратим внимание, что датчики, основанные на нанол листах WS_2 и КТ PbS, могут обнаруживать NO_2 с более низким пределом обнаружения 0.1 ppm и 1 ppm [53,54] соответственно. В отличие от этого сенсоры, разработанные в [74], не только показывали высокую чувствительность к более низким концентрациям NO_2 (2.86 для 150 ppb при 50% относительной влажности), но были также способны сохранять это качество в атмосфере с высокой влажностью (80%). Механизмы чувствительности NO_2 и O_3 подробно обсуждены в [74].

5. Снижение рабочей температуры и увеличение чувствительности датчиков при освещении

В [94] исследованы нанонити ZnO, украшенные КТ PbS с иерархической мезопористой структурой. Наноккомпозиты показали адсорбцию при облучении

в ближней инфракрасной области КТ PbS, имеющего узкую запрещенную зону. По сравнению с сенсорами из нанонитей ZnO, датчик на основе нанокомпозитов ZnO/PbS с оптимальным количеством загрузки сульфидом серы продемонстрировал более высокие отклик и скорость отклика/восстановления до ppm уровня NO₂ при комнатной температуре при освещении NIR. Кроме того, датчик продемонстрировал полную обратимость, низкий предел обнаружения, хорошую селективность и долговременную устойчивость к NO₂.

В последние несколько лет было показано, что ультрафиолетовое освещение усиливает газочувствительные свойства метал оксидов при комнатной температуре [95–100]. Ультрафиолетовое освещение уменьшает время отклика и восстановления и повышает чувствительность. Используя ZnO в качестве материала сенсора, функционирующего при комнатной температуре, можно измерять концентрации NO₂ на уровне ppb [101,102]. Сообщается, что датчик, с помощью которого металл оксидные датчики с УФ-поддержкой можно миниатюризировать, потребляя лишь немного энергии [103].

Газочувствительный материал адсорбирует каждую молекулу NO₂, падающую на поверхность, и, таким образом, сигнал датчика линейно увеличивается с дозой NO₂. Дозиметр на основе ZnO и датчики концентрации газа с регенерацией УФ-светом могут быть реализованы. Экспериментальное доказательство этого продемонстрировано в [104] на золь-гель- ZnO-сенсорах, легированных алюминием, так что концепция сенсора при комнатной температуре для концентраций NO₂ на уровне ppb и низких доз реализована.

Новая наноструктурированная пленка ZnO с ультрафиолетовым (УФ) облучением для эффективного измерения концентрации кислорода при температуре 500° С была разработана в [105]. Нанонитевые ZnO структуры с большой площадью экспонирования синтезированы на стеклянной подложке со встречно-стержневыми чувствительными электродами с помощью разработанных двухстадийных золь-гель и гидротермальных процессов. Ультрафиолетовый светодиод с длиной волны излучения 370 нм использовался для улучшения чувствительности наноструктурированной пленки ZnO. Отклик ZnO пленки под УФ был в 4.66 раза больше, чем у той же пленки без УФ-облучения (рис.7).

Активированные УФ поликристаллические пленки ZnO на гибкой подложке (Kapton) использовались в [106] для измерения концентрации паров O₂ и H₂O при комнатной для обнаружения и дифференциации изменений в окружающей среде кислорода и водяного пара. Пленки ZnO были изготовлены из наночастиц ZnS, полученных из бактерий. Под воздействием ультрафиолетового излучения O₂ реагировал с генерированными светом электронами, что приводило к хемосорбции ионного кислорода на поверхности ZnO. Отклик от межзеренного

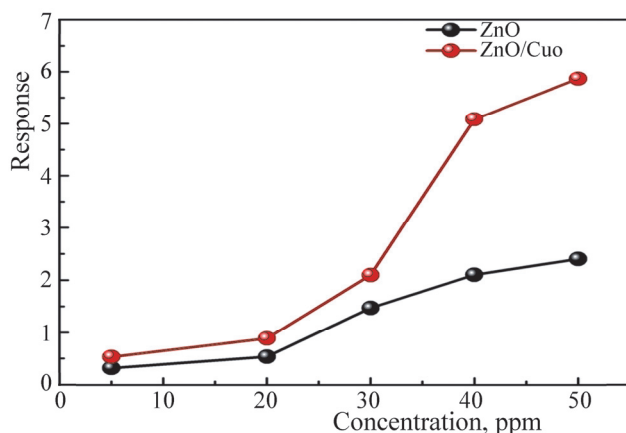


Рис.7. Измеренный отклик ZnO нанонитей при различных рабочих температурах.

сопротивления и межзеренной емкости поликристаллической пленки ZnO являлся значительным только при УФ-облучении.

Комбинация нанопроволок ZnO с светодиодом была использована для изготовления датчика концентрации этанола [100]. Нанопроволоки ZnO были гидротермически синтезированы на силиконовом слое ультрафиолетового (УФ) светоизлучающего диода. Чувствительность сенсора к этанолу увеличилась линейно с УФ-подсветкой LED при комнатной температуре.

Влияние морфологии наноструктуры ZnO на ее газочувствительные свойства в среде НСНО было исследовано в [107]. Газовый сенсор на основе нановолокон ZnO обладал при комнатной температуре высокой чувствительностью и имел обратимый отклик и хорошую селективность к НСНО при облучении УФ-светом с длиной волны 365 нм. Эти особенности могут быть объяснены специальной структурой сенсора, большими удельными площадями поверхности и одномерным расположением нанокристаллитов ZnO, большей долей обедненного слоя, что приводит к регулированию его ширины. Нановолокна ZnO, полученные методом электропряди, являются перспективными химическими чувствительными материалами. Отметим также, что SnO₂, легированный кобальтом, перспективен для изготовления на его основе функционирующего под УФ-излучением сенсора паров пероксида водорода с комнатной ОТ [108].

6. Некоторая информация о теоретических исследованиях

К настоящему времени многие механизмы процесса адсорбции газов и природа активных центров, ответственных за адсорбцию газов на поверхности метал оксидных материалов далеко не полностью изучены. Процессы эти очень сложные и их теоретический анализ требует проведение *ab initio* расчетов

энергий адсорбции, геометрии равновесия и переноса заряда между поверхностью и адсорбентом, основанных на теории функционала плотности (DFT) [109–112]. Нами расчеты выполнены, в частности, на основе DFT, реализованной в пакете Quantum Espresso [110–112]. Мы используем обобщенное градиентное приближение (GGA) в форме, предложенной Пердью, Бурке и Эрнзерхофом [113], для описания обменно-корреляционного функционала. Нами пока исследовано взаимодействие перекиси водорода со стехиометрической поверхностью (110) диоксида олова, в частности, изучено взаимодействие нескольких стартовых конфигураций H_2O_2 и поверхностью. Их структуры, энергии адсорбции и перенос заряда между молекулой и поверхностью были рассчитаны методом анализа заряда Бадера [114].

Поскольку дефекты, примеси, квантово-размерные эффекты и молекулы газа в окружающей среде могут оказывать существенное влияние на процессы адсорбции [115,116], необходимы дополнительные исследования, чтобы выяснить, как все это может повлиять на процесс. Анализ последней книги по квантовым точкам [117] показывает отсутствие прогресса в исследованиях адсорбционных явлений на границе раздела КТ оксид метала–газ.

7. Заключение

В статье обсуждены результаты исследований возможностей создания газочувствительных сенсоров на базе окиси цинка и их применения в науке и технике (в том числе в медицине). Вкратце упомянуты технологии изготовления таких датчиков. Рассмотрены легированные и легированные примесями и углеродными нанотрубками сенсоры ZnO , а также датчики на основе нанонитей, квантовых точек и пористых гетеросистем. Показаны возможности значительного понижения операционной температуры сенсоров с сохранением достаточно высокой чувствительности к различным газам. Сенсоры на основе гибридных структур ZnO и Zn_2SnO_4 с восстановленной окисью графена уже функционируют при комнатной температуре без предварительного нагрева их рабочего тела. Сенсоры ZnO/PbS работают при комнатной температуре и ультрафиолетовом освещении.

ЛИТЕРАТУРА

1. **R. Jaaniso, O.K. Tan** (Eds.), *Semiconductor Gas Sensors*, Woodhead Publishing, 2013.
2. **S.E. Lyshevski** (Ed.), *Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology*, CRC Press, 2014.
3. **F.-G. Banika**. *Chemical and biological sensors Technosphaera*, Press, 2014.

4. **V.M. Aroutiounian.** J. Contemp. Phys. (Armenian Ac. Sci.), **54** 356 (2019).
5. **R. Malik et al.** Appl. Phys. Rev., **7**, 021301 (2020).
6. **V.M. Aroutiounian.** J. Contemp. Phys. (Armenian Ac. Sci.), **55**, 213 (2020).
7. **V.M. Aroutiounian.** Int. J. Hydrogen Energy, **32**, 1145 (2007).
8. **Z.L. Wang.** ACS Nano, **2**, 1987 (2008).
9. **M.A. Kumar, S. Jung, T. Ji.** Sensors, **11**, 5087 (2011).
10. **C.M. Cleetus et al.** Int. J. Nanomedicine, **15**, 5097 (2020).
11. **V.M. Aroutiounian.** J. Nanomedicine and Nanotechnology, **11**, 3 (2020).
12. **S.-M. Peng et al.** J. Phys. Chem. C, **114**, 3204 (2010).
13. **J.-H. Lim, et al.** Adv. Mater., **18**, 2720 (2006).
14. **Y. Sun et al.** Phys. Stat. Sol., **247** 1424 (2010).
15. **T. Seiyama et al.** Anal. Chem., **34**, 1502 (1962).
16. **V.M. Aroutiounian et al.** Sensors and Actuators B, **177**, 308 (2013).
17. **V.E. Galstyan, V.M. Aroutiounian, V.M. Arakelyan, G.E. Shahnazaryan.** J. Contemp. Phys. (Armenian Ac. Sci.), **1**, 242 (2008).
18. **L.J. Bie et al.** Sensors and Actuators B, **126**, 604 (2007).
19. **T.J. Hsueh et al.** Ibid B, **126**, 473 (2007).
20. **P. Bhattacharyya, P.K. Basu, H. Saha, S. Basu.** Ibid B, **124**, 62 (2007).
21. **K.W. Kim et al.** Ibid B, **123**, 318 (2007).
22. **D.R. Patil, L.A. Patil.** IEEE Sensors Journal, **7**, 434 (2007).
23. **V.R. Shinde et al.** Sensors and Actuators B, **123**, 882 (2007).
24. **G. Zhang, C. Li, F. Cheng, J. Chen.** Ibid B, **120**, 403 (2007).
25. **S. Mrdha, D. Basak.** J. Phys. D, **40**, 6902 (2007).
26. **S.C. Navale et al.** Sensors and Actuators B, **126**, 382 (2007).
27. **V. Aroutiounian et al.** J. Sens. Sens. Syst., **7**, 281 (2018).
28. **G.H. Shahkhatuni et al.** J. Contemp. Phys. (Armenian Ac. Sci.), **54**, 188 (2019).
29. **Z. Wang, Z. Tian, D. Han, F. Gu.** ACS Appl. Mater. Interfaces, **8**, 5466 (2016).
30. **J. Xia, K. Diao, Z. Zheng, X. Cui.** RSC Adv., **7**, 38444 (2017).
31. **M.H. Darvishnejad, A.A. Firooz, J. Beheshtian, A.A. Khodadadi.** RSC Adv., **6**, 7838 (2016).
32. **X. Xing et al.** Ibid, **6**, 101304 (2016).
33. **H.W. Huang et al.** Ibid, **5**, 101910 (2015).
34. **M.R. Alenezi, S.J. Henley, N.G. Emerson, S.R.P. Silva,** Nanoscale, **6**, 235 (2014).
35. **N. Nasiri et al.** Adv. Mater., **27**, 4336 (2015).
36. **J. Lee et al.** Materials Letters, **234**, 193 (2018).
37. **M. Napi et al.** J. Nanomaterials, **4**, 574507 (2019).
38. **M. Righettoni, A. Tricoli, S.E. Pratsinis.** Chem. Mater., **22**, 3152 (2010).
39. **S.T. Tan et al.** Sensors and Actuators, **227**, 304 (2016).
40. **V.M. Aroutiounian et al.** Int. J. Emerging Trends in Sci. and Technol., **1**, 1309 (2014).
41. **V.M. Aroutiounian.** Sensors and Transducers, **223**, 9 (2018).
42. **V.M. Aroutiounian.** Lith. J. Phys., **55**, 319 (2015).

43. **A. Sharma, M. Toma, V. Gupta.** J. Mater. Chem., **22**, 23608 (2012).
44. **V.M. Aroutiounian.** J. Contemp. Phys. (Armenian Ac. Sci.), **54**, 356 (2019).
45. **V.M. Aroutiounian.** Sensors and Transducers, **228**, 1 (2018).
46. **Z. Adamyan et al.** Sens. Actuators B, **205**, 261 (2014).
47. **S. Ahmadnia-Feyzabad, A.A. Khodadadi, M. Vesali-Nase, Y. Mortazavi,** Ibid B, **166-167**, 150 (2012).
48. **M.A. Alvi, J. Madani, A. Kumar.** Mater. Res. Express, 61050 (2019).
49. **S. Salehi, E. Nikan, A.A. Khodadadi, Y. Mortazavi.** Sens. Actuators B, **205**, 261 (2010).
50. **S. Zhang, H.-S. Chen, K. Matras-Postolek, P. Yang.** Phys. Chem. Chem. Phys., **17**, 30300 (2015).
51. **T. Qi, X. Yang, J. Sun.** Sens. Actuators B, **283**, 93 (2019).
52. **W. Tang, J. Wang.** Ibid B, **207**, 66 (2015).
53. **V. Lupan et al.** ACS Appl. Mater. Interfaces, **9**, 4084 (2017).
54. **K.Y. Acharya et al.** Analyst, **141**, 2977 (2016).
55. **Z.T. Wang, D. Han, F. Gu.** ACS Appl. Mater. Interfaces, **8**, 5466 (2016).
56. **H. Tian, H. Fan, M. Li, L. Ma.** ACS Sens., **1**, 243 (2016).
57. **A. Katoch, J.-H. Kim, S.S. Kim.** ACS Appl. Mater. Interfaces, **6**, 21494 (2014).
58. **Q.A. Drmosh et al.** Proc. 17th International Meeting on Chemical Sensors, Austria, University of Vienna, p.318, 2018.
59. **N.D. Khoang et al.** Sensors and Actuators B, **174**, 594 (2012).
60. **N.V. Hieu et al.** J. Nanomaterials, Article ID 972025 (2015).
61. **M. Mohammed et al.** Talanta, **170**, 215 (2017).
62. **N. Nasiri, Ch. Clarke.** Biosensors, **9**, 43 (2019).
63. **A. Forleo et al.** Sensors and Actuators B, **146**, 111 (2010).
64. **J. Kim, K. Yong.** J. Phys. C, **115**, 7218 (2011).
65. **H. Fan, X. Jia.** Solid State Ionics, **192**, 688 (2011).
66. **J. Huang et al.** Sens. Actuator B, **207**, 782 (2015).
67. **Y.L. Chen.** Ibid B, **166-167**, 61 (2012).
68. **P. Shobhnath et al.** Ibid B, **293**, 83 (2019).
69. **P.P. Subha, M.K. Jayaraj.** BMC Chemistry, **13**, 4 (2019).
70. **L.A. Patil et al.** J.Modern Physics, **2**, 1215 (2011).
71. **G.K. Mani, J. Bosco, B. Rayappan.** Sensors and Actuators B, **183**, 459 (2013).
72. **V. Kruefu et al.** Nanoscale Research Letters, **9**, 467 (2014).
73. **V.T. Duo et al.** J Nanomaterials, Article ID 6821937, (2019).
74. **Z. Wang et al.** Sensors & Actuators B, **285**, 590 (2019).
75. **G. Korotcenkov, V. Brinzari, B.K. Cho.** J. Sensors, **31**, 2016 (2016).
76. **A. Banichevich, S.D. Peyerimhoff, F. Grein.** Chem. Phys. Lett., **173**, 1 (1990).
77. **Y.-T. Tsai et al.** IEEE Sens. J., **18**, 5559 (2018).
78. **D. Ziegler et al.** Solid St. Ion., **320**, 24 (2018).
79. **A.C. Catto et al.** J. Alloys. Compd., **748**, 411 (2018).
80. **J. Wu et al.** Adv. Sci., **4**, 1600319 (2017).

81. **J. Hu et al.** *J. Mater. Chem. C*, **5**, 6862 (2017).
82. **L. Li et al.** *Anal. Chem.*, **87**, 1638 (2015).
83. **F. Gu, R. Nie, D. Han, Z. Wang.** *Sens. Actuators B*, **219**, 94 (2015).
84. **N. Chen et al.** *Ibid B*, **188**, 902 (2013).
85. **Y. Xia et al.** *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **8**, 35454 (2016).
86. **H. Zhang et al.** *Sens. Actuators B*, **190**, 472 (2014).
87. **S. Liu et al.** *Ibid B*, **202**, 272 (2014).
88. **X. Chu et al.** *Ibid B*, **251**, 120 (2017).
89. **Y. Li et al.** *Ceram. Int.*, **44**, 6836 (2018).
90. **H.X. Thanh et al.** *J. Alloys. Compd.*, **708**, 470 (2017).
91. **S. Park et al.** *Ceram. Int.*, **39**, 3539 (2013).
92. **Y.C. Liang, Y.-J. Lo.** *RSC Adv.*, **7**, 29428 (2017).
93. **J. Liu et al.** *Sens. Actuators B*, **249**, 715 (2017).
94. **R. Chen et al.** *Ibid B*, **255**, 2538 (2018).
95. **C. Baratto et al.** *Ibid B*, **100**, 261 (2004).
96. **L. Zhu, W. Zeng.** *Ibid A*, **267**, 242 (2017).
97. **M.C. Carotta et al.** *Thin Solid Film*, **520**, 939 (2011).
98. **S. Park, S. An, Y. Mun, C. Lee.** *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **5**, 4285 (2013).
99. **C. Zhang et al.** *Sens. Actuators B*, **248**, 886 (2017).
100. **C.L. Hsu, L.F. Chang, T.-J. Hsueh.** *Ibid B*, **249**, 265 (2017).
101. **E. Espid, F.Taghipour.** *ECS J. Solid State Sci. Technol.*, **7**, Q3089 (2018).
102. **N. Markiewicz et al.** *Appl. Phys. Lett.*, **114**, 53508 (2019).
103. **O. Casals et al.** *ACS Sens.*, **4**, 822 (2019).
104. **R.Wagner, D. Schönauer-Kamin, R. Moos.** *Sensors*, **19**, 4104 (2019).
105. **C.B. Jacobs et al.** *Sci. Reports*, **7**, 6053 (2017).
106. **J. Cui et al.** *Sensors and Actuators B*, **227**, 220 (2016).
107. **M.S. Aleksanyan et al.** *J. Contemp. Phys. (Armenian Ac. Sci.)*, **55**, 205 (2020).
108. **H. Zakaryan, V. Aroutiounian.** *J. Contemp. Phys. (Armenian Ac. Sci.)*, **52**, 227 (2017).
109. **A.A. Hunanyan, M.A. Aghamalyan, V.M. Aroutiounian, H.A. Zakaryan.** *Ibid*, **54**, 282 (2019).
110. **M.A. Aghamalyan et al.** *Ibid*, **55**, 235 (2020).
111. **W. Kohn, L.J. Sham.** *Phys. Rev.*, **140**, A1133 (1965).
112. **P. Giannozzi et al.** *J. Phys. Condens. Matter*, **29**, 465901 (2017).
113. **J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof.** *Phys. Rev. Lett.*, **77**, 3865 (1996).
114. **R.F.W. Bader.** *Atoms in Molecules: A Quantum Theory*, Oxford University Press, 1990.
115. **K.D. Schierbaum, U.K. Kirner, J.F. Geiger, W. Göpel.** *Sensors Actuators B*, **4**, 87 (1991).
116. **K.D. Schierbaum, X. Wei-Xing, W. Göpel.** *Berichte der Bunsengesellschaft für Phys. Chemie*, **97**, 363 (1993).
117. *Core/Shell Quantum Dots Synthesis, Properties and Devices* (Eds. **X.Tong u Z. M. Wang**), Springer P. H. 2020.

Հոդվածում քննարկվում են ցինկի օքսիդի հիման վրա գազի զգայուն սենսորների ստեղծման հնարավորությունների ուսումնասիրության և գիտության և տեխնոլոգիայի մեջ դրանց կիրառման հնարավորությունները: Հակիրճ նշվում են այդպիսի տվիչների արտադրության տեխնոլոգիաները: Համարվում են չմշակված, խարնուրդներով և նանոխողովակներով լեզիրացված ZnO սենսորները, ինչպես նաև սենսորներ, որոնք հիմնված են նանոթելերի, քվանտային կետերի և ծակոտկեն հետերոցանցերի վրա: Ցույց են տրված սենսորների աշխատանքային ջերմաստիճանը զգալիորեն իջեցնելու հնարավորությունները, մինչդեռ տարբեր գազերի վրա բավականին բարձր զգայունությունը պահպանելով: ZnO և Zn_2SnO_4 – գրաֆենի օքսիդի հիման վրա կառուցվածքների վրա հիմնված սենսորները արդեն գործում են սենյակային ջերմաստիճանում՝ առանց դրանց աշխատանքային նյութը նախնական տաքացման: ZnO/PbS տվիչները գործում են սենյակային ջերմաստիճանում և ուլտրամանուշակագույն լույսի ներքո:

ZINC OXIDE GAS SENSORS

V.M. AROUTIOUNIAN

The article discusses the results of studies of the possibilities of manufacture of gas-sensitive sensors based on zinc oxide and their applications in science and technology (including medicine). The technologies for such sensors manufacturing are briefly mentioned. Undoped and doped with impurities and carbon nanotubes ZnO sensors, as well as sensors based on nanowires, quantum dots, and porous heterosystems, are considered. The possibilities of significantly lowering the operating temperature of the sensors while maintaining a sufficiently high sensitivity to various gases are shown. Sensors based on hybrid structures of ZnO and Zn_2SnO_4 with reduced graphene oxide already operate at room temperature without preliminary heating of their working fluid. The ZnO/PbS sensors operate at room temperature and under ultraviolet light.

МАТЕРИАЛЬНАЯ СИСТЕМА CdTe–ZnTe–HgTe: АНАЛИЗ СМЕШИВАЕМОСТИ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ

К.М. ГАМБАРЯН^{1*}, А.К. СИМОНЯН²,
В.М. АРУТЮНЯН¹, М.К. ГАМБАРЯН¹

¹Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

²Синопсис Армения, Ереван, Армения

*e-mail: kgambaryan@ysu.am

(Поступила в редакцию 18 сентября 2020 г.)

Исследованы псевдобинарные системы HgTe–CdTe, ZnTe–CdTe и HgTe–ZnTe и определены энергии смешения Гиббса в интервале температур 400–1000 К. Анализ области смешиваемости для четырехкомпонентного твердого раствора CdZnHgTe также осуществлен с помощью расчета свободной энергии Гиббса. Количественные исследования показывают, что для материальной системы CdTe–HgTe в указанном выше температурном диапазоне отсутствует область несмешиваемости. В отличие от этой системы, для твердых растворов $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ уже выявляется область несмешиваемости в пределах $x = 0.4\text{--}0.6$ при $T=400$ К. Для материальной системы ZnTe–HgTe ситуация более сложная. При этом взаимное включение компонентов энергетически выгодно только до примесных концентраций, а несмешиваемость возникает практически во всем интервале составов, начиная с температуры $T = 800$ К и ниже. Кроме того, расчеты показывают, что для четырехкомпонентного твердого раствора CdZnHgTe область несмешиваемости существует в указанном выше температурном диапазоне, однако уменьшается при повышении температуры. Представленные результаты могут быть использованы при выращивании многокомпонентных объемных кристаллов, эпитаксиальных тонких пленок и наноструктур на основе твердых растворов CdZnHgTe.

1. Введение

Соединения II–VI с широкой и узкой запрещенной зоной являются одним из наиболее важных материалов для высокоэффективных оптоэлектронных устройств, таких как светоизлучающие и лазерные диоды, работающие в синем и ультрафиолетовом спектральном диапазоне, а также в средней и дальней инфракрасной области спектра. Кроме того, высокая ионность этих соединений делает их хорошим кандидатом для использования в приборах электрооптической и электромеханической связи. Соединения II–VI с широкой запрещенной зоной являются также перспективными материалами для таких применений, как

пироэлектрические и пьезоэлектрические устройства, солнечные элементы, различные датчики и так далее. [1]. Тонкие пленки на основе твердых растворов CdZnHgTe обычно выращиваются с использованием обычного метода газофазной эпитаксии (VPE). С развитием науки и техники возникли новые и более высокие требования к качеству и свойствам таких материалов. По этой причине были разработаны новые методы эпитаксиального выращивания, включая эпитаксию из горячих стенок (HWE), газофазная эпитаксия из металлоорганических соединений (MOCVD), молекулярно-лучевая эпитаксия (MBE), металлоорганическая молекулярно-лучевая эпитаксия (MOMBE) и атомно-послойная эпитаксия (ALE). Используя эти методы выращивания, был улучшен не только контроль толщины выращиваемых пленок, но также их качество.

Широкий спектр полупроводниковых нанопроволок на основе Si, Ge, соединений III–V и II–VI был выращен с использованием химического осаждения из паровой фазы, термического испарения, термического синтеза из растворов, молекулярно-лучевой эпитаксией и методом пар-жидкость-твердое тело (VLS), где в качестве катализатора используются металлы. Однако до сих пор опубликовано лишь несколько сообщений о синтезе нанопроволок и других наноструктур на основе теллура. Наноструктуры на основе ZnTe, HgTe и CdTe были получены с помощью химического синтеза или методов CVD, а недавно сообщалось о выращивании нанопроволок ZnTe методом MBE [1–6].

В процессе роста полупроводниковых кристаллов из расплавов термодинамические и теплофизические свойства расплавов являются важными параметрами для оптимизации процесса роста, а также при теоретическом моделировании процесса. Однако, в целом существует лишь ограниченное количество данных о термодинамических и теплофизических свойствах расплавленных полупроводников на основе ртути (Hg) из-за их высокого давления пара и химической активности. Твердые растворы $\text{Hg}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ ($0 \leq x \leq 1$) широко изучались в области малых концентраций ($x \leq 0.2$) как потенциально лучший материал для изготовления ИК-детекторов, поскольку особенности химической связи делает этот материал относительно более стабильным по сравнению с HgCdTe [7]. Псевдобинарная система ZnTe–CdTe была исследована при 900 К с помощью масс-спектрометрических измерений с ячейкой Кнудсена. Определены состав и давление пара, активности ZnTe и CdTe, а также энергия смешения Гиббса. Результаты показывают, что зависимости активностей CdTe и ZnTe от состава демонстрируют, соответственно, положительные и отрицательные отклонения от идеальности и что энергия смешения Гиббса меньше, чем у идеального раствора. При 900 К в системе ZnTe–CdTe существует непрерывный ряд твердых растворов без разрыва смешиваемости, а сублимация неконгруэнтна. Зависимость активности CdTe от состава в данном твердом растворе при 780 К свидетельствует

также о наличии фазовой сегрегации [8].

В 1959 году публикация Лоусона и его сотрудников [9] положила начало разработке твердых растворов HgCdTe с переменной шириной запрещенной зоны, обеспечивающих беспрецедентную степень свободы в конструкции инфракрасных детекторов. В этой первой статье сообщается как о фотопроводящем, так и о фотовольтаическом отклике на длинах волн, доходящих до 12 мкм, и что этот материал является многообещающим для ИК-детекторов [10]. Разработка технологии HgCdTe была и остается в первую очередь для специальных приложений. Негативный аспект поддержки оборонных агентств был связан с требованиями секретности, что препятствовала и продолжает препятствовать конструктивному сотрудничеству между исследовательскими группами на национальном и особенно на международном уровне. Кроме того, основное внимание уделялось созданию и демонстрации матрицы фокальной плоскости (FPA), и гораздо меньше – созданию базы знаний. Тем не менее за пять десятилетий был достигнут значительный прогресс. Кроме того, достаточное рассогласование решеток между CdTe / ZnTe, CdTe / HgTe и HgTe / ZnTe, равное 5.8%, 2.1% и 7.8%, соответственно, позволяет рассматривать эти материалы как очень привлекательные также для инженерии наноструктур в режиме роста Странски–Крастанова.

В данной статье мы представляем термодинамические исследования четырехкомпонентной материальной системы $\text{Cd}_{1-x-y}\text{Zn}_x\text{Hg}_y\text{Te}$ и квазибинарных твердых растворов CdTe–HgTe, CdTe–ZnTe и ZnTe–HgTe в различных температурных диапазонах.

2. Анализ смешиваемости твердых растворов CdZnHgTe

Чтобы проанализировать задачу смешиваемости для системы твердых растворов CdZnHgTe, мы рассчитали свободную энергию смешивания Гиббса, используя следующее соотношение:

$$\Delta G(x, y) = \Delta H - T\Delta S, \quad (1)$$

где T – абсолютная температура, ΔH и ΔS – энтальпия и энтропия смешиваемости, соответственно, которые определяются следующими выражениями [11–14]:

$$\begin{aligned} \Delta H(x, y) &= \alpha_{\text{CdTe-ZnTe}}(1-x-y)x + \alpha_{\text{ZnTe-HgTe}}xy + \alpha_{\text{CdTe-HgTe}}(1-x-y)y, \\ \Delta S(x, y) &= RT\{x \ln x + y \ln y + (1-x-y) \ln(1-x-y)\}. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь α – параметр псевдобинарного взаимодействия [11,14], а R – универсальная газовая постоянная. Параметр взаимодействия α – это характерный индекс несмешиваемости, обусловленной напряжением решетки. Согласно так называемой модели «delta-lattice parameter» (DLP) [14–16], параметр

взаимодействия представляется в следующем виде:

$$\alpha_{AB} = 4k \left[\frac{1}{2} (a_A^{-2.5} + a_B^{-2.5}) - \left(\frac{a_A + a_B}{2} \right)^{-2.5} \right], \quad (3)$$

где a_A и a_B – постоянные кристаллических решеток компонентов А и В, а k – константа. Для соединений с кубической симметрией и относительно малых значениях рассогласования кристаллических решеток, фактор k берется равным 1.15×10^7 кал/(моль $\times \text{\AA}^{2.5}$) [14–16]. Поэтому, это значение k мы использовали для твердых растворов $\text{Cd}_{1-x-y}\text{Zn}_x\text{Hg}_y\text{Te}$. Рассчитанные значения параметра взаимодействия представлены в Таблице 1.

2D и 3D диаграммы зависимостей молярной свободной энергии Гиббса от состава твердых растворов CdTe-HgTe , CdTe-ZnTe and ZnTe-HgTe в температурном интервале 400–1000 К показана на Рис.1. Эти диаграммы были рассчитаны с помощью выражения (1) и построены с учетом рассчитанных значений ΔH и ΔS с помощью выражения (2).

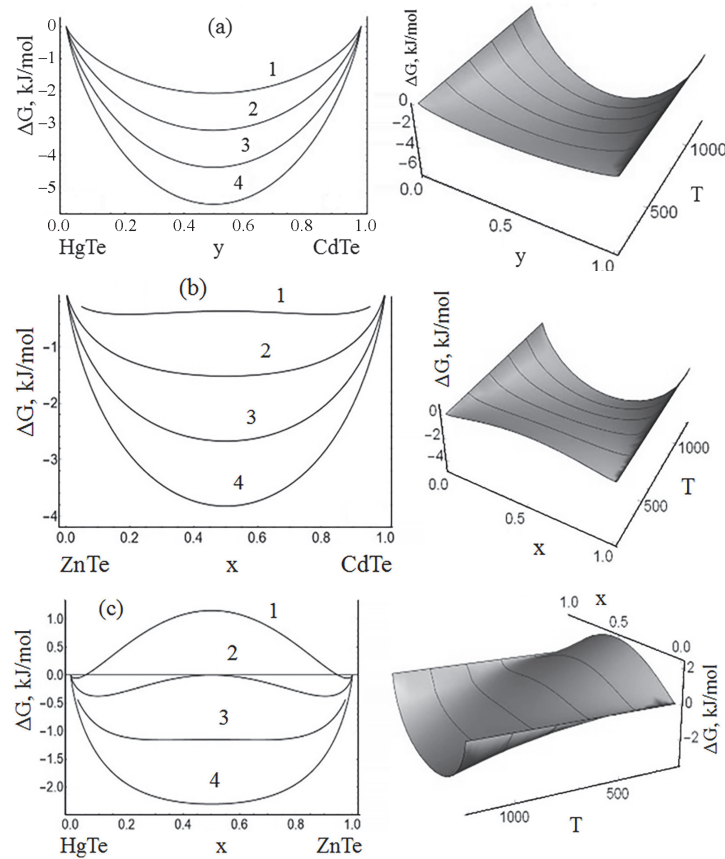


Рис.1. 2D и 3D диаграммы зависимостей молярной свободной энергии Гиббса от состава твердого раствора и температуры (1 – 400 К, 2 – 600 К, 3 – 800 К и 4 – 1000 К).

Табл.1.

Компоненты	Параметр взаимодействия α Дж/моль	Температура плавления T , К	
		CdTe	1314
CdTe–HgTe	875.235	CdTe	1314
CdTe–ZnTe	7750	ZnTe	1513
ZnTe–HgTe	13.829	HgTe	873

Из Рис.1 хорошо видно, что, в отличие от твердого раствора HgTe–CdTe, в системах ZnTe–CdTe и HgTe–ZnTe возникает область несмешиваемости, которая обусловлена увеличением свободной энергии при увеличении концентрации CdTe в ZnTe и ZnTe в HgTe, соответственно. В системах с большой разницей в постоянных решеток, высокая положительная энтальпия смешения может преодолеть отрицательную энтропию смешения при температурах ниже критических, что приводит к увеличению свободной энергии. Это означает, что в равновесных неупорядоченных твердых растворах при значениях состава между бимодальными точками, он должен распадаться на две отдельные твердые фазы [16].

Детальный анализ результатов, представленных на Рис.1, показывает, что для системы CdTe–HgTe в интервале температур $T = 400–1000$ К отсутствует область несмешиваемости. Однако, в отличие от этой системы, для твердых растворов $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ уже выявляется область несмешиваемости в пределах концентраций $x = 0.4–0.6$ при $T = 400$ К. Для системы ZnTe–HgTe взаимное добавление компонентов энергетически выгодно только до примесных значений концентраций, и область несмешиваемости возникает в очень большом интервале составов, уже начиная с температуры $T = 800$ К и ниже. Расчеты также наглядно показывают, что для четырехкомпонентной системы CdZnHgTe область несмешиваемости уменьшается при повышении температуры, что хорошо видно на схематических 3D-диаграммах (Рис.2) зависимости молярной

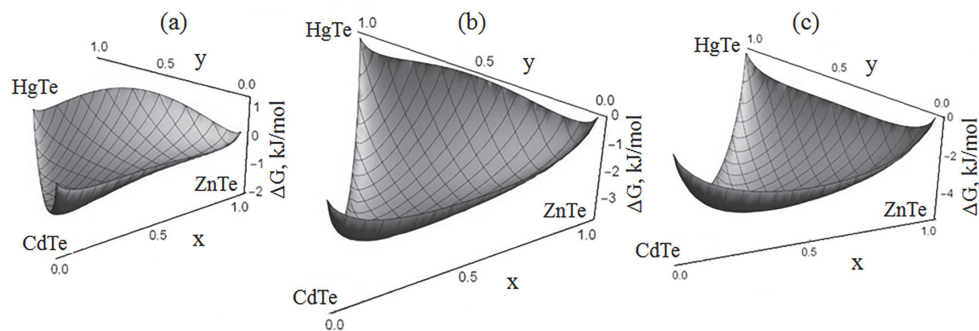


Рис.2. Схематическая 3D диаграмма молярной свободной энергии твердого раствора CdZnHgTe при температурах (a) $T = 400$ К, (b) $T = 600$ К, (c) $T = 800$ К, соответственно.

свободной энергии от состава системы CdZnHgTe в температурном интервале 400–1000 К. Проекции соответствующих изоэнергетических срезов представлены на Рис.3.

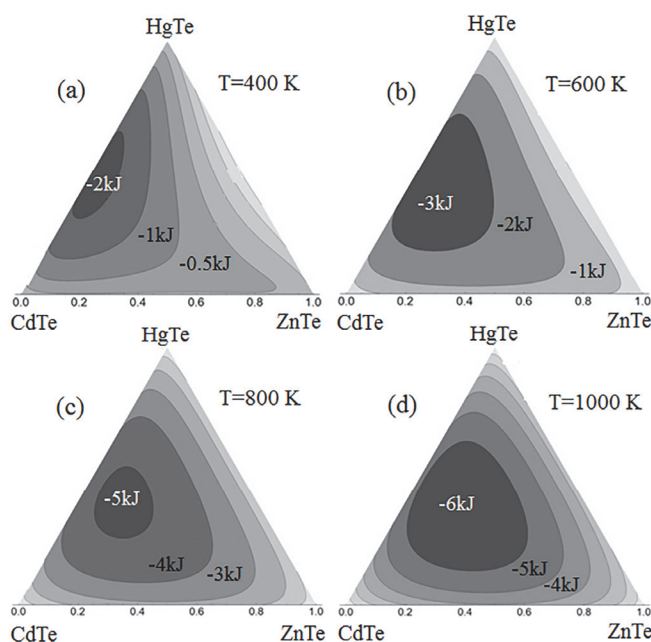


Рис.3. Изоэнергетические проекции срезов молярной свободной энергии твердого раствора CdZnHgTe при температурах (a) $T = 400$ К, (b) $T = 600$ К, (c) $T = 800$ К, (d) $T = 1000$ К, соответственно.

3. Заключение

Таким образом, были исследованы псевдобинарные системы HgTe–CdTe, ZnTe–CdTe и HgTe–ZnTe и определены энергии смешения Гиббса в интервале температур 400–1000 К. Анализ области смешиваемости для четырехкомпонентного твердого раствора CdZnHgTe также был осуществлен с помощью расчета свободной энергии Гиббса. Количественные исследования показали, что для материальной системы CdTe–HgTe в указанном выше температурном диапазоне отсутствует область несмешиваемости. В отличие от этой системы, для твердых растворов $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ уже выявляется область несмешиваемости в пределах концентраций $x=0.4\text{--}0.6$ при $T = 400$ К. Для материальной системы ZnTe–HgTe ситуация более сложная. При этом взаимное включение компонентов энергетически выгодно только до примесных концентраций, а несмешиваемость возникает практически во всем интервале составов, начиная с температуры $T = 800$ К и ниже. Кроме того, расчеты показали, что для четырехкомпонентного твердого раствора CdZnHgTe область несмешиваемости существует в указанном выше температурном диапазоне, однако уменьшается при повышении температуры.

Представленные результаты могут быть использованы при выращивании многокомпонентных объемных кристаллов, эпитаксиальных тонких пленок и наноструктур на основе твердых растворов CdZnHgTe.

Авторы выражают благодарность Комитету науки РА за финансирование данного исследования в рамках гранта No. 18Т–2J016.

ЛИТЕРАТУРА

1. **S. Kasap, P. Capper.** (Eds.). Wide Bandgap II–VI Semiconductors: Growth and Properties. Springer Handbook of Electronics and Photonics Materials. Part B, 2007, p.p. 1–20.
2. **T. Potlog, N. Maticiu, A. Mirzac, P. Dumitriu, D. Scortescu.** CAS 2012 (International Semiconductor Conference), Sinaia, 2012, p. 321, doi: 10.1109/SMICND.2012.6400772.
3. **I. Duz, S. Erdem, S. Ozdemir Kart, V. Kuzucu.** Archives of Materials Science and Engineering, **79**, 5 (2016).
4. **T. Wojtowicz, E. Janik, et al.** Journal of the Korean Phys. Society, **53**, 3055 (2008).
5. **G.I. Rusu, P. Prepelita, N. Apetroaei, G. Popa.** Journal of Optoelect. and Advan. Materials, **17**, 829 (2005).
6. **M.A.M. Seyam, A. Elfalaky.** Vacuum, **57**, 31 (2000).
7. **C.-H. Su, Y.-G. Sha, K. Mazuruk, S.L. Lehoczky.** J. Appl. Phys., **80**, 137 (1996).
8. **A.S. Alikhanian, V.N. Guskov, A.M. Natarovskii, V.V. Kovalenko.** Inorganic Materials, **39**, 234 (2003).
9. **W.D. Lawson, S. Nielson, E.H. Putley, A.S. Young.** J. Phys. Chem. Solids, **9**, 325 (1959).
10. **A. Rogalski.** Optoelectronics Review, **18**, 284 (2010).
11. **H. Ihsiu, G.B. Stringfellow.** Appl. Phys. Lett., **69**, 2701 (1996).
12. **O.S. Emeljanova, S.S. Strelchenko, M.P. Usacheva.** Semiconductors, **43**, 135 (2009).
13. **V.G. Deibuk.** Semiconductors, **37**, 1151 (2003).
14. **E.N. Vigdorovich, Yu.N. Sveshnikov.** Inorganic Materials, **36**, 465 (2000).
15. **A. Wakahara, T. Tokuda, X.-Z. Dang, S. Noda, A. Sasaki.** Appl. Phys. Lett., **71**, 906 (1997).
16. **G.B. Stringfellow.** Organometallic Vapor-Phase Epitaxy: Theory and Practice, USA, San Diego: Elsevier, 1999.

CdTe–ZnTe–HgTe ՆՅՈՒԹԱԿԱՆ ՀԱՄԱԿԱՐԳ: ՊԻՆԴ ԼՈՒԾՈՒՅԹՆԵՐԻ
ՀԱՄԱՏԵՂԵԼԻՈՒԹՅԱՆ ՎԵՐԼՈՒԾՈՒԹՅՈՒՆ

Կ.Մ. ՂԱՄԲԱՐՅԱՆ, Ա.Կ. ՍԻՄՈՆՅԱՆ, Վ.Մ. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ, Մ.Կ. ՂԱՄԲԱՐՅԱՆ

Ուսումնասիրվել են HgTe–CdTe, ZnTe–CdTe և HgTe–ZnTe քվազիերկբադարիչ նյութական համակարգերը և որոշվել է դրանց խառնման Գիբսի էներգիաները 400–1000 Կ ջերմաստիճանային տիրույթում: Գիբսի ազատ էներգիան հաշվարկելու միջոցով նաև վերլուծվել է քառաբադարիչ CdZnHgTe պինդ լուծույթի անհամատեղելիության գոտիները: Քանակական ուսումնասիրությունները ցույց են տվել, որ վերոհիշյալ

ջերմաստիճանային տիրույթում CdTe-HgTe նյութական համակարգի համար չկա անհամատեղելիության գոտի: Ի տարբերություն այս համակարգի, $Cd_{1-x}Zn_xTe$ պինդ լուծույթների համար անհամատեղելիության գոտի արդեն բացահայտվում է բաղադրությունների $x = 0.4-0.6$ տիրույթում՝ $T = 400$ Կ-ում: ZnTe-HgTe նյութական համակարգի համար իրավիճակն ավելի բարդ է: Այս դեպքում բաղադրիչների փոխադարձ ներառումը էներգետիկորեն բարենպաստ է միայն մինչև խառնուրդային կոնցենտրացիաներ, և անհամատեղելիությունը գործնականում տեղի է ունենում բաղադրությունների ամբողջ տիրույթում՝ սկսած $T = 800$ Կ ջերմաստիճանից և ցածր: Բացի այդ, հաշվարկները ցույց են տալիս, որ CdZnHgTe քառաբաղադրիչ պինդ լուծույթի համար ևս գոյություն ունեն անհամատեղելիության գոտիներ վերոնշյալ ջերմաստիճանային տիրույթում, բայց ջերմաստիճանի բարձրացման հետ մեկտեղ նվազում են: Ներկայացված արդյունքները կարող են օգտագործվել CdZnHgTe պինդ լուծույթների հիման վրա ծավալային բյուրեղների, էպիտաքսային բարակ թաղանթների և նանոկառուցվածքների աճեցման համար:

CdTe–ZnTe–HgTe MATERIAL SYSTEM: SOLID SOLUTIONS MISCIBILITY ANALYSIS

K.M. GAMBARYAN, A.K. SIMONYAN, V.M. AROUTIOUNIAN, M.K. GAMBARYAN

The pseudobinary HgTe–CdTe, ZnTe–CdTe and HgTe–ZnTe systems were studied and Gibbs energy of mixing were determined at 400–1000 K temperature range. Miscibility gap analysis for CdZnHgTe quaternary material system is also performed by the Gibbs free energy calculations. Quantitative explorations show that there is no immiscibility gap for CdTe–HgTe material system in the mentioned above temperature range. In spite of that system, for the $Cd_{1-x}Zn_xTe$ solid solutions, an immiscibility gap within $x = 0.4-0.6$ at $T = 400$ K already revealed. For the ZnTe–HgTe material system the situation is more complicated. Here, mutual incorporation of components is energetically favorable only up to impurity levels and an immiscibility gap occurs at entire compositions range starting from $T = 800$ K temperature and below. In addition, our calculations show that for the CdZnHgTe quaternary material system the immiscibility gap exists at the mentioned above temperature range and decreases at temperature increasing. Presented results can be useful at the growth of multicomponent bulk crystals, epitaxial thin films and nanostructures based on CdZnHgTe material system.

ТЕМПЕРАТУРНО-ЗАВИСИМЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СОЛНЕЧНЫХ ФОТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ И ТЕПЛОВЫХ ГИБРИДНЫХ СИСТЕМ

Р.Р. ВАРДАНЯН*, В.К. ДАЛЛАКЯН, М.Г. ТРАВАДЖЯН

Национальный политехнический университет Армении, Ереван, Армения

*e-mail: ruben.vardanyan@polytechnic.am

(Поступила в редакцию 14 сентября 2020 г.)

Солнечные фотоэлектрически-тепловые (ФЭТ) гибридные системы обладают высоким потенциалом, чтобы являться эффективным и жизнеспособным методом производства электроэнергии и низкопотенциальной тепловой энергии. Гибридная система обладает высокой энергоэффективностью с повышенным электрическим КПД за счет охлаждения солнечных элементов и получения тепловой энергии путем поглощения тепла от нагретых элементов. Тем не менее, использование этих систем не растет быстрыми темпами из-за противоречивых эксплуатационных проблем, а также трудностей связанных с установкой и обслуживанием по сравнению с обычными отдельными фотоэлектрическими (ФЭ) и тепловыми системами. В данной статье исследуются рабочие температуры солнечных элементов ФЭ модулей и ФЭТ гибридных коллекторов в зависимости от температуры окружающей среды. На основе сравнения рабочих температур солнечных элементов ФЭ модуля и ФЭТ коллектора произведена оценка эффективности применения ФЭТ гибридной системы. Показано, что существует «критическое» минимальное значение температуры окружающей среды, ниже которого солнечные элементы ФЭТ системы имеют более высокую температуру, чем элементы в ФЭ модулях («обратный» процесс), и применение ФЭТ системы является не целесообразным. Исследована зависимость «критической» температуры от типа и тепловых характеристик ФЭТ системы. Предложенная методика оценки эффективности ФЭТ систем может быть использована учеными и проектировщиками при разработке различных гибридных ФЭТ систем.

1. Введение

Основными технологиями использования солнечного излучения являются фотоэлектрическое преобразование света непосредственно в электричество и тепловое преобразование солнечных лучей в тепло. Рынок солнечной тепловой и фотоэлектрической (ФЭ) генерации электроэнергии быстро растет [1].

Известно, что в фотоэлектрических системах большая часть поглощенного солнечного излучения солнечным элементом (около 80%) не преобразуется

в электричество, а способствует повышению температуры солнечных элементов, тем самым снижает их электрический КПД. Это неотъемлемый недостаток солнечных элементов – снижение производительности из-за температуры. Типичные фотоэлектрические модули преобразуют около 15% (при 25°C, стандартные условия испытаний – STC) солнечного излучения в электричество; остальное нагревает солнечную батарею и рассеивается как отходное тепло. В яркий солнечный день ФЭ панель может нагреваться до температуры выше 100°C. Это может снизить эффективность на 37% или на 0.5% на каждый 1°C повышения температуры. В результате нагрева эффективность преобразования фотоэлектрического модуля снижается до 9.5% вместо 15%, измеренных в стандартных условиях.

Гибридная фотоэлектрически-тепловая (ФЭТ) гибридная система объединяет фотоэлемент, который преобразует солнечное излучение в электричество, с солнечным тепловым коллектором, который улавливает тепловую энергию и отводит тепло от солнечного элемента. В гибридных ФЭТ системах за счет охлаждения солнечных элементов увеличивается выработка электроэнергии, а полученное тепло используется, таким образом увеличивая выгоду от имеющегося солнечного излучения.

Таким образом, системы ФЭТ представляют собой двойной солнечный коллектор с двумя полезными выходами энергии с одного коллектора (два в одном). По сравнению с обычными отдельными фотоэлектрическими и тепловыми системами он имеет следующие преимущества:

- улучшенная фотоэлектрическая генерация – до 40% больше электроэнергии, чем эквивалентная обычная ФЭ система,
- требуется меньше места на крыше,
- повышенная эффективность системы (около 70%) за счет выработки как электрической (15%), так и тепловой (55%) энергии.

Для изучения свойств солнечных гибридных ФЭТ систем проведены многочисленные исследования [2–5]. Однако влияние температуры окружающей среды на работу ФЭТ систем до конца не исследовано. В этой статье исследуются температурно-зависимые характеристики гибридных ФЭТ систем. На основе сравнения рабочих температур ФЭТ и ФЭ систем проведен анализ производительности различных ФЭТ гибридных систем.

2. Электрические и тепловые характеристики ФЭТ гибридных систем

Как упоминалось выше, гибридные солнечные ФЭТ системы обеспечивают как электрическую, так и тепловую энергию. Общее количество энергии, произведенной системой ФЭТ, определяется как:

$$W = E + Q, \quad (1)$$

где E – электрическая, а Q – тепловая составляющая энергии. Разделив на входную энергию P , обеспечиваемую солнцем, мы получим эффективность гибридной системы в следующем виде [6]:

$$\eta_{PVT} = \frac{E + Q}{P} = \eta_{el} + \eta_{th}, \quad (2)$$

где η_{el} и η_{th} – коэффициенты электрического и теплового преобразования соответственно.

2.1. Электрические характеристики

Количество электроэнергии, производимой фотоэлектрической и тепловой гибридной солнечной системой, можно определить по уравнению:

$$E = AS\eta_{el}, \quad (3)$$

где A – площадь солнечного ФЭТ коллектора (м^2), принимающая солнечные лучи, S – энергия солнечного излучения на квадратный метр ($\text{кВт ч} / \text{м}^2$).

Температурная зависимость КПД моно/поликристаллических кремниевых солнечных элементов определяется как [7]:

$$\eta = \eta_0 [1 - \beta (T - T_0)], \quad (4)$$

где η_0 – стандартное значение КПД солнечного элемента, который измеряется в стандартных условиях испытаний (СУИ), β – температурный коэффициент, T – рабочая температура солнечного элемента, T_0 – стандартная температура солнечного элемента. Обычно солнечные элементы тестируются при $T_0 = 25^\circ\text{C}$ и интенсивности солнечного излучения $1 \text{ кВт} / \text{м}^2$ (СУИ). Для наиболее распространенных монокристаллических и поликристаллических кремниевых солнечных элементов $\beta = 0.005 (\text{°C})^{-1}$ и $\beta = 0.0045 (\text{°C})^{-1}$ соответственно [7].

Температурная зависимость эффективности кремниевых солнечных элементов представлена на рис. 1.

При высоких температурах окружающей среды, выше 25°C , солнечные элементы в ФЭ модулях нагреваются в значительной степени и электрическая эффективность уменьшается. При таких высоких температурах солнечные гибридные ФЭТ системы обладают преимуществом по сравнению с ФЭ модулями из-за охлаждения солнечных элементов и увеличении электрической эффективности. При низких температурах, ниже 25°C , эффективность увеличивается с охлаждением солнечных элементов. Поэтому необходимо проанализировать характеристики ФЭТ систем в широком диапазоне температур окружающей среды, а также в зависимости от параметров структуры и тепловых характеристик ФЭТ систем.

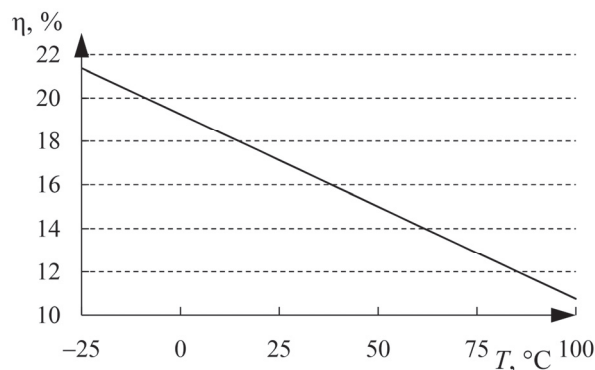


Рис.1. Электрическая эффективность монокристаллического кремни-евого солнечного элемента в зависимости от температуры.

2.2. Тепловые характеристики

Тепловая энергия, получаемая гибридной солнечной системой, определяется как:

$$Q = AS\eta_{th}, \quad (5)$$

где η_{th} – тепловой КПД ФЭТ системы.

Тепловой КПД ФЭТ системы можно определить как тепловой КПД плоского солнечного теплового коллектора как [8]:

$$\eta_{th} = F(\tau\alpha) - FU \frac{T - T_a}{G}, \quad (6)$$

где F – коэффициент теплоотвода коллектора, τ – коэффициент пропускания света крышки, α – коэффициент поглощения коллектора, U – общий коэффициент тепловых потерь коллектора, T – температура приемника (°C), T_a – температура окружающей среды (°C), G – интенсивность солнечного излучения на единицу поверхности и, как правило, принимается $G = 1000$ (Вт/м²).

Таким образом, подставив (6) в (5) тепловую энергию коллектора гибридной солнечной системы можно представить как:

$$Q = ASF(\tau\alpha) - FU \frac{T - T_a}{G}. \quad (7)$$

Также известно, что количество отводящего тепла из коллектора может быть измерено с помощью количества тепла, уносимого жидкостью, прошедшей через него (тепло, хранящееся в накопительном баке), то есть:

$$Q = mC(T_{out} - T_{in}) = mC\Delta T, \quad (8)$$

где m – масса жидкости в резервуаре для хранения (г), C – теплоемкость жидкости (Дж / г °C), T_{out} и T_{in} – температуры на выходе и входе (°C) ФЭТ коллектора.

Предполагая, что температура приемника в формуле (6) равна температуре солнечных элементов гибридной ФЭТ системы, можно записать:

$$T = \frac{T_{in} + T_{out}}{2} = T_{in} + \frac{T_{out} - T_{in}}{2} = T_{in} + \frac{\Delta T}{2} = T_{cell.PVT}, \quad (9)$$

$$\Delta T = 2(T_{cell.PVT} - T_{in}). \quad (10)$$

Подставив (10) в (8), получим:

$$Q = 2mC(T_{cell.PVT} - T_{in}). \quad (11)$$

Предполагая, что нет тепловых потерь от соединительных труб и резервуара для хранения, можно записать энергетический баланс, приравняв (11) и (7). Таким образом, с учетом (9) мы будем иметь:

$$ASF(\tau\alpha) - FU \frac{T_{cell.PVT} - T_a}{G} = 2mC(T_{cell.PVT} - T_{in}). \quad (12)$$

Из этого выражения формулу для температуры солнечных элементов гибридных ФЭТ систем можно записать как:

$$T_{cell.PVT} = \frac{1}{K_1 + K_2} [F(\tau\alpha) + K_1 T_{in} + K_2 T_a], \quad (13)$$

где $K_1 = 2mC/(AS)$ и $K_2 = FU/G$.

Из (13) видно, что температура солнечных элементов в гибридных ФЭТ системах линейно увеличивается с температурой окружающей среды. Таким образом, с помощью формулы (13) можно определить температуру солнечных элементов в гибридной ФЭТ системе в зависимости от тепловых параметров системы (типа ФЭТ и конструктивных параметров) и температуры окружающей среды.

3. Анализ характеристик ФЭТ систем в зависимости от температуры окружающей среды

Как известно, основным преимуществом ФЭТ коллекторов по сравнению с фотоэлектрическими (ФЭ) модулями является пониженная рабочая температура фотоэлементов при повышенных температурах окружающей среды. Проанализируем работу ФЭТ при высоких и низких температурах окружающей среды путем сравнения температуры солнечных элементов ФЭТ системы с температурой солнечных элементов обычных ФЭ модулей, которые не охлаждаются, как в ФЭТ коллекторах.

Выражение для приближенного расчета температуры солнечного элемента фотоэлектрического модуля с открытой задней частью имеет вид [9]

$$T_{cell.PV} = T_a + G \frac{NOCT - 20}{800}, \quad (14)$$

где NOCT определяется как температура, достигаемая элементами с разомкнутой цепью в модуле при стандартной эталонной среде, определяемой следующим образом: солнечное излучение 800 Вт/м^2 , температура окружающей среды 20°C , скорость ветра 1 м/с и тип монтажа – открытая задняя сторона.

Зависимость $T_{\text{cell.PV}}$ от температуры окружающей среды представлена на рис.2. На этом рисунке представлена также зависимость температуры солнечных элементов застекленных гибридных ФЭТ систем $T_{\text{cell.PVT}}$ от температуры окружающей среды, построенная с помощью уравнения (13).

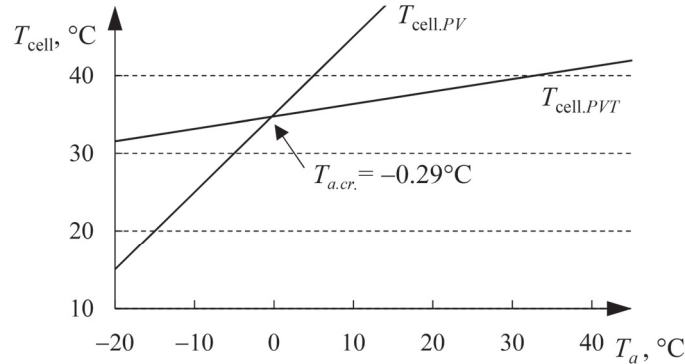


Рис.2. Зависимость температуры солнечных элементов ФЭ модуля и застекленного ФЭТ коллектора от температуры окружающей среды ($G = 1000 \text{ Вт/м}^2$, NOCT = 48°C , емкость бака ФЭТ системы составляет 100 л, $A = 2 \text{ м}^2$, $T_{\text{in}} = 15^\circ\text{C}$, $F(\tau\alpha) = 0.68$, $FU = 4.9 \text{ Вт/м}^2 \text{ } ^\circ\text{C}$ [10]).

Из рис.2 видно, что с повышением температуры окружающей среды солнечные элементы обычного фотоэлектрического модуля нагреваются сильнее, чем элементы гибридного застекленного ФЭТ модуля. Таким образом, при высоких температурах окружающей среды, выше примерно 0°C , с увеличением температуры разница между $T_{\text{cell.PV}}$ и $T_{\text{cell.PVT}}$ увеличивается. Следовательно, электрический КПД ФЭТ системы увеличивается также по сравнению с КПД обычного ФЭ модуля.

Из рис.2 также видно, что, угловые коэффициенты для $T_{\text{cell.PV}}$ и $T_{\text{cell.PVT}}$ разные. Коэффициент для $T_{\text{cell.PV}}$ равняется 1 (формула 14), а для $T_{\text{cell.PVT}}$ он равен $K_2 / (K_1 + K_2) = 0.16$ (формула 13). Из-за разных угловых коэффициентов двух линий существует точка пересечения при $T_a = -0.29^\circ\text{C}$, которая названа «критической» температурой окружающей среды ($T_{a.cr.}$). Когда температура окружающей среды ниже, чем $T_{a.cr.}$, ячейки в ФЭТ коллекторе имеют более высокие температуры, чем ячейки обычного фотоэлектрического модуля с открытой задней стороной, из-за меньших тепловых потерь ФЭТ коллектора. При низких температурах окружающей среды при $T_a < T_{a.cr.}$ происходит «обратный» процесс, и электрический КПД ФЭТ коллектора становится меньше по сравнению с обычным ФЭ. Эта точка пересечения определяет минимально допустимую

температуру для применения гибридной ФЭТ системы. Таким образом, при температурах ниже $T_{a.cr.}$ применение ФЭТ системы нецелесообразно из-за нагрева ячеек и снижения эффективности генерации электроэнергии ФЭТ системы по сравнению с обычным ФЭ модулем.

Критическая температура зависит от типа и тепловых характеристик гибридной ФЭТ системы. Значение $T_{a.cr.}$ можно найти из уравнения

$$T_{cell.PVT} = T_{cell.PV} . \quad (15)$$

Используя уравнения (13) и (14), получим

$$T_{a.cr.} = \frac{F(\tau\alpha)}{K_1} + T_{in} - \left[1 + \frac{k_2}{k_1} \right] G \frac{NOCT - 20}{800} . \quad (16)$$

На рис.3 представлена зависимость температуры солнечных элементов ФЭ модуля $T_{cell.PV}$ и застекленного ФЭТ коллектора $T_{cell.PVT}$ от температуры окружающей среды для трех различных входных температур. Видно, что чем ниже температура охлаждающей жидкости T_{in} на входе, тем меньше «критическая» температура окружающей среды $T_{a.cr.}$ и, следовательно, тем шире температурный диапазон применения ФЭТ системы с заданными тепловыми параметрами.

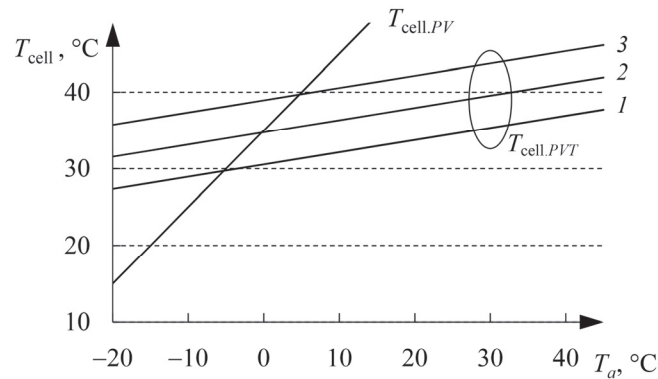


Рис.3. Зависимость температуры солнечных элементов ФЭ модуля $T_{cell.PV}$ и застекленного ФЭТ коллектора $T_{cell.PVT}$ от температуры окружающей среды T_a ($G = 1000 \text{ Вт / м}^2$, $NOCT = 48^\circ\text{C}$, емкость бака PVT системы 1001, $A = 2 \text{ м}^2$, $T_{in} = 15^\circ\text{C}$, $F(\tau\alpha) = 0.68$, $FU = 4.9 \text{ Вт / м}^2 \text{ }^\circ\text{C [10]}$). 1 – $T_{in} = 10^\circ\text{C}$, 2 – $T_{in} = 15^\circ\text{C}$, 3 – $T_{in} = 20^\circ\text{C}$.

Для сравнения рабочих температур солнечных элементов в неостекленных и застекленных плоских, а также вакуумных трубчатых ФЭТ коллекторах температуры для этих систем рассчитаны по (13). Для расчетов использованы следующие тепловые параметры (Табл.1):

Полученные температурные зависимости, а также зависимость температуры ФЭ модуля, установленного с открытой задней стороной, от температуры окружающей среды представлены на Рис.4.

Табл.1.

Тип ФЭТ коллектора	$F(\tau\alpha)$	FU , (Вт/м ² °С)	Ссылки
Неостекленный	0.45	10.15	[11]
Застекленный	0.68	4.9	[10]
Вакуумная труба	0.58	0.7	[10]

Как и следовало ожидать, «критическая» рабочая температура для неостекленного ФЭТ коллектора меньше, и поэтому рабочий диапазон неостекленной ФЭТ системы является максимальным. Более высокую критическую температуру имеет остекленный ФЭТ коллектор, а максимальное значение «критической» температуры имеет ФЭТ коллектор на базе вакуумной трубки.

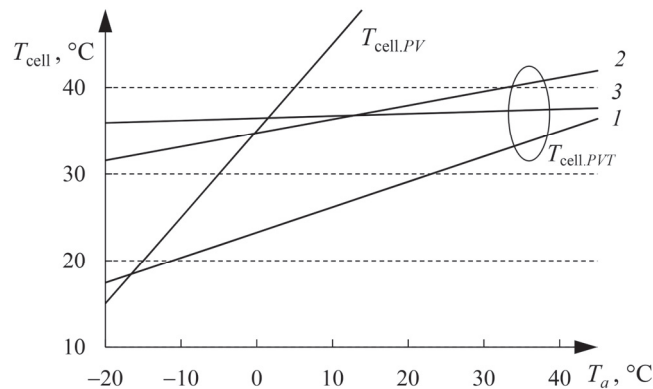


Рис.4. Зависимость температуры солнечных элементов ФЭ модуля $T_{\text{cell},PVT}$ и различных типов ФЭТ коллекторов $T_{\text{cell},PV}$ от температуры окружающей среды ($G = 1000 \text{ Вт/м}^2$, $\text{НОСТ} = 48^\circ\text{C}$, емкость резервуара PVT системы 1001, $A = 2 \text{ м}^2$, $T_{\text{in}} = 15^\circ\text{C}$, $F(\tau\alpha) = 0.68$, $FU = 4.9 \text{ Вт/м}^2 \text{ }^\circ\text{C}$ [10]). 1 – Неостекленный, 2 – Застекленный, 3 – Вакуумная труба.

В случае параметров, указанных на рис. 2, 3, 4 и в Табл.1, следующие значения критических температур для гибридных ФЭТ систем различного типа рассчитаны по формуле (16). Полученные результаты представлены в Табл.2. Как и ожидалось критическая температура окружающей среды $T_{a,cr}$ тем меньше, чем выше коэффициент теплотери коллектора.

Табл.2.

Тип ФЭТ коллектора	Критические значения температуры окружающей среды гибридных ФЭТ систем $T_{a,cr}$
Неостекленный плоский	-16.3°C
Застекленный плоский	-0.29°C
Вакуумная труба	$+1.5^\circ\text{C}$

4. Заключение

Анализирована зависимость характеристик гибридных фотоэлектрических-тепловых (ФЭТ) систем от температуры окружающей среды. Сравниваются рабочие температуры солнечных элементов обычных фотоэлектрических (ФЭ) модулей и гибридных ФЭТ коллекторов. Показано, что существует «критическое» минимальное значение температуры окружающей среды, ниже которого рабочая температура солнечных элементов в ФЭТ системе выше, чем у обычного ФЭ модуля. Этот «обратный» процесс происходит из-за низких тепловых потерь гибридных ФЭТ систем по сравнению с обычными ФЭ модулями. В результате этого процесса электрическая эффективность ФЭТ коллектора становится меньше по сравнению с обычным ФЭ модулем. Таким образом, критическая температура окружающей среды определяет минимально допустимую температуру окружающей среды, когда может использоваться соответствующая гибридная ФЭТ система. «Критическое» значение температуры окружающей среды зависит от тепловых характеристик данной гибридной ФЭТ системы. Он определяет возможный диапазон температур применения данной ФЭТ системы. Предложенная методика определения температурного диапазона рабочих характеристик ФЭТ систем может быть использована учеными и проектировщиками при разработке различных солнечных гибридных ФЭТ систем нового типа.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Комитетом науки Министерства образования, науки, культуры и спорта Республики Армения в рамках научного проекта № SCS 18T-2B333.

ЛИТЕРАТУРА

1. IRENA (2019), Future of Solar Photovoltaic: Deployment, investment, technology, grid integration and socio-economic aspects (A Global Energy Transformation: paper), International Renewable Energy Agency, Abu Dhabi.
2. T.T. Chow. Applied Energy, **87**, 365 (2010).
3. A. Mellora et al. Solar Energy, **174**, 386 (2018).
4. H.A. Zondag. Renewable and Sustainable Energy Reviews, **12**(4), 891 (2008).
5. A. Mallik, M.Z. Hasan. World Scientific News, **96**, 83 (2018).
6. E. Radziemska. International Journal of Photoenergy, **2009**, Article ID 732093.
7. E. Skoplaki, J.A. Palyvos. Solar Energy, **83**, 614 (2009).
8. J.A. Duffie, W.A. Beckman. Solar Engineering of Thermal Processes, 4th Edition, New York: John Wiley & Sons Inc, 2013.
9. R.G. Ross. 14th IEEE Photovoltaic Specialists Conference. San Diego, CA, p. 1126, (1980).
10. RETScreen International. Clean energy support center. Solar water heating project analysis, Canada. www.etscreen.net
11. J.H. Kim, J.T. Kim. International Journal of Photoenergy. **2012**, 1 (2012).

ԱՐԵՎԱՅԻՆ ՖՈՏՈԷԼԵԿՏՐԱԿԱՆ ԵՎ ՋԵՐՄԱՅԻՆ ՀԻԲՐԻԴԱՅԻՆ
ՀԱՄԱԿԱՐԳԵՐԻ ԲՆՈՒԹԱԳՐԵՐԻ ՋԵՐՄԱՍՏԻՃԱՆԱՅԻՆ
ԿԱԽՎԱԾՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԸ

Ռ.Ռ. ՎԱՐԴԱՆՅԱՆ, Վ.Կ. ԴԱԼԼԱԿՅԱՆ, Մ.Գ. ՏՐԱՎԱՅՅԱՆ

Արևային ֆոտոէլեկտրական-ջերմային (ՖԷՋ) հիբրիդային համակարգերն ունեն բարձր ներուժ՝ որպեսզի հաղիսանան արդյունավետ և կենսունակ մեթոդ էլեկտրաէներգիայի և ցածր պոտենցիալային ջերմային էներգիայի արտադրության համար: Հիբրիդային համակարգը, որ կարող է ինել շատ էներգաարդյունավետ՝ բարելավելով էլեկտրական արդյունավետությունը արևային մարկոցների հովացման և դրա արդյունքում ստացված ջերմային էներգիայի շնորհիվ: Այնուամենայնիվ, այս համակարգերի օգտագործումը արագ չի զարգանում՝ կապված գործառնական վիճահարույց խնդիրների, ինչպես նաև առանձին ֆոտոէլեկտրական (ՖԷ) և ջերմային համակարգերի համեմատությամբ, տեղադրման և պահպանման դժվարությունների հետ: Տվյալ հոդվածում ուսումնասիրվում են արևային մարկոցների աշխատանքային ջերմաստիճանները ՖԷ և ՖԷՋ կոլեկտորներում՝ կախված շրջակա միջավայրի ջերմաստիճանից: ՖԷ մոդուլի և ՖԷՋ կոլեկտորի արևային բջիջների աշխատանքային ջերմաստիճանների համեմատության հիման վրա գնահատվում է ՖԷՋ համակարգի կիրառման արդյունավետությունը: Ցույց է տրվել, որ գոյություն ունի շրջակա միջավայրի ջերմաստիճանի «կրիտիկական» նվազագույն արժեք, որից ցածր ՖԷՋ համակարգի մարկոցներն ունեն ավելի բարձր ջերմաստիճան, քան ՖԷ մոդուլների մարկոցները («հակադարձ» գործընթաց) և ՖԷՋ համակարգի կիրառումը նպատակահարմար չէ: Ուսումնասիրվել է «կրիտիկական» ջերմաստիճանի կախվածությունը ՖԷՋ համակարգի տեսակից և ջերմային բնութագրերից: ՖԷՋ հիբրիդային համակարգերի արդյունավետության գնահատման համար առաջարկվող մեթոդը կարող է օգտագործվել գիտնականների և ինժեներների կողմից տարբեր հիբրիդային ՖԷՋ համակարգերի մշակման ընթացքում:

TEMPERATURE DEPENDENT PERFORMANCE OF
PHOTOVOLTAIC AND THERMAL HYBRID SYSTEMS

R.R. VARDANYAN, V.K. DALLAKYAN, M.G. TRAVAJYAN

Solar photovoltaic-thermal (PVT) hybrid systems have the high potential to be an effective and viable method for producing electricity and thermal energy for low grade heating application. The hybrid system proves to be much energy efficient with improved electrical efficiency due to cooling of solar cells and gained thermal energy due to heat absorbed by the fluid from the heated cells. Nevertheless, the utilization of these systems is not growing rapidly due to the controversial operational problems, as well as installation and maintenance difficulties in comparison with general separated photovoltaic and thermal systems. In this paper the operating temperatures of solar cells in PV and PVT collectors in dependence of ambient temperature are investigated. On the base of comparison of operating temperatures of solar cells of PV module and PVT collector the effectivity of PVT system application is assessed. It is shown that there is a “critical” minimum value of ambient temperature below which the PVT system cells have the higher temperatures than the cells in PV modules (“reverse” process) and the application of PVT system is not reasonable. The dependence of “critical” temperature on the type and thermal characteristics of PVT system is investigated. The proposed methodology for PVT hybrid systems effectivity assessment can be used by scientists and designers during the development of different hybrid PVT systems.

НЕМОНОТОННАЯ ДИСПЕРСИЯ НОСИТЕЛЕЙ В РАЗМЕРНО-КВАНТОВАННЫХ НАНОСТРУКТУРАХ С НАРУШЕННЫМИ СИММЕТРИЯМИ

Г.С. НИКОГОСЯН^{1*}, С.Л. АРУТЮНЯН²,
В.Ф. МАНУКЯН¹, Г.Г. НИКОГОСЯН³

¹Ширакский государственный университет, Гюмри, Армения

²Национальный политехнический университет Армении
(Гюмрийский филиал), Гюмри, Армения

³Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

*e-mail: hrach1960@mail.ru

(Поступила в редакцию 3 июня 2020 г.)

Рассматриваются особенности энергетического спектра и движения носителей в одномерных асимметричных полупроводниковых наносистемах. Асимметричные структуры с дополнительным провалом потенциального профиля в квантовых ямах позволяют варьировать положениями квантоворазмерных уровней. А дополнительное влияние внешнего магнитного поля приводит к немонотонной дисперсии и поперечному локальному дрейфу носителей. Такие нарушения фундаментальных симметрии вовлекут за собой соответствующие изменения и в характере электронных переходов. Проводится анализ динамических свойств электронной системы наноструктуры с асимметрией квантового профиля, в зависимости от напряженности внешнего магнитного поля.

1. Введение

Технологические возможности получения полупроводниковых слоев с произвольным профилем изменения состава позволяют создавать наноструктуры с квантовыми ямами сложной формы, у которых нарушена симметрия по отношению к инверсии координат [1–3]. Асимметрия потенциального профиля в таких структурах, а также нарушение симметрии по отношению к обращению времени, созданная путем наложения внешнего магнитного поля, может привести к трансформациям дисперсионных зависимостей носителей заряда, что вовлечет за собой соответствующие изменения в процессе электрон-фононного взаимодействия и в характере электронных переходов [4–8]. Аналогичные структуры формируются в композиционных политипных сверхрешетках, где полупроводниковые слои, образующие ковариантные сверхрешетки, дополняются чередующимися слоями широкозонного материала, которые создают потенциальные

ямы с дополнительными провалами как для электронов, так и для дырок. Провал при $0 < z < d$ образуется путем изменения состава твердого раствора, где эффективная масса носителя заряда m_1^* отличается от значения m_2^* в соседней области $d < z < l$ (рис.1). В структуре с асимметричным потенциальным профилем, обусловленным дополнительным провалом в квантовой яме, наличие слоев с различающимися эффективными массами электронов проявляется в виде асимметричного воздействия на положение энергетических уровней в квантовой яме, что позволяет варьировать величиной энергетической щели между основным и первым возбужденными уровнями размерного квантования в широкой части квантовой ямы [3]. А дополнительный учет влияния квантующего магнитного поля, нарушающего t – инвариантность системы, обуславливает немонотонную дисперсию $E_{cn}(k_x)$ и локальную плотность тока J_x для носителей заряда, в зависимости от степеней магнитной локализации и пространственного ограничения, накладываемые вертикальными стенками квантовой ямы. Определяющим при этом является формирование суперпозиционного состояния электрона, состоящей из локальных состояний внутри слоев с эффективными массами m_1^*, m_2^* . Действительно, как будет явствовать из полученных выражений для энергии суперпозиционных, размерно-квантованных состояний электрона в яме, асимметричная зависимость энергии от составляющей квазиволнового вектора k_x , приводящий к немонотонной дисперсии, находится в прямой зависимости от квантового числа пространственного ограничения. Так что путем варьирования таких параметров асимметрии, как U_0, m_1^*, m_2^*, d, H , можно контролировать дисперсией $E_{cn}(k_x)$ и плотностью поперечного тока J_x . Наличие таких возможностей актуально для создания приборов твердотельной электроники с улучшенными характеристиками. Ниже рассматриваются особенности энергетического спектра и квантовых состояний носителей заряда с нулевым спином, обусловленные такими факторами нарушения фундаментальных

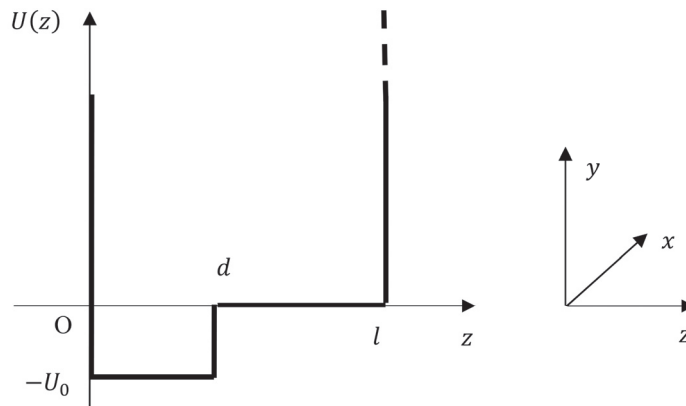


Рис.1. Потенциальный профиль асимметричной ямы.

симметрии как пространственная асимметрия потенциального профиля и влияние квантующего магнитного поля $\mathbf{H} \parallel \mathbf{j}$, где $\mathbf{j}$ - орт оси y .

2. Квантовые состояния при нарушенной t -инвариантности

Поведение частицы в асимметричной яме, при наличии квантующего магнитного поля $\mathbf{H} = \text{rot } \mathbf{A}$, где $\mathbf{A} = \mathbf{A}(Hz, 0, 0)$ – векторный потенциал однородного магнитного поля, описывается волновой функцией

$$\Psi(\mathbf{r}) = \exp[i(k_x x + k_y y)]\varphi(z), \quad (1)$$

где собственные значения k_x, k_y принимают все значения от $-\infty$ до ∞ .

Осцилляторная функция $\varphi(z)$ для структуры с бесконечно высокими стенками удовлетворяет уравнениям

$$\frac{d^2\varphi(z)}{dz^2} + \frac{2m_1^*}{\hbar^2} \left[\left(E - \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_1^*} + U_0 \right) - \frac{m_1^* \omega_{H1}^2}{2} (z - z_0)^2 \right] \varphi(z) = 0, \quad 0 < z < d, \quad (2)$$

$$\frac{d^2\varphi(z)}{dz^2} + \frac{2m_2^*}{\hbar^2} \left[\left(E - \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_2^*} \right) - \frac{m_2^* \omega_{H2}^2}{2} (z - z_0)^2 \right] \varphi(z) = 0, \quad d < z < l. \quad (3)$$

Здесь $\omega_H = |e|H/(m^*(z)c)$ – циклотронная частота колебания магнитного осциллятора, $z_0 = -\hbar k_y c/(eH)$ – z -координата «центра орбиты» электрона в магнитном поле. С целью выявления и сопоставления особенностей, которые вносят факторы пространственно-временных асимметрии в многослойной наноструктуре, сперва рассмотрим поведение бесспинового носителя в симметричной прямоугольной яме с бесконечно высокими стенками при $H \neq 0$, где нарушена только t -инвариантность (рис.2). Наложение потенциального профиля прямоугольной ямы квантовой структуры к параболической яме $0.5m\omega_H^2(z - z_0)^2$ магнитного осциллятора приводит к следующей приближенной картине расположения классических круговых траекторий внутри ямы, что позволяет судить о формировании возможных не эквивалентных состояний бесспиновой частицы:

1. $l - z_0 > R, z_0 > R$. Здесь $R = ((n + 1/2)/\gamma)^{1/2}$ – классический радиус орбиты, зависящий от «главного» квантового числа магнитного осциллятора n , который предопределяет уровни энергии поперечного движения заряда в квантующем магнитном поле, $z_0 = ((n_p + 1/2)/\gamma)^{1/2}$ – среднеквадратичное расстояние между началом координат и центрами круговых траектории, расположенных симметрично относительно оси y в соответствии с

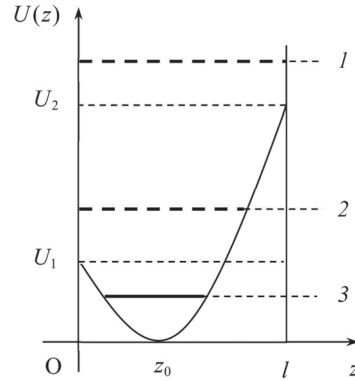


Рис.2. Магнитный осциллятор при наличии размерного квантования.
 l – размерно - квантованные уровни, 2 – уровни электронов на скользящих магнитных траекториях, 3 – уровни магнитного осциллятора.

вырожденностью спектра поперечного движения, n_p – радиальное квантовое число, $\gamma = eH/(2\hbar c)$). При такой геометрии расположения круговых траектории в классическом пределе внутри структуры формируются дискретные состояния $\hbar\omega_H(n+1/2)$, $n = 0, 1, 2, \dots$ в результате преобладающего квантования Ландау по сравнению с размерным квантованием.

2. $l - z_0 > R, z_0 < R$ или $l - z_0 < R, z_0 > R$. Указанная геометрия формирует состояния носителей, локализованные в асимметричной потенциальной яме, образованная бесконечно высоким потенциальным барьером вертикальной стенки ямы слева или справа, соответственно, а с противоположной стороны силой Лоренца. Электроны в таких состояниях в классическом пределе совершают локализованные движения в плоскости xz по открытым скользящим траекториям, перемещаются вдоль оси x , отражаясь от вертикальной стенки асимметричной ямы.
3. $l - z_0 < R, z_0 < R$. При таком расположении потенциальных профилей дискретные состояния носителей формируются под преобладающим влиянием вертикальных стенок прямоугольной ямы, в результате которых возникают подзоны размерного квантования $(\hbar^2/(2m^*))(\pi/l)^2 m^2$, $m = 1, 2, 3, \dots$.

Подсчитаем кратность вырождения основного уровня Ландау состояния типа 1, которая становится конечным из-за пространственного ограничения, вносимое стенками ямы. Очевидно, что число различных дискретных допустимых значений $\hbar k_x = p_x$ в интервале Δp_x есть $(L_x/(2\pi\hbar))\Delta p_x$, где L_x – возможный размер области локализации носителя вдоль оси x . С другой стороны допустимы все значения квазиимпульса p_x , для которых центр орбиты z_0 находится внутри отрезка $z_{01} \leq z_0 \leq z_{02}$, где z_{01} и z_{02} определяются из краевых условий

$$\frac{m^* \omega_H^2 z_{01}^2}{2} = \frac{\hbar \omega_H}{2}, \frac{m^* \omega_H^2 (l - z_{02})^2}{2} = \frac{\hbar \omega_H}{2},$$

т. е. $z_{01} = (\hbar / (m^* \omega_H))^{1/2}$, $z_{02} = l - z_{01}$ и $|\Delta p_x| = eHc^{-1}(z_{02} - z_{01})$. Так что число состояний (кратность вырождения) равно

$$g = \frac{L_x eH}{2\pi\hbar c} (z_{02} - z_{01}) = \frac{L_x eH}{2\pi\hbar c} \left[l - 2 \left(\frac{\hbar}{m^* \omega_H} \right)^{1/2} \right].$$

В случае ограничения движения носителя и в направлении магнитного поля в области с линейным размером L_y , возможная кратность вырождения уровня с $n = 0$ будет равна

$$\frac{L_x L_y eH \Delta p_y}{(2\pi\hbar)^2 c} \left[l - 2 \left(\frac{\hbar}{m^* \omega_H} \right)^{1/2} \right] = \frac{S_{xy} eH \Delta p_y}{(2\pi\hbar)^2 c} \left[l - 2 \left(\frac{\hbar}{m^* \omega_H} \right)^{1/2} \right],$$

где S_{xy} – площадь ограничения движения носителя вдоль стенок потенциальной ямы [9].

Состояния типа 1. описываются волновыми функциями (1), где

$$\varphi(z) = \frac{1}{\pi^{1/4} a_H^{1/2} \sqrt{2^n \frac{n!}{1}}} \exp \left(- \frac{(z - z_0)^2}{2a_H^2} \right) H_n \left(\frac{z - z_0}{a_H} \right), a_H = \left(\frac{\hbar}{m^* \omega_H} \right)^{1/2},$$

H_n – полином Эрмита n -й степени. В состояниях типа 2. преобладает локализация носителей в непосредственной близости к потенциальной стенке, например, $z = 0$. В этой области в уравнении магнитного осциллятора можно пренебречь членом z^2 , заменив параболическую зависимость осцилляторной ямы приближенно-линейной зависимостью ($\sim z$). Так что после разделения переменных приходим к следующему уравнению для z – движения

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 \varphi(z)}{dz^2} + \frac{\hbar k_x eH}{m^* c} z \varphi(z) = \varepsilon \varphi(z), \quad \varepsilon = E - \frac{\hbar^2 (k_x^2 + k_y^2)}{2m^*}. \quad (4)$$

Задача свелась к определению дискретных состояний в треугольной яме [10], [11]. Разрешенные значения энергии ε_n выразим через максимально возможные координаты областей локализации электрона z_n , где $n = 1, 2, 3, \dots$

$$\varepsilon_n = \frac{\hbar k_x eH}{m^* c} z_n. \quad (5)$$

Так что решение уравнения (4) сводится к нахождению значений z_n и собственных функции φ_n уравнения

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 \varphi_n(z)}{dz^2} + \frac{\hbar k_x eH}{m^* c} (z - z_n) \varphi_n(z) = 0 \quad (6)$$

решениями которого являются линейные комбинации функций Эйри, удовлетворяющие краевому условию на стенке потенциальной ямы $z = 0$. Проведем замену переменного

$$\zeta = \left(\frac{2eHk_x}{\hbar c} \right)^{1/3} z \quad (7)$$

получим $d^2\varphi_n/d\zeta^2 - (\zeta - \zeta_n)\varphi_n = 0$, общее решение которого является линейной комбинацией функции Эйри первого и второго родов $\text{Ai}(\zeta - \zeta_n)$ и $\text{Bi}(\zeta - \zeta_n)$. Решение – конечное при больших z

$$\varphi_n(z) = N \text{Ai}(\zeta - \zeta_n), \quad (8)$$

где, в силу краевого условия на бесконечно высокой стенке потенциальной ямы $z=0$ ($\zeta=0$), ζ_n является n -м корнем функций Эйри $\text{Ai}(-\zeta_n)=0$, если $\varphi_n(z=0)=0$. Здесь N нормировочная постоянная. Таким образом нули функции Эйри ζ_n определяют собственные энергетические состояния типа 2.

$$\varepsilon_n = \frac{\hbar^{4/3}}{2^{1/3} m^*} \left(\frac{eHk_x}{c} \right)^{2/3} \zeta_n, \quad (9)$$

где можно воспользоваться приближенным представлением $\zeta_n = \left[(3\pi/2)(n-1/4) \right]^{3/2}$ для $n=1, 2, 3, \dots$ если $|\zeta_n| > 1$. Так что спектр состояний 2 имеет вид

$$E_n = \frac{\hbar^{4/3}}{2^{1/3} m^*} \left(\frac{eHk_x}{c} \right)^{2/3} \left[\frac{3\pi}{2} \left(n - \frac{1}{4} \right) \right]^{3/2} + \frac{\hbar^2 (k_x^2 + k_y^2)}{2m^*}. \quad (10)$$

Примечателен тот факт что, в отличие от состояний типа 1 и 3, для электрона в состояний 2, исходя из выражений спектра (10), имеет место дисперсионная зависимость $E_n(k_x)$ и, следовательно, наличие составляющей скорости вдоль оси x (локальная плотность тока) $J_x = eV_x(k_x) = -(e/\hbar) dE_n(k_x)/dk_x$. Усредненное значение полной плотности тока вдоль оси x

$$J_x = -e \int V_x f(\mathbf{k}) dk_x = -\frac{e}{\hbar} \int \frac{dE_n(k_x)}{dk_x} f(\mathbf{k}) dk_x = -\frac{e}{\hbar} \int f(\mathbf{k}) dE_n(k_x), \quad (11)$$

где $f(\mathbf{k}) = f_0(E_n(k_x)) + f_1(\mathbf{k})$ – неравновесная функция распределения, f_0 – равновесная функция распределения по энергии $E_n(k_x)$, зависящая от k_x^2 , $f_1(\mathbf{k}) = -\partial f_0 / \partial E_n(k_x) \chi(E_n(k_x)) \mathbf{k}$, $\chi(E_n(k_x))$ – векторная функция от энергии $E_n(k_x)$. Спектр состояний 2 симметричен по составляющему квазиимпульса k_x : $E_n(k_x) = E_n(-k_x)$, так что при интегрировании по k_x от $-\infty$ до ∞

$$J_x = -\frac{e}{\hbar} \int f(\mathbf{k}) dE_n(k_x) = -\frac{e}{\hbar} \int f_0(E_n(k_x)) dE_n(k_x) + \frac{e}{\hbar} \int \frac{\partial f_0}{\partial E_n(k_x)} \chi(E_n(k_x)) \mathbf{k} dE_n(k_x) = 0. \quad (12)$$

Таким образом симметричность профиля прямоугольной ямы приводит к симметричному спектру для носителя заряда в квантующем магнитном поле, которое нарушает лишь t – инвариантность системы.

Теперь рассмотрим поведение носителя в структуре с нарушенной симметрией по отношению к инверсии координат. Квантовые состояния носителя на этот раз формируются под влиянием асимметричного профиля потенциальной ямы и внешнего магнитного поля.

3. Асимметричная яма при наличии внешнего магнитного поля

Исходя из того, что потенциальный профиль осцилляторной ямы магнитного поля зависит от эффективной массы носителя, в рассматриваемой модели асимметричной структуры классификацию возможных состояний нагляднее продемонстрировать на основе подбора классических траекторий поперечного движения электрона в широкой части потенциального профиля, в соприкасающихся ямах

$$U_H^{(1)}(z, z_0) = \frac{m_1^* \omega_{H1}^2 (z - z_0)^2}{2}, U_H^{(2)}(z, z_0) = \frac{m_2^* \omega_{H2}^2 (z - z_0)^2}{2} \quad (13)$$

структуры при $z = d$ (рис.3), где, для наглядности, вертикальные стенки предполагаются бесконечно высокими.

Состояния 1 на рисунке 3 отвечают движению электрона в одной или в другой яме и пренебрегается туннелированием через разделяющий широкий барьер, что имеет место только для низших состояний с энергиями

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_{H1} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_1^*} - U_0, \quad \omega_{H1} = \frac{|e| \hbar H}{m_1^* c}, \quad n = 1, 2, \dots,$$

или

$$E_m = \left(m + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_{H2} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_2^*}, \quad \omega_{H2} = \frac{|e| \hbar H}{m_2^* c}, \quad m = 1, 2, \dots \quad (14)$$

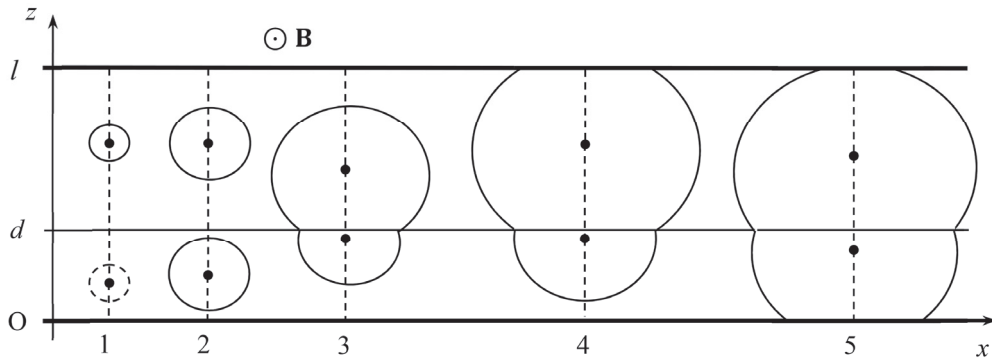


Рис.3. Классические траектории возможных квантовых состояний электрона в плоскости (x, z) .

В состояниях 2 допускается возможность перехода электрона через барьер, разделяющий осцилляторные ямы $U_H^{(1)}(z, z_0), U_H^{(2)}(z, z_0)$. Волновая функция нулевого приближения, отвечающая движению электрона в обеих ямах одновременно, представляет собой линейную комбинацию волновых функций, описывающих движения в отдельных ямах, т. е. экспоненциально затухающие в обе стороны от границ соответствующих ям: $\varphi(z) = c_1\varphi_1(z) + c_2\varphi_2(z)$, где $\varphi_1(z)$ и $\varphi_2(z)$ решения осцилляторных уравнений

$$\frac{d^2\varphi_1(z)}{dz^2} + \frac{2m_1^*}{\hbar^2} \left[\varepsilon_0 - \frac{m_1^*\omega_{H1}^2(z-z_0)^2}{2} \right] \varphi_1(z) = 0, \quad (15)$$

$$\frac{d^2\varphi_2(z)}{dz^2} + \frac{2m_2^*}{\hbar^2} \left[\varepsilon_0 - \frac{m_2^*\omega_{H2}^2(z-z_0)^2}{2} \right] \varphi_2(z) = 0. \quad (16)$$

Очевидно, что произведение $\varphi_1(z)\varphi_2(z) \rightarrow 0$ при любых z . Волновая функция суперпозиционного состояния $\varphi(z)$ удовлетворяет уравнениям

$$\frac{d^2\varphi(z)}{dz^2} + \frac{2m_1^*}{\hbar^2} \left[\varepsilon - \frac{m_1^*\omega_{H1}^2(z-z_0)^2}{2} \right] \varphi(z) = 0, \quad (17)$$

$$\frac{d^2\varphi(z)}{dz^2} + \frac{2m_2^*}{\hbar^2} \left[\varepsilon - \frac{m_2^*\omega_{H2}^2(z-z_0)^2}{2} \right] \varphi(z) = 0. \quad (18)$$

Рассмотрим уравнения (15) и (17). Умножим уравнение (15) на $\varphi(z)$, а уравнение (17) на $\varphi_1(z)$, вычтем почленно и проинтегрируем по z от $z=0$ до $z=d$. Получим равенство

$$I_1 + I_2 + I_3 = 0,$$

где

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_0^d \varphi(z) \frac{d}{dz} \left(\frac{d\varphi_1(z)}{dz} \right) dz - \int_0^d \varphi_1(z) \frac{d}{dz} \left(\frac{d\varphi(z)}{dz} \right) dz = \\ &= \left[(c_1\varphi_1(z) + c_2\varphi_2(z))\dot{\varphi}_1(z) \right]_{z=d} - \left[\varphi_1(z)(c_1\dot{\varphi}_1(z) + c_2\dot{\varphi}_2(z)) \right]_{z=d}, \\ I_2 &= \frac{2m_1^*}{\hbar^2} (\varepsilon_0 - \varepsilon) \int_0^d \varphi(z)\varphi_1(z) dz \approx \frac{2m_1^*}{\hbar^2} (\varepsilon_0 - \varepsilon) c_1 \int_0^d \varphi_1^2(z) dz, \\ I_3 &= -\frac{(m_1^*)^2 \omega_{H1}^2}{\hbar^2} \left[\int_0^d (z-z_0)^2 \varphi(z)\varphi_1(z) dz - \int_0^d (z-z_0)^2 \varphi_1(z)\varphi(z) dz \right] = 0. \end{aligned}$$

С учетом краевых условий на границе слоев

$$\varphi_1(z)_{z=d} = \varphi_2(z)_{z=d}, \frac{1}{m_1^*} (\dot{\varphi}_1)_{z=d} = \frac{1}{m_2^*} (\dot{\varphi}_2)_{z=d}, \quad (19)$$

$$I_1 = c_2 \left(1 - \frac{m_2^*}{m_1^*} \right) \left[\varphi_1(z)\dot{\varphi}_1(z) \right]_{z=d}.$$

В итоге преобразование пары уравнений (15) и (17) приводит к результату

$$c_2 \left(1 - \frac{m_2^*}{m_1^*} \right) [\varphi_1(z) \dot{\varphi}_1(z)]_{z=d} + \frac{2m_1^*}{\hbar^2} (\varepsilon_0 - \varepsilon) c_1 \int_0^d \varphi_1^2(z) dz = 0. \quad (20)$$

Теперь рассмотрим пару (16), (18). Умножим первое уравнение на $\varphi(z)$, второе уравнение на $\varphi_2(z)$, вычтем почленно и проинтегрируем по z от $z=d$ до $z=l$. С учетом (19), приходим к результату

$$c_1 \left(\frac{m_1^*}{m_2^*} - 1 \right) [\varphi_2(z) \dot{\varphi}_2(z)]_{z=d} + \frac{2m_2^*}{\hbar^2} (\varepsilon_0 - \varepsilon) c_2 \int_d^l \varphi_2^2(z) dz = 0. \quad (21)$$

Из условия разрешимости системы уравнений (20), (21) для неизвестных коэффициентов c_1, c_2 , получим

$$\varepsilon_{1,2} = \varepsilon_0 \pm \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{m_1^* - m_2^*}{m_1^* m_2^*} \right) (I_1 I_2)^{-\frac{1}{2}} \left([\varphi_1(z) \varphi_2(z) \dot{\varphi}_1(z) \dot{\varphi}_2(z)]_{z=d} \right)^{\frac{1}{2}} = \varepsilon_0 \pm \Delta E, \quad (22)$$

где

$$I_1 = \int_0^d \varphi_1^2(z) dz, I_2 = \int_d^l \varphi_2^2(z) dz.$$

Таким образом возможность перехода посредством туннелирования из одной ямы в другую приводит к очевидному расщеплению каждого из уровней в обеих ямах ε_0 на два близких уровня ε_1 и ε_2 .

Состояния типа 3 формируются в потенциальной яме сложной формы, которая образуется из двух осцилляторных ям. Соответственно, классическая траектория электрона складывается из двух неполных круговых орбит. Поведение электрона в слоях $0 \leq z \leq d$ и $d \leq z \leq l$ описывается уравнениями

$$\begin{aligned} \ddot{\varphi}_1 - \frac{e^2 H^2}{\hbar^2 c^2} (z - z_0)^2 \varphi_1 &= -\frac{2m_1^*}{\hbar^2} \varepsilon_0 \varphi_1, 0 \leq z \leq d, \\ \ddot{\varphi}_2 - \frac{e^2 H^2}{\hbar^2 c^2} (z - z_0)^2 \varphi_2 &= -\frac{2m_2^*}{\hbar^2} \varepsilon_0 \varphi_2, d \leq z \leq l. \end{aligned} \quad (23)$$

Интегрируем приведенные уравнения по z в соответствующих областях:

$$\begin{aligned} \int_0^d \frac{d}{dz} \left(\frac{d\varphi_1(z)}{dz} \right) dz &= \frac{e^2 H^2}{\hbar^2 c^2} \int_0^d (z - z_0)^2 \varphi_1(z) dz - \frac{2m_1^*}{\hbar^2} \varepsilon_0 \int_0^d \varphi_1(z) dz, \\ \int_d^l \frac{d}{dz} \left(\frac{d\varphi_2(z)}{dz} \right) dz &= \frac{e^2 H^2}{\hbar^2 c^2} \int_d^l (z - z_0)^2 \varphi_2(z) dz - \frac{2m_2^*}{\hbar^2} \varepsilon_0 \int_d^l \varphi_2(z) dz. \end{aligned} \quad (24)$$

Преобразуем левые части уравнений системы (24), с учетом краевых условий на границах ямы:

$$\int_0^d \frac{d}{dz} \left(\frac{d\varphi_1(z)}{dz} \right) dz = (\dot{\varphi}_1(z))_{z=d}, \quad \int_d^l \frac{d}{dz} \left(\frac{d\varphi_2(z)}{dz} \right) dz = -(\dot{\varphi}_2(z))_{z=d}.$$

А учет краевых условий (19) на границе слоев приводит к следующему равенству, исходящее из системы (24)

$$\begin{aligned} & \frac{m_2^* e^2 H^2}{\hbar^2 c^2} \int_0^d (z - z_0)^2 \varphi_1(z) dz - \frac{2m_1^* m_2^*}{\hbar^2} \varepsilon_0 \int_0^d \varphi_1(z) dz \\ &= \frac{2m_1^* m_2^*}{\hbar^2} \varepsilon_0 \int_d^l \varphi_2(z) dz - \frac{m_1^* e^2 H^2}{\hbar^2 c^2} \int_d^l (z - z_0)^2 \varphi_2(z) dz. \end{aligned} \quad (25)$$

Отсюда для энергии состояний типа 3 получим

$$\varepsilon_0 = \frac{\left(e^2 H^2 / c^2 \right) \left[\left(1/m_1^* \right) \int_0^d (z - z_0)^2 \varphi_1(z) dz + \left(1/m_2^* \right) \int_d^l (z - z_0)^2 \varphi_2(z) dz \right]}{2 \left[\int_0^d \varphi_1(z) dz + \int_d^l \varphi_2(z) dz \right]}. \quad (26)$$

Состояния типа 4 формируются в сложном потенциальном поле из соприкасающихся в точке $z = d$ ям $U_H^{(1)}(z, z_0)$, $U_H^{(2)}(z, z_0)$ и удовлетворяют вместе с тем краевым условиям при $z = 0$ или $z = l$. Собственные значения энергии состояний 4 можно оценить по выражению (26), где следует провести замену

$$\varphi_1(z) \rightarrow \varphi_1(z + z_n) \quad (27)$$

или

$$\varphi_2(z) \rightarrow \varphi_2(z - l + z_n), \quad (28)$$

где z_n – нули осцилляторных функции $\varphi_{1,2}(z)$.

Состояния типа 5 формируются под влиянием размерных эффектов из-за ограничения области локализации зарядов вертикальными стенками а также и обязательными условиями непрерывности (19) на границе полупроводниковых слоев $z = d$. Так что энергия состояния дается выражением (26), где необходимо провести одновременную замену (27) и (28).

5. Заключение

Анализ спектров возможных магнитно-квантованных состояний в рассматриваемой пространственно-асимметричной слоистой структуре показывает, что в связи с неопределенностью центров круговых орбит, характерное вырождение уровней свойственно только состояниям типа 1. И, как очевидно из полученных выражений для энергии, вырождение уровней отсутствует для состояний 2–5, в формировании которых определяющий роль играет фактор асимметрии потенциального профиля. Соответственно, состояния 2–5 отличаются наличием дисперсии $E_{cn}(k_x)$ и отличной от нуля локальной плотностью тока

$J_x = -(e/\hbar)dE_{cn}(k_x)/dk_x$. Как следствия асимметрии спектров состояний 2–5 по составляющему квазиимпульса k_x

$$E_c(k_x) \neq E_c(-k_x), \quad (30)$$

усредненное значение полной плотности тока вдоль оси x (12) может иметь отличное от нуля значение [12].

Очевидно, что возрастание напряженности магнитного поля приводит к более сильной локализации носителей в параболических ямах $U_H^{(1)}(z, z_0)$, $U_H^{(2)}(z, z_0)$ и росту вероятности формирования состояний типа 1 по сравнению с состояниями 2–5. Так что эффекты асимметрии, в виде формирования поперечного тока $J_x \neq 0$ благодаря состояниям 2–5, который отсутствовал при $H = 0$, должны обладать немонотонным ходом в зависимости от напряженности магнитного поля, достигая обязательного максимума в процессе изменения H рис.4 [3].

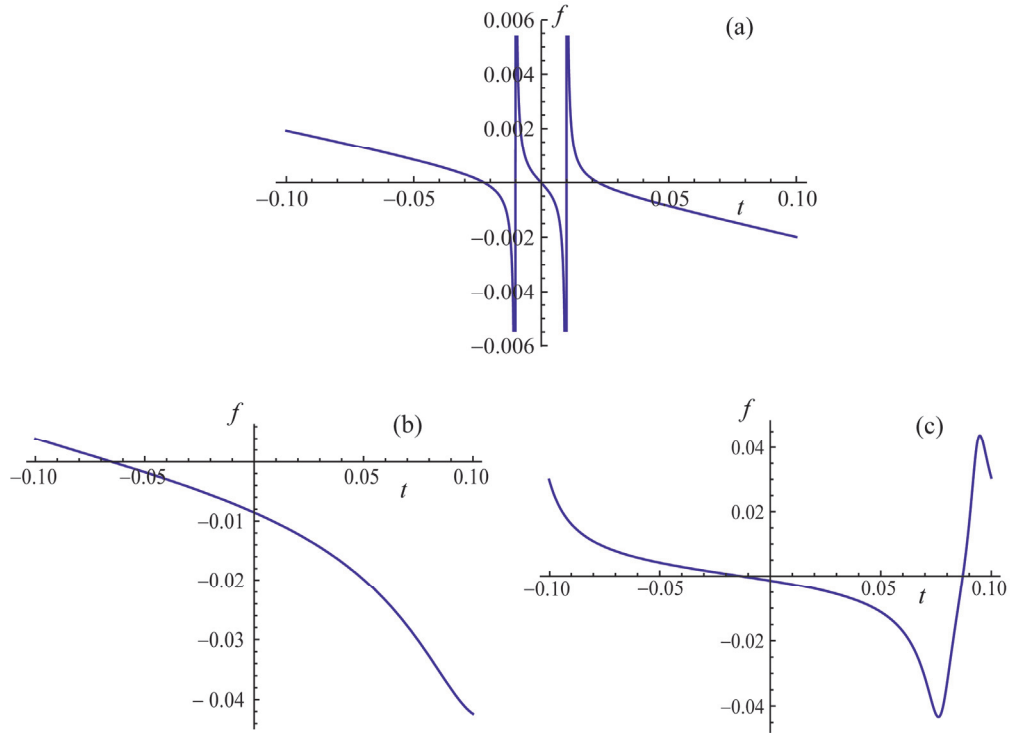


Рис.4. Дисперсионные зависимости $f = \Delta E / \Delta E_c$ от $t = k_x \lambda$, для состояний типа 2 асимметричной гетероструктуры на рис.1, соответствующая GaAs-Al_xGa_{1-x}As при $x = 0.3$ с параметрами $l = 1.63\lambda$, $d = 0.65\lambda$, $m_1^* = 0.067m_{0e}$, $m_2^* = 0.092m_{0e}$, $\lambda = (\pi^2 \hbar^2 / m^* \Delta E_c)^{1/2} = 6.13 \text{ nm}$, $m^* = (m_1^* + m_2^* / 2) = 0.079m_{0e}$ – разрыв зоны проводимости в гетеропереходе, в магнитном поле (a) $H_1 = 10^6 \text{ A/m}$, (b) $H_2 = 10^8 \text{ A/m}$ (c) $H_3 = 5 \cdot 10^8 \text{ A/m}$ когда $n = 2$.

Асимметрия энергетического спектра (30) может обуславливать также анизотропию процесса приобретения кинетического импульса со стороны электронной системы и формирование результирующего дрейфа носителей (электродвижущей силы) под воздействием изотропных возбуждений.

В рассматриваемых структурах функциональные зависимости дисперсионных кривых дырок $E_{Vn}(k_x)$ тоже должны проявлять немонотонное поведение в зависимости от H , однако из-за различия эффективных масс электронов и дырок экстремальные положения зависимостей $E_{cn}(k_x)$ и $E_{Vn}(k_x)$ смещаются друг относительно друга (имеет место трансформация прямозонной диаграммы в непрямозонную, вызванная факторами асимметрии).

ЛИТЕРАТУРА

1. В.В. Филиппов, А.А. Заворотный, Е.Н. Бормонтов. Конденсированные среды и межфазные границы, **13**, 363 (2011).
2. М.А. Ремнев, И.Ю. Катеев, В.Ф. Елесин. ФТП, **44**, 1068 (2010).
3. В.П. Драгунов, И.Г. Неизвестный, В.А. Гридчин. Основы наноэлектроники. Москва, Физматкнига, 2006.
4. H.S. Nikoghosyan, S.L. Harutyunyan, V.F. Manukyan, G.H. Nikoghosyan. Physica B, **575**, 411710 (2019).
5. H.S. Nikoghosyan, S.L. Harutyunyan, V.F. Manukyan, G.H. Nikoghosyan. Journal of Contemporary Physics, **54**, 345, (2019).
6. Ю.А. Артамонов, А.А. Горбацевич, Ю.В. Копаев. ЖЭТФ, **101**, 557 (1992).
7. А.А. Горбацевич. ЖЭТФ, **95**, 1467 (1989).
8. А.А. Горбацевич, В.В. Копаев, Ю.В. Копаев. Письма в ЖЭТФ, **57**, 565 (1993).
9. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Квантовая механика. Нерелятивистская теория, Москва, Наука, 1989.
10. А. Анималу. Квантовая теория кристаллических твердых тел. Москва, Мир, 1981.
11. В.Я. Демиховский, Г.А. Вугальтер. Физика квантовых низкоразмерных структур, Москва, Логос, 2000.
12. О.В. Кибис. Письма в ЖЭТФ, **66**, 551 (1997).

ԼԻՅՔԱԿԻՐՆԵՐԻ ՈՉ ՄՈՆՈՏՈՆ ԴԻՍՊԵՐՍԻԱՆ ԽԱՆՏՎԱԾ
ՀԱՄԱՉԱՓՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐՈՎ ՉԱՓԱՅԻՆ-ՔՎԱՆՏԱՅՎԱԾ
ՆԱՆՈԿԱՌՈՒՑՎԱԾՔՆԵՐՈՒՄ

Հ.Ս. ՆԻԿՈԴՈՍՅԱՆ, Ս.Լ. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ,
Վ.Ֆ. ՄԱՆՈՒԿՅԱՆ, Գ.Հ. ՆԻԿՈԴՈՍՅԱՆ

Դիտարկվում են լիցքակիրների շարժման և էներգիական սպեկտրի առանձնահատկությունները միաչափ անհամաչափ նանոհամակարգերում: Քվանտային հորերում լրացուցիչ անկամբ պոտենցիալային պրոֆիլով անհամաչափ կառուց-

վածքները հնարավորություն են ընձեռում փոփոխել չափային-քվանտացված մակարդակների դիրքերը: Իսկ արտաքին մագնիսական դաշտի լրացուցիչ ներգործությունը հանգեցնում է ոչ մոնոտոն դիսպերսիայի և լիցքակիրների տեղային լայնական դրեյֆի: Հիմնարար համաչափությունների նման խախտումները բերում են համապատասխան փոփոխությունների նաև էլեկտրոնային անցումների բնույթի մեջ: Կատարվում է անհամաչափ քվանտային պրոֆիլով նանոկառուցվածքի էլեկտրոնային համակարգի դինամիկական հատկությունների վերլուծություն՝ կախված արտաքին մագնիսական դաշտի լարվածությունից:

NONMONOTONIC CARRIER DISPERSION IN DIMENSIONALLY QUANTIZED NANOSTRUCTURES WITH BROKEN SYMMETRIES

H.S. NIKOGHOSYAN, S.L. HARUTYUNYAN,
V.F. MANUKYAN, G.H. NIKOGHOSYAN

The features of the energy spectrum and carrier motion in one-dimensional asymmetric semiconductor nanosystems are considered. Asymmetric structures with an additional dip in the potential profile in quantum wells make it possible to vary the positions of size-quantized levels. And the additional influence of an external magnetic field leads to non-monotonic dispersion and a transverse local carrier drift. Such violations of fundamental symmetries will entail corresponding changes in the nature of electronic transitions. The dynamic properties of the electronic system of the nanostructure with the asymmetry of the quantum profile are analyzed, depending on the strength of the external magnetic field.

О ЦЕННОСТНОМ МЕТОДЕ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ДОМИНИРУЮЩЕГО МЕХАНИЗМА НЕЛИНЕЙНОЙ МНОГОКОМПОНЕНТНОЙ ДИФФУЗИИ

Г.П. САРКИСЯН*

Институт химической физики им. А.Б. Налбандяна НАН Армении, Ереван, Армения

*e-mail: hrachya_sargsyan@mail.ru

(Поступила в редакцию 01 июня 2020 г.)

Работа посвящена проблеме анализа механизмов нелинейной многокомпонентной диффузии в сложных системах. Предложен новый способ определения стехиометрических коэффициентов элементарного акта сложного процесса диффузии, в рамках двухячеечной модели формально-кинетического описания кооперативной природы диффузионного скачка. Для выделения базового (доминирующего) механизма сложного диффузионного процесса предложен ценностный подход, заимствованный из методов функционального анализа. Рассмотрена задача ценностной оценки кинетической значимости отдельных стадий и компонентов и определения ценностного вклада каждой стадии и каждого компонента в общий процесс диффузионного переноса.

1. Введение

Физическая идея о квазихимическом представлении механизменного описания сложного процесса диффузии в твердых телах принадлежит Я. И. Френкелю. Он предложил вакансионный и межузельный механизмы диффузии и установил некоторые константы скорости на основе экспериментальных данных. В основу подхода заложено представление о кооперативном характере диффузионного скачка [1,2].

Автор работы [3] методом молекулярной динамики, без использования априорной информации, смоделировал атомный механизм самодиффузии в решетке с гранецентрированной структурой (на примере алюминия). На основании полученных данных установлено, что не подтверждается «скачковый» вакансионный механизм. Подтверждается кооперативный механизм элементарного акта диффузии, предложенный Хайтом и Клиngerом, основанный на предположении о возможности локального плавления вблизи вакансии. Исследованию динамических коллективных смещений атомов в металлах и их роль в вакансионном механизме диффузии посвящена работа [4]. Методом молекулярной динамики

были исследованы также процессы диффузии атома водорода в кристаллах [5,6]. В недавней работе этих авторов [7] представлено молекулярно-динамическое исследование миграции границ зерен наклона в Ni и Ni₃Al. В работе [8] авторы представили результаты исследования диффузии точечных дефектов в никеле, способом активационно-релаксационной кинетики. В работе о механизме диффузии атомов в конденсированных средах [9], с помощью метода молекулярной динамики проанализирован механизм элементарного акта диффузии в конденсированных средах на примере трехмерной решетки с потенциалом межатомного взаимодействия Леннарда-Джонса. Обнаружен температурный интервал, в котором происходит смена механизма передвижения атомов: от одиночных перескоков к сильно коррелированным кооперативным перемещениям многих атомов (string-like diffusion) в жидком и аморфном состояниях. Показано, что коллективное перемещение атомов связано с нелинейностью межатомного потенциала и проявляется при определенных соотношениях между потенциальными барьерами и температурой. Аналогичные явления должны проявляться в любой конденсированной системе.

В настоящее время многие разделы науки и техники требуют оптимального управления нестационарным массопереносом в химически – или адсорбционно-активных гетерогенных средах с изменяющимися в пространстве и времени составом и структурой. Такое управление немыслимо без знания механизма массопереноса в них низкомолекулярных веществ, без подбора адекватной модели диффузии, без расчёта её параметров и их погрешностей.

Обработка результатов диффузионных экспериментов – сложная и окончательно до сих пор не решённая задача. В первую очередь трудности связаны с тем, что закономерности диффузии описываются суммами рядов – громоздкими и плохо сходящимися. Более того, для многих реальных ситуаций исходные дифференциальные уравнения не могут быть выражены в элементарных функциях (например, последовательная диффузия в слоистой среде) или принципиально не имеют решения (например, диффузия + химическая реакция 2-го порядка).

2. Обобщенное формально-кинетическое описание нелинейной многокомпонентной диффузии

В ранних работах нами разработан новый, достаточно общий квазихимический подход описания нелинейной многокомпонентной диффузии, который основан на идее о кооперативном характере элементарного акта диффузии – скачка частицы из одного места в другое [10–13].

Формализация понятия механизм диффузии проведена с помощью математической схемы заимствованной из химической кинетики. Согласно такому подходу механизм диффузии задается в виде совокупности элементарных актов

диффузионного скачка частиц, каждый из которых записывается своим стехиометрическим уравнением. Число стадий и стехиометрия каждого элементарного акта зависит от физико-химических характеристик изучаемой системы [14].

Представим, что физическое пространство разбито на ячейки, с однородным химическим составом и опишем элементарные процессы переноса между ними. Пронумеруем эти ячейки римскими цифрами I и II и пометим все компоненты и величины, связанные с ними верхними индексами I и II соответственно. Списки компонентов ячеек отличаются только верхним индексом: $A_1^I, \dots, A_n^I, A_1^{II}, \dots, A_n^{II}$.

Механизм диффузии определяется как список элементарных переходов между ячейками, описываемые своими стехиометрическими уравнениями. Диффузия является своего рода реакций перескока на границе, для которых записывается стехиометрическое уравнение в следующей форме:

$$\sum_i \alpha_{ri}^I A_i^I + \sum_i \alpha_{ri}^{II} A_i^{II} \rightarrow \sum_i \beta_{ri}^I A_i^I + \sum_i \beta_{ri}^{II} A_i^{II}. \quad (1)$$

Коэффициенты $\alpha_{ri}^{I,II}$ и $\beta_{ri}^{I,II}$ являются неотрицательными. Обычно предполагают, что они являются целыми числами, но в специальных случаях необходимы и достаточны действительные числа. Элементарные акты (1) описывают диффузию и не включают химическое превращение компонент. Общее количество каждой компоненты совпадает с левой и с правой стороны (1):

$$\alpha_{ri}^I + \alpha_{ri}^{II} = \beta_{ri}^I + \beta_{ri}^{II}. \quad (2)$$

Каждый элементарный процесс (1) имеет два вектора потер $\alpha_r^{I,II}$ с координатами $\alpha_{ri}^{I,II}$ и два вектора на выходе $\beta_r^{I,II}$ с координатами $\beta_{ri}^{I,II}$, r – номер элементарного акта (стадии). Совокупность всех элементарных актов (перескок между соседними ячейками) составляет механизм диффузии для данной системы при заданных внутренних и внешних условиях. Вследствие сохранения количества частиц всех типов (2), стехиометрические векторы процессов для ячеек отличаются только знаком координат:

$$\gamma_r = \gamma_r^I = -\gamma_r^{II} = \beta_r^I - \alpha_r^I = -(\beta_r^{II} - \alpha_r^{II}). \quad (3)$$

Для скорости элементарного акта диффузии по механизму (1) в рамках закона действия масс (ЗДМ) записывается выражение:

$$w_r(c^I, c^{II}) = k_r \prod_i (c_i^I)^{\alpha_{ri}^I} \prod_i (c_i^{II})^{\alpha_{ri}^{II}}. \quad (4)$$

Например, для диффузии Фика мы имеем два элементарных процесса: $A_i^I \rightarrow A_i^{II}$ и $A_i^{II} \rightarrow A_i^I$. Соответствующие скорости реакции равняются $k_1 c_i^I$ и $k_2 c_i^{II}$.

Состав каждой ячейки можно представлять в виде вектора $N^{I,II}$.

Компоненты этого вектора $N_i^{I,II} = V^{I,II} c^{I,II}$ составляют количество веществ A_i в соответствующей ячейке. В рамках модели ячеечного перескока с участием ближайших соседей, уравнение кинетики будет иметь вид:

$$\frac{dN^I}{dt} = -\frac{dN^{II}}{dt} = \sum_J S^{I,J} \sum_r \gamma_r w_r(c^I, c^J), \quad (5)$$

где $S^{I,J}$ являются площадью границы между ячейками I и J . Суммирование осуществляется по всем взаимодействующим парам (I, J) .

Вектор потоков для компонента A_i , до первого порядка по l имеет вид:

$$\begin{aligned} J_{ri} &= -\gamma_{ri} [w_r(c(x), c(x+l)) - w_r(c(x+l), c(x))] \\ &= -d\gamma_{ri} \left(\prod_q c_q^{\alpha_{iq}^I + \alpha_{iq}^{II}} \right) \sum_j \frac{\alpha_{rj}^{II} - \alpha_{rj}^I}{c_j} \nabla c_j(x), \end{aligned} \quad (6)$$

где $d = \text{const}(=kl)$, l – размер элементарной ячейки.

По аналогии с законом Фика матрица коэффициентов диффузии по механизму (1), согласно выражению (6) имеет вид:

$$D_{rij}(c) = d \left(\prod_q c_q^{\alpha_{iq}^I + \alpha_{iq}^{II}} \right) \frac{\gamma_{ri} (\alpha_{rj}^{II} - \alpha_{rj}^I)}{c_j}. \quad (7)$$

Соответствующее уравнение диффузии имеет форму дивергенции:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \text{div}(D(c) \nabla c), \quad (8)$$

где c – вектор концентраций, D – матрица коэффициентов диффузии в виде (7).

Характер общности данного математического аппарата не позволяет точно установить роль отдельной стадии и отдельного компонента, даже в случае чисто диффузионных процессов (в отсутствие конвективного массопереноса и/или химических превращений).

3. Ценностный анализ многостадийной нелинейной многокомпонентной диффузии

Характер общности математического аппарата формально-кинетического описания нелинейной многокомпонентной диффузии не позволяет точно установить роль отдельной стадии и отдельного компонента в процессе диффузии. Необходима оценка ценности каждой стадии и ценности каждого компонента в сложном процессе диффузии. В пользу целесообразности такой постановки задачи говорят последние достижения в проблеме анализа сложных химических реакционных систем путем применения ценностного подхода, заимствованного из методов функционального анализа [15–17]. Задача ценностного анализа

сложного диффузионного процесса, это определение ценностного вклада каждой стадии и каждого компонента, для выделения доминирующего механизма диффузии; для целенаправленного воздействия на диффузионный перенос; для выявления и исследования аномальных явлений («восходящая диффузия», спинодальный распад и др.); для планирования диффузионно-лимитированного эксперимента.

Ценностный анализ сложного диффузионного процесса в рамках двухэтапного формализма позволит решить следующие ключевые вопросы:

1. индуктивно-дедуктивное определение доминирующего механизма нелинейной диффузии в сложных системах;
2. оценка кинетической значимости отдельных стадий и компонентов;
3. планирование диффузионного эксперимента;
4. неэмпирическое выявление оптимальной стехиометрии и структуры эффективного диффузианта;
5. целенаправленное воздействие на диффузионный процесс;
6. выявление и исследование «аномальных» процессов диффузии.

В ценностном подходе кинетическая значимость отдельных стадий определяется посредством ценностных величин. Характерная особенность этих величин заключается в том, что они нацелены на выявление влияния вариаций скоростей стадий, или же скоростей изменения состава компонентов в диффузионной зоне на величину выходного параметра сложного процесса диффузии. Варьированием скоростей стадий в большей степени выявляется системная связь между отдельными стадиями. Ценностное выявление значимости отдельной стадии учитывает взаимосвязь этой стадии с другими, как посредством значения константы скорости стадии, так и непосредственно с помощью концентраций компонентов, участвующих в стадии. Учитывая степень сложности решения пространственно-временной задачи, в данной работе мы рассмотрим проблему в рамках одноточечной модели. Эта модель предполагает независимость от пространственной координаты, однако, усреднение по пространственной координате, неявно – в виде усредненных коэффициентов, в себе содержит также и диффузионные проявления.

Внесем ценность отдельной стадии $G_r(t)$, как отношение отклика выбранной характерной динамической величины диффузионной системы в некий момент времени t на малое возмущение скорости r -ой стадии в начальный момент времени t_0 . При этом скорость стадии варьируется путем изменения начальных условий (концентрации компонентов, константы скорости элементарных актов и т. д.). В этом случае для ценности r -ой стадии $G_r(t)$ справедливо следующее выражение:

$$G_r(t) = \frac{\partial F[w_1(t), \dots, w_n(t)]}{\partial w_r} \Big|_{w_r = w_r(t_0)}, \quad (9)$$

где $w_r(t)$ – скорость r – ой стадии, $F(t)$ – динамический параметр, интегральное поведение которого характеризует выбранную величину диффузионного процесса, например, концентрацию компонентов в диффузионной зоне, критичность диффузионной системы и др.

Аналогично ценность компонента сложной системы $\psi_i(t)$ в пределах диффузионной зоны определяется как отклик выбранного параметра в момент времени t на малое возмущение скорости изменения концентрации компонента в момент времени t_0

$$\psi_i(t) = \frac{\partial F[f_1(t), \dots, f_n(t)]}{\partial f_i} \Big|_{f_i = f_i(t_0)}, \quad (10)$$

где $f_i(t) = dc_i/dt$ – скорость изменения концентрации i -го компонента.

Из (9) и (10) следует, что ценность r – ой стадии равна сумме произведений ценностей компонентов и отклика скорости изменения концентраций компонентов в диффузионной зоне на малое возмущение изменения скорости стадии:

$$G_r(t) = \sum_{i=1}^m \psi_i(t) \frac{\partial f_i}{\partial w_r}. \quad (11)$$

Определим ценностный вклад r – ой стадии сложного процесса диффузии следующим образом:

$$h_r(t) = G_r(t) \cdot w_r(t), \quad r = 1, 2, \dots, n. \quad (12)$$

При определении вклада отдельной стадии принимаем, что в ее кинетической значимости существенную роль играет ценность стадии.

Аналогичным образом определим ценностный вклад i – го компонента.

$$b_i(t) = \psi_i(t) \cdot f_i(t), \quad i = 1, 2, \dots, m. \quad (13)$$

Для расчета ценностных величин воспользуемся методикой определения ценностных величин путем нахождения сопряженных функций с помощью формализма гамильтоновой систематизации динамических систем.

Представим выбранное свойство или, иначе говоря, целевой функционал сложного процесса диффузии в интегральной форме:

$$I(t) = \int_{t_0}^t F(t) dt, \quad (14)$$

где $F(t)$ – соответствующий динамический параметр. Очевидно, что вклад

стадии зависит от того, какое свойство сложного процесса диффузии выбирается в качестве приоритетного. Если ставится цель выявить роль стадий в кинетике изменений концентрации i -го компонента, то целевой функционал представляется в виде:

$$I(t) = c_i(t) = \int_{t_0}^t f_i(t) dt. \quad (15)$$

Выявление вклада отдельных стадий в кинетике изменения концентраций нескольких компонентов будем осуществлять целевым функционалом вида:

$$I(t) = \sum_i c_i(t) = \sum_i \int_{t_0}^t f_i(t) dt. \quad (16)$$

Если в диффузионной системе число компонентов равно m то (10) запишется в виде:

$$\psi_i(t) = \frac{\partial F}{\partial f_i}, \quad i = 1, 2, \dots, m \quad (17)$$

или, в интегральной форме

$$F = \sum_{i=1}^m \psi_i f_i + \text{const}. \quad (18)$$

Обозначим

$$H = -F + \sum_{i=1}^m \psi_i f_i. \quad (19)$$

Сравнивая (18) и (19) получим $H = \text{const}$ и, соответственно,

$$\frac{dH}{dt} = \sum_i \left(\frac{\partial H}{\partial c_i} \frac{\partial c_i}{\partial t} + \frac{\partial H}{\partial \psi_i} \frac{\partial \psi_i}{\partial t} \right) = 0. \quad (20)$$

Согласно (19) систему кинетических уравнений (8) можно представить в виде:

$$\frac{dc_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \psi_i}, \quad i = 1, 2, \dots, m. \quad (21)$$

Тогда из (20) получается:

$$\frac{dH}{dt} = \sum_i \left(\frac{\partial H}{\partial c_i} + \frac{d\psi_i}{dt} \right) \frac{dc_i}{dt} = 0. \quad (22)$$

Условие (22) должно выполняться для любых концентраций c_i , откуда следует, что всегда имеет место:

$$\frac{d\psi_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial c_i}. \quad (23)$$

Таким образом, из выражений (19), (21) и (23) следует, что H представляет собой гамильтониан системы.

Ценности компонентов $\psi_i(t)$ определяются решением системы уравнений (23) совместно с кинетическими уравнениями (21). Необходимые для расчета ценностных величин начальные значения $\psi_i(t)$ определяются, учитывая выбранный параметр F в целевом функционале (14).

Преобразуем уравнение (19) к виду

$$F = -H + \sum_r^n G_r w_r = -H + \sum_r^n h_r = -H + \sum_i^m \psi_i f_i = -H + \sum_i^m b_i. \quad (24)$$

Из (24) следует, что уравнения (12) и (13) с точностью до постоянной величины характеризует относительный вклад отдельной стадии и компонента в выбранном параметре F диффузионной системы.

Процедура расчета ценностных величин сводится к следующим этапам:

1. запись целевого функционала сложного процесса диффузии (уравнение (14)) и соответствующего гамильтониана системы (уравнение (19)),
2. составление системы кинетических уравнений (8) и системы дифференциальных уравнений для функций $\psi_i(t)$ (ценностей компонентов), сопряженных концентрациям компонентов, согласно уравнению (23),
3. определение из целевого функционала (14) сопряженных функций $\psi_i(t_0)$ соответствующих компонентов для начального момента времени,
4. вычисление динамики величин $\psi_i(t)$ совместным решением системы кинетических уравнений (8) и дифференциальных уравнений сопряженных функций (23),
5. расчет временной зависимости ценностей и ценностных вкладов стадий и компонентов по уравнениям (11)–(13), соответственно.

4. Заключение

В представленной интерпретации ценностный подход является методом локального анализа. Вместе с тем, ценностной метод используется как аппарат нахождения оптимального протекания диффузии. Это одновременно позволяет вычислять ценностные вклады стадий и компонентов диффузионной системы, соответствующие оптимальному значению целевой функции. Причем, оптимальное значение целевой функции диффузионной системы может быть найдено в широком интервале изменений параметров диффузионной зоны.

Отметим также, что ценностный метод выявления значимости стадий и компонентов в сложном процессе диффузии дает определенные преимущества при анализе кинетических моделей многокомпонентной нелинейной диффузии, благодаря простоте расчетов и наглядности полученных результатов.

ЛИТЕРАТУРА

1. **J. Frenkel.** Zeitschrift für Physik, **26**, 117 (1924).
2. **J. Frenkel.** Zeitschrift für Physik, **35**, 652 (1925).
3. **В.Г. Чудинов.** Ж. технической физики, **70** (7), 133 (2000).
4. **Г.М. Полетаев, М.Д. Старостенков.** Физика твердого тела, **51** (4), 686 (2009).
5. **G.M. Poletaev, I.V. Zorya, D.V. Novoselova, M.D. Starostenkov.** International Journal of Materials Research, **108** (10), 785 (2017).
6. **Н.А. Кулабухова, Г.М. Полетаев, М.Д. Старостенков, В.В. Кулагина, А.И. Потекаев.** Известия вузов. Физика. **54** (12), 86 (2011).
7. **Г.М. Полетаев, И.В. Зоря, М.Д. Старостенков, Р.Ю. Ракитин, П.Я. Табаков.** ЖЭТФ, **155** (1), 96 (2019).
8. **S. Mahmoud, M. Trochet, O.A. Restrepo, N. Mousseau.** Acta Materialia, **144**, 679 (2018).
9. **В.В. Алексеенко.** Физика твердого тела, **50** (10), 1775 (2008).
10. **A.N. Gorban, H.P. Sargsyan, H.A. Wahab.** J. Math. Model. Nat. Phenom, **6** (5), 184 (2011).
11. **A.N. Gorban, H.P. Sargsyan, H.A. Wahab.** Armenian Journal of Physics, **12** (1), 45 (2019).
12. **H.P. Sargsyan.** Armenian Journal of Physics, **13** (1), 7 (2020).
13. **А.Н. Горбань, Г.П. Саркисян.** Кинетика и катализ, **27** (2), 527 (1986).
14. **H.P. Sargsyan, A.H. Sargsyan, A.M. Danielyan.** J. Contemp. Phys. (Armenian Ac. Sci.), **54**, 326 (2019).
15. **Л.С. Понтрягин, В.Г. Болтянский, Р.В. Гамкрелидзе.** Математическая теория оптимальных процессов. Ценность. Сопряженная функция. М.: Наука, 1983.
16. **Л.А. Тавадян, Г.А. Мартоян.** Анализ кинетических моделей химических реакционных систем. Ценностный подход. Ереван. Гитутюн, 2005.
17. **L.A. Tavadyan, G.A. Martoyan.** Analysis of Kinetic Models of Chemical Reaction Systems. Value Approach. New York. Nova Publishers Inc., 2014.

ON THE VALUE METHOD OF DETERMINING A DOMINANT MECHANISM OF NONLINEAR MULTICOMPONENT DIFFUSION

H.P. SARGSYAN

The work is devoted to the problem of analyzing the mechanisms of nonlinear multicomponent diffusion in complex systems. A new method is proposed for determining the stoichiometric coefficients of an elementary event of a complex diffusion process, in the framework of a two-cell model of the formal-kinetic description of the cooperative nature of the diffusion jump. To highlight the basic (dominant) mechanism of a complex diffusion process, a value approach is borrowed from functional analysis methods. The problem of the value assessment of the kinetic significance of the individual stages and components and the determination of the value contribution of each stage and each component to the general process of diffusion transfer are considered.

МИКРОВОЛНОВЫЙ СИНТЕЗ НАНОКОМПОЗИТА ZnO/Ag

А.А. САРГСЯН¹, В.В. БАГРАМЯН^{1*}, Н.Б. КНЯЗЯН¹,
Р.К. ОВСЕПЯН², Н.Р. АГАМАЛЯН², Г.Р. БАДАЛЯН²

¹Институт общей и неорганической химии им. М.Г. Манвеляна
НАН Армении, Ереван, Армения

²Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак, Армения

*e-mail: v_bagramyan@mail.ru

(Поступила в редакцию 24 июня 2020 г.)

Разработан микроволновый (МВ) метод получения нанокompозита ZnO/Ag с использованием методов химического осаждения и разложения термически нестабильных соединений. Химическое совместное осаждение является простым и эффективным методом в сравнении с другими методами получения нанокompозита ZnO/Ag. Определены характеристики синтезированного продукта методами дифференциально-термического анализа (ДТА), рентгенофазовым анализом (РФА) и сканирующей электронной микроскопией (СЭМ). Проведенные исследования показывают эффективность МВ обработки при получении нанокompозитов ZnO/Ag.

1. Введение

Оксид цинка (ZnO) – перспективный материал для применения во многих областях науки, техники и наиболее широко используется в качестве катализаторов и хемосорбентов [1,2], а также для создания устройств оптоэлектронной и сенсорной техники [3,4]. В последнее время внимание исследователей привлекают нанокompозиты на основе наночастиц оксида цинка, которые обладают важными функциональными свойствами: оптическими, механическими, полупроводниковыми, ферроэлектрическими, пьезоэлектрическими, пироэлектрическими и др.

Известны различные физические [5,6] и химические [7,8] методы получения ультрадисперсных частиц оксида цинка. Физические методы заключаются в интенсивном тепловом или силовом воздействии на исходный материал и требуют применения специального оборудования для поддержания высоких давлений и температур. К химическим относятся методы осаждения, микроэмульсионный, гидро- и сольвотермальный, золь-гель и термическое разложение.

Наночастицы металлов привлекли внимание ученых из-за их уникальных свойств, которые используются для разработки новых технологий в области

электроники, материаловедения и медицины [9–11]. В частности, наночастицы серебра (Ag) используются в качестве материала для батарей, оптических рецепторов, катализаторов в химических реакциях и антимикробных агентов. Одно из важнейших свойств серебра – его бактерицидная и противовирусная активность, которая существенно возрастает при использовании наночастиц вследствие резкого увеличения площади поверхности. При добавлении серебра антибактериальная активность ZnO может значительно возрасти. Композиты нового типа – неорганические антибактериальные материалы, содержащие Ag и ZnO, могут найти широкое применение.

Задачей современной химии и материаловедения является разработка новых методов получения материалов с целью снижения энергетических расходов и технологических процессов. Весьма перспективным методом является микроволновая (МВ) химия, которая открывает новые возможности в технологии синтеза [12–14]. МВ обработка – эффективный способ получения неорганических материалов благодаря равномерному и быстрому нагреву реакционной смеси по всему объему, контролю за временем процесса, а также условиям высокой чистоты процесса.

Целью настоящей работы является разработка МВ метода получения композитов ZnO/Ag с высокой дисперсностью для производства фотокатализаторов и компонентов полупроводниковых приборов, датчиков, УФ-фильтров, солнечных батарей и антибактериальных материалов.

2. Экспериментальная часть

Синтез композита ZnO/Ag осуществляли в бытовой микроволновой печи марки «CE1073AR» фирмы «Samsung», переделанной для проведения химических процессов, в открытой стеклянной колбе, снабженной обратным холодильником и мешалкой (рис.1). Условия синтеза: частота микроволн – 2.45 ГГц, мощность микроволновой печи – 100 Вт. На этапе синтеза композита ZnO/Ag химическим осаждением из водных растворов основной целью является получение порошка заданного химического и фазового состава и дисперсности. Для синтеза композита ZnO/Ag использовали AgNO_3 , $\text{Zn}(\text{NO}_3)_2$ и Na_2CO_3 марки «хч». Количества исходных растворов взяты с таким расчетом, чтобы обеспечить следующий состав в конечном продукте: ZnO – 96.73 и Ag – 3.27 масс%.

Осаждение проводили одновременным взаимодействием смеси растворов солей AgNO_3 (0.5 М), $\text{Zn}(\text{NO}_3)_2$ (0.5 М) и раствора осадителя Na_2CO_3 (2 М) при интенсивном перемешивании, поддерживая $pH = 10$. Реакции, протекающие в растворе, могут быть представлены уравнениями:

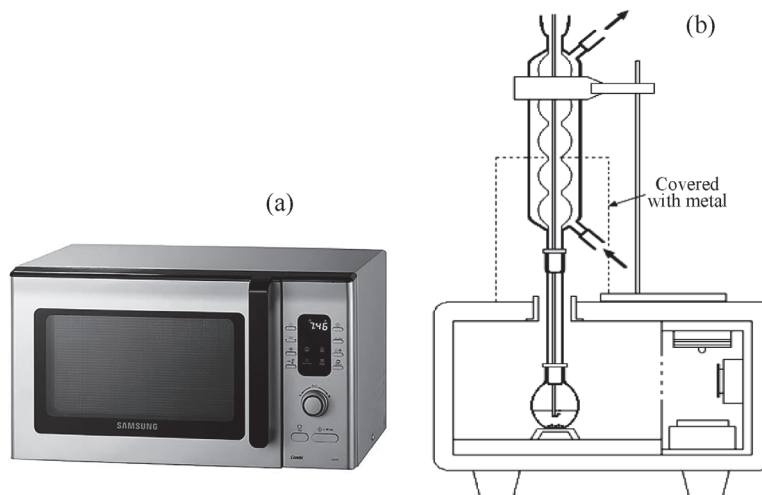
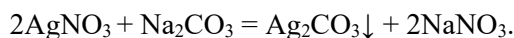
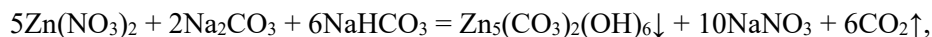
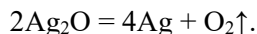
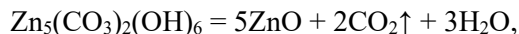


Рис.1. Бытовая микроволновая печь марки CE1073AR фирмы «Samsung», переделанная для проведения химических процессов.



Для получения гомогенной массы реакцию смесь выдерживали 10–15 мин. при непрерывном перемешивании в МВ печи при температуре 40–45°C, после чего осадок отфильтровывали с использованием воронки Бюхнера. Для полного протекания вышеуказанных реакций при МВ нагреве достаточно 10–15 минут, что 4–6 раза быстрее в сравнении с известными методами [15]. Образующийся рыхлый осадок светло-желтого цвета, обусловленного преобладающим количеством карбоната серебра, темнеет под действием света. Осадок тщательно отмывали от ионов Na^+ и NO_3^- горячей водой путем репульсации и высушивали при 80°C до установления стабильной массы. После сушки смесь солей-прекурсоров отжигали на воздухе при температуре 400°C в течение 3 час., в результате чего происходит разложение термически нестабильных солей Ag_2CO_3 и $\text{Zn}_5(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_6$ до оксида цинка и металлического серебра:



В результате получили смесь, состоящую из серебра и оксида цинка, которая представляет собой высокодисперсный светло-коричневый порошок без видимых включений.

Состав продуктов определяли физико-химическими методами анализа (весовым, спектроскопическим, фотокалориметрическим, пламенно-фотокалориметрическим). Рентгенофазовый анализ (РФА) образцов проводили

порошковым методом на дифрактометре URD-63 с излучением $\text{CuK}\alpha$, а дифференциально-термический анализ (ДТА) до температуры 1500°C – на дериватографе Q-1500 фирмы MOM. Структура поверхности образцов изучалась с помощью сканирующего электронного микроскопа (СЭМ) Vega TS-5130MM.

3. Результаты и их обсуждение

Получен наноккомпозит ZnO/Ag МВ методом. Соосажденная смесь $\text{Zn}_5(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_6$ и Ag_2CO_3 после термолиза представляет собой гомогенный порошок, состоящий из оксида цинка и серебра. Результаты термического анализа смеси карбонатов цинка и серебра представлены на рис.2. Так как в исследуемых образцах карбонат цинка является основной фазой, то следует ожидать, что он проявляет доминирующее влияние на характер кривых ДТА–ТГ термолиза.

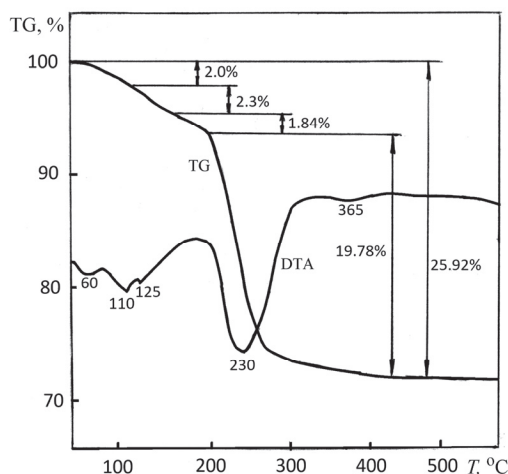


Рис.2. Кривые ДТА–ТГ соосажденных карбонатных солей $\text{Zn}_5(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_6$ и Ag_2CO_3 .

Кривые ДТА–ТГ полученных порошков, приведенные на рис.2, показывают пять эндотермических пиков вплоть до 450°C с общей потерей массы 25.92%. Эта потеря массы близка к теоретической (25.97%), рассчитанной для $\text{Zn}_5(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_6$ и Ag_2CO_3 . Слабые эндотермические пики при 60, 110 и 125°C с общей потерей массы 6.13% обусловлены дегидратацией воды и началом разложения $\text{Zn}_5(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_6$ и Ag_2CO_3 . Слабый эндопик при 365°C обусловлен термолизом Ag_2O на Ag [15]. Основной пик при 230°C с потерей массы 19.78% представляет собой совокупность тепловых эффектов термолиза солей серебра и цинка с образованием ZnO и Ag с выделением CO_2 и H_2O . Расчетные потери массы при термолизе составляют 6.14% и 19.78%, соответственно, что согласуется с потерями, выявленными на кривой ТГ.

Для подтверждения фазового состава смеси соосажденных солей и

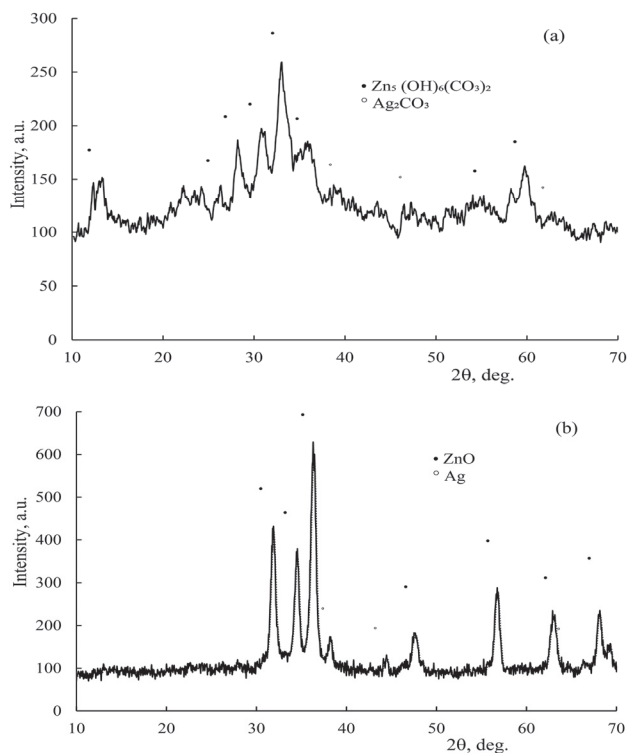


Рис.3. Рентгенограмма смеси соосажденных карбонатных солей $Zn_5(CO_3)_2(OH)_6$ и Ag_2CO_3 (а) до и (б) после термической обработки при $T = 400^\circ C$.

образующихся в результате термолиза металл–оксидных порошков был проведен рентгенофазовый анализ и исследования поверхности образцов. На рис.3 представлены рентгенограммы смеси соосажденных солей до и после термической обработки при $T = 400^\circ C$. Как показали результаты исследования, синтезированный нанокомпозит имеет состав $Zn_5(CO_3)_2(OH)_6$ и Ag_2CO_3 (рис.3а). По данным РФА, продуктом термического разложения $Zn_5(CO_3)_2(OH)_6$ и Ag_2CO_3 являются ультрадисперсные ZnO и Ag (рис.3б).

На рис.4 представлены СЭМ-микроструктура смеси после термической обработки соосажденных солей при $T = 400^\circ C$ (рис.4а) и СЭМ-микроструктура пленки, полученной вакуумным напылением из мишени, изготовленной из этого порошка (рис.4б).

СЭМ изображения показывают, что синтезированный нанокомпозит ZnO/Ag имеет агломерированную структуру, а частицы – сферическую форму с размерами менее 100 нм (рис.4а), в то время как в пленке частицы Ag (размеры 0.1–0.5 мкм) практически равномерно распределены в матрице ZnO (рис.4б). Присутствие более крупных частиц Ag (1.5–2 мкм) объясняется агрегацией частиц серебра в процессе термической обработки.

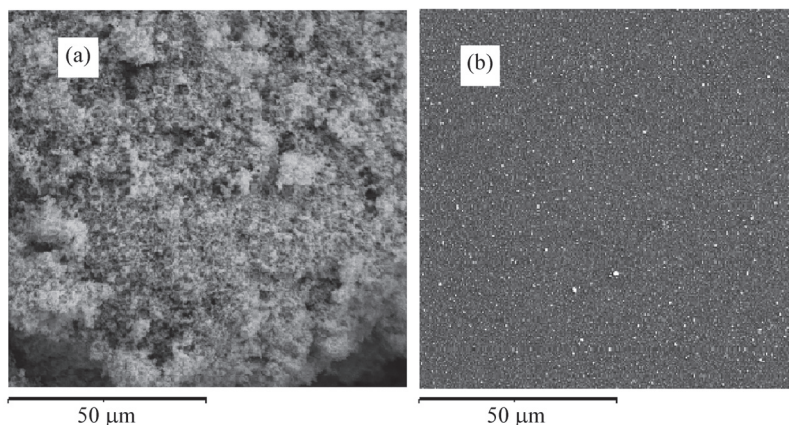


Рис.4. СЭМ микроструктура (а) смеси соосажденных солей после термической обработки при $T = 400^{\circ}\text{C}$ и (б) пленки, полученной вакуумным напылением из мишени, изготовленной из этого порошка.

4. Заключение

Проведенные исследования показали, что химическое совместное осаждение МВ методом является простым и эффективным в сравнении с другими методами получения нанокompозита ZnO/Ag. Согласно результатам, полученным с помощью СЭМ, восстановленный Ag прочно адсорбируется на поверхности наночастиц ZnO. Полученные экспериментальные данные процесса термического разложения карбонатов $\text{Zn}_5(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_6$ и Ag_2CO_3 на основании термогравиметрического анализа в интервале температур $50\text{--}600^{\circ}\text{C}$ показали, что реакции дегидратации и декарбонизации протекают в перекрывающемся температурном интервале $20\text{--}400^{\circ}\text{C}$.

Проведенные исследования показывают эффективность МВ обработки при получении нанокompозита ZnO/Ag.

ЛИТЕРАТУРА

1. Z. Liu, W. Hou, P. Pavaskar, M. Aykol, S.B. Cronin. Nano Letters, **11**, 1111 (2011).
2. A.J. Esswein, D.G. Nocera. Chem. Rev., **107**, 4022 (2007).
3. М.В. Евстафьева, А.Н. Редькин, Е.Е. Якимов. Нано- и Микросистемная техника, **18**, 729 (2016).
4. М.В. Рыжова, А.Н. Редькин, Е.Е. Якимов. Межд. научно-техн. конф. «Технологии микро- и наноэлектроники в микро- и наносистемной технике», Сб. материалов конференции, с.231 (2016).
5. Е.И. Бурылин, А.Г. Веселов, А.С. Джумалиев, О.А. Кирясова, Т.А. Пушкарёва, С.Л.Рябушкин. ЖТФ, **77(5)**, 130 (2007)..
6. Н.А. Шабанова. Химия и технология нанодисперсных оксидов, Москва, Академкнига, 2007.

7. V. Briois, C. Giorgetti. J. Sol–Gel Sci. Techn., **39**, 25 (2006).
8. A. Aimable, M.T. Buscaglia, V. Buscaglia, P. Bowen. J. European Ceramic Society, **30**, 591 (2010).
9. Y. Xia, Y. Xiong, B. Lim, S.E. Skrabalak. Angew. Chem. Int. Ed., **23**, 60 (2009).
10. Ր.Կ. Օվսեպյան, Ն.Ր. Ագամալյան, Է.Ա. Կաֆադարյան, Դ.Դ. Մնացականյան, Ա.Ա. Արաքելյան, Շ.Ի. Սեդրոսյան, Գ.Ր. Բադալյան. Изв. НАН Армении, Физика, **53**, 477 (2018).
11. C. Meng, L. Ying, J.-T. Han, J.-Y. Zhang, Z.-Y. Li, D.-L. Qian. J. Fudan University, **45**, 34 (2006).
12. E.T. Thostenson, T.W. Chou. Composites Part A: Applied Science and Manufacturing, **30**, 1055 (1999).
13. H. Brittany. Microwave Synthesis Chemistry at the Speed of Light. CEM Publishing, USA, 2002.
14. Դ.Լ. Քահանյան, Ի.Խ. Բիքբուլատով, Ն.Ս. Սլադկով, Շ.Ս. Շախմատով. Микроволновое излучение и интенсификация химических процессов, Химия, Москва, 2003.
15. H.C. Николаева, В.В. Иванов, А.А. Шубин. J. Siberian Federal University. Chemistry, **2**, 153 (2010).

ZnO/Ag ՆԱՆՈԿՈՄՊՈԶԻՏԻ ՄԻԿՐՈՍԱԼԻՔՍԻՆ ՄԻՆԹԵԶ

Ա.Ա. ՍԱՐԳՍՅԱՆ, Վ.Վ. ԲԱԳՐԱՄՅԱՆ, Ն.Բ. ԿՆՅԱԶՅԱՆ,
Ր.Կ. ՀՈՎՍԵՓՅԱՆ, Ն.Ր. ԱԴԱՄԱԼՅԱՆ, Գ.Ր. ԲԱԴԱԼՅԱՆ

ZnO/Ag նանոկոմպոզիտների ստացման համար մշակվել է միկրոսալիքային (ՄԱ) մեթոդ՝ օգտագործելով քիմիական նստեցման և ջերմանկայուն միացությունների քայքայման եղանակը: Քիմիական համատեղ նստեցումը պարզ և արդյունավետ մեթոդ է՝ համեմատած ZnO/Ag նանոկոմպոզիտների ստացման այլ մեթոդների հետ: Մինթեզված արտադրանքի բնութագրերը որոշվել են դիֆերենցիալ ջերմային վերլուծության (DTA), ռենտգենյան ֆազային վերլուծության (XRD) և սկան էլեկտրոնային մանրադիտակի (SEM) միջոցով: Ուսումնասիրությունները ցույց են տալիս ՄԱ մշակման արդյունավետությունը ZnO/Ag նանոկոմպոզիտների ստացման համար:

MICROWAVE SYNTHESIS OF ZnO/Ag NANOCOMPOSITE

A.A. SARGSYAN, V.V. BAGHRAMYAN, N.B. KNYAZYAN,
R.K. HOVSEPYAN, N.R. AGHAMALYAN, G.R. BADALYAN

A microwave (MW) method has been developed for the production of ZnO/Ag nanocomposites using chemical precipitation and decomposition of thermally unstable compounds. Chemical co-precipitation is a simple and effective method compared to other methods for producing ZnO/Ag nanocomposites. The characteristics of the synthesized product were determined by differential thermal analysis (DTA), X-ray phase analysis (XRD) and scanning electron microscopy (SEM). The studies show the effectiveness of MW processing for the preparation of ZnO/Ag nanocomposites.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПЛЕНОК ДИОКСИДА КРЕМНИЯ В КАЧЕСТВЕ АНТИОТРАЖАЮЩЕГО ПОКРЫТИЯ ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ОДНОФОТОННОГО ДЕТЕКТОРА

А.А. КУЗАНЯН*, С.И. ПЕТРОСЯН, А.С. КУЗАНЯН, Г.Р. БАДАЛЯН

Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак, Армения

*e-mail: astghik.kuzanyan@gmail.com

(Поступила в редакцию 15 апреля 2020 г.)

Антиотражающие слои являются важной частью чувствительных элементов высокоэффективных однофотонных детекторов. Методом электронно-лучевого напыления на подложках Al_2O_3 , AlN , Si и покрытиях CeB_6 , LaB_6 и W нами получены аморфные пленки диоксида кремния. Исследованы элементный состав, микроструктура и шероховатость поверхности, оптические характеристики образцов, полученных при различных условиях напыления. Показано, что двухслойные покрытия $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ и SiO_2/AlN могут обеспечить высокую эффективность детектирования при регистрации излучения в ближней ИК области, которое используется в телекоммуникационных системах и устройствах квантовой обработки информации.

1. Введение

Антиотражающие покрытия находят широкое применение в оптической промышленности, солнечной энергетике, микроэлектронике, производстве военной техники, телекоммуникационной промышленности, квантовых системах и устройствах. Одним из таких устройств являются однофотонные детекторы, которые используются в различных областях современной науки и техники: фотонике, астрофизике, лазерной спектроскопии, физике высоких энергий, квантовой криптографии, метрологии, медицинском приборостроении и так далее [1]. Важнейшими характеристиками однофотонного детектора являются скорость счета, энергетическое разрешение, эффективность детектирования, спектральный диапазон детектирования и рабочая температура [2,3]. В настоящее время рекордными характеристиками обладают сверхпроводящие нанопроволочные однофотонные детекторы (SNSPD – superconducting nanowire single photon detector) [4–6]. Исходя из результатов компьютерного моделирования можно утверждать, что конкурентом сверхпроводящим однофотонным детекторам в недалеком будущем станет термоэлектрический детектор (TSPD – thermoelectric

single-photon detector), концепцию которого предложили армянские и американские ученые в 2000 году [7,8]. Преимуществами TSPD являются простота конструкции чувствительного элемента и нежесткие требования к рабочим условиям.

В предыдущих работах мы рассмотрели в качестве материала термоэлектрического сенсора соединения CeB_6 , $(\text{La}, \text{Ce})\text{B}_6$ и FeSb_2 , а в качестве поглотителя и теплоотвода – W , Pb , Nb , YBCO . Однослойные и трехслойные чувствительные элементы TSPD из этих материалов обеспечивают высокое энергетическое разрешение и высокую скорость счета [9–14]. Для увеличения эффективности детектирования в качестве поглотителя был рассмотрен LaB_6 и была предложена четырехслойная конструкция чувствительного элемента TSPD [15–17]. Полученные результаты позволяют утверждать, что TSPD может обеспечить терагерцовую скорость счета, энергетическое разрешение не менее 1% и эффективность детектирования на уровне 90% в широком диапазоне электромагнитного спектра.

Для применения однофотонных детекторов в телекоммуникационных системах, устройствах квантовой обработки информации, использующих излучение ближней ИК области, требуется обеспечить эффективность детектирования выше 90%. Увеличить эффективность детектирования можно увеличением оптической связи излучения и чувствительного элемента детектора, что возможно с помощью антиотражающего слоя. В некоторых конструкциях сверхпроводящих детекторов ИК излучения в качестве антиотражающего слоя используется SiO_2 покрытие [18–20].

Тонкие пленки SiO_2 широко применяются в оптоэлектронике [21], полупроводниковых приборах [22], телекоммуникационных системах [23] и так далее. Пленки SiO_2 имеют низкий показатель преломления, низкое поглощение, низкое рассеяние и используются в качестве слоя с низким показателем преломления в оптических системах, таких как интерференционные фильтры, зеркала, и др. [24,25] а также для увеличения оптического пропускания и минимизации потерь энергии в солнечных коллекторах [26]. Пленки SiO_2 получают ионно-лучевым распылением (IBS) [27], напылением с помощью ионного пучка (IBAD) [28], молекулярно-лучевой эпитаксией (MBE) [29], магнетронным распылением (MS) [30], химическими методами (CVD, PECVD) [31] и реактивным импульсным лазерным напылением (RPLD) [32]. Этими методами синтезированы как аморфные, так и кристаллические пленки с различными оптическими характеристиками. Целью данной работы являлось изучение возможности создания многослойного чувствительного элемента TSPD с SiO_2 антиотражающим слоем. Пленки SiO_2 были нами получены при различных условиях на различных подложках и покрытиях методом электронно-лучевого напыления (EBPVD).

2. Эксперимент

Напыление пленок SiO_2 проводилось на вакуумной установке ВУ-1А, оснащенной электронной пушкой с энергией электронного пучка 6 кэВ. Вакуум в камере напыления перед началом процесса был на уровне 10^{-5} торр. Во всех процессах напыления использовались мишени из кристаллического кварца с 99.9% содержанием основного вещества. Пленки напылялись на подложки с площадью поверхности $10 \times 10 \text{ мм}^2$ из сапфира (Al_2O_3), кремния (Si) и нитрида алюминия (AlN) с шероховатостью (Ra) в пределах 2–5 нм, 4–10 нм и 19–25 нм соответственно. Температура подложек в процессе напыления составляла 290°C и контролировалась с помощью хромель-копелевой термопары. Пленки SiO_2 напылялись также на полученные ранее пленки вольфрама (W), гексаборидов лантана (LaB_6) и церия (CeB_6) с шероховатостью меньше 20 нм.

Толщина пленок и шероховатость образцов измерялась с помощью профилометра Ambios Technology XP-1. Вертикальное разрешение профилометра при перепаде измеряемых высот до 10 мкм составляло 0.1 нм. Толщина пленок определялась по пяти измерениям с последующим усреднением. Отклонение от среднего значения толщины пленок не превышало $\pm 5\%$.

Микроструктура поверхности и элементный состав образцов исследовались с помощью сканирующего электронного микроскопа (СЭМ) VEGA TS5130MM, оснащенного системой энергодисперсионного рентгеновского микроанализа INCA Energy 300. Оптические спектры отражения измерялись при комнатной температуре на спектрофотометре СФ-8 с приставкой зеркального отражения. Коэффициент отражения определялся с точностью 0.01 во всем диапазоне измерений 1–2 мкм.

3. Результаты и их обсуждение

В табл.1 приведены параметры процесса напыления пленок SiO_2 : ток эмиссии (I_E), ток катода (I_C), длительность процесса (t), расстояние мишень-подложка (d) и скорость напыления (V). Скорость напыления рассчитывалась по средней толщине пленок данного напыления.

Табл.1. Параметры напыления пленок SiO_2

№	I_E , мА	I_C , А	T , мин	d , см	V , нм/мин
SiO1	60	19	3	16	2133
SiO2	100	20	~1	64	250
SiO3	>100	24	~1	50	440

В держателе подложек располагались по 4 образца в 3 рядах. В результате каждого напыления получалось 12 образцов. Используемая маркировка образцов включает номер процесса напыления (SiO1-SiO3), номер образца в ряду держателя (a-d) и номер ряда (1–3). Пленки напылений SiO2 и SiO3 практически прозрачные, а пленки напыления SiO1 слегка матовые, все пленки имеют гладкую поверхность. Профиль поверхности пленок SiO₂, напыленных на подложку Al₂O₃ и многослойное покрытие W/CeB₆ приведен на рис.1. Сканирование проводилось на длине 500 мкм в центральной части поверхности образцов.

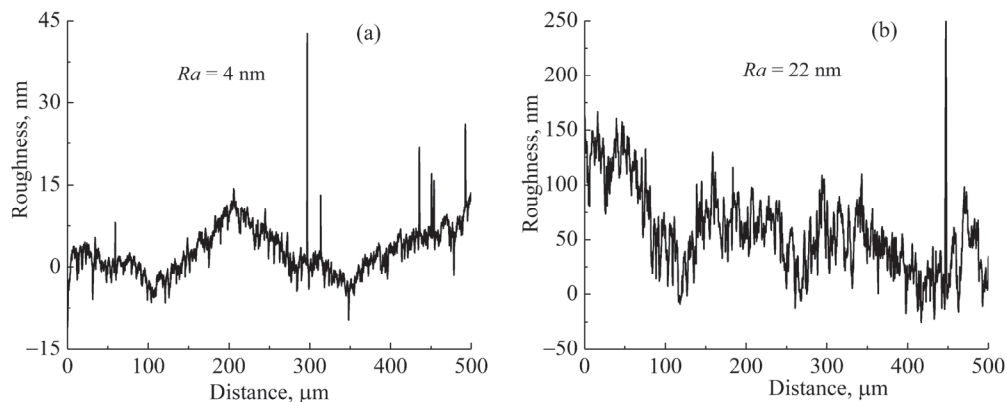


Рис.1. Шероховатость поверхности пленок: (a) SiO₂a3 на подложке Al₂O₃, (b) SiO₂c2 на покрытии W/CeB₆.

Сравним шероховатости представленных на рис.1 пленок. Поверхность пленки, напыленной на подложку Al₂O₃ более гладкая и имеет шероховатость 4 нм, а у пленки напыленной на многослойное покрытие W/CeB₆/Al₂O₃ шероховатость значительно больше – 22 нм. В обоих случаях шероховатость поверхности пленок SiO₂ обуславливается шероховатостью поверхности, на которую она напыляется.

Для изучения химического состава и микроструктуры поверхность образцов была покрыта тонким слоем алюминия. Состав пленок всех трех напылений практически не отличался от стехиометрического (максимальная статистическая ошибка измерения содержания Si и O составляла ± 0.21 ат % и ± 0.37 ат % соответственно). Неконтролируемые примеси не были обнаружены.

На микрофотографиях поверхности пленок нам не удалось увидеть гранулы даже при увеличении электронного микроскопа в 50 000 раз. Данный факт позволяет предположить, что нами получены аморфные пленки, что подтверждается отсутствием максимумов на рентгенограммах образцов всех трех напылений, которые свойственны кристаллическим образцам SiO₂. При меньшем увеличении в отдельных местах на гладкой поверхности некоторых пленок серии

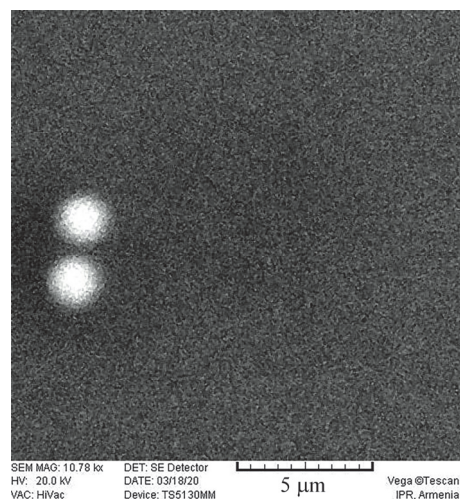


Рис.2. СЭМ изображения поверхности образца SiO_{1a2} на подложке Al_2O_3 , увеличение 10 000×.

$\text{SiO}1$ можно увидеть частицы сферической формы микронных размеров, что является результатом присутствия мелких капель расплава в испаренном электронным пучком веществе мишени. Очевидно, что процесс испарения мишени проходит довольно интенсивно при использованных условиях напыления. На рис.2 представлены СЭМ изображения поверхности образца $\text{SiO}1a2$ с описанными дефектами.

Табл.2. Толщина, шероховатость поверхности и коэффициент оптического отражения пленок SiO_2

№	Подложка	h , нм	Ra , нм	R	
				1310 нм	1550 нм
$\text{SiO}1a2$	Al_2O_3	6250	2.4	0.02	0.03
$\text{SiO}1c2$	$\text{W/CeB}_6/\text{Al}_2\text{O}_3$	4500	22.5	0.56	0.44
$\text{SiO}1d2$	$\text{W}/\text{Al}_2\text{O}_3$	6700	14.9	0.52	0.57
$\text{SiO}2d1$	$\text{LaB}_6/\text{CeB}_6/\text{Si}$	338	17.6	0.78	0.71
$\text{SiO}2c2$	$\text{W/CeB}_6/\text{Al}_2\text{O}_3$	212	22	0.57	0.57
$\text{SiO}2d2$	$\text{W}/\text{Al}_2\text{O}_3$	208	5	0.57	0.55
$\text{SiO}2a3$	Al_2O_3	219	4	0.04	0.02
$\text{SiO}2b3$	AlN	249	23	0.04	0.03
$\text{SiO}2d3$	Si	262	3.37	0.36	0.31
$\text{SiO}3c2$	$\text{W/CeB}_6/\text{Al}_2\text{O}_3$	223	7.9	0.56	0.66
$\text{SiO}3a3$	Al_2O_3	456	4	0.05	0.05

Для оценки возможности применения пленок SiO_2 в качестве антиотражающего покрытия нами изучены спектры оптического отражения образцов различной толщины и с различной шероховатостью. Результаты профилометрии и исследования оптического отражения полученных образцов обобщены в табл.2, где приведены номер образца, тип подложки или многослойной структуры, на которые напылялись пленки, толщина пленки (h), шероховатость поверхности пленки (Ra), коэффициент отражения (R) на длине волны 1310 нм и 1550 нм. Излучение этих длин волн наиболее часто используется в телекоммуникационных системах связи. Из данных таблицы следует, что толщины пленок одного и того же процесса напыления несколько отличаются, что является следствием угловой зависимости скорости массопереноса испаренного из мишени вещества. Эта особенность свойственна всем методам напыления фокусированным пучком с небольшой площади мишени. В то же время, значительно отличаются толщины пленок различных напылений. Толстые пленки (~ 6.5 мкм) получены в первом, более продолжительном напылении при наименьшем расстоянии мишень-подложка. Толщины пленок двух других напылений значительно меньше (~ 0.2 – 0.4 мкм).

Шероховатость пленок находится в пределах от минимальной 2.4 нм (SiO1a2 , подложка Al_2O_3) до максимальной 27 нм (SiO1c2 , покрытие W/CeB_6). Коэффициент отражения на длине волны 1310 нм изменяется от 0.02 (SiO1a2 , подложка Al_2O_3) до 0.78 (SiO2d1 , покрытие $\text{LaB}_6/\text{CeB}_6/\text{Si}$), а на длине волны 1550 нм – от 0.03 (SiO1a2 , подложка Al_2O_3 ; SiO2b3 , подложка AlN) до 0.71 (SiO2d1 , покрытие $\text{LaB}_6/\text{CeB}_6/\text{Si}$).

Коэффициент отражения пленок SiO_2 на подложке Al_2O_3 изменяется в небольших пределах 0.02–0.05 для пленок всех трех напылений со значительно разной толщиной и практически одинаковой шероховатостью (2.4–4 нм). Коэффициент отражения пленки на подложке AlN , при значительно большей шероховатости поверхности (23 нм), также мал – 0.04 ($\lambda=1310$ нм) и 0.03 ($\lambda=1550$ нм). Пленки SiO_2 , напыленные на W подслои (SiO1d2 , SiO2d2) или многослойное покрытие с W верхним слоем (SiO1c2 , SiO2c2 , SiO3c2), имеют намного больший коэффициент отражения (0.44–0.66) при изменении значений шероховатости в пределах 5–27 нм. В этих же пределах (0.44–0.66, $\lambda=1550$ нм) изменяется коэффициент отражения пленок SiO_2 на многослойном покрытии с CeB_6 верхним слоем, хотя на длине волны 1310 нм коэффициент отражения для пленок всех трех напылений (SiO1c2 , SiO2c2 , SiO3c2) практически одинаков. Максимальным отражением 0.78 и 0.71, на длинах волн 1310 нм и 1550 нм соответственно, обладает образец SiO2d1 , в котором пленка SiO_2 напылена на многослойное покрытие с LaB_6 верхним слоем.

Обобщая данные таблицы 2, можем утверждать, что величина коэффи-

циента отражения пленок SiO_2 на обеих рассмотренных длинах волн зависит от материала слоя, на который напылена пленка и не зависит от шероховатости поверхности пленки. Последнее не вызывает удивления, т.к. даже максимальная шероховатость поверхности образцов намного меньше длин волн излучения ближней ИК области.

Спектры отражения в интервале 1–2 мкм пленок SiO_2 на Al_2O_3 и AlN подложках трех напылений приведены на рис.3. Как видно из графиков, во всей области измерений отражение меньше 10%, а в спектральной области 1300–2000 нм отражение порядка 3%. Следовательно, в спектральной области 1300–1600 нм двухслойные покрытия $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ и SiO_2/AlN могут быть использованы в качестве антиотражающего покрытия.

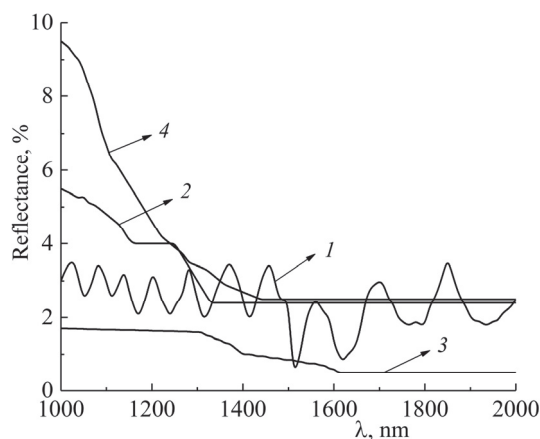


Рис.3. Спектры отражения пленок SiO_2 : 1 – SiO_2a_2 , 2 – SiO_2a_3 , 3 – SiO_2a_3 на подложке Al_2O_3 и 4 – SiO_2b_3 на подложке AlN .

4. Заключение

Электронно-лучевым методом на различных подложках и многослойных покрытиях получены пленки SiO_2 . Исследованы микроструктура и шероховатость поверхности, элементный состав и спектры оптического отражения. На основе исследования оптических характеристик образцов сделан вывод о том, что пленки SiO_2 уменьшают отражение в диапазоне 1300–1600 нм, но у пленок на покрытиях W , CeB_6 , LaB_6 коэффициент отражения выше 0.5, что не может обеспечить высокую эффективность детектирования. Коэффициент отражения менее 0.03, достигнут для пленок SiO_2 различной толщины и шероховатости на подложках Al_2O_3 и AlN . Таким образом можем предположить, что покрытие, состоящее из слоев AlN , Al_2O_3 и SiO_2 , может уменьшить коэффициент отражения в ИК диапазоне и использоваться в качестве антиотражающего слоя в чувствительном элементе TSPD для достижения высокой эффективности детектирования.

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

Исследование выполнено при финансовой поддержке Государственного комитета по науке МОН РА в рамках научного проекта № 18Т-2F134.

ЛИТЕРАТУРА

1. **C.J. Chunnillall, I.P. Degiovanni, S. Kuck, I. Muller, A. G. Sinclair.** Optical Engineering, **53(8)**, 081910 (2014).
2. **M.D. Eisaman, J. Fan, A. Migdall, S.V. Polyakov.** Review of Scientific Instruments, **82**, 071101 (2011).
3. **R.H. Hadfield.** Nature Photonics, **3**, 696 (2009).
4. **H. Zhang, L. Xiao, B. Luo, J. Guo, L. Zhang, J. Xie.** J. Phys. D: Appl. Phys., **53**, 013001 (2020).
5. **P.A. Hiskett, D. Rosenberg, C.G. Peterson, R.J. Hughes, S. Nam, A.E. Lita, A.J. Miller, J.E. Nordholt.** New J. Phys., **8**, 193 (2006).
6. **E. Knill, R. Laflamme, G. J. Milburn.** Nature, **409**, 46 (2001).
7. **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. Horwits, A.M. Gulian.** Proc. SPIE, San Diego, CA, **4140**, 459 (2000).
8. **D. Van Vechten, K. Wood, G. Fritz, J. Horwitz, A. Gyulamiryan, A. Kuzanyan, V. Vartanyan, A. Gulian.** Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. A, **444**, 42 (2000).
9. **V.A. Petrosyan.** J. Contemp. Phys. (Armenian Ac. Sci.), **46**, 125 (2011).
10. **A.A. Kuzanyan, V.R. Nikoghosyan, A.S. Kuzanyan.** J. Contemp. Phys. (Armenian Ac. Sci.), **52**, 249 (2017).
11. **A.A. Kuzanyan, V.R. Nikoghosyan, A.S. Kuzanyan.** Proc. SPIE, **10229**, 10229 (2017).
12. **A.A. Kuzanyan.** J. Contemp. Phys. (Armenian Ac. Sci.), **51**, 360 (2016).
13. **A.A. Kuzanyan, V.R. Nikoghosyan, A.S. Kuzanyan.** J. Contemp. Phys. (Armenian Ac. Sci.), **53**, 73 (2018).
14. **A.A. Kuzanyan, A.S. Kuzanyan, V.R. Nikoghosyan.** J. Contemp. Phys. (Armenian Ac. Sci.), **53**, 242 (2018).
15. **A.S. Kuzanyan, A.A. Kuzanyan, V.N. Gurin, M.P. Volkov, V.R. Nikoghosyan.** Semiconductors, **53(5)**, 682 (2019).
16. **A.A. Kuzanyan, A.S. Kuzanyan, V.R. Nikoghosyan.** J. Contemp. Phys. (Armenian Ac. Sci.), **54**, 175 (2019).
17. **A.A. Kuzanyan, V.R. Nikoghosyan, A.S. Kuzanyan.** IEEE Sensors, **20(6)**, 3040 (2020).
18. **W.J. Zhang, L.X. You, H. Li, J. Huang, C.L. Lv, L. Zhang, X.Y. Liu, J.J. Wu, Z. Wang, X.M. Xie.** Sci. China-Phys. Mech. Astron., **60**, 120314 (2017).
19. **I.E. Zadeh, J.W.N. Los, R.B.M. Gourgues, G. Bulgarini, S.M. Dobrovolskiy, V. Zwiller, S.N. Dorenbosz.** ArXiv:1801.06574v1 (2018).
20. **M. Caloz, M. Perrenoud, C. Autebert, B. Korzh, M. Weiss, C. Schönenberger, R.J. Warburton, H. Zbinden, F. Bussi eres.** Appl. Phys. Lett., **112**, 061103 (2018).
21. **S. Dzioba, R. Rousina.** J. Vac. Sci. Technol. B, **12**, 433 (1994).

22. **A.A. Volinsky, J.B. Vella, W.W. Gerberich.** Thin Solid Films, **429**, 201 (2003).
23. **J. Olivares, E. Wegmann, J. Capilla, E. Iborra, M. Clement, L. Vergara, R. Aigner.** IEEE Trans Ultrason Ferroelectr Freq Control, **57(1)**, 23 (2010).
24. **M. Mazur, D. Wojcieszak, J. Domaradzki, D. Kaczmarek, S. Song, F. Placido.** Electron Rev., **21(2)**, 233 (2013).
25. **J. Boudadena, P. Oelhafena, A. Schulerb, C. Roeckerb, J.-L. Scartezzinib.** Solar Energy Materials & Solar Cells, **89**, 209 (2005).
26. **H.K. Raut, A.S. Nair, S.S. Dinachali, V.A. Ganesh, T.M. Walsh, S. Ramakrishna.** Solar Energy Materials & Solar Cells, **111**, 9 (2013).
27. **E. Çetinörgü, B. Baloukas, O. Zabeida, J.O. Klemberg-Sapieha, L. Martinu.** Appl. Opt., **48(23)**, 4536 (2009).
28. **J.Z. Wang, Y.Q. Xiong, D.S. Wang, H.K. Liu.** Physics Procedia, **18**, 143 (2011).
29. **T. Harada, Y. Yamada, H. Uyama, T. Murata, H. Nozoye.** Thin Solid Films, **392(2)**, 191 (2001).
30. **W.-F. Wu, B.-S. Chiou.** Appl. Surf. Sci., **99(3)**, 237 (1996).
31. **W. Klug, R. Schneider, A. Zoller.** Proc. SPIE, **1323**, 88 (1990).
32. **N. Charnd, J.E. Johnson, J.W. Oscenbach, W.C. Liang, L.C. Feldman, W.T. Tsang, H.W. Krautter, M. Passlack, R. Hull, V. Swaminathan.** J. Cryst. Growth, **148**, 336 (1995).

THE USE OF SILICON DIOXIDE FILMS AS AN ANTIREFLECTION COATING FOR A THERMOELECTRIC SINGLE-PHOTON DETECTOR

A.A. KUZANYAN, S.I. PETROSYAN, A.S. KUZANYAN, G.R. BADALYAN

The anti-reflection layers are an important parts of high-performance single-photon detectors' sensitive elements. Amorphous silicon dioxide films are obtained by electron beam deposition method on Al₂O₃, AlN, Si substrates and CeB₆, LaB₆, W coatings. The elemental composition, microstructure and roughness of the surface as well as the optical characteristics of samples obtained under various deposition conditions are investigated. It is shown that SiO₂/Al₂O₃ and SiO₂/AlN two-layer coatings can provide high detection efficiency for detecting near infrared region radiation, that is used in telecommunication systems and quantum information processing devices.

ЧАСТОТНО-ВРЕМЕННОЙ АНАЛИЗ ЭЛЕКТРОКАРДИОГРАММ

Б.А. ОГАНИСЯН, Т.Н. ОГАНЕСЯН, А.О. МАКАРЯН*

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

*e-mail: armenm@ysu.am

(Поступила в редакцию 27 марта 2020 г.)

В настоящей работе предложена и выполнена статистическая обработка электрокардиограммы (спектральный и биспектральный анализ) с использованием метода «скользящего окна». Была разработана система записи и оцифровки электрокардиограммы, выходной сигнал которой подается на компьютер. Обработка сигнала осуществляется с помощью системы, выполненной в среде LabVIEW. Показано, что частотно-временной анализ с использованием метода «скользящего окна» позволяет обнаруживать динамические процессы в работе сердца человека, которые могут оставаться незамеченными при стандартных анализах. Результаты исследований могут быть полезны для диагностики заболеваний сердца.

1. Введение

Современная функциональная диагностика здоровья человека располагает самыми различными инструментальными методами исследования, некоторые из которых доступны только узкому кругу специалистов. Одним из самых распространенных и доступных методов исследований является электрография - регистрация биопотенциалов тканей и органов. Однако, более распространены конкретные названия соответствующих диагностических методов: электрокардиография (ЭКГ) – регистрация биопотенциалов, возникающих в сердечной мышце при ее возбуждении, электромиография (ЭМГ) – регистрация биоэлектрической активности мышц, электроэнцефалография (ЭЭГ) – регистрация биоэлектрической активности головного мозга и др. Снятие биопотенциалов непосредственно с органа – сердца, головного мозга и др. (инвазивный метод) в большинстве случаев связано с большими трудностями поэтому часто биопотенциалы снимаются электродами с других, соседних наружных тканей, на которых исследуемым органом наводятся электрические потенциалы (неинвазивный метод).

Основным методом исследования динамики развития сердечно-сосудистых заболеваний является электрокардиография [1,2], так как она является

неинвазивным методом и не причиняет особое беспокойство пациенту. Прямым результатом электрокардиографии является получение электрокардиограммы (ЭКГ сигнала) – графического представления разности потенциалов возникающих в результате работы сердца. На ЭКГ сигнал отражаются все действующие потенциалы, возникающие во время работы сердца.

После первых работ О. Уоллера [3,4] и В. Эйнтховена [4] еще в конце 19-го века по регистрации электрокардиосигнала, методика регистрации ЭКГ сигнала интенсивно совершенствовалась и, несмотря на более чем 100-летнюю историю применения в клинической практике, электрокардиография до сих пор остается востребованным методом диагностики сердечно-сосудистых заболеваний.

Одним из важных моментов этапа сбора данных о состоянии здоровья сердца является снятие и анализ электрокардиограммы [1,2,4]. Существует большая гамма приборов для регистрации ЭКГ сигнала. Часть из них способна также анализировать зарегистрированный сигнал ЭКГ. Следует отметить, что особенно эффективное использование медицинской аппаратуры на современном этапе стало возможно благодаря появлению быстродействующих микропроцессоров, поскольку приборы на их основе способны производить сложную математическую обработку данных и представить большой объем информации различной степени сложности в ясной и доступной для медицинского персонала форме, что является важным условием для быстрого принятия необходимых решений.

Используемые рабочие методы обработки и анализа электрокардиографической информации [5–10], несмотря на их исключительное разнообразие, не обеспечивают полного решения задачи [10]; более того, результаты, полученные различными методами, зачастую противоречат друг другу. Поэтому, для наиболее точного оценивания состояния сердца естественно искать альтернативные методы статистической обработки ЭКГ сигналов.

В последнее время наряду со спектральным анализом ЭКГ сигнала широко применяется также биспектральный анализ – двумерное преобразование Фурье корреляционных функций третьего порядка [5–7,11–13]. Обработка сигналов с использованием биспектрального анализа позволяет узнать о свойствах сигнала гораздо больше, чем применение энергетического спектра [7,12,13]. При биспектральном анализе сохраняется информация о фазовом спектре исходного сигнала и, следовательно, появляется возможность восстановления априорно неизвестной формы сигнала. Кроме того, биспектр мало чувствителен к аддитивной помехе с симметричным законом распределения плотности вероятности, а также к случайным смещениям обрабатываемого сигнала. Биспектр в отличие от энергетического спектра позволяет не только правильно описать характеристики наблюдаемого процесса, но и определить наличие фазовых связей спектральных

компонент, а также сохранить, а при необходимости и восстановить фазовые характеристики составляющей, содержащейся в наблюдаемом процессе.

Несмотря на вышесказанное, при обработке ЭКГ сигнала при его длительном наблюдении часто теряется информация о динамике процесса, которая могла бы способствовать для быстрой и точной диагностики состояния сердца. Поэтому, для выявления динамических особенностей в поведении сердца, в настоящей работе предложен и проведен частотно-временной анализ ЭКГ сигнала с применением кратковременного преобразования Фурье и биспектрального анализа.

2. Материалы и методы исследования

Для проведения частотно-временного анализа нами была собрана ЭКГ установка, блок схема которого изображена на Рис.1.

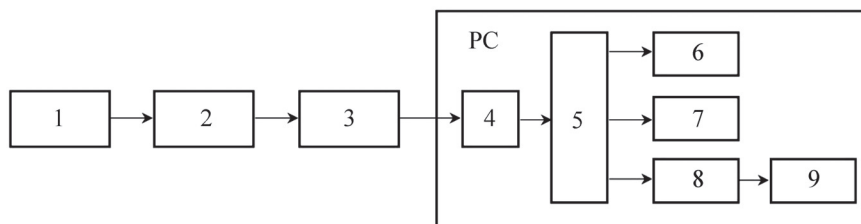


Рис.1. Блок схема ЭКГ установки: 1 – датчики (электроды), 2 – предварительный малошумящий усилитель, 3 – аналого-цифровой преобразователь, PC – компьютер, 4 – блок предварительной обработки сигнала, 5 – блок разделения сигнала на сегменты, 6 – анализатор спектра, 7 – биспектральный анализатор, 8 – измеритель ритма сердца, 9 – анализатор спектра ритма сердца.

В качестве датчиков 1 электрокардиосигналов нами использовались стандартные электроды для ЭКГ.

Сигнал, полученный от электродов усиливается с помощью малошумящего дифференциального усилителя 2 с коэффициентом усиления ~ 100 , и подается на вход аналого-цифрового преобразователя 3. Оцифрованный сигнал вводится в компьютер для последующей обработки. Обработка сигнала была произведена в среде LabVIEW.

С помощью блока предварительной обработки 4 снимается постоянная составляющая сигнала, после чего в блоке 5 выбирается нужная часть кардиосигнала определенной длительности для численного анализа. Выбранная часть сигнала параллельно обрабатывается анализатором спектра 6, биспектральным анализатором 7. Измеряется также ритм биений сердца с помощью блока 8 и снимается спектр ритма анализатором 9. Описанная схема статистической обработки позволяет обрабатывать данные ЭКГ, накопленные за любой промежуток

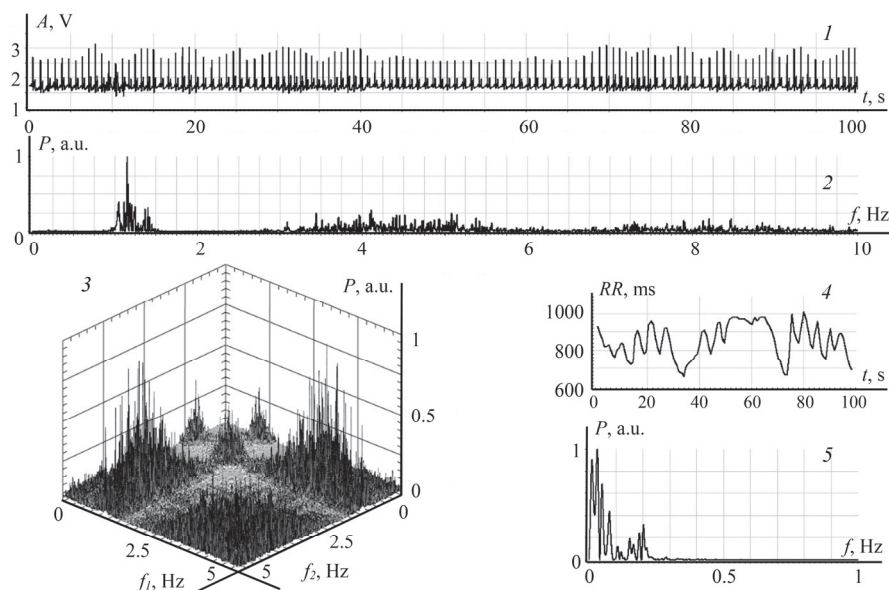


Рис.2. 1 – ЭКГ лежащего человека, записанный за 100 сек., 2 – энергетический спектр ЭКГ, 3 – биспектр ЭКГ, 4 – изменение ритма биения сердца, 5 – спектр изменения ритма.

времени- начиная от одного периода биения сердца до несколько часов. На Рис.2 приведены ЭКГ лежащего человека за 100 сек., его энергетический спектр, биспектр, изменение ритма биения сердца и спектр изменения ритма.

Из Рис.2. видно, что за период наблюдения происходит значительное изменение ритма биения сердца, однако, это практически не отражается на энергетическом спектре и на биспектре, т. к. при такой (длительной) обработке получаются усредненные значения спектра и биспектра, и теряется информация о динамике изменения параметров ЭКГ.

Для восстановления динамической картины, нами был использован метод скользящего окна (sliding window method) [14, 15]. Формируется временной интервал (окно) определенной длительности (в данном случае $\Delta T = 10$ сек.), и обрабатывается весь набор значений кардиосигнала в этом интервале. После обработки данного набора окно смещается по временной последовательности на один шаг ($\Delta t = 100$ мсек.) и обрабатывается новый набор значений кардиосигнала. Этот процесс повторяется до тех пор, пока скользящее окно не дойдет до конца наблюдаемого временного интервала (в нашем случае $T = 100$ сек.). При указанном выборе длительности скользящего окна ($\Delta T \gg 1/f$, где f – это частота биения сердца) в спектре ЭКГ отчетливо выделяются основная частота, гармоники и другие спектральные компоненты.

Результаты спектрального анализа ЭКГ сигнала с использованием метода скользящего окна можно представить в виде частотно-временной диаграммы (изменение спектра ЭКГ во времени).

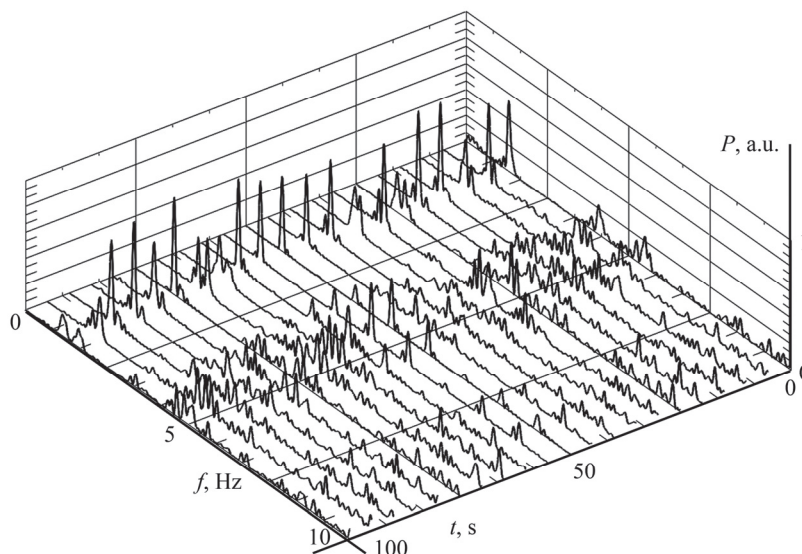


Рис.3. Частотно-временная диаграмма ЭКГ.

3. Результаты исследований, обсуждение и выводы

На Рис.3. представлена частотно-временная диаграмма, соответствующая ЭКГ сигнала, изображенного на Рис.2.

На Рис. 3. отчетливо видно, что сердцебиение лежащего человека не происходит монотонно. Выделяются основная частота биения сердца и ее гармоники. Однако энергетический спектр ЭКГ вокруг основной частоты периодически меняется (в частности, при $t \approx 30$ сек. и при $t \approx 65$ сек.), и наблюдаются два, а временами три или даже четыре горба. Соответственно сильно меняется спектр вокруг гармоник основной частоты, а также биспектр ЭКГ.

На Рис.4 представлены ЭКГ и результаты обработки кардиосигнала в интервале скользящего окна ($\Delta T=10$ сек.) в разные моменты времени.

Анализ ЭКГ сигнала с использованием метода скользящего окна четко выявляет кратковременные изменения характера биения сердца. Так, например, в течение времени от 45 до 60 сек. сердцебиение относительно ровное (см. на ЭКГ и на ритм сердца на Рис.2), и на энергетическом спектре ЭКГ четко выделяются его основная частота, третья и четвертая гармоники (Рис.4а). В тех отрезках времени, где ритм сердца меняется заметно, основная частота биения в спектре ЭКГ раздваивается – появляются две отчетливо выделенные частоты (Рис.4б). Сильно меняется также спектр вокруг гармоник основной частоты. Во время работы сердца могут заметно меняться как ритм биений, так и амплитуда кардиосигнала (см. Рис.2). Однако, как видно на частотно-временной диаграмме (Рис.3.), на форму спектра вокруг основной частоты в основном влияет характер

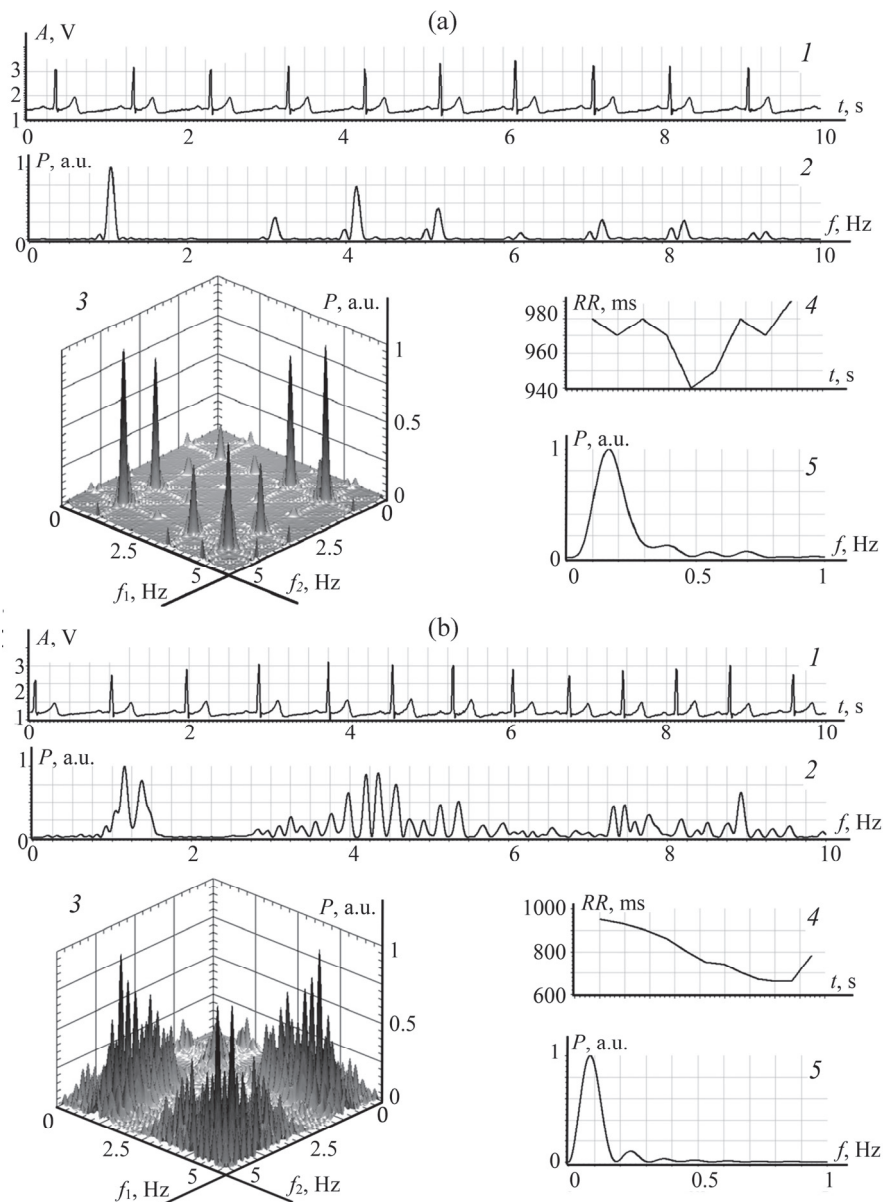


Рис.4. 1 – ЭКГ, 2 – энергетический спектр ЭКГ, 3 – биспектр ЭКГ, 4 – ритм сердца, 5 – спектр ритма: (а) при $t = 55$ сек., (б) при $t = 66$ сек.

изменения ритма биений сердца, а изменение амплитуды ЭКГ заметно влияет на форму спектра только в области гармоник основной частоты.

Отметим, что кроме ЭКГ, представленной на Рис.2, нами было исследовано еще множество различных кардиограмм. Результаты этих исследований указывают на то, что статистический анализ ЭКГ сигнала с использованием метода скользящего окна может выявлять такие характерные особенности работы сердца, которые не заметны при анализе кардиосигнала стандартными методами.

Мы предполагаем, что исследование кардиограмм пациентов с различными патологиями сердца с использованием метода скользящего окна поможет найти корреляцию между патологией и результатами анализов, которая в свою очередь может способствовать выявлению патологии при установлении диагноза.

ЛИТЕРАТУРА

1. **R. McCraty.** Exploring the Role of the Heart in Human Performance, Volume 2, HeartMath Research Center, 2015, p.118.
2. **А.А. Кузнецов.** Биофизика Сердца, Владимир, изд ВлГУ, 2012, с.237.
3. **A.D. Waller.** The Journal of physiology, 8(5), 229 (1887).
4. **G.E. Burch, N.P. DePasquale.** A history of electrocardiography, Norman Publishing, 1990.
5. **S.K. Berkaya et al.** Biomedical Signal Processing and Control, **43**, 216 (2018).
6. **L. Sornmo, P. Laguna.** Electrocardiogram (ECG) Signal Processing, Wiley Encyclopedia of Biomedical Engineering, 2006.
7. **C.K. Chua, V. Chandran, R. Acharya, L.C. Min.** Medical Engineering and Physics, **32**(7), 679 (2010).
8. **J. Wang, P. Wang, S. Wang,** Biomedical Signal Processing and Control, **55**, 1 (2020).
9. **D.N. Ghista et al.** Journal of Medical Systems, **34**, 445 (2010).
10. **J. Moeyersons, E. Smets, J. Morales, et al.** Computer Methods and Programs in Biomedicine, **182**, 105050 (2019).
11. **R.S.H. Istepanian, L.J. Hadjileontiadis, S.M. Panas.** IEEE Transactions on Information Technology in Biomedicine, **5**(2), 108 (2001).
12. **А.А. Зеленский, В.Ф. Кравченко, В.В. Павликов, А.В. Тоцкий.** Физические основы приборостроения, **2**(3), 4 (2013).
13. **A.P. Petropulu.** Higher-Order Spectral Analysis, CRC Press LLC, 2000.
14. **J.H. Chang, W.S. Lee.** Journal of Information Science, **31**, 76 (2005).
15. **А.В. Тоцкий.** Системы обработки информации, **3**, 108 (2009).

FREQUENCY-TEMPORAL ANALYSIS OF ELECTROCARDIOGRAMS

B.A. HOVHANNISYAN, T.N. HOVHANNESYAN, A.H. MAKARYAN

Statistical processing of electrocardiogram (spectral and bispectral analysis) using the "sliding window" method was proposed and performed in this work. An electrocardiogram recording and digitizing hardware system has been developed. The output data of this hardware is fed to the computer. Signal processing is done using a system executed in the LabVIEW environment. It is shown that frequency-temporal analyzes using the "sliding window" method allow the detection of dynamic processes in the workings of the human heart that may be unnoticed in standard analyzes. The results of these studies may be useful in the diagnosis of heart disease.

ИЗУЧЕНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ЭФФЕКТА ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИЯ ИНТЕНСИВНОСТИ ПРИ ВОЗБУЖДЕНИИ АКУСТИЧЕСКИХ ВОЛН В КРИСТАЛЛАХ КВАРЦА Х-СРЕЗА С ПОМОЩЬЮ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

А.Е. БЛАГОВ^{3,4}, В.Р. КОЧАРЯН^{1,2*}, А.Е. МОВСИСЯН¹, Т.Р. МУРАДЯН¹,
А.В. ТАРГОНСКИЙ^{3,4}, Я.А. ЭЛИОВИЧ^{3,4}, Ю.В. ПИСАРЕВСКИЙ^{3,4},
А.Ю. СЕРЕГИН^{3,4}, В.А. КОРЖОВ^{3,4}, М.В. КОВАЛЬЧУК^{3,4}

¹Институт прикладных проблем физики НАН Армении, Ереван, Армения

²Национальный исследовательский Томский политехнический
университет, Томск, Россия

³Институт кристаллографии имени А. В. Шубникова РАН, Москва, Россия

⁴Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

*e-mail: vahan2@yandex.ru

(Поступила в редакцию 11 июня 2020 г.)

На станции РКФМ НИЦ «Курчатовский институт» проведены исследования особенностей эффекта перераспределения интенсивности дифрагированного синхротронного пучка в кристаллах кварца Х-среза в условиях возбуждения резонансных ультразвуковых колебаний. Получены зависимости интенсивности дифрагированного рентгеновского пучка от напряжения сигнала резонансной частоты, показано, что результаты согласуются с данными полученными ранее в лабораторных условиях. Также впервые получены и исследованы временные характеристики наблюдаемого эффекта перераспределения интенсивности.

1. Введение

Рентгеновское излучение позволяет проводить уникальные исследования в области наноструктурной диагностики с атомарным и субатомарным разрешением, при этом наибольший интерес представляет применение рентгеновского излучения для анализа динамики различных наномасштабных процессов. Для решения этой задачи происходит одновременное развитие трех ключевых направлений методологии современных рентгеновских экспериментов: строятся новые источники излучения, включая синхротроны четвертого поколения и лазеры на свободных электронах, производится детектирующая аппаратура, в том числе быстрые двухкоординатные детекторы, а также создается особая рентгеновская оптика, позволяющая проводить быструю перестройку параметров рентге-

новского или синхротронного пучка. Последнее направление обладает рядом преимуществ, включая масштабируемость – возможность установки на практически любом источнике, от лабораторного дифрактометра до современной синхротронной станции, а также адаптивность – возможность вариации параметров непосредственно во время проведения экспериментов, что является ключевым преимуществом при проведении экспериментов по изучению динамики различных процессов.

В рамках данного направления на текущий момент существует достаточно большое количество работ, предлагающих различные способы управления параметрами рентгеновского пучка с помощью особых элементов рентгеновской оптики [1–2]. Среди прочих стоит отметить работы научной группы из ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, которые посвящены разработке адаптивных элементов рентгеновской оптики на основе продольных и изгибных акустических колебаний [3–7], позволяющих проводить управление угловым положением рентгеновского пучка и осуществлять спектральную перестройку [8–9]. Другая научная группа из ИППФ НАН Армении давно и успешно занимается разработкой элементов, позволяющих модулировать интенсивность рентгеновского пучка с помощью поперечных акустических колебаний. В их ключевых работах [10–17] было проведено детальное изучение эффекта перераспределения интенсивности дифрагированного рентгеновского пучка кварцевым резонатором при присутствии объемных акустических волн. Было показано, что с помощью внешних акустических полей можно управлять формой и параметрами (как в пространстве, так и во времени) дифрагированного рентгеновского пучка. Например, в работе [10] было впервые обнаружено явление полной переброски рентгеновских лучей от направления прохождения к направлению отражения в монокристаллах кварца в геометрии Лауэ под влиянием ультразвуковых колебаний. В работах [11,12] экспериментально и теоретически показано, что с помощью акустического поля можно контролировать местоположение фокуса отраженного рентгеновского излучения, а также преобразовывать сферическую волну в плоскую. В работах [13,14] экспериментально показано, что возбуждение объемных акустических волн в монокристалле кварца с АТ-срезом приводит к пространственной модуляции дифрагированных пучков, у них во фронтальном сечении возникают полосы интенсивности, а их число зависит от порядка гармоники возбуждения акустического поля. В работе [15] осуществилась двойная модуляция рентгеновского излучения ультразвуковым колебанием, который в свою очередь, модулирован низкочастотным акустическим колебанием.

В работе [16] рассматривалась возможность расщепления изначального синхротронного пучка на многочисленные монохроматические пучки. Изучалась возможность применения пространственной и временной модуляции

синхротронного излучения аналогично методике, развитой в работах [10–15] для лабораторного излучения. Первые эксперименты, направленные на изучение такой возможности, проводились на кольцевом ускорителе ЕрФИ АРУС [16]. Была впервые показана возможность экспериментальной модуляции синхротронного излучения для различных резонаторов кварца. Также в данной работе впервые была показана возможность модуляции дифрагированного пучка с одновременным использованием двух управляющих частот – резонансный сигнал приводил к перераспределению интенсивности, а низкочастотный сигнал с частотой 1 или 2 кГц использовался для вторичной модуляции интенсивности отраженного от уже возбужденного кристалла рентгеновского пучка.

В одной из недавних работ [17] в лабораторных условиях были проведены экспериментальные и теоретические исследования структуры распределения интенсивности рентгеновского пучка при реализации эффекта перераспределения интенсивности из проходящего рентгеновского пучка в дифрагированный рентгеновский пучок в аналогичных кварцевых резонаторах. В данной работе с помощью численных расчетов были получены трехмерные картины распределения деформаций, которые показали, что распределение напряжений в резонаторе имеет слоистую структуру, причем «слои» параллельны плоскостям кристалла-резонатора. Также в результатах расчетов наблюдается сложная структура локальных максимумов, которая хорошо согласуется с результатами измерений с помощью метода рентгеновской топографии. Также было показано, что количество локальных максимумов зависит от частоты колебаний и возрастает вместе с ней.

Интерес представляет проведение аналогичных экспериментов на современной синхротронной станции, где интенсивность исследовательского пучка существенно выше, а также определение характерных времен наблюдаемых эффектов с использованием современных времяразрешающих методик. Соответствующие результаты приведены в данной работе.

2. Описание образцов. Методика проведения экспериментов

Эксперименты проводились на экспериментальной станции РКФМ Курчатовского источника синхротронного излучения (КИСИ). Использовалась базовая конфигурация оптической схемы станции (рис.1).

В данной конфигурации станция оснащена двухкристальным монохроматором фирмы FMB Oxford с возможностью точной подстройки углового положения второго кристалла-монохроматора. Монохроматор оснащен двумя парами кристаллов кремния симметричных срезов (111) и (311).

Регистрация интенсивности осуществляется путем регистрации TTL-импульсов со сцинтилляционного детектора с помощью многоканального

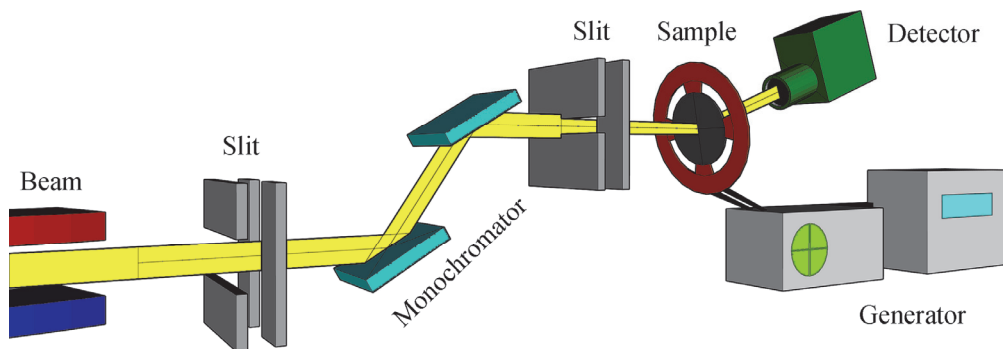


Рис.1. Экспериментальная схема, реализованная на станции РКФМ.

анализатора ORTEC Easy MCS, который синхронизируется по фазе с подаваемым управляющим сигналом с генератора Rigol DG4062 и распределяет интенсивность по каналам, длительность которых ограничена 100 нс.

В качестве образца был установлен кристалл-резонатор кварца толщиной 0.5 мм, резонансная частота которого составляет порядка 5 МГц. На боковые поверхности резонатора методом магнетронного напыления наносились токопроводящие электроды. Фотография образца и его АЧХ, измеренная с помощью анализатора спектров RIGOL DSA1030TG, представлены на рис.2.

Реальное значение резонансной частоты определялось методом корректирующего подбора частоты подаваемого сигнала на генераторе сигналов с помощью непрерывного мониторинга интенсивности рентгеновского пучка. Итоговое значение резонансной частоты составило 5.269973 МГц.

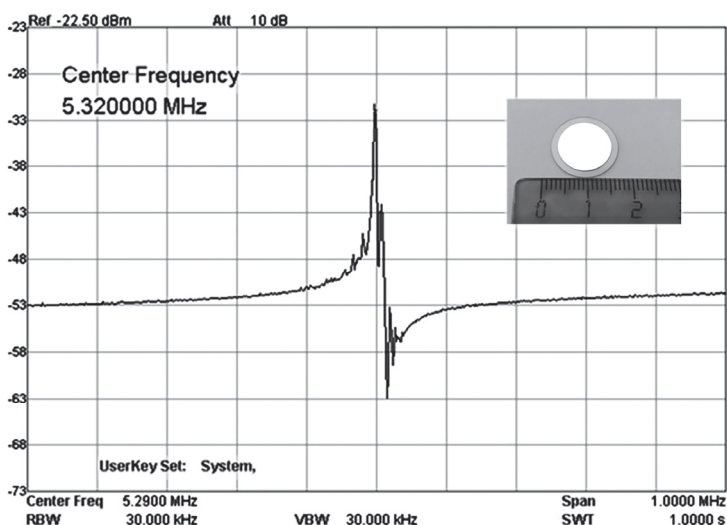


Рис.2. Фотография и АЧХ резонатора, используемого для проведения экспериментов.

После проведения предварительной юстировки экспериментальной схемы и выбор оптимальной точки поверхности кристалла была зарегистрирована зависимость формы и пика КДО (кривой дифракционного отражения) для различных значений амплитуды подаваемого сигнала. При этом фактическое напряжение на кристалле измерялось с помощью осциллографа, т.к. используемый усилитель не позволял выбрать фиксированный коэффициент усиления. Полученные результаты представлены на рис.3, где для каждой из полученных КДО указано напряжение на кристалле, измеренное с помощью осциллографа в данной точке.

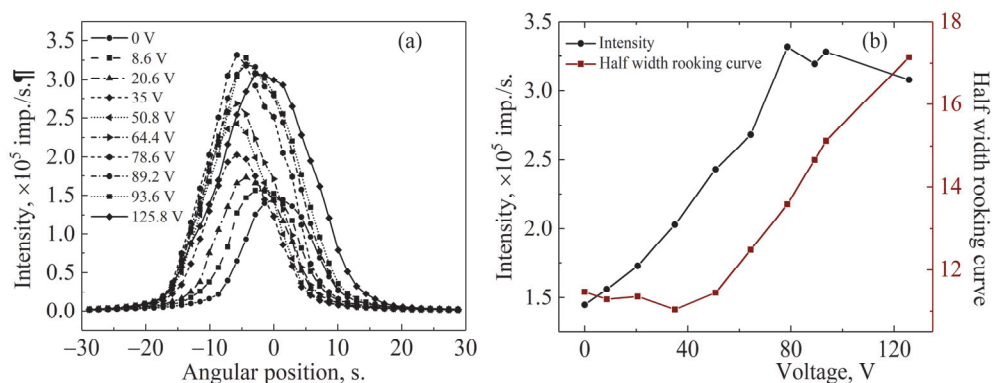


Рис.3. Зависимость формы и интенсивности пика КДО от напряжения сигнала резонансной частоты (0–125 В).

Хорошо видно, что при увеличении напряжения сначала происходит рост интенсивности пика до значений напряжения порядка 80 В, а затем кривая существенно уширяется и интенсивность пика снижается. При этом при напряжении сигнала в 80 В интенсивность дифрагированного пучка увеличивается более чем в 2 раза. Данные результаты хорошо согласуются с теоретической моделью [11–12], а также с результатами, полученными ранее при проведении аналогичных экспериментов на лабораторном дифрактометре ТРС [17].

Также крайне интересной задачей является определение временных характеристик наблюдаемого эффекта перераспределения интенсивности. Определение характерного времени установления колебаний может помочь изучить физику процесса возникновения колебаний в резонаторах, а также оценить их реальное быстродействие при использовании в качестве адаптивных элементов для быстрого управления параметрами рентгеновского пучка.

Исследование временных характеристик осуществлялось с помощью многоканального анализатора спектров Ortec EASY MCS, позволяющего разбивать анализируемый массив данных на 65536 каналов с минимальной длительностью канала в 100 нс. Эксперименты проводились следующим образом. С

помощью генератора сигналов на образец подавался резонансный сигнал, который повторялся определенное число циклов колебаний. При этом момент подачи сигнала синхронизировался по времени с блоком многоканального анализатора, что позволило накапливать статистику любое наперед заданное число раз. На рис. 4 представлен результат исследования временных характеристик эффекта, полученный при накоплении данных в многоканальном анализаторе за 25000 циклов при 10000 периодах колебаний самого резонатора.

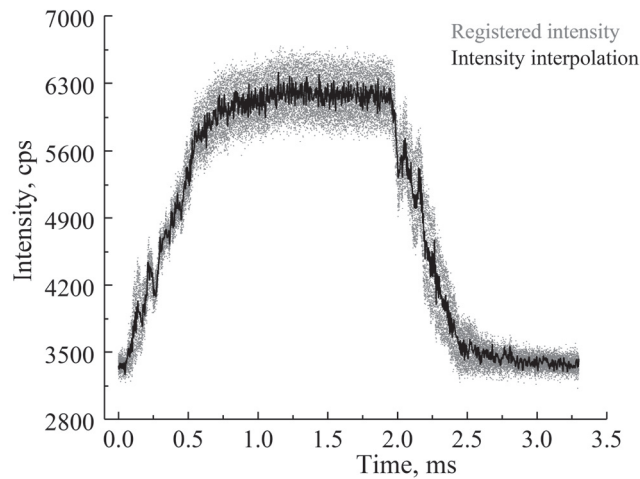


Рис.4. Исследование временных характеристик эффекта.

Хорошо видно, что характерное время установления эффекта составляет примерно 0.7 мс, при этом процесс изменения мгновенной интенсивности, регистрируемой с помощью многоканального анализатора, после включения внешнего сигнала обладает сложным характером, а процесс возбуждения кристалла является многостадийным.

Очевидно, что полученная временная оценка не соответствует по порядку периоду колебаний, характерному для резонаторов с частотами более 1 МГц, однако свой вклад может вносить не только физика возникновения колебаний в резонаторах, но и ограниченное быстродействие оборудования. Оценка вклада аппаратной функции, т.е. характерного времени установления колебаний после усилителя осуществлялось с помощью аналогичной системы для возбуждения определенного числа колебаний, при этом одновременно с мониторингом интенсивности осуществлялся контроль релаксации колебаний непосредственно на выходе используемого усилителя с помощью быстрого осциллографа.

В таком режиме работы была получена оценка характерного времени затухания колебаний, результаты измерений для процессов включения и выключения сигнала представлены на рис.5. Из проведенной оценки видно, что полное время нарастания сигнала составляет не более 200 нс при используемом

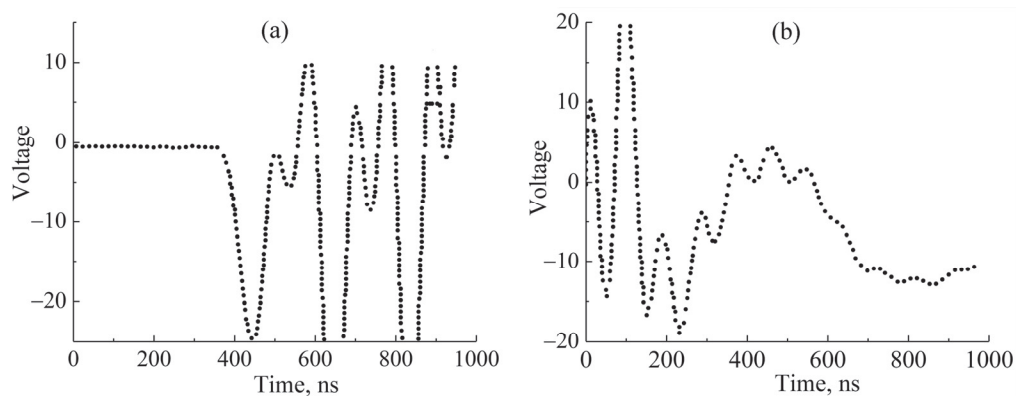


Рис.5. Оценка аппаратных временных характеристик используемого оборудования для генерации управляющего сигнала с помощью осциллографа.

оборудовании. Время полной релаксации электрического управляющего сигнала занимает чуть более продолжительное время и, согласно полученным данным, составляет около 1 микросекунды.

При этом наблюдаемый эффект имеет другой порядок характерных времен – процесс нарастания и релаксации интенсивности занимает времена порядка миллисекунд, что хорошо видно из рис.4, на котором одна точка соответствует одному каналу и составляет по длительности 100 нс. Для максимальной наглядности на рис.6 на одной временной шкале представлено сравнение времен наблюдаемого эффекта с измеренными значениями, характерными для используемой аппаратуры. Здесь серый график – результаты измерений интенсивности, а черный – результат моделирования подаваемого сигнала с учтенной аппаратной задержкой сигнала.

Интересным также представлялось изучение поведения резонатора в

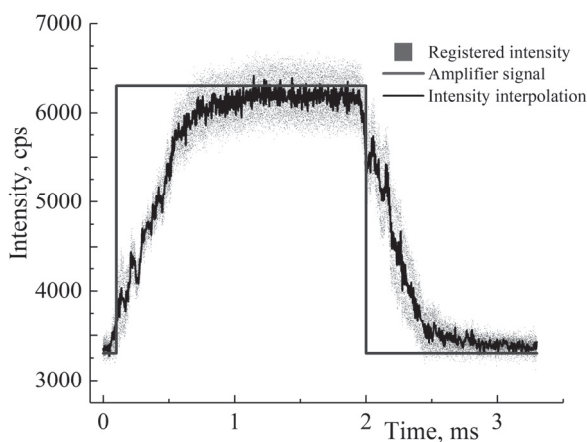


Рис.6. Сравнение быстродействия используемой аппаратуры и временных характеристик эффекта, полученных при проведении эксперимента.

зависимости от количества циклов колебаний подаваемого резонансного сигнала. Такие эксперименты ранее не проводились, однако крайне интересны, т.к. могут позволить более точно определить временные особенности наблюдаемого эффекта, а также попытаться оценить механизмы распределения колебаний при подаче сигнала.

Для проведения данного эксперимента использовалась такая же схема эксперимента, что и для оценки временных характеристик эффекта. С помощью синхронизации многоканального анализатора по определенному номеру канала с генератором на образец подавалось фиксированное число циклов колебаний управляющего сигнала, при этом измерялась зависимость интенсивности от номера канала, т.е. от времени. Время канала составляло минимально возможные для данного прибора 100 нс.

Примеры полученных результатов для 500 и 2000 циклов колебаний представлены на рис.7.

Из полученных результатов видно, что при 500 циклах колебаний кристалл даже не успевает полностью перейти в возбужденное состояние, однако процесс релаксации все равно занимает длительное время.

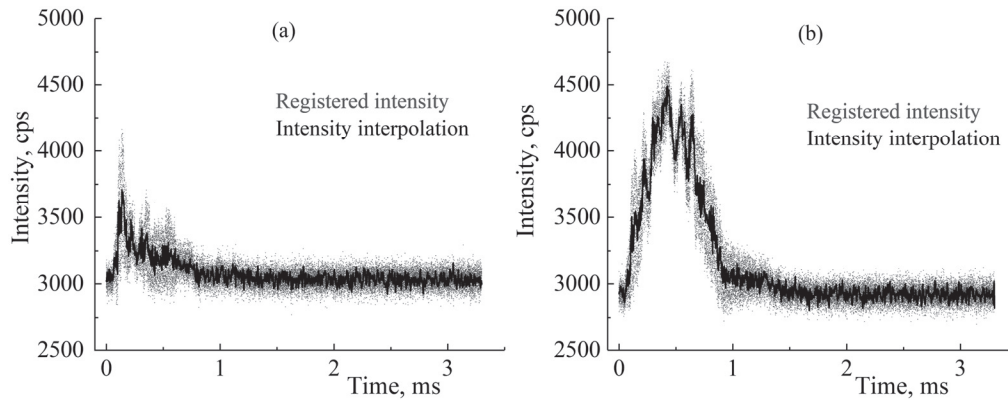


Рис.7. Зависимость интенсивности от времени при различном числе колебаний кристалла-резонатора: (а) 500 циклов колебаний, (б) 2000 циклов колебаний.

3. Выводы и заключение

Проведены исследования эффекта перераспределения интенсивности синхротронного пучка, дифрагированного от кварцевого резонатора, в котором возбуждаются поперечные резонансные колебания. Показана возможность быстрой модуляции интенсивности синхротронного пучка. Полученные в рамках данной работы результаты полностью согласуются с полученными ранее в лабораторных условиях.

Впервые изучены временные характеристики наблюдаемого эффекта перераспределения интенсивности, показано, что процесс занимает времена порядка 1 мс, причем это время не связано с особенностями используемого экспериментального оборудования. Представляется перспективным интересным проведение дальнейших экспериментов на синхротронном источнике, в том числе с двухчастотными элементами особой конструкции, в которых возможно возбуждение одновременно продольных и поперечных волн, что позволит управлять одновременно угловым положением и интенсивностью дифрагированного излучения.

Исследования проводились при поддержке министерства науки и высшего образования РФ в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН в части подготовки исследуемых образцов, а также при финансовой поддержке ГКН МОН РА и РФФИ (РФ) в рамках совместной научной программы 18RF-142 и 18-52-05024 соответственно.

ЛИТЕРАТУРА

1. **M. Richwin, R. Zaeper, D. Lutzenkirchen-Hecht, R. Frahm.** Journal of Synchrotron Radiation, **8**, 354 (2001).
2. **E. Fonda, A. Rochet, M. Ribbens, L. Barthe, S. Belin, V. Briois.** Journal of Synchrotron Radiation, **19**, 417 (2012).
3. **А.Е. Благов, А.С. Быков, И.В. Кубасов, М.Д. Малинкович, Ю.В. Писаревский, А.В. Таргонский, Я.А. Элиович, М.В. Ковальчук.** Приборы и техника эксперимента, № 5, 109 (2016).
4. **A.E. Blagov, M.V. Koval'chuk, V.G. Kohn, V.V. Lider, Yu.V. Pisarevski.** J. Exp. Theor. Phys., **101**, 770 (2005).
5. **А.Е. Благов, М.В. Ковальчук, Ю.В. Писаревский, П.А. Просеков.** Кристаллография, **53**, 411 (2008).
6. **М.В. Ковальчук, А.В. Таргонский, А.Е. Благов, И.С. Занавескина, Ю.В. Писаревский.** Кристаллография, **56**, 886 (2011).
7. **А.Е. Благов, А.Н. Даринский, М.В. Ковальчук, Ю.В. Писаревский, П.А. Просеков, А.В. Таргонский.** Акустический журнал, **59**, 561 (2013).
8. **А.Е. Благов, Ю.В. Писаревский, М.В. Ковальчук.** Кристаллография, **61**, 191 (2016).
9. **А.Е. Благов, Ю.В. Писаревский, П.А. Просеков, А.В. Таргонский, Я.А. Элиович, А.И. Проценко, М.В. Ковальчук.** Кристаллография, **62**, 870 (2017).
10. **А.Р. Мкртчян, М.А. Навасардян, Р.Г. Габриелян и др.** Письма в ЖТФ, **9**, 1181 (1983).
11. **R.G. Gabrielyan, A.R. Mkrtchyan, H.A. Aslanyan, Kh.V. Kotandyan.** Phys. Stat. Sol. (a), **92**, 361 (1985).
12. **A.R. Mkrtchyan, M.A. Navasardian, R.G. Gabrielyan, L.A. Kocharian, R.N. Kuzmin.** Solid State Commun., **59**, 147 (1986).
13. **T.R. Muradyan, R.V. Amiraghyan, S.H. Khlopuzyan, A.R. Wagner, V.R. Kocharyan.** J. Contemp. Phys. (Armenian Ac. Sci.), **50**, 204 (2015).

14. A.R. Mkrtchyan, A.S. Bagdasaryan, V.R. Kocharyan, A.A. Kiziridi, T.R. Muradyan. J. Contemp. Phys. (Armenian Ac. Sci.), **51**, 386 (2016).
15. Л.А. Кочарян, А.Г. Бегларян, О.А. Унанян, К.Г. Галоян, Э.М. Арутюнян. Изв. АН Арм. ССР. Физика, **21**, 323 (1986).
16. А.Р. Мкртчян, М.А. Навасардян, Л.А. Кочарян, В.К. Мирзоян, О.А. Унанян, К.Т. Айрапетян. Изв. АН Арм. ССР. Физика, **21**, 326 (1986).
17. A.R. Mkrtchyan, A.E. Blagov, V.R. Kocharyan, A.G. Kulikov, A.E. Movsisyan, T.R. Muradyan, A.V. Targonsky, Ya. A. Eliovich, A.N. Darinski, Yu.V. Pisarevski, M.V. Kovalchuk. J. Contemp. Phys. (Armenian Ac. Sci.), **54**, 210 (2019).

X-ԿՏՐՎԱՅՔՈՎ ԿՎԱՐՑԻ ՄԻԱԲՅՈՒՐԵՂՆԵՐՈՒՄ ԱԿՈՒՍՏԻԿ ԱԼԻՔՆԵՐԻ
ԳՐԳՈՄԱՆ ՊԱՅՄԱՆՆԵՐՈՒՄ ԻՆՏԵՆՍԻՎՈՒԹՅԱՆ ՎԵՐԱԲԱՇԽՄԱՆ
ԵՐԵՎՈՒՅԹԻ ԱՌԱՆՁՆԱՀԱՏՎՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ՀԵՏԱԶՈՏՈՒՄԸ
ՄԻՆԲՐՈՏՐՈՆԱՅԻՆ ՃԱՌԱԳԱՅԹՄԱՆ ՄԻՋՈՑՈՎ

Ա.Ե. ԲԼԱԳՈՎ, Վ.Ռ. ՔՈՉԱՐՅԱՆ, Ա.Ե. ՄՈՎՍԻՍՅԱՆ, Տ.Ր. ՄՈՒՐԱԴՅԱՆ,
Ա.Վ. ՏԱՐԳՈՆՍԿԻՅ, ՅԱ.Ա. ԷԼԻՈՎԻՉ, ՅՈՒ.Վ. ՊԻՍԱՐԵՎՍԿԻ,
Ա.ՅՈՒ. ՍԵՐԵԳԻՆ, Վ.Ա. ԿՈՐԺՈՎ, Մ.Վ. ԿՈՎԱԼՉՈՒԿ

Ազգային հետազոտական կենտրոն «Կուրչատովյան ինստիտուտ»-ի «РКФМ» կայանում ուսումնասիրվել են X-կտրվածքով կվարցի միաբյուրեղներում ռեզոնանսային ուլտրաձայնային տատանումների առկայության պայմաններում դիֆրակցված սինքրոտրոնային փնջի ինտենսիվության վերաբաշխման երևույթի առանձնահատկությունները: Ստացվել են դիֆրակցված ռենտգենյան ճառագայթման ինտենսիվության կախվածությունը բյուրեղներին տրվող ազդանշանի լարումից, ցույց է տրվել, որ ստացված արդյունքները համահունչ են նախկինում լաբորատոր պայմաններում կատարված հետազոտությունների հետ: Առաջին անգամ հետազոտվել են նաև դիֆրակցված ճառագայթման ինտենսիվության վերաբաշխման երևույթի ժամանակային բնութագրերը:

STUDY OF THE PECULIARITIES OF THE EFFECT OF REDISTRIBUTING INTENSITY IN THE EXCITATION OF ACOUSTIC WAVES IN X-CUT QUARTZ CRYSTALS BY USING SYNCHROTRON RADIATION

A.E. BLAGOV, V.R. KOCHARYAN, A.E. MOVSIKYAN, T.R. MURADYAN,
A.V. TARGONSKY, YA. A. ELIOVICH, Yu.V. PISAREVSKY,
A.YU. SEREGIN, V.A. KORZHOV, M.V. KOVALCHUK

At the “RKFM” stations in NRC “Kurchatov institute”, the characteristics of the effect of redistribution of the intensity of the diffracted synchrotron beam in X-cut quartz crystals under the conditions of excitation of transverse resonant ultrasonic vibrations were studied. The dependences of the intensity of the diffracted X-ray beam on the resonant frequency voltage of the signal are obtained. It is shown that the results are consistent with those previously recorded in the laboratory. Additionally, the temporal characteristics of the observed intensity redistribution effect were obtained and studied for the first time.

ДИНАМИКА ПРОЦЕССА ОПТИЧЕСКОЙ НАКАЧКИ В ЯЧЕЙКАХ С ПОКРЫТИЕМ, ЗАПОЛНЕННЫХ ПАРАМИ Rb

А. КРАСТЕВА¹, Э. МАРИОТТИ^{2*}, Й. ДАНЧЕВА², К. МАРИНЕЛЛИ^{2,3},
Л. МАРМУГИ^{2,3,4}, Л. СТАЧИНИ², С. ГОДЗИНИ³,
С. ГАТЕВА¹, С. КАРТАЛЕВА¹

¹Institute of Electronics, Bulgarian Academy of Sciences, Sofia, Bulgaria

²Department of Physical, Geological and Environmental Sciences,
University of Siena, Italy

³Istituto Nazionale di Ottica del CNR-S.S. Pisa, Italy

⁴Department of Physics and Astronomy, University College London, United Kingdom

*e-mail: mariotti@unisi.it

(Поступила в редакцию 9 октября 2020 г.)

Основной целью нашего исследования является лучшее понимание взаимодействия атом – поверхность, его влияния на эксперимент, а также применение для разработки воспроизводимого метода создания поглощающих ячеек с надежным покрытием. В настоящей работе сообщается о влиянии интенсивности, а также и скорости сканирования частоты диодного лазера на спектр D₂ линии атомов Rb, содержащихся в стеклянных ячейках с парафиновым покрытием и покрытием из поли-ди-метил-силоксана (PDMS). Антирелаксационное покрытие внутренних стенок стеклянных ячеек позволяет расширить область наведенной светом оптической ориентации атомов по всему объему ячейки и по распределению по атомным скоростям. Кроме этого, для дальнейшего исследования роли атомов, адсорбированных на антирелаксационных покрытиях, проведено сравнение спектров D₂ линии в двух случаях: с освещением стенок ячейки ультрафиолетовой лампой и без. Для анализа экспериментальных результатов развита теоретическая модель на основе скоростных уравнений. Выявленное поведение легло в основу простого метода для тестирования поверхностей с покрытием. Он может найти применения во всех случаях, когда критична периодическая оценка состояния органического покрытия – от спектроскопии паров до магнитооптического пленения редких и радиоактивных частиц.

1. Введение

Антирелаксационные органические покрытия – общепринятое средство предотвращения, или даже подавления рандомизации спина атомарных паров из-за столкновений атом–поверхность на стенках спектроскопических стеклянных ячеек. В этом случае, при условии, что плотность атомов достаточно низка для предотвращения изменения проекции спина $\langle S_z \rangle$ столкновениями с обменом

спина, оператор $\langle \mathbf{S} \cdot \mathbf{I} \rangle$ дает основной вклад в спиновую динамику [1–6]. Иными словами, благодаря органическим покрытиям, таким как пленки силикона или парафина, $\langle \mathbf{S} \cdot \mathbf{I} \rangle$ не изменяется во времени в течение десятков секунд и более [7]. Вследствие их свойства сохранять спин, органические покрытия были успешно применены в магнитометрии, лазерном охлаждении и пленении, высокоточных измерениях частоты и фотонных сенсорах, о чем сообщалось, например, в работах [8–10].

Более того, было выявлено, что антирелаксационное покрытие аккумулирует существенное количество атомов щелочных металлов, как на его поверхности, так и в толще (т.н. «адатомы»), которые могут легко освобождены нерезонансным светом низкой интенсивности вследствие процесса, именуемого «светоиндуцированная атомная десорбция» (LIAD) [11]. В этом контексте, предварительные исследования показали, что атомы щелочных металлов, переходящие в паровую фазу посредством LIAD-а, влияют на эффективность процесса сверхтонкой оптической накачки [12], чьи свойства, наряду с другими факторами, становятся зависимыми от особенностей фотодесорбции. Подобные выводы были сделаны также в работе [13] в контексте когерентной спектроскопии и электромагнитно-индуцированной прозрачности.

В настоящей работе представлено детальное исследование влияния парафинового и PDMS покрытий на процесс сверхтонкой оптической накачки паров Rb, в сравнении со случаем без покрытия, а также изучено влияние LIAD на эффективность процесса накачки.

Хотя возможны, или даже уже продемонстрированы более сложные методы [14], нами разработан относительно простой, быстрый и недорогой метод оценки свойств покрытий и эффективности лазерно-индуцированной десорбции, основанный на лазерной спектроскопии D_2 линии Rb. В настоящей работе мы исследовали изменения в D_2 линии обоих изотопов рубидия, содержащихся в ячейке как с парафиновым, так и с PDMS покрытием, которые получаются при сканировании треугольными импульсами частоты зондирующего лазера по всей области резонанса. Спектры поглощения сильно видоизменяются сверхтонкой (ст) оптической накачкой: когда скорость сканирования становится меньше, чем скорость релаксации $\langle \mathbf{S} \cdot \mathbf{I} \rangle$, в спектрах проявляется сильная зависимость от направления сканирования, т.е. от знака производной частоты по времени. Подобный эффект, связанный с антирелаксационными свойствами органического покрытия, недавно наблюдался в ячейке с Cs [15].

Помимо этого, мы показываем, что LIAD вызывает большие изменения населенности основного состояния вследствие его влияния на процесс накачки. В частности, при увеличении интенсивности десорбирующего света такие

изменения становятся более значимыми, так как растет степень ориентации атомного спина.

Для описания динамики оптической накачки в зависимости как от скорости сканирования лазерной частоты, так и от влияния LIAD-а, проведен теоретический анализ, основанный на скоростных уравнениях (для простоты – только для изотопа ^{85}Rb), что позволяет определить характеристики органического покрытия.

С использованием этой методики продемонстрирован простой и недорогой качественный тест для определения эффективности покрытия. Производители покрытий до сих пор не гарантируют воспроизводимость однородности и функциональности покрытий. Это быстрый и неразрушающий метод оценки характеристик покрытия и отслеживания его деградации во времени, с небольшим влиянием на основной эксперимент.

2. Особенности оптической накачки на линии $\text{Rb } D_2$

Объектом исследований в настоящей работе были спектральные свойства естественной смеси изотопов Rb [$\eta(^{85}\text{Rb}) = 72.2\%$, $\eta(^{87}\text{Rb}) = 27.8\%$], содержащихся в ячейках с парафиновым или PDMS покрытием. Для использования в последующем анализе кратко напомним некоторые характеристики оптической накачки на линии D_2 (сверхтонкая структура показана на Рис.1).

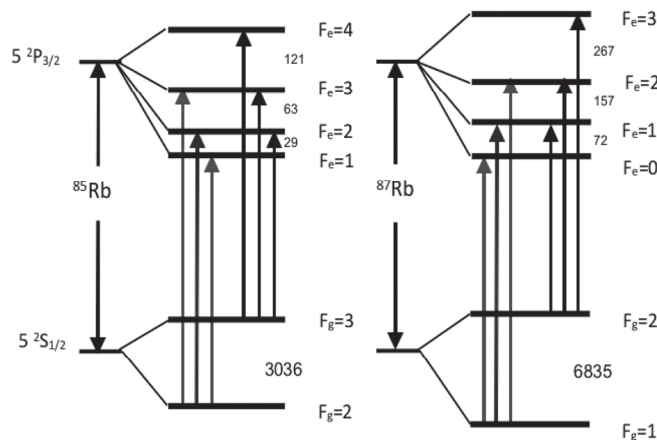


Рис.1. Диаграммы энергетических уровней ^{85}Rb и ^{87}Rb частотный сдвиг между сверхтонкими уровнями указан в МГц.

Заметим, что в области рабочих температур (от 20°C до 30°C) сверхтонкие оптические переходы с одного уровня основного состояния полностью перекрываются вследствие доплеровского уширения: для ячейки, использованной в данном эксперименте измеренная ширина спектральной линии

составляла 400–500 МГц. Это значение больше, чем расстояние между сверхтонкими уровнями возбужденного состояния. Вследствие этого два типа переходов, представляющих интерес ($F_g \rightarrow F_e \leq F_g$ и $F_g \rightarrow F_e > F_g$) не могут быть спектрально разделены.

Напомним, что на переходах $F_g \rightarrow F_e \leq F_g$ происходит потеря населенности из-за сверхтонкой или зеемановской оптической накачки на другие уровни основного состояния, которые не взаимодействуют со светом. Даже если этот тип переходов не закрыт для сверхтонкой оптической накачки, он в любом случае будет подвержен зеемановской оптической накачке на зеемановские подуровни, не взаимодействующие со светом, в зависимости от поляризации: атомная населенность аккумулируется на подуровнях с наивысшими (по модулю) значениями магнитного квантового числа.

В противоположность, переходы $F_g \rightarrow F_e > F_g$, закрытые для сверхтонкой оптической накачки, могут рассматриваться как полностью циклические для поглощающих атомов [16], т.е. атомная населенность распределяется только между двумя уровнями энергии, участвующими в атомном переходе, что известно из процессов лазерного охлаждения и пленения.

3. Экспериментальная установка

Пары Rb при комнатной температуре, содержащиеся в ячейках из пирекса с парафиновым или PDMS покрытием (цилиндрическая форма, с диаметром 25 и 30 мм и длиной 0.76 и 5.3 см соответственно), освещались светом диодного лазера, настроенного на D_2 линию Rb ($\lambda = 780.24$ нм). Свет распространялся вдоль оси вращения ячеек.

Ток лазерного диода периодически модулировался симметричными треугольными импульсами напряжения (скважность 50%). В результате лазерная частота сканировалась по всему спектру линии D_2 , покрывая область примерно 10 ГГц. Частотная модуляция сопровождалась некоторой амплитудной модуляцией (несколько процентов). Передний фронт треугольного импульса соответствовал уменьшению лазерной частоты ($dv/dt < 0$), а задний фронт – увеличению ($dv/dt > 0$). Другими словами, на нарастающем участке лазер сканировался от групп $^{87}\text{Rb } F_1$ и $^{85}\text{Rb } F_2$ до $^{85}\text{Rb } F_3$ и $^{87}\text{Rb } F_2$, и наоборот – на спадающем участке. Спектр поглощения Rb измерялся при разных значениях лазерной интенсивности, получаемых посредством нейтрального светофильтра с переменной оптической плотностью, а также при разных скоростях сканирования лазерной частоты, задаваемой периодом генератора импульсов.

Как показано на Рис.2, лазерный пучок разделяется на две части: Первый пучок расширяется до диаметра 10 мм и направляется на ячейку с покрытием, а второй проходит через ячейку без покрытия, служащую для формирования

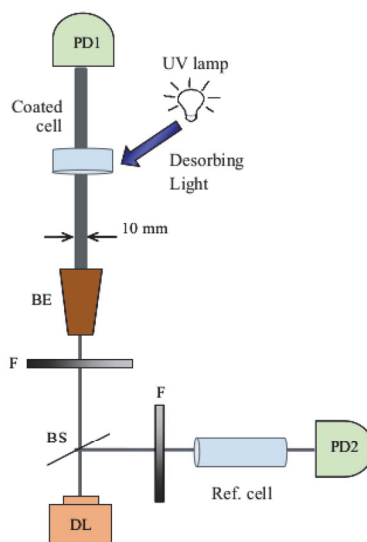


Рис.2. Экспериментальная установка. DL – диодный лазер, BS – делитель пучка, F – нейтральный светофильтр, BE – расширитель пучка, PD1 и PD2 – оптические детекторы.

спектра сравнения. В эксперименте использовался линейно- или циркулярно-поляризованный свет, но полученные результаты слабо зависели от поляризации. Это подтверждает пренебрежимый вклад столкновений с переброжкой спина, а следовательно, и $\langle S_z \rangle$ релаксации. Поэтому в последующем мы будем учитывать только вклад $\langle \mathbf{S} \cdot \mathbf{I} \rangle$.

В эксперименте ячейки находились под воздействием фонового лабораторного неоднородного магнитного поля. Более того, лазерное возбуждение на D_2 линии осуществлялось при лазерных интенсивностях, при которых зеемановской оптической накачкой можно пренебречь, так как скорость релаксации выше по сравнению с динамикой исследуемых процессов. Это подтверждается также тем, что полученные результаты не зависят от лазерной поляризации. Так как ячейки держались при комнатной температуре, из-за малой плотности паров можно пренебречь эффектом спинового обмена. Реализованный режим малой оптической толщины позволял напрямую сравнивать результаты, полученные в ячейках с разными длинами, как представлено на последующих рисунках. Мы предлагаем процедуру качественного тестирования характеристик покрытия и его деградации с использованием сверхтонкой оптической накачки и ее релаксации.

Все измерения были проведены одновременной регистрацией сигналов пропускания от ячеек с покрытием и без, причем поглощение нормализовалось на длину из-за разных длин ячеек. В процессе регистрации ячейки поддерживались при неизменных условиях фонового освещения с целью

получения воспроизводимого равновесного значения атомной плотности без дополнительного вклада эффектов десорбции и адсорбции. После облучения УФ лампой или пробным лазером с высокой интенсивностью, позволяющего локально освободить поверхность от атомов, ячейки держались в темноте в течение 24 часов для восстановления равновесного соотношения плотностей атомарных паров и адатомов [17].

Спектры на D₂ линии сравнивались для следующих случаев: (i) ячеек с парафиновым и PDMS покрытиями и (ii) с освещением и без стенок ячеек ультрафиолетовой (УФ) лампой с центральной длиной волны 404 нм и полной шириной на полувысоте 20 нм.

4. Экспериментальные результаты

Спектр, полученный в вакуумной ячейке без покрытия, не зависит от скорости и направления сканирования лазерной частоты, и следовательно, может быть использован как надежный спектр сравнения. Он практически не подвержен оптической накачке из-за рандомизации спина, создаваемой деполяризирующими столкновениями атомов со стенкой.

В противоположность, в ячейках с органическим покрытием направление сканирования лазерной частоты влияет на пропускание на каждой линии поглощения. Более того, снижение скорости сканирования приводит к усилению оптической накачки сверхтонких уровней основного состояния, не взаимодействующих с лазерным светом. Из-за этого процесса, в дополнение к разнице в амплитудах поглощения для двух направлений сканирования, наблюдается хорошо выраженный сдвиг максимума профиля пропускания для каждой линии [12].

Это может быть качественно объяснено следующим образом: очевидно, что форма спектра поглощения определяется относительными населенностями атомных уровней, связанных лазерным полем. Из-за быстрой динамики процесса (время жизни возбужденных состояний – порядка ~10 нс), можно предположить, что населенность уровней основного состояния становится равновесной при скоростях сканирования лазера, использованных в этой работе (0.1 Гц – 10 кГц). Другими словами, можно использовать приближенные скоростные уравнения, основанные на условиях квазиравновесия (Приложение 1). В рамках этих условий, сканированием резонансной лазерной частоты в двух направлениях, охватывая линии поглощения, возможно наблюдать, переводит ли свет атомы из одной группы уровней на другую посредством оптической накачки, и если да, то в какой степени: в каждый момент времени зондирующий лазер, фиксированный на заданной частоте по отношению к временной шкале системы, возбуждает стабильную и определенную населенность.

Степень воздействия этого процесса зависит как от стабильности перераспределения населенности, а значит, например, от деполяризующих столкновений, так и от эффективности оптической накачки. В этом смысле, при быстром сканировании частоты процесс теряет эффективность. При этом соответствующая временная шкала задается макроскопическим временем, необходимым для передачи населенности от одного уровня другому (умеренная оценка дает $\tau \leq 10^{-4}$ с).

Если столкновения атом-стенка приводят к рандомизации спина (т.е. $\langle \mathbf{S} \cdot \mathbf{I} \rangle = 0$), эффект перераспределения населенности полностью разрушается. Следовательно, даже при достаточно медленных скоростях лазерного сканирования v_{scan} , оптическая накачка может все еще оставаться неэффективной, и при сканировании в спектре поглощения не будут наблюдаться изменения. Это происходит в случае ячеек без покрытия. С другой стороны, с хорошим антидеполяризационным покрытием, соответствующая временная шкала задается временем релаксации $\langle \mathbf{S} \cdot \mathbf{I} \rangle$ (τ_{rel}), которое может быть больше, чем время, в течение которого лазер остается на заданной частоте. В этих условиях скорость сканирования лазера становится существенным параметром. В частности, если $\tau_{\text{rel}} \geq 1/v_{\text{scan}} \geq \tau$, можно напрямую наблюдать на осциллографе проявление эффективности оптической накачки в спектрах поглощения, а значит и оценить качество покрытия.

4.1. Парафиновое покрытие

На Рис.3 показаны сигналы поглощения, наблюдаемые в ячейке с парафиновым покрытием. Спектры, измеренные при разных скоростях сканирования лазера ($v_{\text{scan}} = 41$ Гц и 4.1 Гц на Рис.3а и 3б соответственно) со спадающей ($dv/dt < 0$) и нарастающей ($dv/dt > 0$) частотой, сравнены со спектрами, полученными при тех же условиях в реперной ячейке без покрытия (пунктирные кривые).

Спектры, полученные в реперной ячейке без покрытия не проявляют какой-либо зависимости от v_{scan} или от направления сканирования лазерной частоты. Сигналы поглощения на каждой частоте одинаковы при $v_{\text{scan}} = 41$ Гц и 4.1 Гц, независимо от направления сканирования (от 0 до +10 ГГц или от +10 до 0 ГГц). Отметим, что подобный отклик – ожидаемый результат для вакуумной ячейки, и эти особенности сигнала получаются также в теоретическом спектре, как будет показано в Разделе 5.

В свете предыдущего обсуждения, это поведение в условиях нашего эксперимента является проявлением режима, в котором поляризация атомного спина непрерывно рандомизируется столкновениями атом-стенка и, следовательно, оптическая накачка не имеет вклада или он пренебрежимо мал.

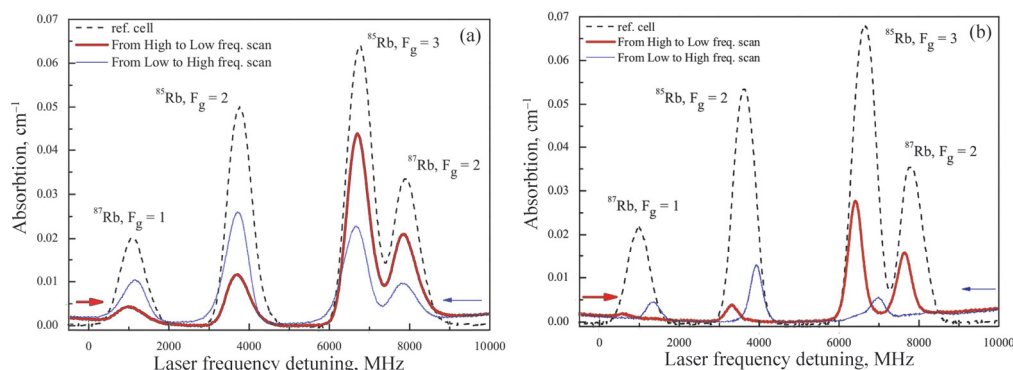


Рис.3. Спектры поглощения на линии D₂ Rb для ячеек с парафиновым покрытием и без (для сравнения) в случае линейно-поляризованного лазера с низкой интенсивностью $I_{las} = 3.17 \text{ мВт/см}^2$ и скорости сканирования лазерной частоты (а) 41 Гц и (б) 4.1 Гц. Спектр атомов Rb в ячейке с парафиновым покрытием показан красной толстой линией для сканирования от высокой к низкой частоте, и синей тонкой линией – для сканирования в обратном направлении.

Такой отклик может быть рассмотрен как имеющий место в случае очень плохого органического покрытия. В противоположность, в присутствии парафинового покрытия в спектрах ясно проявляются изменения.

Это подтверждает картину, описанную в предыдущем разделе: с парафиновым покрытием при сканировании лазера с $dv/dt < 0$ (толстые кривые на Рис.3) атомы в состояниях $^{87}\text{Rb } F_g=1$ и $^{85}\text{Rb } F_g=2$ эффективно возбуждаются резонансным излучением и перекачиваются на другие сверхтонкие уровни основного состояния, которые не взаимодействуют со светом. Обратная ситуация наблюдается, когда лазер сканируется с $dv/dt > 0$. Следовательно, относительная высота соответствующих пиков уменьшается, и такое изменение более выражено с ростом времени, в течение которого лазер остается на данной частоте. Это ясно видно из сравнения Рис.3а и Рис.3б: при $dv/dt < 0$ наблюдается почти полное подавление пика $^{87}\text{Rb } F_g=1$.

Также частотное положение максимума поглощения зависит от направления сканирования лазерной частоты, как сообщалось в [15] в случае Cs. Такой эффект более выражен при $\nu_{scan} = 4.1 \text{ Hz}$ (Рис.3б). Это можно объяснить эффективной оптической накачкой, а значит – хорошим качеством антирелаксационного парафинового покрытия. Так, в случае $dv/dt < 0$ сканирования 82 МГц/мс (толстая линия на Fig.3б) максимумы смещены в сторону высоких частот, в то время как при $dv/dt > 0$ наблюдается противоположное. Это можно качественно понять следующими доводами: для примера, в случае $dv/dt < 0$ лазер вначале входит в резонанс с атомами в состоянии $^{87}\text{Rb } F_g=1$, имеющими высокую скорость. Эти атомы перекачиваются

на другой сверхтонкий уровень. В результате перераспределения групп атомов по скоростям из-за столкновений атомов с покрытием, сохраняющих спиновую поляризацию, все больше и больше атомов подвергаются оптической накачке по мере того как лазер проходит резонанс с другими группами атомов по скоростям. В итоге постепенно формируется провал населенности, а значит постепенно уменьшается поглощение по мере линейного уменьшения лазерной частоты. Такой же эффект, но с противоположным знаком, имеет место в случае лазерного сканирования с $dv/dt > 0$. В результате пики поглощения смещаются в сторону низких частот. Более детальный и точный анализ этих процессов будет представлен в Разделе 5.

Изменение спектра поглощения Rb является простым методом для оценки качества органического покрытия: деформация и частотный сдвиг пиков поглощения – быстрый, но опосредованный тест антирелаксационных свойств покрытия.

В качестве дальнейшего подтверждения предыдущего анализа, а также для демонстрации быстроты техники, позволяющей оценивать свойства покрытия за время менее 2 с, мы приводим на Рис.4 экспериментальные спектры, отложенные от времени, зарегистрированные при интенсивности, которая в 6 раз ниже ($I_{las} = 0.57 \text{ мВт/см}^2$) и при скоростях сканирования $v_{scan} = 50 \text{ Гц}$ и 0.29 Гц , соответствующих 1 ГГц/мс и 6 МГц/мс соответственно.

При высокой скорости сканирования (1 ГГц/мс), когда сканирование ограничивает время взаимодействия лазера с группой атомов по скоростям, оптическая накачка в ячейке с покрытием пренебрежима (Рис.4а,б). Другими словами, профили поглощения в ячейке с покрытием совпадают с профилями в ячейке без покрытия, где ориентация атомного спина рандомизируется при каждом столкновении атом-стенка, даже если процессы имеют разную динамику. С уменьшением скорости сканирования, как и в предыдущем случае, оптическая накачка опять становится эффективной, вызывая сдвиг максимума спектральной линии, наблюдаемый только в ячейке с покрытием. Такой ожидаемый скан-зависимый сдвиг приписывается опустошению уровня основного состояния в процессе сканирования частоты в пределах линии. Наиболее сильное изменение профиля поглощения имеет место при очень низкой скорости сканирования 6 МГц/мс (Рис.4с,д).

Видоизменение спектров вызвано двумя противоположными процессами: (i) сверхтонкой оптической накачкой на уровень основного состояния, не взаимодействующий со светом, и (ii) частичной релаксацией атомной населенности от оптически накаченного уровня обратно на уровень, возбуждаемый светом.

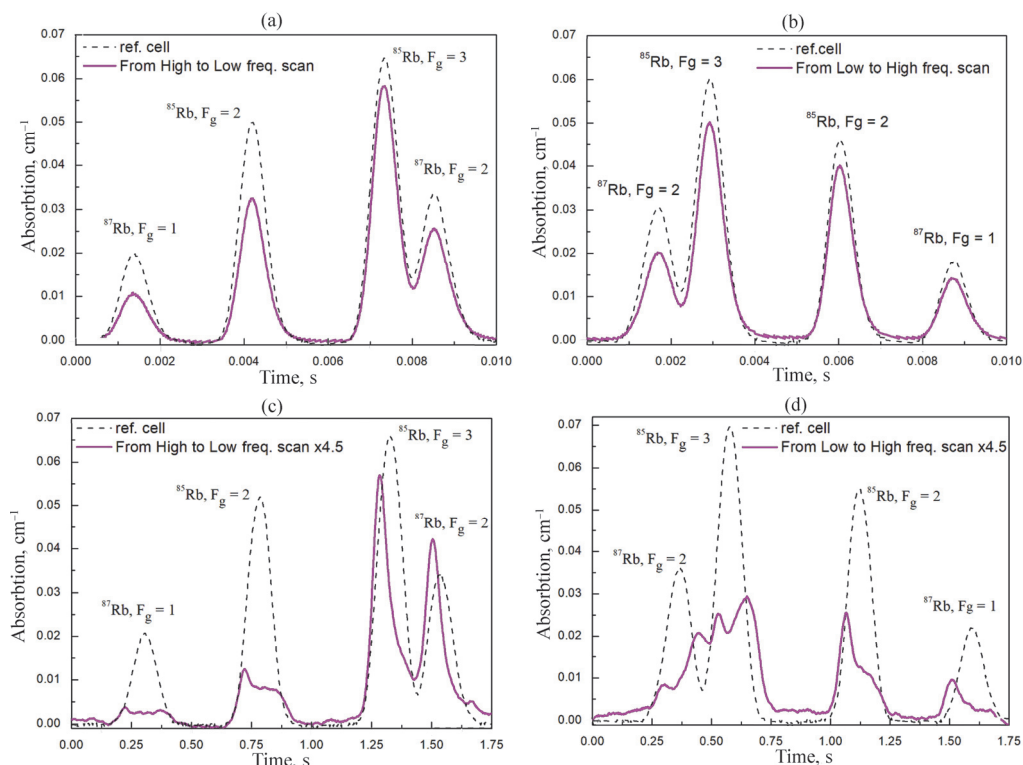


Рис.4. Спектры поглощения на линии D₂ Rb, полученные в ячейке с парафиновым покрытием при $I_{las} = 0.57$ мВт/см² и сканировании в обоих направлениях: от высокой к низкой (а, с) и обратно (b, d). Спектры зарегистрированы при быстрой и медленной скоростях сканирования: 1 ГГц/мс (а, b) и 6 МГц/мс (с, d). Время на горизонтальной оси позволяет напрямую определить направление сканирования лазерной частоты и временную эффективность предложенного метода для оценки качества органического покрытия.

4.2. Практический метод для оценки качества покрытия

Осуществимость получения информации о состоянии покрытия и его функциональности подтверждена на Рис.5, где для примера построена зависимость амплитуды пика $^{85}\text{Rb } F_g=3$ от обратной частоты сканирования ν_{scan} . По сути, Рис.5 представляет определение феноменологического времени релаксации $\langle S \cdot I \rangle$. В частности, моделированием экспериментальных данных экспоненциальной кривой можно получить феноменологическую постоянную времени, относящуюся ко времени релаксации, а значит, если реализованы однородные условия, как это сделано в данной работе, то можно охарактеризовать также качество покрытия. Это позволит напрямую сравнивать разные покрытия или периодически проверять качество того же покрытия с

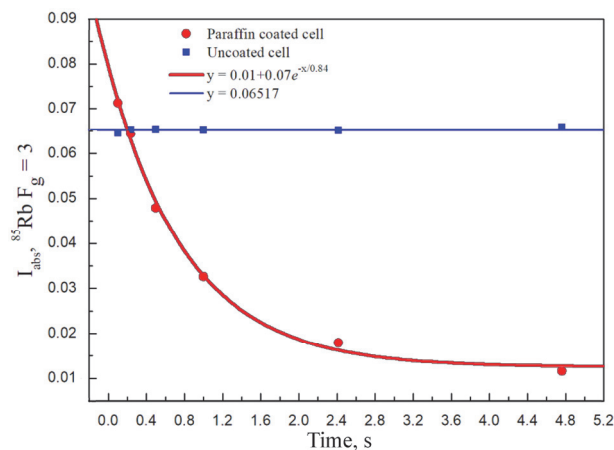


Рис.5. Зависимость амплитуды пика поглощения $^{85}\text{Rb } F_g=3$ от обратной величины частоты сканирования диодного лазера. Толстая кривая: ячейка с парафиновым покрытием; синяя тонкая кривая: ячейка сравнения без покрытия. Моделирование проведено экспоненциальной функцией, позволяющей определить феноменологическое время релаксации.

целью прослеживания возможной деградации свойств. В случае с парафином измеренное время составляет $\tau_{\text{par}} = 0.84$ с, в то время как с ячейкой без покрытия мы не наблюдали никакой временной эволюции амплитуды пика.

4.3. PDMS покрытие

Для того, чтобы получить подтверждение предыдущего наблюдения и обосновать применимость предложенного метода оценки качества покрытия, мы представляем результаты подобного эксперимента, проведенного с другой ячейкой, имеющей PDMS покрытие. Примечательно, что результаты, полученные с ячейкой с PDMS покрытием повторяют все особенности, наблюдаемые в случае парафина, но с другими значениями времени и изменений населенности при тех же экспериментальных параметрах. Мы приписываем это разным характеристикам исследуемых покрытий: с точки зрения потенциальных приложений, это подтверждает, что наш метод чувствителен также к особенностям свойств покрытий. Следовательно, имея соответствующую базу данных, в принципе возможно анализом динамики спектров поглощения идентифицировать тип покрытия.

В частности, в PDMS ячейке при увеличении интенсивности лазера проявляется очевидная оптическая накачка. Это согласуется с ролью оптической накачки, обсужденной в предыдущих разделах.

При очень низкой интенсивности (Рис.6а), спектры Rb в обеих ячейках с покрытием имеют такой же вид, как в ячейке без покрытия, без сдвига частоты и

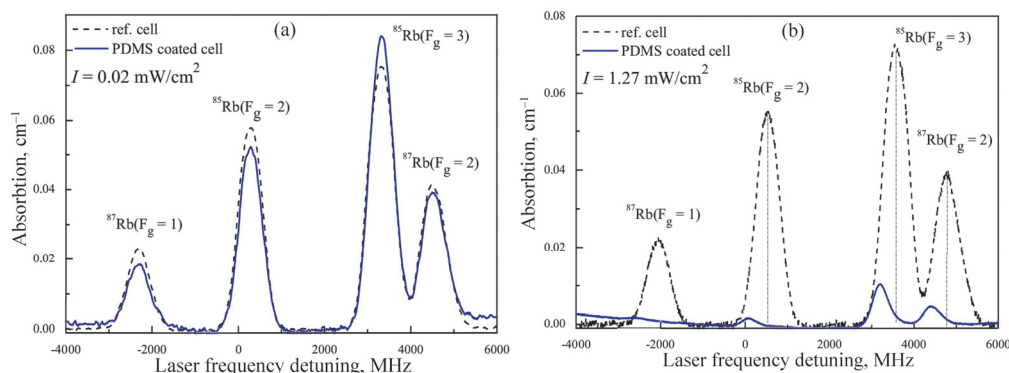


Рис.6. Спектры поглощения на линии D₂ Rb в оптической ячейке с PDMS покрытием при $\nu_{\text{scan}} = 10$ Гц и 4.2 Гц. Сравнение с ячейкой без покрытия (штриховая линия) показано в случае очень низкой (a) и высокой (b) лазерной интенсивности.

изменений профиля. Эффекты оптической накачки становятся существенными при увеличении лазерной интенсивности (Рис.6b), как и в случае с парафиновой ячейкой. Первый уровень основного состояния каждого изотопа Rb, подвергшийся излучению, сильно опустошается, и поглощение на нем практически исчезает. Как и в случае Рис.3b, пики поглощения на $^{87}\text{Rb } F_g=1$ и $^{85}\text{Rb } F_g=2$ уменьшаются более чем в 20 раз. Это демонстрирует высокую степень ориентации атомных спинов, вызванную лазерным излучением, и сохраняющуюся при органическом покрытии. В то же время, имеет место сильно выраженный сдвиг профиля поглощения на каждой линии.

При таких экспериментальных условиях становится возможным исследовать ориентацию атомов, адсорбированных на стенках, посредством задействования эффекта LIAD [12]. В этом контексте, характеристика сверхтонкой оптической накачки позволяет также исследовать поведение атомов, адсорбированных на покрытии. Фактически, десорбированные светом атомы были подвержены рандомизации спина в течение предшествующего взаимодействия со стенками, длящемся $\tau_{\text{ads}} = \tau_0 \exp(E_{\text{ads}}/kT)$, где E_{ads} – энергия адсорбции атомов на поверхности, а τ_0 – время упругого столкновения. При попадании в фазу пара эти атомы вызывают новые изменения в регистрируемом спектре. Следовательно, посредством изучения динамики оптической накачки в присутствии светоиндуцированной десорбции становится возможным извлечение относительной информации о качестве различных антирелаксационных покрытий, как показано в следующем разделе.

4.4. Атомная ориентация в покрытии: эффект LIAD

При облучении покрытия УФ светом от десорбирующего светодиода, как было описано в Разделе 3, происходит увеличение плотности атомарных паров в

созданную оптической накачкой. Другими словами, с потоком фотодесорбированных неполяризованных атомов степень поляризации $\langle \mathbf{S} \cdot \mathbf{I} \rangle$ существенно уменьшается. Более того, вклад десорбированных атомов приводит к уширению линии поглощения и уменьшению сдвига максимума профиля поглощения (Рис.7d в случае PDMS).

В режиме низкой интенсивности (Рис.7 а, b) количество десорбированных неполяризованных атомов достаточно большое для подавления выстраивания населенности, созданного оптической накачкой, что приводит к небольшой деформации пиков. Это происходит из-за относительно малого потока резонансных фотонов, которые не в состоянии быстро поляризовать десорбированные атомы; этот эффект особенно проявляется в случае PDMS. Эта интерпретация подтверждается также тем, что в то время как в случае PDMS не наблюдается остаточный сдвиг пика, такой сдвиг есть в случае парафина, в согласии с поведением, наблюдаемым в отсутствие LIAD. Это может быть приписано относительно меньшему вкладу неполяризованных атомов в случае парафинового покрытия – из-за меньшей эффективности LIAD.

В противоположность, когда лазерная интенсивность высока (Рис.7c,d), процесс сверхтонкой оптической накачки восстанавливает свою значимую роль, сохраняя ее даже в присутствии LIAD. В согласии с предыдущими результатами, когда количество десорбированных атомов относительно мало, как в случае парафина, спектр, получаемый при фотодесорбции повторяет сдвиг максимумов пиков и деформацию, наблюдаемые в отсутствие LIAD. Когда число десорбированных атомов, наоборот, растет, как в случае PDMS, действие оптической накачки частично компенсируется неполяризованными атомами Rb, даже при высокой лазерной интенсивности (Рис.7d): поток LIAD атомов от PDMS перенаселяет уровни ^{85}Rb , $F_g=2$ and $F_g=3$, которые были полностью опустошены оптической накачкой. Такое уменьшение ориентации атомов Rb в объеме ячейки связано со случайным характером спинового распределения атомов, десорбированных со стенок ячейки. Это подтверждается теоретическим анализом системы, представленным в следующем разделе.

5. Теоретический анализ

Чтобы обосновать интерпретацию, представленную в предыдущих разделах, и подтвердить применимость анализа изменений спектров в качестве инструмента для исследования качества и характеристик органических покрытий, разработана теоретическая модель, основанная на системе скоростных уравнений. Для простоты рассматривается только линия D₂ изотопа ^{85}Rb [12] и пренебрегаются столкновения с обменом спина, не имеющие заметной роли при температуре, при которой был проведен эксперимент.

Расчеты проведены по упрощенной энергетической схеме, показанной на Рис.8, где две группы сверхтонких переходов, разделенных по частоте на 3036 МГц, показаны таким образом, чтобы подчеркнуть направление сканирования частоты, реализованное в эксперименте. Таким образом, мы имеем шесть возможных вынужденных переходов, индуцированных лазером, начинающихся с уровней $F_g=3$ и $F_g=2$ основного состояния, и четыре возможных спонтанных канала распада, указанных волнистыми линиями на Рис.8. Предполагается, что все сверхтонкие переходы имеют доплеровский профиль $G(\nu)$ с шириной $\Delta\nu_D = 400$ МГц и вероятностями, приведенными в [20]. В этих условиях сверхтонкие переходы с двух уровней основного состояния перекрываются, создавая два профиля, как показано в нижней части Рис.8. Детали модели, а также различные аппроксимации, приводящие к результатам, представленным в этом разделе, приводятся в Приложении А.

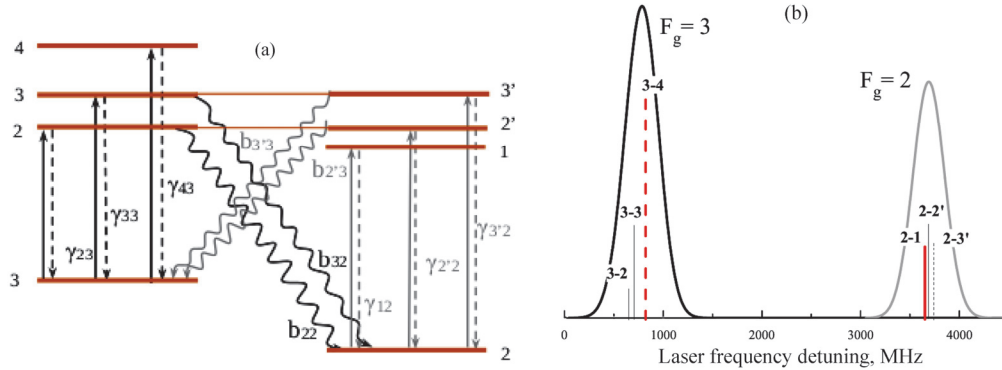


Рис.8. Используемая в модели схема уровней для линии D_2 ^{85}Rb (a) и рассчитанные доплеровские профили групп сверхтонких переходов с уровней $F_g=3$ и $F_g=2$ основного состояния (b).

Модель скоростных уравнений описывает населенности основного состояния как при низкой интенсивности лазерного излучения, так и в режиме глубокого насыщения. Основные результаты показаны на Рис.9. При низком насыщении ($s = 0.001$, Рис.9a) теоретический результат находится в согласии с экспериментальным спектром, полученным в ячейке без покрытия, где эффект оптической накачки незначителен. В промежуточном режиме ($s = 0.01$, Рис.9a), модель воспроизводит полученные в эксперименте деформацию и сдвиг пиков и их зависимость от направления сканирования лазерной частоты. В случае сильного насыщения ($s = 50$, Рис.9b) теоретический анализ демонстрирует существенную разницу как между населенностями обоих уровней основного состояния из-за сверхтонкой оптической накачки, так и зависимость от направления сканирования частоты.

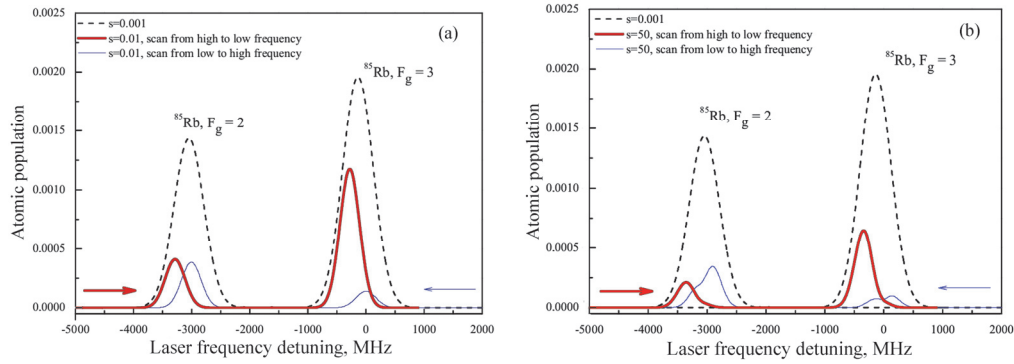


Рис.9. Теоретическая симуляция населенностей уровней $F_g=3$ и $F_g=2$ изотопа ^{85}Rb при слабой ($s = 0.01$) и сильной ($s = 50$) оптической накачке на сверхтонких переходах. Штриховая линия: атомная населенность при очень низкой интенсивности насыщения; сплошные линии: атомные населенности при высокой интенсивности насыщения (тонкая линия: расчет начинается с уровня $F_g=3$; жирная линия: расчет начинается с уровня $F_g=2$).

Таким образом, эти результаты подтверждают, что сдвиг максимума профиля зависит от направления сканирования лазерной частоты, и что он на самом деле связан с особенностями динамики оптической накачки при наличии покрытия с хорошими антирелаксационными свойствами. В частности, это связано с конкуренцией между сверхтонкой оптической накачкой, которая опустошает атомную населенность основного уровня, возбуждаемого светом, и увеличением поглощения (в пределах профиля линии поглощения) при сканировании, когда частота приближается к центру линии [15]. Таким образом, максимум профиля поглощения формируется раньше, чем центр сверхтонкого перехода, т.е. максимум поглощения смещается к начальной точке сканирования частоты.

В нашей модели зависимость сдвига максимума профиля от направления сканирования лазерной частоты вводится феноменологически, посредством следующего представления плотностей населенности обоих уровней основного состояния (^{85}Rb $F_g=3$ и $F_g=2$) в виде $N(F_g=3) = n_0 G(\nu)$, $N(F_g=2) = n_0 G(\nu')$, где $n_0 = 0.5$, а $G(\nu)$ и $G(\nu')$ – гауссовы формы линий. Соответствующие доплеровские профили центрированы на первом сверхтонком переходе, в зависимости от точки начала сканирования частоты. При таком подходе учитывается опустошение основного уровня в зависимости от расстройки частоты по всему профилю линии поглощения.

Как видно из Рис.9, теоретические результаты согласуются с экспериментальными наблюдениями, таким образом подтверждая обоснованность качественной интерпретации зависимости деформации профилей и сдвига пиков поглощения от направления сканирования лазерной частоты (в

теоретическом анализе – от выбора начальной точки симуляции).

В дополнение, мы развили нашу модель для учета также рандомизации спинов десорбированных атомов вследствие эффекта LIAD, что подтверждает роль фотодесорбированных неполяризованных атомов. Прежние условия были изменены посредством введения дополнительных неполяризованных атомов, получаемых в процессе LIAD. Строго говоря, это подразумевает введение новых атомов, которые испытывают спонтанный распад из возбужденного состояния на основное состояние, взаимодействующих и не взаимодействующих с лазерным полем. Идея заключается в том, что эти дополнительные атомы могут компенсировать сверхтонкую оптическую накачку, таким образом уменьшая сдвиг максимумов пиков и, следовательно, ослабляя зависимость от направления сканирования лазерной частоты.

Это реализовано представлением спектров поглощения посредством комбинирования двух вкладов: вклада от сверхтонкой оптической накачки и вклада от дополнительных неполяризованных атомов, которые не вовлечены в оптическую накачку. Используя различные веса этих вкладов, можно воспроизвести экспериментальные результаты для обоих типов покрытий в двух различных режимах: (i) слабая оптическая накачка ($s = 0.1$) и (ii) сильная оптическая накачка ($s = 50$) (см. Рис.10), что уверенно подтверждает роль неполяризованных атомов, фотодесорбированных с покрытия.

Несмотря на феноменологическое описание фотодесорбированных атомов, из результатов, показанных на Рис.10, в частности можно сделать два основных вывода: (i) в режиме слабой оптической накачки, вклад свежих атомов больше, чем вклад атомов, подверженных сверхтонкой оптической накачке. В противоположность, (ii) в режиме сильной оптической накачки количество спин-поляризованных атомов на порядок больше, чем вклад свежих атомов. Это означает, что при высокой интенсивности лазерного излучения или при низкой скорости сканирования существенная часть фотодесорбированных атомов подвергается процессу оптической накачки. Если сравнить два вклада в симулированном поглощении в ячейках с парафиновым и PDMS покрытиях, можно увидеть, что в случае PDMS покрытия вклад свежих атомов выше, чем в случае парафинового покрытия. Это согласуется с большей десорбционной эффективностью PDMS по сравнению с парафином: в первом случае при УФ облучении стенок ячейки в паровую фазу высвобождается большее число свежих атомов с рандомизованными спинами.

Наше теоретическое моделирование качественно согласуется с экспериментальными результатами, демонстрируя, что на самом деле, различные сдвиги максимума профиля атомной населенности зависят от направления

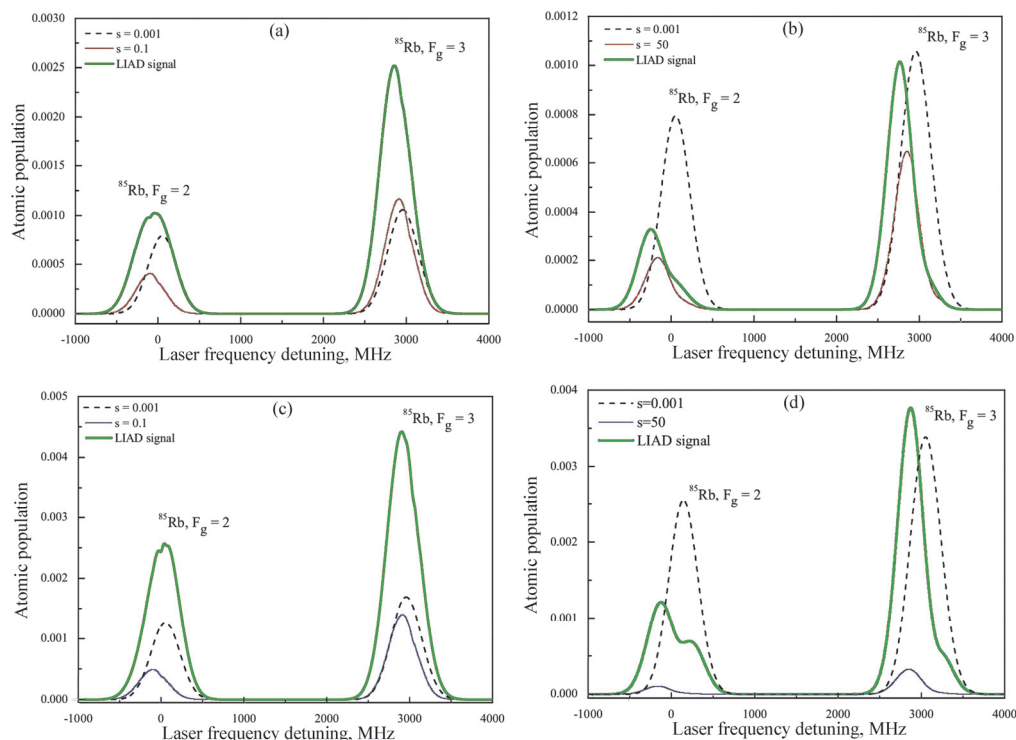


Рис.10. Теоретическая симуляция линий поглощения на $F_g=3$ и $F_g=2$ изотопа ^{85}Rb в ячейках с парафиновым (а, б) и PDMS (с, д) покрытиями, при малом (а, с) и большом (б, д) насыщении сверхтонких переходов. Пунктирная линия: очень малое значение параметра насыщения; тонкая линия: без LIAD; жирная линия: с LIAD.

лазерного сканирования, и что фотодесорбированные LIAD-ом с покрытия неполяризованные атомы играют важную роль в формировании поведения атомной системы и эффективности передачи населенности.

В то же время, с другой точки зрения, наша модель подтверждает реализуемость этого подхода в качестве практического метода для оценки характеристик антирелаксационных покрытий.

6. Заключение

Исследование сверхтонкой оптической накачки в зависимости от лазерной интенсивности и скорости сканирования частоты позволяет наблюдать эффекты спиновой релаксации атомов щелчных металлов. Это представляет собой новый подход к исследованию свойств и эффективности антирелаксационных покрытий, а также особенностей фотодесорбционных эффектов, таких как LIAD. В частности, наши наблюдения показали, что в присутствии органических покрытий, таких как парафин или PDMS, в спектрах

поглощения паров Rb проявляется перераспределение населенности, созданной оптической накачкой. В частности, были наблюдаемы деформация профилей поглощения и частотный сдвиг пиковых амплитуд, и продемонстрировано, что эти изменения сильно зависят от скорости и направления сканирования лазерной частоты.

Уменьшение скорости сканирования лазерной частоты приводит к более сильной оптической накачке сверхтонких уровней основного состояния, не взаимодействующих с лазерным излучением. Вследствие этого процесса, в дополнение к разнице амплитуд поглощения для двух направлений сканирования, на каждой линии появляется также выраженный сдвиг максимума профиля поглощения. Экспериментальное исследование показало, что в ячейках с обоими типами покрытия при увеличении лазерной интенсивности существенно проявляется сверхтонкая оптическая накачка.

Принимая в расчет повышение плотности вследствие стимулированной фтородесорбции неполяризованных атомов, получаются разные результаты для случаев PDMS и парафинового покрытий, что обусловлено различием их десорбционных свойств: фтордесорбция в случае PDMS больше, чем в случае парафина. Этим объясняется более выраженное уширение профиля поглощения на всех линиях и меньший вклад оптической накачки, наблюдаемый в случае PDMS. Фактически, сдвиг максимума профиля поглощения и деформация профиля, проявляющиеся в спектре поглощения Rb под воздействием LIAD в ячейке с парафиновым покрытием, которые наблюдаются также в отсутствие LIAD. В противоположность, в ячейках с PDMS покрытием поток LIAD атомов приводит к очевидному уменьшению вклада сверхтонкой оптической накачки, действие которой на опустошенные уровни частично компенсируется «свежими» десорбированными атомами. Такое уменьшение ориентации атомов Rb в объеме ячейки связано со случайным характером распределения спинов атомов, десорбированных со стенок ячейки.

Теоретическая модель, основанная на скоростных уравнениях, воспроизводит изменения населенностей обоих уровней основного состояния вследствие сверхтонкой оптической накачки, а также зависимость профиля поглощения от направления сканирования лазерной частоты, тем самым подтверждая нашу качественную интерпретацию результатов и доказывая применимость численных расчетов для экстраполяции информации о качестве и состоянии покрытия.

Эти результаты также проливают свет на феноменологию процесса оптической накачки в присутствии органических покрытий и LIAD. В то же время, они позволяют исследовать роль и вклад антирелаксационных свойств покрытий в отклике атомной системы на оптическую накачку. Этот подход

может лечь в основу практического, недорогого и быстрого метода оценки характеристик органических покрытий, который может быть реализован без препятствования основному эксперименту.

Работа частично финансируется в рамках двухстороннего договора о сотрудничестве CNR/BAS и программы FP7 Marie Curie International Research Staff Exchange Scheme Fellowship Европейского Союза. А. Крастева и С. Гатева благодарят Болгарскую Академию Наук за программу поддержки молодых ученых (грант DFNP-188/2016).

Приложение А. Вывод модели скоростных уравнений

Две рассматриваемые сверхтонкие системы ^{85}Rb (Рис.8) связаны посредством спонтанного испускания с возбужденных состояний на основное состояние, не взаимодействующее с лазерным излучением, что происходит на открытых переходах $F_g = 3 \rightarrow F_e = 2, 3$ и $F_g = 2 \rightarrow F_e = 2', 3'$. Заметим, что $F_e = 2', 3'$ и $F_e = 2, 3$ – те же самые возбужденные состояния. Скоростные (кинетические) уравнения описывают эволюцию атомной населенности энергетических уровней в результате спонтанных и вынужденных оптических переходов [20,21]. В системе скоростных уравнений лазерная частота вводится как переменная, а уравнения (A1)–(A8) решаются для случая стационарного режима:

$$\frac{\partial N(F_e = 2)}{\partial t} = [N(F_g = 3) - N(F_e = 2)]\sigma_{32} - \gamma_{23}N(F_e = 2) - b_{22}N(F_e = 2), \quad (\text{A1})$$

$$\frac{\partial N(F_e = 3)}{\partial t} = [N(F_g = 3) - N(F_e = 3)]\sigma_{33} - \gamma_{33}N(F_e = 3) - b_{32}N(F_e = 3), \quad (\text{A2})$$

$$\frac{\partial N(F_e = 4)}{\partial t} = [N(F_g = 3) - N(F_e = 4)]\sigma_{34} - \gamma_{43}N(F_e = 4), \quad (\text{A3})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial N(F_e = 3)}{\partial t} = & [N(F_e = 2) - N(F_g = 3)]\sigma_{32} + \gamma_{23}N(F_e = 2) \\ & + [N(F_e = 3) - N(F_g = 3)]\sigma_{33} + \gamma_{33}N(F_e = 3) + [N(F_e = 4) - N(F_g = 3)]\sigma_{34} \\ & + \gamma_{43}N(F_e = 4) + b_{2'3}N(F_e = 2') + b_{3'3}N(F_e = 3') + [n_0 G(\nu) - N(F_g = 3)]\Gamma, \end{aligned} \quad (\text{A4})$$

$$\frac{\partial N(F_e = 1)}{\partial t} = [N(F_g = 2) - N(F_e = 1)]\sigma_{21} - \gamma_{12}N(F_e = 1), \quad (\text{A5})$$

$$\frac{\partial N(F_e = 2')}{\partial t} = [N(F_g = 2) - N(F_e = 2')]\sigma_{22'} - \gamma_{2'2}N(F_e = 2') - b_{2'3}N(F_e = 2'), \quad (\text{A6})$$

$$\frac{\partial N(F_e = 3')}{\partial t} = [N(F_g = 2) - N(F_e = 3')]\sigma_{23'} - \gamma_{3'2}N(F_e = 3') - b_{3'3}N(F_e = 3'), \quad (\text{A7})$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial N(F_e = 2)}{\partial t} = & [N(F_e = 1) - N(F_g = 2)]\sigma_{21} + \gamma_{12}N(F_e = 1) \\
& + [N(F_e = 2') - N(F_g = 2)]\sigma_{22'} + \gamma_{2'2}N(F_e = 2') + [N(F_e = 3') - N(F_g = 2)]\sigma_{23'} \quad (A8) \\
& + \gamma_{3'2}N(F_e = 3') + b_{22}N(F_e = 2) + b_{32}N(F_e = 3) + [n_0 G(v') - N(F_g = 2)]\Gamma.
\end{aligned}$$

Аналитические решения скоростных уравнений для населенностей основных уровней ($F_g=3$ and $F_g=2$) в стационарном режиме имеют следующий вид ($G(v)$ и $G(v')$ – доплеровские профили с $\Delta v_D = 400$ МГц):

$$N(F_g = 3) = n_0 \frac{B[G(v) + G(v')] + \Gamma G(v)}{A + B + \Gamma} \quad (A9)$$

и

$$N(F_g = 2) = n_0 \frac{A[G(v) + G(v')] + \Gamma G(v)}{A + B + \Gamma}, \quad (A10)$$

где A и B – коэффициенты, задаваемые выражениями

$$A = \frac{0.42\gamma\sigma_{23}}{\sigma_{23} + 0.54\gamma} + \frac{0.34\gamma\sigma_{33}}{\sigma_{33} + 0.77\gamma} \quad (A11)$$

и

$$B = \frac{0.12\gamma\sigma_{22'}}{\sigma_{22'} + 0.55\gamma} + \frac{0.43\gamma\sigma_{23'}}{\sigma_{23'} + 0.78\gamma}, \quad (A12)$$

σ_i – поперечные сечения соответствующих оптических переходов, описывающие испускание и поглощение света. Поперечное сечение оптического перехода выражается как:

$$\sigma_i = \left(\frac{\gamma I}{2I_s} \right) \left(\frac{\gamma}{2} \right)^2 \left((v - v_{0i})^2 + \left(\frac{\gamma}{2} \right)^2 \right)^{-1}, \quad (A13)$$

что вводит в систему сверхтонкую оптическую накачку. В предыдущем уравнении параметр насыщения s определяется как $s = I/2I_s$. γ – ширина спонтанного распада, взятая равной $\gamma = 60$ рад/с, включая также спектральную ширину лазерного диода; b_{ij} – скорость спонтанного распада с возбужденного уровня на основной уровень, не взаимодействующий с лазерным полем (коэффициент ветвления) [12]. Γ – ширина безызлучательной релаксации, которая в вакуумных ячейках обычно существенно меньше, чем γ [21]; соответственно, в наших расчетах мы взяли величину 10 рад/с. В Γ учитывается также эффект столкновений атомов Rb со стенками ячейки с изменением скорости, не приводящий к рандомизации спина.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Z. Ding, X. Long, J. Yuan, Z. Fan, H. Luo.** Sci. Rep., **6**, 32605 (2016).
2. **E.B. Aleksandrov, M.V. Balabas.** Opt. Spectrosc., **98**, 800 (2005).
3. **W. Happer.** Rev. Mod. Phys., **44**, 169 (1972).
4. **M.A. Bouchiat, J. Brossel.** Phys. Rev., **147**, 41 (1966).
5. **C. Cohen-Tannoudji, A. Kastler.** Optical pumping, in: Progress in Optics, E. Wolf (Ed.), 1966.
6. **M.T. Graf, D.F. Kimball, S.M. Rochester, K. Kerner, C. Wong, D. Budker.** Phys. Rev. A, **72**, 023401 (2005).
7. **M.V. Balabas, T. Karaulanov, M.P. Ledbetter, D. Budker.** Phys. Rev. Lett., **105**, 070801 (2010).
8. **M. Stephens, R. Rhodes, C. Wieman.** J. Appl. Phys., **76**, 3479 (1994).
9. **V. Coppolaro, N. Papi, A. Khanbekyan, C. Marinelli, E. Mariotti, L. Marmugi, L. Moi, L. Corradi, A. Dainelli, H. Arigawa, T. Ishikawa, Y. Sakemi, R. Calabrese, G. Mazzocca, L. Tomassetti, L. Ricci.** J. Chem. Phys., **144**, 134201 (2014).
10. **S.J. Seltzer, M.V. Romalis.** J. Appl. Phys., **106**, 114906 (2009).
11. **S.N. Atutov, V. Biancalana, P. Bicchi, C. Marinelli, E. Mariotti, M. Meucci, A. Nagel, K. Nasyrov, S. Rachini, L. Moi.** Phys. Rev. A, **60**, 4693 (1999).
12. **Y. Dancheva, C. Marinelli, E. Mariotti, L. Marmugi, M.R. Zampelli, P.N. Ghosh, S. Gateva, A. Krasteva, S. Cartaleva.** J. Phys.: Conf. Ser., **514**, 012029 (2014).
13. **L. Marmugi, S. Gozzini, A. Lucchesini, A. Bogi, A. Burchianti, C. Marinelli.** J. Opt. Soc. Am. B, **29**, 2729 (2012).
14. **S. Gozzini, L. Marmugi, A. Lucchesini, S. Gateva, S. Cartaleva, K. Nasyrov.** Phys. Rev. A, **84**, 013812 (2011).
15. **D.I. Sevost'yanov, V.P. Yakovlev, A.N. Kozlov, V.V. Vasilev, S.A. Zibrov, V.L. Velichansky.** Quant. Electron., **43**, 638 (2013).
16. **S. Cartaleva, A. Krasteva, A. Sargsyan, D. Sarkisyan, D. Slavov, P. Todorov, K. Vaseva.** Advanced Photonic Sciences (InTech), 2012, p.255.
17. **C. Marinelli, A. Burchianti, A. Bogi, F. Della Valle, G. Bevilacqua, E. Mariotti, S. Veronesi, L. Moi.** Eur. Phys. J. D, **37**, 319 (2006).
18. **J.H. Xu, F. Mango, G. Alzetta, R.A. Bernheim.** Eur. Phys. J. D, **10**, 243 (2000).
19. **S.N. Atutov, N.A. Danilina, S.L. Mikerin, A.I. Plekhanov.** Optoelectronics, Instrumentation and Data Processing, **49**, 608 (2013).
20. **P. Siddons, C.S. Adams, C. Ge, I.G. Hughes.** J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **41**, 155004 (2008).
21. **S. Gozzini, D. Slavov, S. Cartaleva, L. Marmugi, A. Lucchesini.** Acta Physica Polonica A, **116**, 489 (2009).

DYNAMICS OF OPTICAL PUMPING PROCESSES IN COATED CELLS FILLED WITH Rb VAPOUR

A. KRASTEVA, E. MARIOTTI, Y. DANCHEVA, C. MARINELLI,
L. MARMUGI, L. STIACCINI, S. GOZZINI, S. GATEVA, S. CARTALEVA

A better theoretical understanding of the atom – surface interactions and of the experimental consequences and applications to a reproducible method for the construction of reliable coated absorption cells is the main scope of our research. In this paper we report on the influence of diode laser intensity and of diode frequency scanning rate on the spectrum of the D_2 line of Rb atoms, contained in paraffin or PolyDiMethylSiloxane (PDMS) coated glass cells. The anti-relaxation coating of inner walls of the glass cells allows to extend the optical orientation of atoms induced by the light to the entire cell volume and atomic velocity distribution. Moreover, in order to further investigate the role of atoms adsorbed in the anti-relaxation coatings, the D_2 line spectra are compared for two cases: without and with illumination of the walls of the cell by an ultraviolet lamp. A theoretical model based on rate equations is introduced in order to analyze the experimental results. The extracted behaviour is a simple method to test the conditions of a coated surface. This finds applications in all cases where timely assessment of an organic coating layer is critical, from vapour spectroscopy to magneto-optical trapping of rare and radioactive species.

Академик Владимир Михайлович Арутюнян

(к 80-летию со дня рождения)



30 августа исполняется 80 лет со дня рождения видного армянского физика, признанного специалиста по физике и технике полупроводников, радиофизике и электронике, методам преобразования солнечной энергии и полупроводниковым сенсорам, лауреата Премии Президента РА, заслуженного деятеля науки РА, академика Владимира Михайлович Арутюняна.

В. М. родился в 1940 г. в г. Ереване. Отец – известный инженер, мать – заслуженный деятель высшей школы, доцент консерватории, воспитатель 2-х народных артисток Армении и многих лауреатов конкурсов вокалистов. С отличием окончил факультет радиоэлектроники Киевского политехнического института по специальности «Полупроводники и диэлектрики» (1964 г.). Кандидатскую диссертацию защитил в 1970 г., а докторскую – в 1977 г. В 1981 г. утвержден в ученом звании профессора. В 1990 г. избран членом–корреспондентом, а в 1996 г. – академиком НАН РА по специальности «Радиофизика и электроника». В. М. избран также действительным членом Инженерной Академии РА и международной Инженерной Академии, членом 2 других академий и международных научных обществ по солнечной энергии и материаловедению и т. д. Член бюро Отделения физики и астрофизики НАН РА и Научного Совета «Функциональные материалы для электроники» Международной ассоциации Академий наук. Являлся членом ряда ученых и экспертных советов в республике и научных советов СССР. Многие годы являлся членом спецсоветов в ЕГУ и ГИУА.

С 1992 г. – главный редактор журнала «Известия НАН РА. Физика», полностью переводимого с русского языка на английский и издаваемого издательством Шпрингер (Германия) под названием «Journal of Contemporary Physics». Тринадцатый год под его редакцией издается электронный журнал «Armenian Journal of Physics», в котором публикуются не только работы армянских авторов, но и результаты исследований физиков из более чем двадцати стран. Один из редакторов международного журнала «Nanomedicine, Nanotechnology and Nanomaterials» и член редколлегий 6 журналов, издаваемых в России, Франции, Канаде, Сингапуре, и 2 журналов в Армении.

С 1965 г. работал в Институте радиофизики и электроники НАН Армении, в том числе 14 лет со дня основания в качестве заведующего лабораторией физики полупроводниковых приборов. В декабре 1977 г. был приглашен на работу в ЕГУ на

должность зав. кафедрой «Физика полупроводников и диэлектриков» и научного руководителя НИЛ физики полупроводниковых материалов и приборов радиофизического факультета. Позже кафедра была переименована в кафедру «Физика полупроводников и микроэлектроника», а на базе НИЛ был создан Научный центр полупроводниковых приборов и нанотехнологий.

Круг научных интересов академика В. М. Арутюняна весьма широк. Его работам свойственно сочетание фундаментальных исследований с приборными разработками. В центре внимания В. М. и его соавторов находятся тщательное изучение различных явлений, наблюдаемых на границах раздела полупроводников с электролитом, газом или жидким кристаллом, в различных полупроводниковых гетероструктурах, в том числе содержащих квантовые ямы, точки и т.д. Весомый вклад им с коллегами внесен в развитие таких исключительно важных для прикладной науки разделов как, фотоприемники инфракрасного, ультрафиолетового и микроволнового диапазонов спектра. Крупный вклад внесен В. М. в решение проблем по созданию химических сенсоров и преобразователей солнечной энергии в химическую или электрическую энергию. ЕГУ был ведущей организацией в СССР в рамках всесоюзной научно-технической программы по преобразованию солнечной энергии по разделу «Фотоэлектрохимическое преобразование солнечной энергии». В настоящее время продолжают интенсивные исследования явлений в газовых сенсорах, эпитаксиальных тонких пленках и жидких кристаллах.

Большое внимание уделяется академиком международному сотрудничеству. Им опубликованы около 100 статей и докладов совместно с учеными США, Франции, России, Швеции, Германии и Италии. Получено 6 совместных патентов. Выезжал в длительные научные командировки в США, Францию, Германию, Италию, Великобританию, Чехию и Румынию, многократно принимал участие в работе научных конференций (в том числе, с приглашенными докладами) во многих странах, являлся членом Оргкомитетов конференций в Чехии и Франции. На кафедре и в научном центре ЕГУ выполнены совместные проекты, в том числе в рамках более чем 20 зарубежных грантов.

Предложены новые приборы, установки, технологии и методы измерений, многие из которых защищены 54 патентами и авторскими свидетельствами Армении и РФ, а также 1 патентом США и 2 патентами Франции. Эти разработки по своим параметрам, как правило, превышают характеристики зарубежных аналогов. Внедрение ряда разработок было осуществлено в Армении, Москве и Санкт-Петербурге. До развала СССР В. М. возглавлял созданную им в ПО «Позистор» совместную с ЕГУ отраслевую лабораторию, что способствовало внедрению многих результатов в производство и повышению процента выхода продукции.

По всем вышеперечисленным направлениям академиком Арутюняном опубликованы 3 монографии, 12 книг, нескольких учебных пособий, главы в 10 совместных монографиях, опубликованных за рубежом, 30 обзорных статей, более 550 статей и докладов в научных журналах и трудах международных конференций. Многие работы получили высокую оценку научной общественности и ведущих ученых мира, в том числе лауреатов Нобелевской премии Н. Н. Семенова и Ж. И. Алферова.

Международные наукометрические организации Google Scholar и Mendeley сообщают об 3600 ссылках на его работы и 65 тысячах их прочтений за рубежом за последние 25 лет.

Наряду с интенсивной научной деятельностью всегда в центре внимания В. М. воспитание и подготовка кадров. В ЕГУ в разные годы им прочитаны лекции по физике полупроводников и полупроводниковых приборов, оптоэлектронике, полупроводниковой СВЧ-электронике, микроэлектронике, сенсорам, нанотехнологиям, преобразователям солнечной энергии. Им опубликованы учебные пособия на армянском и русском языках.

Научная и научно-организационная деятельность В. М. Арутюняна во многом способствовала подготовке в Армении высококвалифицированных кадров. На кафедре и в центре, возглавляемых В. М., царит творческая обстановка. Им лично подготовлены 6 докторов наук и более 30 кандидатов наук. Он был членом первой в Армении Высшей аттестационной комиссии. Только в Армении В. М. Арутюняном с сотрудниками организовано 6 всесоюзных, 12 международных конференций и ряд различных выездных секций научных советов. Научные работы возглавляемого им коллектива дважды удостоены Премий Президента РА. Среди его учеников и коллег – иностранный член НАН РА и 7 лауреатов Премии Президента РА.

За успехи в науке и подготовке кадров академику В. М. Арутюняну присуждена правительственная награда – медаль А. Ширакаци. Его деятельность в 2009 г. отмечена благодарностью Премьер-министра РА. Награжден золотыми медалями Мин. науки и высшего образования Армении, Международной ассоциации водородной энергетики за 2019 г., медалью Российской академии наук и Московского государственного университета памяти Эммануэля 2019 г., золотой медалью 2009 г. для Армении (США), медалью «ArmTech'09» (США), золотыми медалями Инженерной Академии наук, Ереванского и Одесского университетов и др.

Для становления здорового творческого коллектива, научной школы, формирования международных связей, наряду с высоким научным уровнем и актуальностью проводимых работ, большое значение имеют характеризующие его как личность качества. Это, прежде всего, глубокие знания, интеллигентность, интуиция, трудолюбие, сильно развитое чувство ответственности, целеустремленность, неиссякаемая энергия в работе, принципиальность, сочетающаяся с отзывчивостью и доброжелательностью, коммуникабельностью в общении с людьми на всех уровнях.

Поздравляя Владимира Михайловича Арутюняна с 80-летним юбилеем, желаем ему крепкого здоровья, счастья и благополучия в личной жизни, успехов в работе и во всех начинаниях на благо развития науки и высшего образования в Армении!

Президент НАН Армении Р.М. Мартиросян

Академик-секретарь Отделения физики и астрофизики НАН Р.Б. Костанян