

ФИЗИКА-ՖԻԶԻԿԱ-PHYSICS



ИЗВЕСТИЯ
НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК АРМЕНИИ

ՏԵՂԵԿԱԳԻՐ
ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԶԳԱՅԻՆ ԱԿԱԴԵՄԻԱՅԻ

PROCEEDINGS
OF NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF ARMENIA

ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ՀԱՆՐԱՊԵՏՈՒԹՅԱՆ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԶԳԱՅԻՆ ԱԿԱԴԵՄԻԱ
НАЦИОНАЛЬНАЯ АКАДЕМИЯ НАУК РЕСПУБЛИКИ АРМЕНИЯ

Տ Ե Ղ Ե Վ Ա Գ Ի Դ ИЗВЕСТИЯ
ՖԻԶԻԿԱ ФИЗИКА

ՀԱՏՈՐ ТОМ

56

№ 3

ՀՀ ԳԱԱ "ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆ" ՀՐԱՏԱՐԱԿՉՈՒԹՅՈՒՆ

ИЗДАТЕЛЬСТВО "ТИТУТЮН" НАН РА

ԵՐԵՎԱՆ

ЕРЕВАН

2021

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. Շառոյան

EDITORIAL BOARD

V. M. Aroutiounian, editor-in-chief
A. V. Papoyan, associate editor
K. M. Gambaryan, executive secretary
A. A. Hakhumyan
E. M. Kazaryan
R. B. Kostanyan
A. O. Melikyan
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.

УСИЛЕНИЕ И ОСОБЕННОСТИ ИЗЛУЧЕНИЯ ПОЗИТРОНОВ В КРИСТАЛЛИЧЕСКОМ ОНДУЛЯТОРЕ С СЕКЦИЯМИ

А.Л. ГЕВОРГЯН*, Л.А. ГЕВОРГЯН, А.Г. ШАМАМЯН

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

*e-mail: hayk.gevorgyan@aanl.am

(Поступила в редакцию 5 февраля 2021 г.)

Теоретически исследована задача об ондуляторном излучении каналированных позитронов в кристаллическом ондуляторе с секциями (КОС), учитывая эффект диэлектрической поляризации среды. Конфигурация КОС такова, что сохраняет плоскостное каналирование позитронов с заданной энергией. Получено аналитическое выражение для спектрального распределения числа излученных фотонов. Представлены особенности этого спектра. Как и следовало ожидать, модификация кристаллического ондулятора приводит к усилению излучения за счет конструктивной интерференции полей излучения, образованных на отдельных участках. Найдены оптимальные параметры КОС. Подобные микро-эмиттеры могут найти широкое практическое применение, поскольку с помощью них можно генерировать направленные пучки как жестких, так и мягких фотонов.

1. Введение

Интенсивные, монохроматические, направленные фотонные пучки, образованные сгустками заряженных частиц высоких энергий имеют широкое практическое применение. Такие фотонные пучки можно получить с помощью сгустков релятивистских электронов, которые в периодическом электрическом поле осциллируют в поперечном направлении, что было в 1947 г. предложено В. Л. Гинзбургом для генерации микрорадиоволн [1]. Для генерации этих волн в 1951 г. Мотц предложил использовать последовательный ряд магнитных полей разной полярности, названный ондулятором [2]. В [3] были проведены экспериментальные исследования излучения при прохождении релятивистских электронов через ондулятор. Ондуляторное излучение перестраиваемо в довольно широком диапазоне излучаемых частот. В 1970 г. Корхмазяном [4] было предложено использовать ондулятор для получения рентгеновских и более жестких гамма пучков. Эксперимент по обнаружению ондуляторного излучения в рентгеновской области частот был впервые поставлен на Ереванском ускорителе [5].

В работе [6] было показано, что поляризация среды играет существенную роль в формировании спектрального распределения ондуляторного излучения. При этом существует нижний энергетический порог для формирования

излучения. Когда энергия сгустка заряженных частиц приближается к пороговой энергии, частотно-угловое распределение излучения сужается вокруг нулевого угла. В результате существенно увеличивается плотность излучения, и спектр становится более монохроматичным и направленным.

В теории ондуляторного излучения релятивистских частиц фундаментальную роль играет параметр ондулятора $q = \gamma\theta_0$, где γ – энергия частицы в единицах энергии покоя электрона mc^2 (m – масса электрона, c – скорость света в вакууме), θ_0 – максимальный угол отклонения частицы в поле ондулятора. В случае $q \leq 1$ излучение имеет дипольный характер, что обеспечивает когерентность излучения с различных периодических участков траектории и достаточную монохроматичность. Эти свойства учитываются при исследовании процесса вынужденного ондуляторного излучения в лазерах на свободных электронах (ЛСЭ). Для плоского синусоидального поля параметр ондулятора представляется в виде $q = eH_0l / (2\pi mc^2)$, где e – электрический заряд частицы, H_0 – амплитуда, l – пространственный период магнитного поля ондулятора.

Характерная длина волны ондуляторного излучения пропорциональна периоду ондулятора и обратно пропорциональна квадрату энергии частицы E . Поэтому для продвижения в более короткую волновую область, не увеличивая величину энергии излучающей частицы, единственным путем остается уменьшение периода ондулятора. Практически сложно создать ондулятор с пространственным периодом $l \leq 1$ см. Такая возможность реализуется в кристаллах при каналировании.

В результате численного моделирования процесса проникновения быстрых ионов в монокристалл было замечено, что при движении частиц под малыми углами относительно кристаллографических плоскостей или осей кристалла длина их пробега аномально возрастает. Это явление было названо каналированием, плоскостным или осевым, и объяснено Линдхардом [7]. Явление каналирования имеет место, когда угол попадания релятивистских частиц в монокристалл меньше угла Линдхарда $\theta_L = \sqrt{2v/\gamma}$, где v – усредненный потенциал атомов монокристалла в единицах mc^2 .

Излучение при каналировании заряженных частиц в кристаллах было исследовано в 1976 г. Кумаховым [8–10]. Длина каналирования ограничена некогерентным рассеянием частиц на электронах среды и тепловых колебаниях атомов (деканалирование). Следует отметить, что максимальная длина каналирования проявляется при плоскостном каналировании положительно заряженных частиц.

Спектры излучения при плоскостном и осевом каналировании позитронов с энергией в несколько ГэВ были измерены в эксперименте на линейном ускорителе SLAC в Стенфорде [11]. В работе [12] была построена теория излучения сгустка позитронов при плоскостном каналировании с учетом поляризации среды и проведено сравнение с экспериментальными данными [13]. Спектральные характеристики сгустка позитронов, каналированных в плотно

упакованных нанотрубках получены в [14]. Монография [15] посвящена проблемам теории электромагнитного излучения быстрых заряженных частиц, в частности, излучению при каналировании в кристаллах.

При плоскостном каналировании позитронов в кристалле волнообразной формы образуется также ондуляторное излучение. Идея возможности построения кристаллического ондулятора была предложена в [16–17], где предлагалась формировать КО ультразвуком или электромагнитной волной.

В очерке [18] представлены работы, посвященные различным методам получения КО, а также экспериментальные и теоретические работы по ондуляторному излучению позитронов и электронов. В работах [19–20] предлагалось получить КО периодической модуляцией содержания Ge в сверхрешетке $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$. КО также можно получить с помощью нанесения периодических микроцарапин [21–22], или тонких полосок [23], образующих периодическое напряжение на поверхности кристалла. При этом первые эксперименты по излучению позитронов в КО с царапинами [21] представлены в [22]. Эксперименты по излучению электронов в КО, образованного в результате изменения концентрации Ge в сверхрешетке $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ [19–20] представлены в работах [24–25].

Теория кристаллического ондуляторного излучения (КОИ) разработана в [26] без учета поляризации среды. Однако необходимо учитывать, как и в случае тормозного излучения [27], влияние среды на образование КОИ. Поляризация среды при образовании КОИ учтена в работе [28]. При этом появляется как энергетический порог образования излучения, так и порог на степень изогнутости кристалла. Спонтанное и вынужденное излучения в кристаллических и нанотрубных ондуляторах были исследованы в работе [29].

По аналогии с оптическим клистроном [30], где была рассмотрена система из двух разделенных ондуляторов, в [31] исследовано излучение позитронов в КО с промежутками. В данной системе монокристаллы КО изогнуты по дуге окружности и расположены так, что в системе сохраняется каналирование позитронов. Было показано, что из-за конструктивной интерференции полей излучения, образованных в каждой секции, имеет место усиление излучения, однако не удалось получить оптимальное значение расстояния между секциями и, следовательно, максимальное значение коэффициента усиления. В [32] рассмотрена задача об излучении позитронов в мульти-кристаллическом ондуляторе [33], образованного набором кристаллов с наклонным разрезом толщиной половины пространственного периода каналирования и расположенных на одинаковых расстояниях. В работе [34] рассмотрен случай, когда расстояние между кристаллами намного превосходит их толщину. Однако, в этом случае излучение будет сильно подавлено, поскольку как показано в настоящей работе, оптимальное расстояние между секциями, при котором значение коэффициента усиления максимально, меньше толщины монокристалла.

В пункте 2 настоящей работы получено выражение для поля ондулятор-

ного излучения. В пункте 3 найдено спектральное распределение числа излученных фотонов с учетом поляризации среды. В пункте 4 приведено выражение для фактора конструктивной интерференции и выявлено оптимальное значение продольного расстояния между секциями кристаллического ондулятора. В пункте 5 обсуждается вопрос о возможности создания кристаллического ондулятора с секциями (КОС) для формирования достаточно интенсивного, направленного пучка рентгеновских фотонов. Рассчитаны параметры КОС, состоящего из монокристаллов алмаза, а также необходимое значение энергии позитронного сгустка. В работе приведены спектральные распределения числа излученных фотонов, образованных в КО, как в отсутствии продольного расстояния между секциями, а также, когда данный промежуток является оптимальным.

2. Ондуляторное излучение каналированных в КОС позитронов с учетом поляризации среды

Кристаллический ондулятор с секциями состоит из $2n$ изогнутых по дуге окружности радиусом R и хордой длиной $l = 2a$ монокристаллов, чередующихся по знаку кривизны. При этом расстояния между монокристаллами представим равными $2pa$ вдоль оси OZ и $2pa^2/R$ вдоль оси OX . Максимальный угол отклонения изогнутых монокристаллов относительно оси OZ равен $\theta_0 = a/R$. Пусть первый монокристалл расположен симметрично относительно оси OX , а секции кристаллического ондулятора симметричны относительно оси OZ (рис.1).

Удобно продольное расстояние измерять в единицах a ($z = a\xi$). Если позитронный сгусток с малой угловой расходимостью попадает в монокристалл под углом $\theta_0 < \theta_L$, то позитроны каналируются. Средняя траектория плоскоотно- каналированных позитронов в первом монокристалле задается формулой:

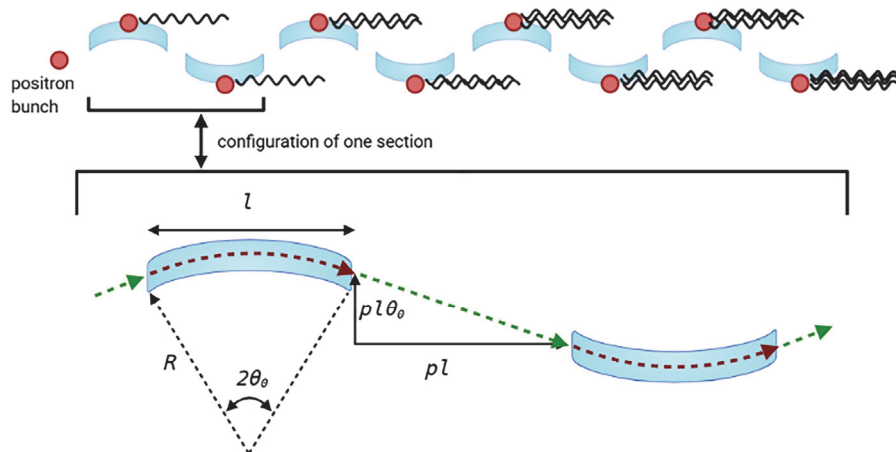


Рис.1. Схематическое представление кристаллического ондулятора с секциями и образование направленного излучения.

$$X_0(\xi) = pa\theta_0 + R\left(\sqrt{1-\theta_0^2\xi^2} - \sqrt{1-\theta_0^2}\right). \quad (1)$$

Если число колебаний на полупериоде в изогнутом канале длиной $2a(1+\theta_0^2/6)$ нечетно, то позитроны после выхода из первого монокристалла попадают во второй монокристалл под углом $\pi - \theta_0$.

С учетом расположений монокристаллов вдоль оси OZ для j -того монокристалла ($j = 0, 1, 2, \dots, 2n-1$) зависимость поперечной координаты от продольной координаты представляется в виде

$$x_j(\xi) = (-1)^j \left(pa\theta_0 + R\left(\sqrt{1-\theta_0^2(\xi - 2j(1+p))^2} - \sqrt{1-\theta_0^2}\right) \right), \quad (2)$$

$$-1 + 2j(1+p) \leq \xi \leq 1 + 2j(1+p).$$

Усредненная траектория каналированных позитронов повторяет форму линии канала КОС, т.е. состоит из дуг окружностей и прямолинейных участков.

Ясно, что при прямолинейном движении позитроны не излучают. Поле излучения позитрона в КОС представляет собой суперпозицию полей излучений, образованных в секциях и отличающихся по фазе. Величина $\mathbf{I}_0$, характеризующая суммарное поле излучения, с точностью до постоянного фазового множителя имеет вид

$$\mathbf{I}_0 = \sum_{j=0}^{2n-1} \mathbf{J}_j, \quad \mathbf{J}_j = \int_{-1}^1 [\mathbf{n} \times \boldsymbol{\beta}_j(\xi)] e^{i\phi_j(\xi)} d\xi, \quad (3)$$

где $\mathbf{n}$ направляющий вектор излучения

$$\mathbf{n} = \{\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta\}, \quad (4)$$

θ и φ полярный и азимутальный углы. Скорость позитронов сгустка в единицах скорости света c в вакууме $\boldsymbol{\beta}_j(\xi) = d\boldsymbol{\chi}_j(\xi)/dt$ с учетом малости θ_0 представим в виде

$$\boldsymbol{\beta}_j(\xi) = \left\{ (-1)^{j+1} (\xi - 2j(1+p)) \theta_0 \boldsymbol{\beta}_{\parallel}, \quad 0, \quad \boldsymbol{\beta}_{\parallel} \right\}, \quad (5)$$

где $\beta_{\parallel}$ – средняя продольная скорость позитронов. Входящая в выражение (3) фаза $\phi_j(\xi)$ имеет вид

$$\phi_j(\xi) = \frac{\omega l}{2\beta_{\parallel} c} \left(1 - \beta_{\parallel} \sqrt{\varepsilon(\omega)} (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\chi}_j(\xi)) \right), \quad (6)$$

где $\varepsilon(\omega)$ – диэлектрическая проницаемость среды, ω – частота излучения.

В данной задаче среднюю траекторию движения позитрона в секциях с достаточной точностью можно заменить ломанной

$$\boldsymbol{\chi}_j(\xi) = \left\{ \frac{\theta_0}{2} (-1)^j (1 + 2p - |\xi - 2j(1+p)|), \quad 0, \quad \xi \right\}. \quad (7)$$

Поэтому, после замены $\zeta = \xi - 2j(1+p)$, получаем

$$\boldsymbol{\chi}_j(\zeta) = \left\{ \frac{\theta_0}{2} (-1)^j (1 + 2p - |\zeta|), \quad 0, \quad \zeta + 2j(1 + p) \right\}, \quad (8)$$

$$\boldsymbol{\beta}_j(\zeta) = \left\{ (-1)^{j+1} \beta_{\parallel} \theta_0 \zeta, \quad 0, \quad \beta_{\parallel} \right\}, \quad -1 \leq \zeta \leq 1.$$

Поле излучения в j -той секции, представленное в переменных ζ , имеет вид

$$\mathbf{J}_j = \int_{-1}^1 [\mathbf{n} \times \boldsymbol{\beta}_j(\zeta)] e^{i\phi_j(\zeta)} d\zeta. \quad (9)$$

Фаза поля излучения в j -той секции определяется следующим образом

$$\phi_j(\zeta) = C_j + D_j \zeta, \quad (10)$$

где

$$\begin{aligned} C_j &= jY + (-1)^{j+1} C_p, \quad C_p = (2p + 1)C_0, \quad Y = 2(1 + p)Y_0, \\ Y_0 &= \frac{\omega l}{4c\beta_{\parallel}} \left(1 - \beta_{\parallel} \sqrt{\varepsilon(\omega)} \cos \vartheta \right), \quad D_j = 2 \left(Y_0 + (-1)^j C_0 \operatorname{sign}(\zeta) \right), \\ C_0 &= \frac{\omega l \theta_0}{8c} \sqrt{\varepsilon(\omega)} \sin \vartheta \cos \varphi. \end{aligned} \quad (11)$$

Векторное произведение, находящееся перед экспоненциальным выражением в (3), представим в виде

$$\begin{aligned} [\mathbf{n} \times \boldsymbol{\beta}_j(\zeta)] &= \mathbf{A} + 2(-1)^{j+1} \zeta \mathbf{B}, \\ \mathbf{A} &= \beta_{\parallel} (n_y \mathbf{i} - n_x \mathbf{j}), \quad \mathbf{B} = \frac{\beta_{\parallel} \theta_0}{2} (n_z \mathbf{j} - n_y \mathbf{k}). \end{aligned} \quad (12)$$

Здесь $\mathbf{i}$, $\mathbf{j}$, $\mathbf{k}$ – ортонормированные векторы вдоль координатных осей OX , OY и OZ , n_x , n_y , n_z – компоненты вектора $\mathbf{n}$.

Суммарное поле излучения определяется выражением

$$\mathbf{I}_0 = \sum_{k=0}^{n-1} (\mathbf{J}_- \exp(iC_{2k}) + \mathbf{J}_+ \exp(iC_{2k+1})), \quad (13)$$

где выделены поля излучения, образованные в секциях с четными и нечетными номерами. Следует отметить, что аналогичная формула (7) в работе [31] совпадёт с точной формулой (13), если в $\mathbf{I}_0$ поменять местами $\mathbf{J}_-$ и $\mathbf{J}_+$ в слагаемых суммы.

Коэффициенты $\mathbf{J}_{\pm}$ определяются с помощью следующих интегралов

$$\mathbf{J}_{\pm} = \int_{-1}^0 (\mathbf{A} \pm 2\zeta \mathbf{B}) \exp(i\zeta Y_{\pm}) d\zeta + \int_0^1 (\mathbf{A} \pm 2\zeta \mathbf{B}) \exp(i\zeta Y_{\mp}) d\zeta. \quad (14)$$

Здесь $Y_{\pm} = Y_0 \pm C_0$ и легко заметить, что

$$\mathbf{J}_-(\mathbf{B}, Y_{\mp}) = \mathbf{J}_+(-\mathbf{B}, Y_{\pm}).$$

С учетом этих соотношений, можно суммировать выражение (13):

$$\mathbf{I}_0 = F_0 e^{i(n-1)Y} (e^{-iC_p} \mathbf{J}_- + e^{iC_p} e^{iY} \mathbf{J}_+), \quad F_0 = \sin(nY) / \sin Y, \quad (15)$$

где F_0 – известный дифракционный синус.

После интегрирования (14) получаем:

$$\mathbf{J}_{\pm} = e^{\mp iC_0} \mathbf{g}_{\pm}, \quad \mathbf{g}_{-} = F_{+} \mathbf{A} + (F_{-} + iF) \mathbf{B}, \quad \mathbf{g}_{+} = F_{+}^{*} \mathbf{A} + (F_{-}^{*} + iF^{*}) \mathbf{B} = \mathbf{g}_{-}^{*}, \quad (16)$$

где знак « $*$ » означает комплексно-сопряженное значение величин, а функции $F_{\pm}$ и F определяются через функции $f_{\pm}$ и их производные

$$F_{\pm} = f_{-} e^{-iY_0} \pm f_{+} e^{iY_0}, \quad F = \dot{f}_{-} e^{-iY_0} + \dot{f}_{+} e^{iY_0},$$

$$f_{\pm} = \frac{\sin(Y_0 \pm C_0)}{Y_0 \pm C_0} = \frac{\sin Y_{\pm}}{Y_{\pm}}, \quad \dot{f}_{\pm} = \frac{df_{\pm}}{dY_{\pm}}. \quad (17)$$

Для поля излучения, образованного в КОС, окончательно, получаем следующее простое выражение

$$\mathbf{I}_0 = F_0 e^{i(n-1)Y} (\mathbf{K}_{-} + \mathbf{K}_{-}^{*} e^{iY}), \quad (18)$$

где введены следующие обозначения

$$\mathbf{K}_{+} = \mathbf{J}_{+} e^{iC_p} = \mathbf{g}_{+} e^{2ipC_0}, \quad \mathbf{K}_{-} = \mathbf{J}_{-} e^{-iC_p} = \mathbf{g}_{-} e^{-2ipC_0}, \quad \mathbf{K}_{+} = \mathbf{K}_{-}^{*}. \quad (19)$$

3. Спектральное распределение числа излученных фотонов

Для спектрально-углового распределения числа N излученных фотонов имеем [35]

$$\frac{d^3 N}{d\omega dO} = \frac{\alpha \omega \sqrt{\varepsilon(\omega)}}{(2\pi v_{\parallel})^2} \frac{l^2}{4} |\mathbf{I}_0|^2, \quad (20)$$

где учтено, что расстояние измеряется в единицах $a = l/2$, $\alpha = 1/137$ – постоянная тонкой структуры, $dO = \sin \theta d\theta d\varphi$ – телесный угол излучения. Входящая в формулу (20) функция $|\mathbf{I}_0|^2$ равна

$$|\mathbf{I}_0|^2 = F_0^2 |\mathbf{K}_{-} + \mathbf{K}_{-}^{*} e^{iY}|^2. \quad (21)$$

Если КОС состоит из достаточно большого числа пар монокристаллов, то можно воспользоваться следующим представлением δ -функции

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\sin^2(nY)}{\sin^2 Y} = \pi n \sum_{k=1}^{\infty} \delta(Y - k\pi). \quad (22)$$

В дипольном приближении параметр КОС $q = \gamma\theta_0$ меньше единицы, и основной вклад в излучение вносит первая гармоника $k=1$. Тогда $Y = \pi$, $\exp(i\pi) = -1$. С учетом (11) $Y_0 = \pi / (2(1+p)) = \mu$ и вместо выражения (21) имеем

$$|\mathbf{I}_0|^2 = \pi n |\mathbf{K}|^2 \delta(Y - \pi), \quad (23)$$

где

$$\mathbf{K} = \mathbf{K}_{-} - \mathbf{K}_{-}^{*} = 2i(G_{+} \mathbf{A} + (G_{-} + G) \mathbf{B}),$$

$$G_{\pm} = \text{Im}[F_{\pm} e^{-2C_0 p i}] = -f_{-} \sin(\mu + 2C_0 p) \pm f_{+} \sin(\mu - 2C_0 p), \quad (24)$$

$$G = \text{Re}[F e^{-2C_0 p i}] = -\dot{f}_{-} \cos(\mu + 2C_0 p) + \dot{f}_{+} \cos(\mu - 2C_0 p).$$

В этом приближении параметр C_0 мал. Если при этом $2pC_0 \ll 1$, то разложив $f_{\pm}$ и $\dot{f}_{\pm}$ по малому параметру C_0 и, оставив члены второго порядка малости, получим

$$\begin{aligned} f_{\pm} &= \frac{1}{\mu} \left(\sin \mu \mp V(\mu) C_0 + \left(\frac{V(\mu)}{\mu} - \frac{\sin \mu}{2} \right) C_0^2 \right), \\ \dot{f}_{\pm} &= \frac{df_{\pm}}{dC_0} = -V(\mu) \pm \left(\frac{V(\mu)}{\mu} - \frac{\sin \mu}{2} \right) C_0, \end{aligned} \quad (25)$$

где

$$V(z) = \frac{\sin z}{z} - \cos z. \quad (26)$$

С точностью до малых порядка C_0^2 выражения $G_{\pm}$ и G имеют следующий вид

$$\begin{aligned} G_+ &= -2 \frac{\sin \mu}{\mu} V(\mu) C_0, \quad G_- = -2 \frac{\sin^2 \mu}{\mu}, \\ G &= -2 \frac{\cos \mu}{\mu} V(\mu), \quad G_- + G_+ = -\frac{2}{\mu} V(2\mu). \end{aligned} \quad (27)$$

Следовательно, для функции $|\mathbf{K}|^2$ получаем выражение вида

$$|\mathbf{K}|^2 = 4 \left(G_+^2 \mathbf{A}^2 + (G_- + G)^2 \mathbf{B}^2 + 2G_+ (G_- + G) \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} \right). \quad (28)$$

Поскольку релятивистские частицы излучают под малым углом $\vartheta \leq \gamma^{-1}$,

то

$$\mathbf{A}^2 = \beta_{\parallel}^2 \sin^2 \vartheta \approx \vartheta^2, \quad \mathbf{B}^2 = \beta_{\parallel}^2 \frac{\theta_0^2}{4} = \frac{\theta_0^2}{4}, \quad \mathbf{B}^2 = \beta_{\parallel}^2 \frac{\theta_0^2}{4} = \frac{\theta_0^2}{4}. \quad (29)$$

Спектрально-угловое распределение числа излученных фотонов удобно представить в зависимости от безразмерной частоты $x = \omega / (\Omega \gamma^2)$, где $\Omega = \pi \beta_{\parallel} c / l$ и от угла ϑ в единицах $1/\gamma$, то есть $u = \vartheta \gamma$.

В рентгеновской области частот диэлектрическая проницаемость, характеризующая поляризацию диспергирующей среды, меньше единицы:

$$\sqrt{\varepsilon} = 1 - \frac{\omega_0^2}{2\omega^2} = 1 - \frac{r^2}{2x^2 \gamma^2}, \quad x \gg r / \gamma, \quad r = \frac{\omega_0}{\Omega \gamma} = \frac{2l}{\lambda_0 \gamma} = \frac{\gamma_0}{\gamma}. \quad (30)$$

Выражения в (11), (29) в безразмерных переменных x и u имеют вид

$$\begin{aligned} \mathbf{A}^2 &= \frac{u^2}{\gamma^2}, \quad \mathbf{B}^2 = \frac{q^2}{4\gamma^2}, \quad \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = -\frac{uq}{2\gamma^2} \cos \varphi, \\ C_0 &= \frac{\pi q}{4} x u \cos \varphi, \quad Y_0 = \frac{\pi x}{4} \left(u^2 + Q + \frac{r^2}{x^2} \right), \end{aligned} \quad (31)$$

где параметр Q в случае движения позитронов по дуге окружности равен

$$Q = (\gamma / \gamma_{\parallel})^2 = 1 + q^2 / 3.$$

Связь между углом и частотой излучения задается δ -функцией

$$\delta(Y - \pi) = \frac{4\mu}{\pi^2 x} \delta(u^2 - \varphi_p(x)), \quad \varphi_p(x) = \frac{2}{(1+p)x} - Q - \frac{r^2}{x^2}. \quad (32)$$

Выражение (28) окончательно представляется в виде

$$|\mathbf{K}|^2 = \left(\frac{2q}{\gamma\mu} \right)^2 \Phi_p(x, u, \varphi) \cdot \delta(u^2 - \varphi_p(x)), \quad (33)$$

$$\Phi_p(x, u, \varphi) = \left(\frac{\pi}{4} u^2 x V(\mu) \sin \mu - V(2\mu) \right)^2 \cos^2 \varphi + V^2(2\mu) \sin^2 \varphi.$$

Для спектрально-углового распределения числа излученных фотонов имеем

$$\frac{d^3 N_{ph}}{dx du^2 d\varphi} = \frac{\alpha \gamma^2 x}{16} |\mathbf{I}_0|^2 = \frac{\alpha n q^2}{\pi \mu} \Phi_p(x, u, \varphi) \cdot \delta(u^2 - \varphi_p(x)). \quad (34)$$

После интегрирования по азимутальному углу φ получаем

$$\begin{aligned} \frac{d^2 N_{ph}}{dx du^2} &= \alpha n q^2 F_p(x, u) \cdot \delta(u^2 - \varphi_p(x)), \\ F_p(x, u) &= \frac{1}{\mu} \left(\left(\frac{\pi}{4} \sin \mu V(\mu) u^2 x - V(2\mu) \right)^2 + V^2(2\mu) \right). \end{aligned} \quad (35)$$

4. Частотное распределение и фактор конструктивной интерференции

Для частотного распределения числа фотонов после интегрирования по углу излучения имеем

$$\begin{aligned} \frac{dN_{ph}}{dx} &= \alpha n q^2 F_p(x), \quad F_p(x) = \frac{1}{\mu} \left(\left(\psi_p(x) - V(2\mu) \right)^2 + V^2(2\mu) \right), \\ \mu &= \frac{\pi}{2(1+p)}, \quad \psi_p(x) = \frac{\pi}{4} V(\mu) \sin \mu \left(\frac{2}{(1+p)} - Qx - \frac{r^2}{x} \right), \end{aligned} \quad (36)$$

где частота излучения x находится в следующем интервале

$$\frac{1 - \sqrt{1 - Qr^2(1+p)^2}}{Q(1+p)} = x_0(p) \leq x \leq x_c(p) = \frac{1 + \sqrt{1 - Qr^2(1+p)^2}}{Q(1+p)} \quad (37)$$

с граничными частотами $x_0(p)$ и $x_c(p)$.

При $r \ll 1$ выражения для граничных частот упрощаются:

$$\frac{(1+p)r^2}{2} = x_0(p) \leq x \leq x_c(p) = \frac{2}{Q(1+p)}. \quad (38)$$

В отсутствии промежутка между монокристаллами ($p = 0$) имеем

$$F_0(x) = 1 + \left(\psi_0(x) - 1 \right)^2. \quad (39)$$

На граничных частотах x_0 и x_c (излучают под нулевым углом) имеем $\varphi_p(x_0) = \varphi_p(x_c) = \psi_p(x_0) = \psi_p(x_c) = 0$. Следовательно,

$$F_p(x_0) = F_p(x_c) = 2(1+p) \cdot V^2 \left(\frac{\pi}{1+p} \right). \quad (40)$$

Таким образом, фактор конструктивной интерференции, определяемый отношением вероятности излучения, образуемого в системе из монокристаллов, разделенных промежутком, к вероятности, когда этот промежуток отсутствует, для крайне мягких или жестких фотонов (под нулевым углом) имеет вид

$$\begin{aligned} \Lambda(p) &= \frac{F_p(x_0)}{F_0(x_0)} = \frac{F_p(x_c)}{F_0(x_c)} = (1+p) \cdot V^2 \left(\frac{\pi}{1+p} \right) \\ &= (1+p) \left(\frac{1+p}{\pi} \sin \left(\frac{\pi}{1+p} \right) - \cos \left(\frac{\pi}{1+p} \right) \right)^2. \end{aligned} \quad (41)$$

На рис.2 приведен график зависимости функции $\Lambda(p)$ от параметра p , равного отношению продольного расстояния между секциями к длине монокристалла.

Фактор $\Lambda(p)$ свое максимальное значение $\Lambda(p_o) \approx 1.3619$ принимает при значении параметра $p_o \approx 0.2768$. При этом энергия мягких фотонов излученных под нулевым углом увеличивается, а жестких - уменьшается в $1+p$ раза. Следовательно, применение КОС повысит эффективность, как спонтанного излучения, так и лазера на свободных электронах.

5. Обсуждение и некоторые численные результаты

Как известно, заряженный осциллятор с пространственным периодом $2l$ ($p=0$) в среде с плазменной длиной волны λ_0 излучает, когда его энергия больше или равна пороговой энергии $\gamma_{th} = \gamma_0 / \sqrt{Q}$, $\gamma_0 = 2l / \lambda_0$ [6]. Когда $\gamma = \gamma_{th}$, излучение образуется под нулевым углом с длиной волны $\lambda_{th} = \lambda_0^2 / (2l)$. Для

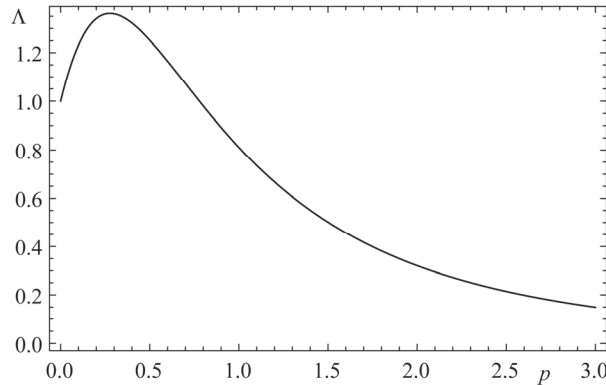


Рис.2. Зависимость фактора конструктивной интерференции $\Lambda(p)$ от параметра p , характеризующего расстояние между монокристаллами.

больших энергий спектр излучения становится шире и под нулевым углом излучаются крайне короткие и крайне длинные волны. В области энергий $\gamma \gg \gamma_{th}$ длина волны излучения крайне мягких фотонов $\lambda_s = \lambda_0^2 / l$ не зависит от γ . Кроме этого, число как крайне мягких, так и число крайне жестких излученных фотонов имеют одинаковый порядок [12–13].

В плоскостном канале изогнутого под углом θ_0 монокристалла с глубиной потенциальной ямы v (в единицах энергии покоя позитрона), позитроны каналируются, если угол входа в монокристалл меньше угла Линдхарда θ_L ($\theta_0 < \theta_L = \sqrt{2v / \gamma}$). Каналирование позитронов сохраняется в КОС с определенной конфигурацией. При этом сумма углов входа позитронов в монокристалл θ_0 и выхода равняется π . Поэтому, длину монокристалла необходимо выбрать равной $l = ml_{ch} / 2$ ($m = 1, 3, 5, \dots$), где $l_{ch} = \pi d / \theta_L$ – пространственный период монокристалла каналированных позитронов, d – межплоскостное расстояние. Из выше указанных необходимых условий для параметров КОС с учетом $l_u = 2l(1 + p)$ получаем следующие необходимые (собственные) значения энергии сгустка позитронов

$$\gamma_m = 2v \left(\frac{2\lambda_0^2}{\pi d m \lambda (1 + p)} \right)^2, \quad \gamma_{th} \ll \gamma_m \leq \frac{1}{2v}. \quad (42)$$

Здесь правая часть неравенства определяет оптимальное значение параметра ондулятора $q \leq 1$.

Приведем расчет параметров КОС, состоящего из совокупности монокристаллов углеродного алмаза с плоскостями (1 1 0) каналирования, межплоскостным расстоянием $d = 1.26 \text{ \AA}$, глубиной потенциальной ямы $U = 25 \text{ эВ}$ ($v = 4.89 \cdot 10^{-5}$) и с плазменной длиной волны $\lambda_0 = 3.263 \cdot 10^{-6} \text{ см}$ ($\hbar\omega_0 = 38 \text{ эВ}$) [15,28].

Для генерации направленного пучка фотонов с энергией 9 кэВ ($\lambda = 1.38(6) \text{ \AA}$) с учетом оптимального значения $p_0 = 0.277$ и условия (40) для значения m получаем

$$2.99 \leq m \ll 15.46. \quad (43)$$

Следовательно, необходимое значение энергии позитронного сгустка равно $\gamma = \gamma_3 = 10^4$ ($E = 5.11 \text{ ГэВ}$). Тогда имеем $\theta_L = 9.78 \cdot 10^{-5}$, $l_{ch} = \pi d / \theta_L = 4 \text{ мкм}$, $l = 3l_{ch} / 2 = 6 \text{ мкм}$, $\gamma_{th} = 2l / \lambda_0 = 3.68 \cdot 10^2$, $\gamma / \gamma_{th} = 37$. Выбирая угол изгиба монокристаллов $\theta_0 = 7.5 \cdot 10^{-5}$, для значения параметра ондулятора имеем $q = 0.8$.

Для создания эмиттера необходимо использовать монокристаллы длиной $l = 6 \text{ мкм}$, радиусом кривизны $R = l / (2\theta_0) = 4 \text{ см}$, которые расположены на расстояниях в продольном направлении $p_0 l = 1.66 \text{ мкм}$ и в поперечном – $p_0 \theta_0 l = 1.25 \text{ \AA}$. Число периодов КОС ограничено: $n \leq L_D / (2l)$, где L_D – длина деканалирования.

На рис.3 приведены спектральные распределения числа излученных

фотонов при значений параметров: $q = 0.8$, $Q = 1.21(3)$, $l = 6 \cdot 10^{-4}$ см, $\lambda_0 = 3.263 \cdot 10^{-6}$ см, $\gamma = 10^4$, $r = 2l / (\lambda_0 \gamma) = 3.68 \cdot 10^{-2}$, для двух значений $p = p_0 = 0.277$ и $p = 0$. Оба распределения принимают свои минимальные значения при $x_m = r / \sqrt{Q} = 3.339 \cdot 10^{-2}$, что соответствует энергии излученных фотонов 0.345 мэВ ($\lambda_m = 3.6 \cdot 10^{-2}$ Å).

Энергия излученных под нулевым углом мягких фотонов при $p = p_0 = 0.277$ равна $E_s(p_0) = 9$ кэВ ($\lambda_s(p_0) = 1.38$ Å) или $x_0(p_0) = 8.7 \cdot 10^{-4}$, а энергия жестких – $E_h(p_0) = 13.3$ мэВ ($\lambda_h(p_0) = 9.25 \cdot 10^{-4}$ Å) или $x_c(p_0) = 1.3$.

В случае $p = 0$ для крайне-мягких фотонов имеем $E_s(0) = 7$ кэВ ($\lambda_s(0) = 1.77$ Å), $x_0(0) = 6.77 \cdot 10^{-4}$, а для крайне-жестких – $E_h(0) = 17$ мэВ ($\lambda_h(0) = 7.3 \cdot 10^{-4}$ Å), $x_c(0) = 1.65$.

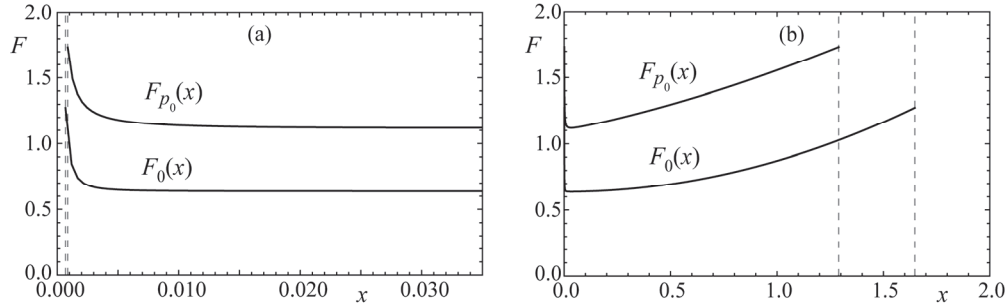


Рис.3. Спектральные распределения числа излученных фотонов при $p = p_0 = 0.277$ и $p = 0$. На рис.3а x меняется в пределах: $x_0(p_0) \leq x \leq x_m$ и $x_0(0) \leq x \leq x_m$. На рис.3б пределы изменения x следующие: $x_m \leq x \leq x_c(p_0)$ и $x_m \leq x \leq x_c(0)$.

6. Заключение

В работе получено аналитическое выражение для распределения числа излученных фотонов, образованные в кристаллическом ондуляторе с секциями. КОС может иметь важное практическое применение: может служить эмиттером для рентгеновского ЛСЭ (XFEL). Найдены оптимальные параметры такого эмиттера.

Таким образом, выбором необходимых параметров КОС и энергии позитронного сгустка, в процессе ЛСЭ, можно получить достаточно интенсивный пучок направленных рентгеновских фотонов с необходимой энергией.

ЛИТЕРАТУРА

1. **В.Л. Гинзбург.** Известия АН СССР, Сер. Физ., **11**(2), 165 (1947).
2. **H. Motz.** J. Appl. Phys., **22**, 527 (1951).
3. **H. Motz, W. Thon, R.N. Whitehurst.** J. Appl. Phys., **24**, 826 (1953).
4. **Н.А. Корхмязян.** Изв. АН Арм. ССР, Физика, **5**, 287 (1970); 418 (1970).
5. **А.И. Алиханян, С.К. Есин, К.А. Испирян, С.А. Канканян, Н.А. Корхмязян, А.Г. Оганесян, А.Г. Таманян.** Письма ЖЭТФ, **15**, 142 (1972).
6. **Л.А. Геворгян, Н.А. Корхмязян.** ЖЭТФ, **76**, 1226 (1979).
7. **J. Lindhard.** Physcis Uspekhi, **99** (2), 249 (1969).
8. **М.А. Кумакхов.** Phys. Lett. A, **57**, 17 (1976).
9. **М.А. Кумахов.** ДАН СССР, **230**(5), 1077 (1976).
10. **М.А. Кумахов.** ЖЭТФ, **72** (4), 1489 (1977).
11. **Р. Авакян, И. Мирошниченко, Д. Мюррэй, Т. Фигут.** Письма в ЖЭТФ, **29**(12), 786 (1979); ЖЭТФ, **82**(6), 1825 (1982).
12. **L.A. Gevorgian, L.A. Hovsepyan.** J. Contemp. Phys., **42**, 87 (2007).
13. **R. Avakian, L. Gevorgian, L. Hovsepyan.** NIM B, **309**, 20 (2013).
14. **K.L. Gevorgian, L.A. Gevorgian.** J. Contemp. Phys., **54**, 126 (2019).
15. **В.А. Базылев, Н.К. Жеваго.** Излучение быстрых частиц в среде и во внешних полях, Москва, Наука, 1987.
16. **V.V. Kaplin, S.V. Plotnikov, S.A. Vorobev.** Zh. Tekh. Fiz., **50**, 1079 (1980).
17. **V.G. Baryshevsky, I.Ya. Dubovskaya, A.O. Grubich.** Phys. Lett. A, **77**, 61 (1980).
18. **V.G. Baryshevsky, V.V. Tikhomirov.** NIM B, **309**, 30 (2013).
19. **H. Ikezi, Y. Lin-Liu, T. Ohkawa.** Phys. Rev. B, **30**, 1567 (1984).
20. **U. Mikkelsen, E. Uggerhoj.** NIM B, **160**, 435 (2000).
21. **S. Belucci, S. Bini, V.M. Biryukov, et. al.** Phys. Rev. Lett., **90**, 034801 (2003).
22. **V.T. Baranov, et.al.** JETP Lett., **82**, 562 (2005).
23. **R.O. Avakian, K.T. Avetyan, K.A. Ispirian, E.G. Melikyan.** NIM A, **492**, 11 (2002).
24. **H. Backe, et. al.** Nuovo Cim. C, **34**, 157 (2011).
25. **H. Backe, et. al.** NIM B, **309**, 37 (2013).
26. **A.A. Korol, A.V. Solovev, W. Greiner.** J. Phys. G., **24**, L45 (1998).
27. **M.L. Ter-Mikaelian.** High Energy Electromagnetic Processes in Condensed Media, New York: Wiley-Interscience, 1972.
28. **L.A. Gevorgian, R.O. Avakyan, K.A. Ispirian, R.K. Ispirian.** JETP Letters, **68**(6), 467 (1998).
29. **L.A. Gevorgian, R.O. Avakyan, K.A. Ispirian, R.K. Ispirian.** NIM B, **173**, 112 (2001).
30. **Н.А. Винокуров, А.Н. Скринский.** Препринт 77-59 (Новосибирск, ИЯФ СО РАН, 1977).
31. **R.O. Avakian, L.A. Gevorgian, K.A. Ispirian, A.H. Shamamian.** NIM B, **227**, 104 (2005).
32. **V. Epp, J. Janz, V. Kaplin.** NIM B, **388**, 24 (2016).
33. **S. Vorobiev, V. Kaplin, E. Rozum.** Patent SU 876044 A1, 1982.
34. **V. Epp, J. Janz, V. Kaplin.** NIM B, **402**, 98 (2017).
35. **J.D. Jackson.** Classical Electrodynamics, 3rd ed., New York: Wiley, 1999.

ՊՈԶԻՏՐՈՆՆԵՐԻ ՃԱՌԱԳԱՅԹՄԱՆ ՈՒԺԵՂԱՑՈՒՄԸ ԵՎ
ԱՌԱՆՁՆԱՀԱՏԿՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԸ ՍԵԿՑԻԱՆԵՐՈՎ ԲՅՈՒՐԵՂԱՅԻՆ
ՕՆԴՈՒԼՅԱՏՈՐՈՒՄ

Հ.Լ. ԳԵՎՈՐԳՅԱՆ, Լ.Ա. ԳԵՎՈՐԳՅԱՆ, Ա.Հ. ՇԱՄԱՄՅԱՆ

Հետազոտվել է սեկցիաներով բյուրեղային օնդուլյատորում ուղղորդված պոզիտրոնների օնդուլյատորային ճառագայթման խնդիրը՝ հաշվի առնելով միջավայրի բևեռացումը: Համակարգն այնպիսին է, որ պահպանում է տրված էներգիայով պոզիտրոնների հարթ ուղղորդումը: Ճառագայթված ֆոտոնների թվի սպեկտրալ բաշխման համար ստացվել է անալիտիկ արտահայտություն: Ներկայացված են սպեկտրի առանձնահատկությունները: Ինչպես որ սպասվում էր, ձևափոխված բյուրեղային օնդուլյատորի առանձին մասերում ձևավորված ճառագայթման դաշտերի կոնստրուկտիվ ինտերֆերենցիայի շնորհիվ ճառագայթումն ուժեղանում է: Գտնվել են սեկցիաներով բյուրեղային օնդուլյատորի օպտիմալ պարամետրերը: Նմանատիպ միկրոէմիտերները կարող են ունենալ գործնական լայն կիրառություն, քանի որ նրանց միջոցով կարելի է ստանալ ինչպես կոշտ, այնպես էլ փափուկ ֆոտոնների ուղղորդված փնջեր:

GAIN AND FEATURES OF RADIATION OF POSITRONS IN A
CRYSTALLINE UNDULATOR WITH SECTIONS

H.L. GEVORGYAN, L.A. GEVORGIAN, A.H. SHAMAMIAN

Undulator radiation of positrons channeled in a crystalline undulator with sections (CUS) is investigated theoretically, taking into account the effect of dielectric polarization of the crystalline medium. Configuration of CUS preserves in-plane channeling of positrons with a given energy. An analytical expression is obtained for the spectral distribution of the number of radiated photons. The features of this spectrum are presented. As expected, such a modification of the crystalline undulator leads to the gain of radiation due to the constructive interference of the radiation fields formed in separate sections. The optimal parameters of the CUS are found. Such micro-emitters can have wide practical applications, since they can generate directional beams of both hard and soft photons.

СТАТУС ЛИНЕЙНОГО УСКОРИТЕЛЯ ЛУЭ-75 НАЦИОНАЛЬНОЙ НАУЧНОЙ ЛАБОРАТОРИИ ИМ. А. АЛИХАНИЯ И СТАБИЛЬНОСТЬ ЭНЕРГИИ ЭЛЕКТРОННОГО ПУЧКА

А.С. АКОПЯН*

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

*e-mail: ashothako@yerphi.am

(Поступила в редакцию 1 июня 2021 г.)

Представлен научно-технический статус линейного ускорителя электронов ЛУЭ-75 Национальной научной лаборатории им. А. Алиханяна после проведенных реновационно-восстановительных работ и рассмотрены некоторые расчетные данные влияния частотных, фазовых и температурных изменений тракта высокочастотного питания и ускоряющей системы на стабильность энергии электронного пучка, связанные с задействованием дополнительной ускорительной станции.

1. О статусе ЛУЭ-75

Электронный ускоритель ЛУЭ-75 Национальной научной лаборатории им. А. Алиханяна (ННЛА, Ереванский физический институт – ЕрФИ), протонный медицинский ускоритель – циклотрон С-18 с возможностью проведения физических экспериментов, а также уникальный линейный ускоритель AREAL Института синхротронных исследований CANDLE, позволяют Армении оставаться региональным центром применения ускорительной физики и техники в области фундаментальных и прикладных научных исследований [1,2].

Резонансный ускоритель электронов на бегущей волне десятисантиметрового диапазона ЛУЭ-75 – инжектор ереванского 6-ти ГэВ-ного синхротрона АРУС (рис.1), работа кольцевой части которого в настоящее время приостановлена – функционирует автономно в качестве единственного базового комплекса экспериментального отделения ННЛА для изучения актуальных задач низкоэнергетической ядерной физики в диапазоне энергий 10–75 МэВ.

В качестве источника электронов в ЛУЭ-75 используется термоэлектронная пушка с оптикой Пирса, с выхода которой 50 кэВ-ный пучок поступает на вход волноводного группирователя (инжекторную секцию). В группирователе в процессе автофазировки равномерно распределённый по фазам волны поток электронов группируется в сгустки (модулируется по плотности) с частотой следования, равной частоте СВЧ-ускоряющего поля и одновременно ускоряется до

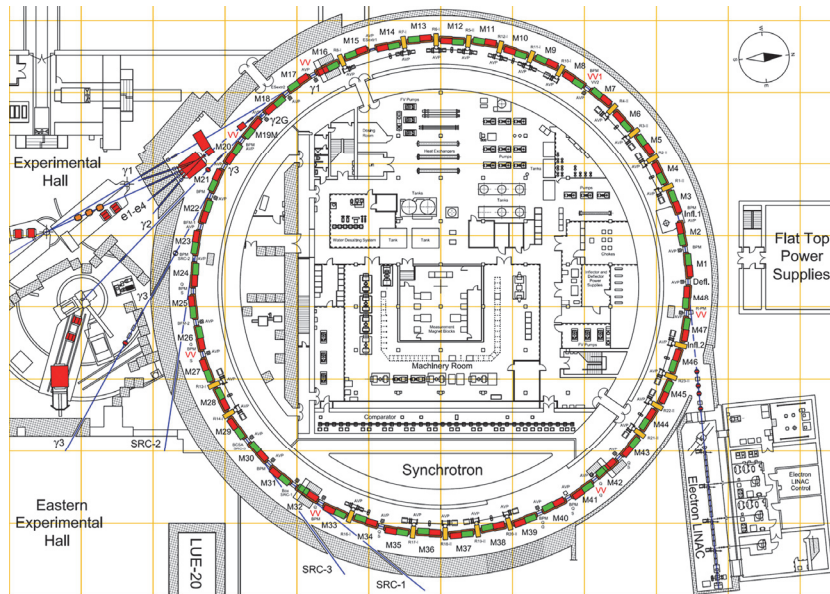


Рис.1. Схема синхротронного кольца АРУС.

энергии 3 МэВ; дальнейшее ускорение осуществляется тремя идентичными основными ускоряющими секциями (рис.2), в которые поступает СВЧ-энергия от трёх мощных клистронных постов. Первый клистрон работает по схеме



Рис.2. Ускоряющие секции ЛУЭ-75.

автогенератора, предложенной специалистами ЕрФИ еще в 70-х годах [3], снабжая остальные клистроны, работающие в усилительном режиме, входной мощностью. Преимуществом автогенераторной системы питания ЛУЭ-75 является эксплуатационная надежность, простота, отсутствие дорогостоящего внешнего драйвера. При необходимости имеется возможность работы и в режиме внешнего возбуждения мощных пролетных клистронов.

При работе синхротрона линейный ускоритель в качестве инжектора запускался от системы управления процессами электронно-кольцевого ускорителя (ЭКУ) синхронно с частотой питания электромагнитов ЭКУ с номинальной частотой посылок 47–49 Гц. В автономном режиме система синхронизации питается и запускается синхронно от той же стабильной сети, что и высоковольтные модуляторы СВЧ генераторов и электронной пушки, чем исключается возникновение биений. Номинальная частота следования запускающих импульсов равна 50 Гц. Импульсный режим ускорителя приводит к двойной модуляции электронного потока. Временная структура пучка представлена на рис.3.



Рис.3. Временная структура пучка ЛУЭ-75.

Ускоритель предоставляет экспериментаторам электронные пучки со средним током до 10 мкА (без коллимации), что соответствует импульсному току до 150–200 мА в зависимости от длительности макроимпульса и энергии. Коллимированный и хорошо сгруппированный пучок на номинальных энергиях имеет ширину энергетического спектра (FWHM) порядка 2%. Подробно параметры линейного ускорительного комплекса ЛУЭ-75, включающего собственно линейный ускоритель и тракт транспортировки с параллельным переносом (рис.4), расположенный в кольцевом зале синхротрона, представлены в статьях [4–6].

В последние годы были проведены некоторые реновационно-восстановительные работы [4], в частности, была восстановлена и задействована 3-я ускорительная станция, включающая ускоряющую секцию, клистронный пост с волноводным трактом и высоковольтным импульсным модулятором, а также системы их обеспечения. Благодаря проведенным работам энергия электронов на выходе была доведена до 75 МэВ, что создало возможность изучения фотоядерных процессов при реакциях, имеющих более высокий энергетический порог; была повышена надежность функционирования узлов при длительных сеансах.

ЛУЭ-75 является однооборотным ускорителем и вместе с трактом параллельного переноса пучка имеет длину порядка 45 м. Направление движения пучка примерно совпадает с направлением восток-запад, т.е. почти перпендикулярно магнитным силовым линиям Земли (рис.1). Для устранения влияния геомагнитного поля на пучок были изготовлены и установлены на вновь задействованную ускоряющую секцию протяженные корректирующие катушки, компенсирующие смещение центра тяжести пучка в горизонтальной и

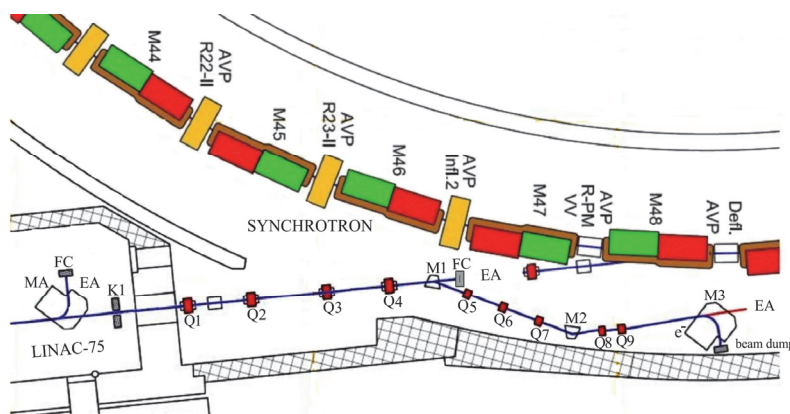


Рис.4. Схема расположения тракта транспортировки и параллельного переноса в синхротронном зале. МА – дипольный анализирующий магнит 90° на выходе ЛУЭ-75; FC – цилиндр Фарадея; K1 – коллиматор; M1, M2 – поворотные магниты параллельного переноса; M3 – отклоняющий магнит (beam dump), используемый для получения фотонных пучков; Q1...Q9 – квадрупольные линзы; EA – экспериментальные зоны.

вертикальной плоскостях; тем самым нейтрализуется также влияние расположенных вблизи ферромагнитных масс и разных источников полей.

Тракт транспортировки с параллельным переносом пучка расположен в синхротронном зале вдали от помещения ЛУЭ-75 за его радиационно-защитной стеной (рис.4), где существенное уменьшение радиационного фона при отключенном синхротроне и, практически, отсутствие влияния электромагнитных помех и наводок от электрорадиотехнических устройств линейного ускорителя на измерительную аппаратуру, создали благоприятные низкофоновые условия для проведения прецизионных экспериментов. Проведена модернизация элементов магнитной оптики тракта параллельного переноса.

Разработана методика получения уникальных пучков экстремально низкой интенсивности порядка десятков электронов в секунду в диапазоне энергий 15–75 МэВ. Такие пучки на ЛУЭ-75 применялись в качестве тестовых с числом одноэлектронных событий более 70% для калибровки кристаллических детекторов элементарных частиц в рамках совместных договорных работ ННЛА (Ереван) – ОИЯИ (Дубна) [4,5,7,8]; пучки экстремально низкой интенсивности могут применяться для изучения отдельных событий, исследования биологических эффектов ионизирующей радиации в малых дозах, дифракционных задач и др. Создана также возможность получения фотонных пучков с помощью отклоняющего электромагнита M3 (рис.4) в самом конце тракта. При выполнении работ в основном использовалась наличная технико-технологическая база ННЛА.

Параметры пучка и их стабильность, определяющие качество эксперимента, зависят от различных факторов [9–12]. В связи с включением на выходе ускорителя 3-й ускорительной станции с дополнительной секцией ниже рассматривается влияние частотных, фазовых и температурных изменений на стабильность энергии электронного пучка на выходе ускоряющей секции ЛУЭ-75.

2. О стабильности энергии электронного пучка

Одним из важных параметров электронного пучка является стабильность энергии и энергетический разброс пучка, оцениваемый шириной энергетического спектра, определяющей степень монохроматичности пучка. Устойчивость ускорения зависит от начальных условий на входах ускоряющих секций.

Рассмотрим зависимость относительного прироста энергии пучка от начальной фазы волны на входе в ускоряющую секцию. С целью получения максимального ускорения при настройке ускорителя начальная фаза частиц, т.е. фаза волны, в которой оказываются частицы в начале каждой из основных ускоряющих секций, выбирается так, чтобы сгустки оказались вблизи гребня основной гармоники ускоряющей волны. Изменение начальной фазы приводит к смещению центра тяжести сгустков от оптимального положения, что приводит к недобору энергии на выходе секции. С увеличением ошибки фазирования увеличивается энергетический разброс пучка. Для типового режима ЛУЭ-75 на рис. 5 приведены расчетные кривые зависимости относительного прироста энергии от начальной фазы при одинаковой амплитуде ускоряющих полей и неизменной частоте генератора поля для трех основных секций, на входы которых пучок поступает с разными энергиями. Оптимальные фазы секций отличаются, в зависимости от кинетической энергии влетающих в них частиц, но с увеличением входной энергии кривые практически сливаются, и оптимальное значение начальной фазы электронов близка к нулю.

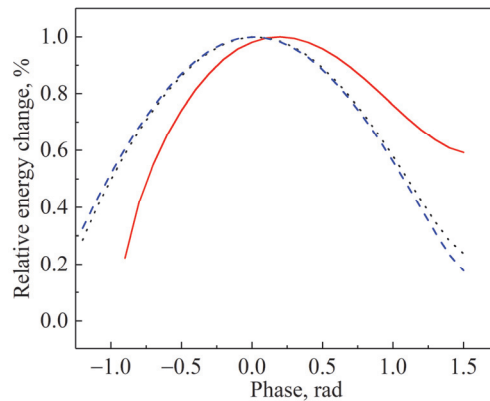


Рис.5. Зависимость относительного прироста выходной энергии электронов от начальной фазы ускоряющей волны для основных ускоряющих секций линейного ускорителя; сплошная кривая – на входе 1-ой секции 3 МэВ; точки – на входе II-ой секции 25 МэВ; штриховая – на входе III-ей секции 50 МэВ.

При небольших отклонениях от оптимальной для каждой секции начальной фазы относительное изменение энергии на выходах примерно одинаково, но с увеличением отклонения вновь задействованная секция, в которую влетают частицы с энергией 50 МэВ, как и вторая секция с входным 25 МэВ-ным пучком, более критичны относительно изменения начальной фазы: при одном и том же

отклонении фазы недобор энергии оказывается больше, чем для первой секции, в которую электроны влетают с энергией 3 МэВ. ЛУЭ-75 – ускоритель бегущей волны и с точки зрения СВЧ электродинамики является прибором длительного взаимодействия. С увеличением энергии время пролета через секцию – время взаимодействия пучка с ускоряющей волной – уменьшается, и одно и то же отклонение по какой-либо причине от оптимальной начальной фазы, приводит к большему недобору энергии на выходе (ср. кривые на рис.5). Аналогично можно объяснить и разницу в поведении семейства кривых, приведенных в [9], где дана зависимость относительного прироста энергии от начальных условий, но при разных амплитудах ускоряющей волны.

Отклонения от оптимального значения могут быть при неправильном фазировании секции. Более наглядно влияние начальной фазы частицы на энергию можно показать, построив кривые зависимости относительного изменения энергии пучка (изменения относительного прироста энергии) на выходе ускоряющей секции от начальной фазы при небольшом отклонении последней от установленной, к примеру, на 1° . Приведенные на рис. 6 кривые построены для трех основных ускоряющих секций при постоянной частоте генератора и одинаковой амплитуде СВЧ поля на входах при отклонении фазы от установленной на 1° .

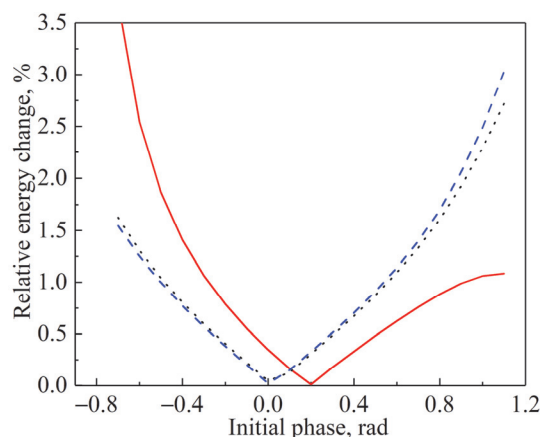


Рис.6. Относительное изменение энергии частиц на выходе секции при отклонении начальной фазы инжекции от установленного значения на 1° для основных секций; параметром служит энергия частиц на входе секции. Сплошная кривая – на входе 1-ой секции 3 МэВ; точки – на входе 2-ой секции 25 МэВ; пунктирная – на входе 3-й секции 50 МэВ.

Из графиков видно, что чем больше ошибка фазирования, тем больше относительное изменение выходной энергии частиц при отклонении начальной фазы электронов на 1° от установленного, причем при небольших ошибках фазирования относительные изменения энергии на выходах секций примерно одинаковы, но с увеличением ошибки вторая и третья секции становятся более критичными по сравнению с первой, на вход которой поступает пучок с намного меньшей энергией. Так, при одинаковой ошибке фазирования в 50° отклонение

всего на 1° от установленного приводит к изменению энергии на выходе первой секции на 1%, а на выходе третьей секции на 2%. Однако, такая ошибка фазирования приводит к неустойчивости ускорения и обнаруживается по нестабильности тока пучка, измеряемого после магнитного анализатора, и неверная установка фазы устраняется ее регулированием.

Кривые рис.5 и 6 показывают, что при небольших отклонениях начальной фазы от оптимальной энергетический разброс пучка примерно одинаков для всех трех секций с разными энергиями электронов на входах; так, изменение фазы на $\pm 8^\circ$ от оптимального значения приводит к относительному изменению энергии $\pm 1\%$.

Дополнительное уширение энергетического спектра появляется также из-за дисперсионных свойств волноводного тракта. В процессе работы ускорителя частота генератора ускоряющего поля может изменяться под воздействием внешних факторов – питающих напряжений, температуры, что приведет к изменению фазовой скорости волны в волноводе. Появятся дополнительные фазовые сдвиги на входах ускоряющих секций и фазовое скольжение сгустков электронов относительно ускоряющей волны в секциях. Фазовое скольжение сгустков приводит к увеличению разброса энергии электронов, что рассмотрено в литературе [9–12], для ЛУЭ-75 – в [4]. Здесь рассмотрим фазовые сдвиги между секциями, возникающие из-за неодинаковых длин волноводных линий передачи.

Волноводные линии передачи высокого уровня мощности от клистронов до ускоряющих секций имеют примерно одинаковую длину; поэтому отклонение частоты генератора по какой либо причине от установленной при настройке на входах секций возникают одинаковые фазовые сдвиги. Линии возбуждения клистронов, собранные в основном из прямоугольных волноводов сечением (72×34) мм² и проложенные от 1-го клистронов к остальным двум, имеют разные длины – 7.2 м и 11.5 м соответственно. Используется основная волна в прямоугольном волноводе Н₁₀. Небольшие отрезки коаксиальных линий с ТЕМ- волной дисперсностью не обладают. На рис.7 приведены зависимости дополнительных фазовых сдвигов между ускоряющими секциями от величины отклонения частоты генератора Δf , возникающих из-за дисперсности волноводных линий возбуждения клистронов. С увеличением длины линии возбуждения кривая идет круче. К примеру, отклонение частоты генератора в пределах ± 100 кГц (что возможно при длительных сеансах) вызывает изменение фазового сдвига между 1-ой и 2-ой секциями $\pm 1.3^\circ$, а между 1-ой и 3-ей (вновь задействованной) секциями – $\pm 2^\circ$, что привносит свой вклад в нестабильность энергетического спектра.

Фазовый сдвиг возникает также при изменении температуры волноводного тракта из-за изменения его геометрических размеров. На рис.8 приведена расчетная зависимость фазового сдвига из-за изменения температуры волноводного тракта высокого уровня мощности (общей длиной 30 м) для основной волны в прямоугольном волноводе сечением 90×45 мм² при неизменной рабочей частоте. Расчеты показывают, что в широких пределах рабочей температуры волноводного тракта фазовый сдвиг практически не зависит от значения

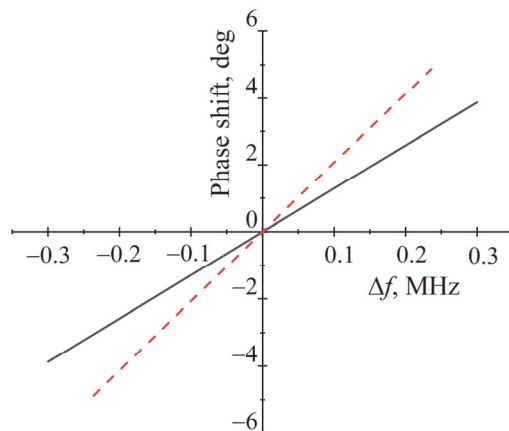


Рис.7. Зависимость дополнительного фазового сдвига в градусах из-за дисперсности линий возбуждения клистронов от смещения частоты генератора от рабочей частоты: сплошная кривая – между 1-ой и 2-ой секциями; точки – между 1-й и 3-й секциями.

температуры, при которой была осуществлена настройка ускорителя, а зависит от ее изменения: изменение геометрических размеров приводит к изменению длины волны в волноводе, что в свою очередь приводит к изменению электрической длины питающих ускоряющих секций волноводного тракта. Из графика видно, что изменение температуры на $\pm 0.5^\circ\text{C}$ приводит к изменению начальной фазы $\pm 1^\circ$. Такое отклонение начальной фазы от оптимальной приводит к несущественному изменению энергии – около 0.014%.

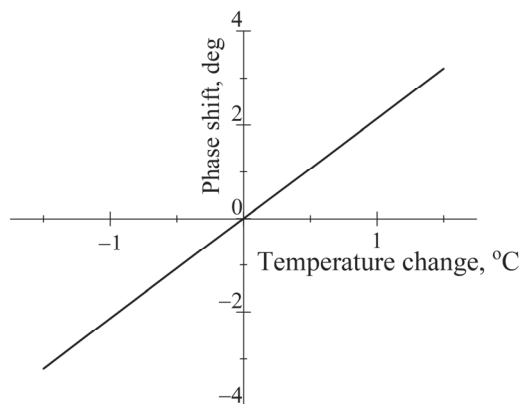


Рис.8. Зависимость фазового сдвига от температуры волноводного тракта.

На устойчивость энергии и тока пучка действует также стабильность частоты запускающих импульсов, синхронизированных с питающей ускоритель стабильной сетью; последняя в свою очередь работает синхронно с промышленной сетью. Изменение частоты промышленной сети приводит к изменению среднего тока мощных клистронов, что приводит к своему вкладу в нестабильность пучка. Изменение среднего тока устраняется соответствующей подстройкой. Нестабильность частоты промышленной сети наблюдается редко даже при непрерывных многодневных сеансах.

3. Заключение

Полученные результаты учитывались при наладке и настройке ускорителя после пуска 3-ей ускорительной станции. Потребовалось доработать систему фазирования вновь задействованной ускоряющей секции включением дополнительного переменного волноводного фазовращателя в линию возбуждения генератора для установления и поддержания в необходимых пределах относительного фазового сдвига СВЧ колебаний на входе этой секции. С включением модулятора и клистронного поста для работы в режиме 50–75 МэВ потребовалось доработать системы охлаждения и термостатирования.

Приведенные выше расчетные данные и практические работы на ускорителе показывают, что с включением дополнительной ускоряющей секции повышаются требования к стабильности частоты генератора и фазовых соотношений, к оптимальному выбору которых практически сводится настройка ЛУЭ-75, как и любого ускорителя. Заметим, что неустойчивость ускорения, вызванная изменением частоты ускоряющего поля, суммируется с неустойчивостью от других факторов. Повышаются требования к системе синхронного питания ускорителя.

Хотя экспериментальные работы, осуществляемые в последние годы на ЛУЭ-75 [7,13–15], показали его надежную работу, с целью улучшения параметров планируется разработать новую систему термостатирования секций и охлаждения узлов ускорителя с применением ПИД-регулирования и модульной схемы стабилизации; такая схема позволит обеспечить не только автоматическое поддержание температуры секций и генераторных узлов в заданных пределах, но также оперативность и точность установления температур при изменении режимов линейного ускорителя.

В настоящее время ускоритель находится в рабочем состоянии и предоставляет электронные пучки для задач низкоэнергетической ядерной физики и научно-методических исследований. Ускоритель может служить и для учебно-образовательных целей. Планируются работы по модернизации ускорителя с внедрением современной вакуумной техники, силовой электроники и измерительной базы, что повысит качество пучка, а значит, и востребованность ЛУЭ-75 для прецизионных экспериментов. Это позволит расширить круг решаемых на ускорителе актуальных научно-исследовательских задач.

Автор выражает благодарность Л.Р. Ваградян за оказанную помощь при написании статьи.

ЛИТЕРАТУРА

1. I. Kerobyan, H. Marukyan. J. Contemp. Phys., **55**, 8, (2020).
2. M.I. Ivanyan, V.A. Danielyan, B.A. Grigoryan, A.H. Grigoryan, A.V. Tsakanian, V.M. Tsakanov, A.S. Vardanyan, S.V. Zakaryan. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A, **829**, 187 (2016).
3. Г.Г. Оксюзян, Э.М. Лазиев, В.Л. Серов, В.И. Белоглазов, И.А. Гришаев, Т.Ф. Никитина, Л.Н. Сдобнова. Вопросы атомной науки и техники. Серия: Физика высоких энергий и атомного ядра, **4**(6), 67 (1973). (ХФТИ АН УССР).
4. A.M. Sirunyan, A.S. Hakobyan, A.Z. Babayan, H.H. Marukyan, H.G. Mkrtchyan,

- K.D. Davtyan, H.L. Arutyunov, G.M. Ayvazyan, S.K. Avagyan, V.H. Martirosyan, A.A. Margaryan, G.G. Khachatryan, L.R. Vahradyan. J. Contemp. Phys., **54**, 225 (2019).
5. A. Sirunyan, A. Hakobyan, G. Ayvazyan, A. Babayan, H. Vardanyan, G. Zohrabyan, K. Davtyan, H. Torosyan, A. Papayan. J. Contemp. Phys., **53**, 271 (2018).
 6. Р.О. Авакян, А.Э. Аветисян, А.З. Бабаян, К.А. Испирян, В.Ц. Никогосян, С.П. Тароян. Изв. НАН Армении, Физика, **45**, 69 (2010).
 7. A. Artikov, A. Babayan, V. Baranov, J. Budagov, Yu. I. Davydov, V. Glagolev, A. Hakobyan, H. Hakobyan, D.G. Hitlin, S. Miscetti, T. Mkrtchian, A. Simonenko, A. Sirunyan, A. Shalyugin, V. Tereschenko, H. Torosyan, Z. Usubov, H. Zohrabyan. Tests of undoped CsI matrix with an extremely low intensity electron beam. Conference New Trends in High Energy Physics, Budva, Montenegro, p.24, September 2018, <http://indico.jinr.ru/contributionDisplay.py?contribId=111&confId=410>.
 8. Ю.И. Давыдов. Требования к пучку для тестирования детекторов (для кристаллов CsI в частности), опыт работы в Ереване. <https://indico.jinr.ru/conferenceDisplay.py?confId=363>.
 9. О.А. Вальднер, А.Д. Власов, А.В. Шальнов. Линейные ускорители. Москва: Атомиздат, 1969.
 10. А.Н. Лебедев, А.В. Шальнов. Основы физики и техники ускорителей. Москва: Энергоатомиздат, 1991.
 11. О.А. Вальднер, Н.П. Собенин, Б.В. Зверев, И.С. Щедрин. Справочник по диафрагмированным волноводам. Москва: Атомиздат, 1969.
 12. Е.Г. Комар. Основы ускорительной техники. Москва: Атомиздат, 1975.
 13. Y. Aleksanyan, S.M. Amirkhanyan, A. Balabekyan, N.A. Demekhina, H.R. Gulkanyan, T.V. Kotanjyan, V. Mangasaryan, V.S. Poghosov, L.A. Poghosyan, S. Faltajanyan, J. Contemp. Phys., **55**, 275 (2020).
 14. Р.О. Авакян, А.Е. Аветисян, И.А. Керопян, С.П. Тароян, А.С. Данагулян, Р.М. Мирзоян, К.С. Бунятов, Р.Ц. Саркисян, С.А. Галумян, В.С. Еганов, А.А. Оганесян, Г.С. Вартамян, В.Б. Гавалян, В.Ц. Никогосян, В.С. Айрапетян, А.З. Бабаян, А.А. Матосян, С.В. Жамкочян. Изв. НАН Армении, Физика, **47**, 9, (2012).
 15. А.Р. Мкртчян, А.Г. Мкртчян, Л.Ш. Григорян, А.А. Саарян, А.А. Асланян, Э.М. Арутюнян, С.П. Тароян, В.Ц. Никогосян, В.Р. Кочарян, Г.А. Айвазян, В.В. Налбандян, Т.Г. Довлатян, А.Е. Мовсисян, Э.А. Мкртчян, О.Р. Мурадян, С.А. Миракян. Изв. НАН Армении, Физика, **48**, 236 (2013).

STATUS OF ELECTRON LINEAR ACCELERATOR LUE-75 OF THE A. ALIKHANYAN NATIONAL SCIENCE LABORATORY AND STABILITY OF ELECTRON BEAM ENERGY

A.S. HAKOBYAN

The scientific and technical status on upgrade of the linear electron accelerator LUE-75 of the A. Alikhanyan National Science Laboratory is presented. Some calculated data on the effect of frequency, phase and temperature changes of the high-frequency power supply path and the accelerating system on the stability of the electron beam energy associated with the use of an additional accelerating station are considered.

РАСЧЕТЫ ПОПРАВКИ КВАНТОВОЙ ХРОМОДИНАМИКИ ВЫСШИХ ПОРЯДКОВ

Г.Г. АСАТРЯН^{1*}, Г.М. АСАТРЯН²

¹Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

²Национальная научная лаборатория им. А.И. Алиханяна, Ереван, Армения

*e-mail: hrachasatryan48@gmail.com

(Поступила в редакцию 12 апреля 2021 г.)

Наша статья посвящена вычислению двух трехпетлевых диаграмм, которые вносят вклад в распад $b \rightarrow s\gamma$ на уровне α_s^2 . Мы используем дифференциальные уравнения для мастер интегралов (МИ), чтобы вычислить эти диаграммы для произвольной массы с-кварка. Использование программы Canonic позволяет получить дифференциальные уравнения в каноническом базисе. С помощью этого, можно решить дифференциальные уравнения и получить выражения для МИ в терминах функций GPL. Мы надеемся, что тот же метод можно использовать для других трехпетлевых диаграмм, которые вносят вклад в распад $b \rightarrow s\gamma$ в порядке α_s^2 .

1. Введение

Редкие распады В-мезонов находятся в центре внимания физиков, поскольку они обеспечивают потенциальные тесты стандартной модели для высоких энергий (см. например, работы [1, 2, 3, 4, 5]). В работах [1,2] впервые были получены результаты порядка α_s^2 для распада $b \rightarrow s\gamma$, которые хорошо согласуются с экспериментальными данными. Однако, часть вклада порядка α_s^2 для распада $b \rightarrow s\gamma$ была получена путем интерполяции с использованием результатов асимптотики $m_c \rightarrow \infty$ и $m_c = 0$ [1,2], где m_c – масса очарованного кварка.

Ввиду ожидаемого повышения точности экспериментальных измерений, более точный расчет порядка α_s^2 необходим, чтобы уменьшить теоретические погрешности и дать нам возможность провести строгое сравнение с будущими экспериментальными данными.

Мы попробуем провести расчеты для реальных значений массы с-кварка для двух диаграмм, используя метод дифференциальных уравнений. Это очень малая часть гораздо более крупного проекта, основная цель которого – уменьшить неопределенности, возникающие из диаграмм с петлями с-кварка [1,2].

Использование программы Canonic позволяет получить дифференциальные уравнения в каноническом базисе. С помощью этого, можно решить дифференциальные уравнения и получить выражения для МИ в терминах

функций GPL. Мы надеемся, что тот же метод можно использовать для других трехпетлевых диаграмм, которые вносят вклад в распад $b \rightarrow s\gamma$ в порядке α_s^2 .

2. Мастер интегралы

Диаграммы, которые будут рассмотрены, приведены на Рис. 1. На этих диаграммах O_2 и O_7 являются частью эффективного гамильтониана, приведенного в формуле (1.1) в работе [3]. Они равны:

$$O_2 = (\bar{c}_{L\alpha}\gamma^\mu b_{L\alpha})(\bar{s}_{L\beta}\gamma_\mu c_{L\beta}),$$

$$O_7 = \frac{e}{16\pi^2} \bar{s}_\alpha \sigma^{\mu\nu} (m_b(\mu)R + m_s(\mu)L) b_\alpha F_{\mu\nu}, \quad (1)$$

где $F_{\mu\nu}$ — тензор напряженности электромагнитного поля, $L = (1 - \gamma_5)/2$ и $R = (1 + \gamma_5)/2$. Эти диаграммы непосредственно дают вклад в ширину распада $b \rightarrow s\gamma$.

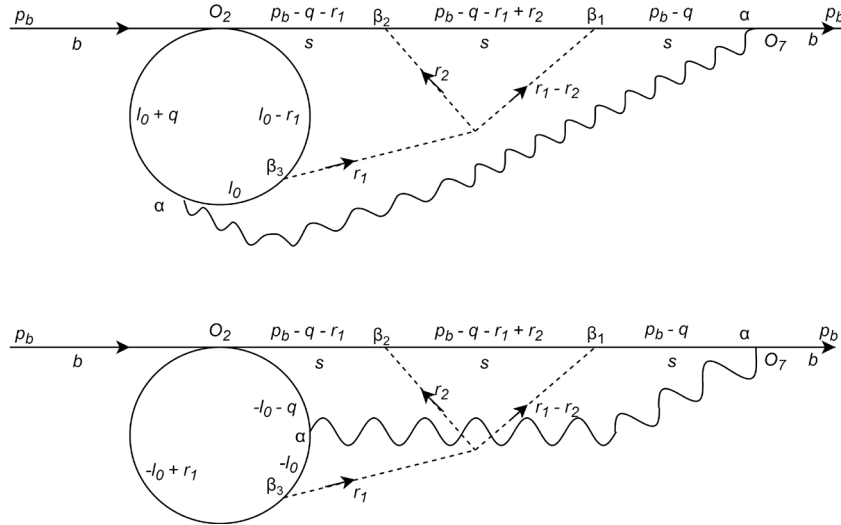


Рис.1. Здесь p_b — импульс b -кварка, а q — импульс фотона. Пунктирные линии соответствуют глюонам, синусоиды — фотонам.

Для расчета этих диаграмм была использована программа Tracer [6]. Полученный результат может быть представлен в виде линейных комбинаций скалярных произведений (а также произведений этих скалярных произведений) наших импульсов: p_b и q — это внешние импульсы, а r_1, r_2 и l_0 — импульсы петли (включая скалярное произведение импульсов на самих себя). В результате получаются 12 скалярных произведений. Используемые нами программы сокращения (поговорим об этом в следующей секции) требуют, чтобы скалярные произведения были выражены в виде линейных комбинаций так называемых «пропагаторов». В качестве этих «пропагаторов» можно использовать 8 настоящих пропагаторов, которые показаны на Рис.1:

$$\begin{aligned}
D_1 &= l_0^2 - m_c^2, & D_2 &= (l_0 + q)^2 - m_c^2, \\
D_3 &= (l_0 - r_1)^2 - m_c^2, & D_4 &= r_1^2, \\
D_5 &= r_2^2, & D_6 &= (r_1 - r_2)^2, \\
D_7 &= (p_b - r_1 - q)^2, & D_8 &= (p_b - r_1 - q + r_2)^2,
\end{aligned} \tag{2}$$

и дополнительно определить еще 4 искусственных пропагатора:

$$\begin{aligned}
D_9 &= (r_1 + q)^2, & D_{10} &= (r_2 + q)^2, \\
D_{11} &= (p_b - q + l_0)^2, & D_{12} &= (l_0 + r_2)^2.
\end{aligned} \tag{3}$$

В уравнениях (2) и (3) масса s-кварка m_s считается равной 0. Отсюда получается, что $p_b \cdot q = m_b^2 / 2$, где m_b — масса b-кварка.

После выражения скалярных произведений в виде линейных комбинаций этих пропагаторов и объединения скалярных интегралов с одинаковыми степенями пропагаторов, получается, что сумма диаграмм в Рис. 1 может быть выражена как линейная комбинация 636 скалярных интегралов. Это число (636) необходимо (и возможно) дополнительно сократить. Таких программ сокращений много, о некоторых из них мы поговорим ниже.

Первый алгоритм был предложен Laporta [7]. Этот алгоритм использует теорему Гаусса для получения уравнений интегрирования по частям (ИПЧ) для скалярных интегралов. Большинство алгоритмов сокращения за последние 20 лет являются реализацией этого алгоритма, например AIR [8], FIRE [9] и LiteRed [10]. В этой статье используется программа Kira [11], которая лучше подходит для более сложных наборов интегралов, как в нашем случае. В таких случаях Kira получает результаты намного быстрее, чем другие программы, потому что он может использовать несколько процессоров.

Использование программы Kira позволяет свести 636 скалярных интегралов к 8 мастер интегралам: все 636 скалярных интегралов могут быть выражены как линейные комбинации этих 8 мастер интегралов. Если определить $\mathbf{p}$ как вектор отрицательных степеней пропагаторов в мастер интегралах (p_1 — вектор отрицательных степеней 12 пропагаторов для первого мастер интеграла, p_2 — вектор отрицательных степеней 12 пропагаторов для второго мастер интеграла и т.д.) получаются следующие выражения:

$$\begin{aligned}
p_1 &= [1, 0, 1, 0, 1, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0], & p_2 &= [0, 1, 1, 0, 1, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0], \\
p_3 &= [0, 1, 1, 0, 1, 0, 0, 2, 0, 0, 0, 0], & p_4 &= [0, 1, 2, 0, 1, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0], \\
p_5 &= [0, 1, 1, 0, 1, 1, 1, 0, 0, 0, 0, 0], & p_6 &= [0, 1, 1, 0, 1, 1, 2, 0, 0, 0, 0], \\
p_7 &= [1, 1, 1, 0, 1, 1, 1, 0, 0, 0, 0, 0], & p_8 &= [1, 1, 1, 0, 1, 1, 0, 1, 0, 0, 0, 0].
\end{aligned} \tag{4}$$

Можно показать, что производные (по $z = m_c^2 / m_b^2$) мастер интегралов также могут быть представлены в виде линейных комбинаций мастер интегралов. Используя Kira, находим дифференциальные уравнения для 8 мастер интегралов. В следующих разделах эти дифференциальные уравнения используются для определения мастер интегралов.

3. Канонический базис

Как упоминалось в предыдущем разделе, имеется система из восьми дифференциальных уравнений для наших мастер интегралов. Теперь перейдем к решению этих дифференциальных уравнений. В работе [12] предлагается метод, значительно упрощающий задачу решения дифференциальных уравнений: преобразование их к каноническому базису. Предположим, что у нас есть следующая система дифференциальных уравнений:

$$d\mathbf{f} = a(\varepsilon, x)\mathbf{f}, \quad (5)$$

где $\mathbf{f} = \{f_1, f_2, \dots, f_8\}$ — вектор мастер интегралов (список соответствует (4)), а a — это 8×8 матрица, которая зависит от параметра размерной регуляризации ε и переменных дифференциального уравнения (в данном случае есть только одна переменная x , связанная с z , которую мы определим ниже). В работе [12] показано, что для подходящих систем дифференциальных уравнений можно выбрать базис, для которого (в случае одной переменной):

$$d\mathbf{g} = \varepsilon A(x)\mathbf{g}, \quad (6)$$

где A — матрица размером 8×8 . Эта форма называется канонической формой, а базис мастер интегралов, для которого достигнуто это выражение $\mathbf{g} = \{g_1, g_2, \dots, g_8\}$ называется каноническим базисом. В каноническом базисе уравнения значительно упрощаются, так как можно решить систему дифференциальных уравнений, начиная с наименьшей степени ε , а затем для каждой последующей степени ε использовать решения предыдущих степеней.

На практике найти преобразование для приведения системы дифференциальных уравнений к каноническому базису — нетривиальная задача. Чтобы найти канонический базис для системы дифференциальных уравнений, используется пакет Mathematica Canonica [13]. Чтобы использовать Canonica, необходимо найти переменную x (связанную с z), для которой Canonica может найти преобразование приводящую дифференциальное уравнение в каноническую форму. В данном случае эта переменная x , которая связана с z при помощи преобразования $z = (1 - x^2) / 4$. После использования этого преобразования и нахождения канонического базиса выполняется еще одно преобразование: $x \rightarrow 1/x$. Причина этого в том, что при выборе предела $z \rightarrow \infty$ (поговорим об этом в следующем разделе), соответствующий предел равен $x \rightarrow 0$. В этом случае выражения сильно упрощаются.

После преобразования $z \rightarrow (1 - 1/x^2) / 4$ и перехода к каноническому базису с помощью Canonica дифференциальные уравнения принимают вид

$$d\mathbf{g} = \varepsilon \left(\frac{A_0}{x} + \frac{A_1}{x-1} + \frac{A_{-1}}{x+1} \right) \mathbf{g} \equiv E \cdot \mathbf{g}, \quad (7)$$

где A_0, A_1 и A_{-1} — постоянные 8×8 матрицы.

Конкретная форма матрицы E такова:

$$\begin{aligned}
E_1 &= \left\{ -\frac{3\varepsilon}{x-1} - \frac{3\varepsilon}{1+x} + \frac{6\varepsilon}{x}, 0, 0, 0, 0, 0, 0 \right\}, \\
E_2 &= \left\{ 0, \frac{4\varepsilon}{x-1} + \frac{4\varepsilon}{1+x} + \frac{2\varepsilon}{x}, \frac{36\varepsilon}{1+x} - \frac{36\varepsilon}{x-1}, \frac{3\varepsilon}{x-1} - \frac{3\varepsilon}{1+x}, 0, 0, 0, 0 \right\}, \\
E_3 &= \left\{ 0, \frac{\varepsilon}{2(x-1)} - \frac{\varepsilon}{2(1+x)}, -\frac{4\varepsilon}{x-1} - \frac{4\varepsilon}{1+x} + \frac{8\varepsilon}{x}, 0, 0, 0, 0, 0 \right\}, \\
E_4 &= \left\{ 0, 0, \frac{4\varepsilon}{x-1} + \frac{4\varepsilon}{1+x} - \frac{8\varepsilon}{x}, -\frac{3\varepsilon}{x-1} - \frac{3\varepsilon}{1+x} + \frac{6\varepsilon}{x}, 0, 0, 0, 0 \right\}, \\
E_5 &= \left\{ \frac{16\varepsilon}{441x} - \frac{16\varepsilon}{147(1+x)}, 0, 0, 0, \frac{3\varepsilon}{x-1} + \frac{3\varepsilon}{1+x} + \frac{2\varepsilon}{x}, \frac{24\varepsilon}{1+x} - \frac{24\varepsilon}{x-1}, 0, 0 \right\}, \\
E_6 &= \left\{ \frac{4\varepsilon}{441(1+x)} - \frac{4\varepsilon}{441x}, 0, 0, 0, \frac{\varepsilon}{2(x-1)} - \frac{\varepsilon}{2(1+x)}, -\frac{4\varepsilon}{x-1} - \frac{4\varepsilon}{1+x} + \frac{8\varepsilon}{x}, 0, 0 \right\}, \\
E_7 &= \left\{ -\frac{8\varepsilon}{49(x-1)} - \frac{40\varepsilon}{49(1+x)} + \frac{16\varepsilon}{21x}, 0, 0, 0, \frac{36\varepsilon}{1+x} - \frac{12\varepsilon}{x}, \right. \\
&\quad \left. \frac{144\varepsilon}{1+x} - \frac{144\varepsilon}{x}, -\frac{3\varepsilon}{x-1} - \frac{3\varepsilon}{1+x} + \frac{6\varepsilon}{x}, 0 \right\}, \\
E_8 &= \left\{ \frac{16\varepsilon}{49x} - \frac{8\varepsilon}{49(x-1)} - \frac{8\varepsilon}{49(1+x)}, \frac{4\varepsilon}{x} - \frac{14\varepsilon}{1+x}, \frac{72\varepsilon}{x} - \frac{72\varepsilon}{1+x}, \right. \\
&\quad \left. \frac{6\varepsilon}{1+x} - \frac{6\varepsilon}{x}, 0, 0, 0, \frac{6\varepsilon}{x} - \frac{3\varepsilon}{x-1} - \frac{3\varepsilon}{1+x} \right\},
\end{aligned} \tag{8}$$

где E_i — это i -я строка матрицы E .

Для упрощения решения дифференциальных уравнений используются так называемые секторы. Они определяются следующим образом: правая часть дифференциальных уравнений интегралов в i -м секторе равна линейной комбинации интегралов, присутствующих только в $1 \leq j \leq i$ секторах. Например, правая часть дифференциальных уравнений интегралов первого сектора равна линейной комбинации интегралов первого сектора. Правая часть дифференциальных уравнений второго сектора равна линейной комбинации интегралов в первом и втором секторах. В этом секторе можно использовать интегралы из первого сектора, которые уже были решены. Как видно из дифференциальных уравнений, первый мастер интеграл находится в собственном секторе, второй, третий и четвертый мастер интегралы образуют второй сектор, пятый и шестой мастер интегралы образуют третий сектор, седьмой мастер интеграл образует четвертый сектор и восьмой мастер интеграл образует пятый сектор.

4. Решение дифференциальных уравнений. Нахождение констант интегрирования

Переходим к решению дифференциальных уравнений в каноническом базисе. Прежде всего, надо выяснить, до какой степени ε нужен каждый мастер интеграл в регулярном базисе. Чтобы найти это, используется тот факт, что фактические физические величины (в нашем случае сумма диаграмм на рис.1) должны быть пропорциональны ε^0 . Зная на какую степень ε делятся мастер интегралы, можно найти наибольшую степень ε , которая нужна. Из этого факта следует, что максимальная степень ε для i -го мастер интеграла равна ε^{n_i} , где $\mathbf{n} = (1, 1, 0, 1, 0, -1, 0, 0)$. Далее переходим к каноническому базису. В дальнейшем мы представим $\mathbf{g}$ в следующем виде:

$$g_i = \sum_{j=-7}^1 B_{j+8,i} \varepsilon^j. \quad (9)$$

Здесь наименьшая степень ε берется как ε^{-7} , так как наименьшая степень в регулярном базисе равна ε^{-3} , а наибольшая степень в матрице преобразования равна ε^4 . По той же причине наивысшая степень ε в каноническом базисе равна ε^1 , так как наименьшая степень ε в матрице преобразования равна ε^0 и наивысшая степень ε в регулярном базисе равна ε^1 .

При решении дифференциальных уравнений используется тот факт, что для наименьшей степени ε соответствующие коэффициенты постоянны: $B_{1,i} = c_i$. Это следует из конкретной формы дифференциальных уравнений (6). Таким образом, для следующей степени ε коэффициенты будут равны интегралу предыдущей степени относительно $1/x$, $1/(x-1)$ и $1/(x+1)$. Это означает, что для следующей степени ε получается $B_{2,i} = c_{0i} + c_{1i}G[0,x] + c_{2i}G[1,x] + c_{3i}G[-1,x]$, где c_{0i} — произвольная константа, а c_{1i} , c_{2i} и c_{3i} — константы, которые определяются c_i и A_0 , A_1 и A_{-1} из (7). В общем случае, $B_{i,j}$ — это линейная комбинация обобщенных полилогарифмов с $k \leq j$ индексами. Здесь использовалось определение обобщенных полилогарифмов

$$G(z_1, z_2, \dots, z_m; x) = \int_0^x \frac{dt_1}{t_1 - z_1} \int_0^{t_1} \frac{dt_2}{t_2 - z_2} \dots \int_0^{t_{m-1}} \frac{dt_m}{t_m - z_m}. \quad (10)$$

Используя этот метод, можно найти решение для любой степени ε как линейную комбинацию обобщенных полилогарифмов. Это выражение зависит конечно и от констант интегрирования. Найти эти константы интегрирования — нетривиальная задача. Чтобы найти их, используются следующие методы.

Прежде всего, как упоминалось выше, наименьшая степень ε в регулярном базисе равна ε^{-3} , поэтому можно положить коэффициенты всех степеней ε начиная с ε^{-7} до ε^{-4} равным нулю для всех мастер интегралов в регулярном базисе. Это дает ряд уравнений для констант интегрирования.

Следующий используемый метод — аналитическое интегрирование первого мастер интеграла из регулярного базиса. Этот интеграл находится в отдельном секторе и может быть аналитически вычислен с использованием

стандартных методов интегрирования. Приравнивая результат этого вычисления к решению соответствующего дифференциального уравнения для каждой степени ε , можно найти все константы интегрирования дифференциального уравнения первого сектора.

Второй мастер интеграл более сложен, чем первый (а остальные шесть еще сложнее), и не может быть вычислен стандартными методами интегрирования. Однако, в предельном случае $z \rightarrow \infty$ или $x \rightarrow 0$ это можно сделать для второго мастер интеграла. Поскольку $z = m_c^2 / m_b^2$, этот предел соответствует $m_b \ll m_c$. Даже в этом пределе невозможно найти остальные шесть мастер интегралов. Однако в этом случае можно использовать другой метод. Поскольку этот предел соответствует $m_b \ll m_c$, можно предположить, что указанные в (2) и (3) пропагаторы в этом случае пропорциональны степеням m_c^2 или z . В частности, числители пропорциональны z^6 , (это связано с тем, что у нас трехпетлевые диаграммы), а знаменатели пропорциональны z^{k_i} , где

$$k_i = \sum_{j=1}^8 p_{i,j} \quad (11)$$

для i -го мастер интеграла. Отсюда находим (по причинам связанным с размерностью), что мастер интегралы должны быть пропорциональны z^{6-k_i} , или (в том же пределе $z \rightarrow \infty$) $x^{-2(6-k_i)}$ для i -го мастер интеграла. Таким образом, в этом пределе мастер интегралы пропорциональны $x^{-4}, x^{-4}, x^{-2}, x^{-2}, x^{-2}, x^0, x^0, x^0$ соответственно. Приравнивая решения дифференциальных уравнений к полученному нами аналитическому выражению в предельном случае $z \rightarrow \infty$ для второго интеграла и положив коэффициенты разложений по переменной x остальных шести интегралов при всех степенях x с меньшими, чем упомянутые выше степенями, равными нулю для всех степеней ε , можно найти все оставшиеся константы интегрирования. При этом используются правила разложения GPL в ряд по переменной x , приведенные в работе [14].

После нахождения всех констант интегрирования и подстановки их в аналитические выражения для мастер интегралов канонического базиса мы теперь имеем выражения для МИ канонического базиса в виде линейных комбинаций обобщенных полилогарифмов. Вставляя эти выражения в матрицу преобразования между каноническим и регулярным базисом, находим интегралы в регулярном базисе. Определив все 8 мастер интегралов в регулярном базисе, и вставляя их обратно в выражения, найденные с помощью Kira для 636 скалярных интегралов (указанные выше), вычисляется сумма двух диаграмм как функция x (или z).

5. Сравнение наших результатов с SecDec

Для того, чтобы проверить правильность наших расчетов, используется программа SecDec [15]. Эта программа может численно вычислить мастер интегралы. Чтобы найти мастер интегралы для $z = 0.1 - i \times 10^{-8}$ (мнимая часть бесконечно мала), используется программа GiNaC [16], которая позволяет численно

вычислить GPL. Сравнивая наши результаты и результаты SecDec для этого значения z , можно заметить, что наши результаты очень точны: разница между нашим результатом и SecDec пренебрежимо мала для всех 8 интегралов. Ниже приведены численные значения нашего результата и SecDec для восьмого мастер интеграла при ε^0 , так как относительная разница в этом случае наибольшая:

$$\begin{aligned} f_8^0 &= -6.91221 \times 10^{-7} + 6.26921 \times 10^{-6} i, \\ f_{8 \text{ SecDec}}^0 &= -6.91242 \times 10^{-7} + 6.26922 \times 10^{-6} i. \end{aligned} \quad (12)$$

Как видно, относительная разница незначительна. Для вещественной части это 3.038102×10^{-5} а для мнимой части 1.59509×10^{-6} . Относительные разницы всех остальных интегралов меньше этой.

6. Оценка диаграмм для разных значений z

Здесь приводятся численные оценки суммы двух диаграмм для трех значений z : $z = 1/100 - i \cdot 10^{-8}$ («маленькое» значение), $z = 1/10 - i \cdot 10^{-8}$ («реальное» значение) и $z = 10 - i \cdot 10^{-8}$ («большое» значение). После нахождения значений GPL для этих z и подстановки их в окончательную формулу, получаются нижеуказанные результаты для ε^0 . Для краткости мы опустили постоянный множитель во всех наших результатах.

$$K_0 = \frac{|\lambda_t|^2 m_b^5 C_2 C_7 \alpha_e \alpha_s^2 G_f^2}{1024 \pi^2}, \quad (13)$$

где G_f константа Ферми слабого взаимодействия, λ_t связана с матрицей Кабиббо-Кобаяси-Маскава, а C_2 и C_7 коэффициенты Вильсона [3]. Как и следовало ожидать, результаты пропорциональны α_e и α_s^2 .

Если обозначить результат как S_0 :

$$\begin{aligned} S_0 \left(\frac{1}{10} - i \cdot 10^{-8} \right) &= 105.268087 + 24.942983i, \\ S_0 (10 - i \cdot 10^{-8}) &= 165.495535, \\ S_0 \left(\frac{1}{100} - i \cdot 10^{-8} \right) &= 200.393748 + 190.135156i. \end{aligned} \quad (14)$$

Вклад диаграмм в ширину распада $b \rightarrow s\gamma$ пропорционален вещественной части этих результатов. Видно, что в предельных случаях наш результат примерно на 60–90% больше, чем в случае, соответствующем «фактическому» значению. Это означает, что произведенные расчеты имеют смысл, поскольку полученные результаты сильно отличаются от предельных случаев. Окончательный результат (без константы K_0) для всех отрицательных степеней ε приведен в приложении.

7. Заключение

Были рассчитаны две трехпетлевые диаграммы на Рис.1, которые дают вклад в ширину распада $b \rightarrow s\gamma$ пропорциональный α_s^2 . С помощью программы Kira были найдены 8 мастер интегралов через которые выражаются все 636 скалярных интегралов нашей задачи. Также были определены дифференциальные уравнения для этих 8 мастер интегралов. Мы привели наши дифференциальные уравнения к каноническому базису с помощью Canonic, после чего стало возможно их решение. Используя переход к пределу $z \rightarrow \infty$ мы смогли найти константы интегрирования и, таким образом, 8 мастер интегралов.

Приложение

Ниже представляем сумму двух диаграмм на Рис.1 в виде серии ε до ε^{-1} . Выражение для ε^0 слишком длинное, чтобы приводить его здесь. Оно, при необходимости, может быть предоставлено авторами.

$$\begin{aligned}
 S_m = & \frac{10}{3\varepsilon^2} + \frac{1}{\varepsilon} \left(-\frac{23G(-1,x)}{x^3} + \frac{23G(1,x)}{x^3} + \frac{13G(-1,x)}{x} - 10G(-1,x) + 20G(0,x) \right. \\
 & - \frac{13G(1,x)}{x} - 10G(1,x) + \frac{39}{x^2} + 10i\pi + \frac{8}{3} + 20\log(2) \\
 & + \frac{(x^2-1)(13x^2-1)}{2x^4} \left(-G(-1,-1,x) + G(-1,1,x) + G(1,-1,x) - G(1,1,x) \right) \\
 & + \frac{2(5x^4-6x^2+1)}{x^4} \left(-G(-1,-1,-1,x) + G(-1,-1,1,x) + G(-1,1,-1,x) \right. \\
 & - G(-1,1,1,x) + 2G(0,-1,-1,x) - 2G(0,-1,1,x) - 2G(0,1,-1,x) \\
 & + 2G(0,1,1,x) - G(1,-1,-1,x) + G(1,-1,1,x) + G(1,1,-1,x) - G(1,1,1,x) \left. \right) \\
 & + \frac{2(3x^4-4x^2+1)}{x^4} \left(G(-1,-1,-1,-1,x) - G(-1,-1,-1,1,x) - G(-1,-1,1,-1,x) \right. \\
 & + G(-1,-1,1,1,x) - 2G(-1,0,-1,-1,x) + 2G(-1,0,-1,1,x) + 2G(-1,0,1,-1,x) \\
 & - 2G(-1,0,1,1,x) + G(-1,1,-1,-1,x) - G(-1,1,-1,1,x) - G(-1,1,1,-1,x) \\
 & + G(-1,1,1,1,x) - 2G(0,-1,-1,-1,x) + 2G(0,-1,-1,1,x) + 2G(0,-1,1,-1,x) \\
 & - 2G(0,-1,1,1,x) + 4G(0,0,-1,-1,x) - 4G(0,0,-1,1,x) - 4G(0,0,1,-1,x) \\
 & + 4G(0,0,1,1,x) - 2G(0,1,-1,-1,x) + 2G(0,1,-1,1,x) + 2G(0,1,1,-1,x) \\
 & - 2G(0,1,1,1,x) + G(1,-1,-1,-1,x) - G(1,-1,-1,1,x) - G(1,-1,1,-1,x) \\
 & + G(1,-1,1,1,x) - 2G(1,0,-1,-1,x) + 2G(1,0,-1,1,x) + 2G(1,0,1,-1,x) \\
 & \left. - 2G(1,0,1,1,x) + G(1,1,-1,-1,x) - G(1,1,-1,1,x) - G(1,1,1,-1,x) + G(1,1,1,1,x) \right) \left. \right).
 \end{aligned}$$

ЛИТЕРАТУРА

1. **H.M. Asatrian, M. Misiak et al.** Phys. Rev. Lett., **114**, 221801 (2015).
2. **H.M. Asatrian, M. Misiak et al.** Phys. Rev. Lett., **98**, 022002 (2007).
3. **C. Greub, T. Hurth, D. Wyler.** Phys. Rev. D, **54**, 3350 (1996).
4. **H.M. Asatrian et al.** JHEP, **04**, 012 (2020).
5. **А.Г. Оганесян.** Изв. НАН Армении, Физика, **37**, 206 (2002).
6. **M. Jamin, M. Lautenbacher.** Comput. Phys. Commun., **74**, 265 (1993).
7. **S. Laporta.** Int. J. Mod. Phys. A, **15**, 5087 (2000).
8. **C. Anastasiou, A. Lazopoulos.** JHEP, **7**, 046 (2004).
9. **A. Smirnov.** JHEP, **10**, 107 (2008).
10. **R. Lee.** J. Phys. Conf. Ser., **523**, 012059 (2014).
11. **P. Maierhöfer, J. Usovitsch, P. Uwer.** Phys. Commun., **230**, 99 (2018).
12. **J. Henn.** Phys. Rev. Lett., **110**, 251601 (2013).
13. **C. Meyer.** Comput. Phys. Commun., **222**, 295 (2018).
14. **J. Vollinga, S. Weinzierl.** Comput. Phys. Commun., **167**, 177 (2005).
15. **J. Carter, G. Heinrich.** Comput. Phys. Commun., **182**, 1566 (2011).
16. **J. Vollinga.** Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., **559**, 282 (2006).

ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ՔՐՈՄՈԴԻՆԱՄԻԿԱՅԻ ԲԱՐՁՐ ԿԱՐԳԻ ՈՒՂՂՈՒՄՆԵՐԻ ՀԱՇՎԱՐԿՆԵՐ Հ.Հ. ԱՍԱՏՐՅԱՆ, Հ.Մ. ԱՍԱՏՐԻԱՆ

Մեր հոդվածը նվիրված է երկու երեք-օղականի դիագրամների հաշվարկին, որոնք ներդրում ունեն $b \rightarrow s\gamma$ տրոհման մեջ α_s^2 ճշտությամբ: Մենք օգտագործում ենք դիֆերենցիալ հավասարումներ վարպետ ինտեգրալների համար, որպեսզի հաշվենք այս դիագրամները c-քվարկի կամայական զանգվածի համար: Canonica ծրագրի օգտագործումը թույլ է տալիս բերել դիֆերենցիալ հավասարումները կանոնիկ բազիսի: Օգտագործելով դրանք, հնարավոր է լուծել դիֆերենցիալ հավասարումները և ստանալ արտահայտություններ վարպետ ինտեգրալների համար՝ որպես GPL ֆունկցիաների գծային կոմբինացիա: Հույս ունենք, որ նույն մեթոդը կարող է օգտագործվել α_s^2 ճշտությամբ $b \rightarrow s\gamma$ տրոհման մեջ ներդրում ունեցող այլ երեք-օղականի դիագրամների համար:

CALCULATIONS OF HIGHER ORDER QUANTUM CHROMODYNAMICS CORRECTIONS

H.H. ASATRYAN, H.M. ASATRIAN

Our article is devoted to the calculation of two three-loop diagrams that contribute to the $b \rightarrow s\gamma$ decay at α_s^2 order. We use differential equations for master integrals (MI) to calculate these diagrams for an arbitrary c-quark mass. The program Canonica is used to obtain differential equations in the canonical basis. Using them, it is possible to solve the differential equations and get expressions for MI-s in terms of GPL functions. We hope that the same method can be used for other three-loop diagrams which contribute to the $b \rightarrow s\gamma$ decay at α_s^2 order.

РАСПАД ЛАЗЕРНОГО ПУЧКА НА РЕГУЛЯРНЫЕ ОПТИЧЕСКИЕ ИЗОБРАЖЕНИЯ И ФОРМИРОВАНИЕ РЕФРАКТИВНЫХ СТРУКТУР В ФОТОРЕФРАКТИВНОМ КРИСТАЛЛЕ НИОБАТА ЛИТИЯ

Л.М. ЦАРУКЯН*

Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак, Армения

*e-mail: lustsarukyan@gmail.com

(Поступила в редакцию 16 апреля 2021 г.)

Продemonстрирован распад непрерывного лазерного луча с длиной волны 632.8 нм на регулярные оптические изображения при распространении в фоторефрактивном кристалле ниобата лития, легированного железом (LN:Fe). В эксперименте мощность лазерного пучка варьировалась в диапазоне 0.02–10 мВт и были использованы кристаллы LN:Fe с длиной 4 мм и 10 мм. Временная эволюция профиля лазерного луча на выходной поверхности кристалла LN:Fe показала разделение гауссова луча на два пучка и затем формирование регулярных оптических 2D изображений микрометрического масштаба. Увеличение мощности входного луча существенно ускоряет формирование регулярных оптических изображений. Регулярные оптические изображения с вращательной симметрией второго порядка индуцируют квазикристаллические фотонные структуры в кристалле LN:Fe. Обсуждается физическая модель для объяснения экспериментальных результатов.

1. Введение

В классической оптической голографии формирование рефрактивных решеток осуществляется пространственно-модулированными оптическими пучками [1,2]. Освещение фоторефрактивной среды модулированным по интенсивности светом вызывает соответствующее изменение показателя преломления и формирование рефрактивной решетки. Модуляция интенсивности обычно достигается в отдельных двухлучевых [3] или многолучевых [4] интерференционных схемах, а также с использованием техники масок [5], комбинированной интерференционно-масочной техники [6] или пространственных модуляторов света [7]. Очень перспективным является использование недифрагирующих световых пучков для формирования фотонных решеток [8,9]. Недифрагирующие пучки обеспечивают формирование нерасплывающихся и высококонтрастных объемных решеток благодаря их характерной особенности распространения в свободном пространстве без изменения распределения интенсивности в поперечной плоскости.

Взаимодействие одиночного интенсивного гауссова оптического пучка с нелинейной средой может вызывать эффекты самовоздействия. Среди них эффекты самофокусировки и самодефокусировки лазерного луча происходят в зависимости от положительного или отрицательного изменения показателя преломления в среде. Точный баланс между самофокусировкой и линейной дифракцией оптического луча приводит к образованию нерасходящихся самолокализованных лучей, которые известны как пространственные оптические солитоны. Оптические солитоны являются предметом интенсивных исследований в нелинейной оптике, поскольку имеют хорошую аналогию с волноводными структурами и перспективны для адресной передачи оптической информации и востребованы для различных применений в оптических коммуникационных системах и полностью оптических устройствах [10,11].

Примерами перспективных голографических материалов являются фоторефрактивные кристаллы [2,12,13], жидкие кристаллы [14,15] и композитные полимерные материалы [16,17]. Среди фоторефрактивных кристаллов легированные кристаллы ниобата лития (LN) являются предметом интенсивного изучения в качестве материалов для голографических применений благодаря их превосходным фоторефрактивным свойствам [2]. Фоторефрактивные свойства кристаллов LN изучались методом Z-сканирования в многочисленных работах (см. работы [18,19] и ссылки в них). Эти исследования продемонстрировали индуцированное светом отрицательное изменение показателя преломления в кристалле LN. Такая особенность кристалла LN может обеспечить самодефокусировку, а также образование «темных» солитонов для конкретных условий эксперимента [20,21]. Отсутствие самофокусировки в кристаллах LN дает хорошую возможность выявить другие эффекты самовоздействия, такие как формирование регулярных изображений в лазерном луче, взаимодействующем с кристаллом ниобата лития.

Модификация одиночного лазерного луча, прошедшего через нелегированный фоторефрактивный волновод ниобата лития, наблюдалась в работах [22,23] и были изучены нелинейные эффекты самодефокусировки, одномерного распада пучка и временной нестабильности для диапазона интенсивностей света $10^3\text{--}5\times 10^7\text{ Вт/м}^2$.

Явление формирования регулярных оптических 2D изображений в микрометрическом масштабе под действием лазерного луча мощностью 0.5 мВт, прошедшего через фоторефрактивный кристалл ниобата лития легированного железом (LN:Fe), было описано в работах [24,25]. Особенностью эксперимента была достаточно низкая мощность оптического луча на уровне милливатт, которая обеспечивала медленную эволюцию нелинейных процессов в кристалле и позволяла наблюдать все детали эволюции распределения интенсивности в луче. Результаты объяснялись индуцированием лазерным излучением комплексной нелинейной линзы в среде, которая вызывает дефокусировку луча из его центра и фокусировку на периферии. Взаимная интерференция лучей с разными фазами

приводит к формированию регулярных оптических 2D изображений микрометрического масштаба.

Регулярные оптические изображения внутри кристалла, в свою очередь, могут привести к формированию рефрактивной структуры в кристалле LN:Fe. Однако для эффективной записи рефрактивных структур в течение реального времени освещения требуется относительно большая мощность лазерного луча. Таким образом, изучение особенностей формирования световых изображений при больших мощностях лазерного луча, распространяющегося через фоторефрактивный кристалл LN:Fe, является актуальной задачей.

В данной работе представлены результаты экспериментальных исследований формирования регулярных оптических 2D изображений микрометрического масштаба в кристалле LN:Fe для более широкого диапазона мощности лазера от 0.02 до 10 мВт. Результаты экспериментов показывают, что увеличение мощности входного пучка существенно ускоряет формирование регулярных оптических изображений. Найдены оптимальные параметры лазерного луча для формирования оптических изображений и, одновременно, эффективной записи рефрактивных структур в кристалле LN:Fe. Квазикристаллические рефрактивные структуры, сформированные в кристалле LN:Fe, тестировались методом оптического пробного луча.

2. Экспериментальная установка

Экспериментальная установка для изучения формирования регулярных оптических 2D изображений микрометрического масштаба в одиночном гауссовом пучке, распространяющемся через кристалл LN:Fe, аналогична установке использованной и подробно описанной в работе [24].

В качестве источника излучения использовался одномодовый гелий-неоновый лазер (ThorlabsHP-100) с длиной волны 632.8 нм и максимальной мощностью 10 мВт. В экспериментах использовался образец LN:Fe кристалла с концентрацией 0.03 вес.% Fe и размерами $4.2 \times 4.4 \times 10 \text{ мм}^3$ и $4.2 \times 4.4 \times 4 \text{ мм}^3$ ($X \times Y \times Z$). Лазерный луч фокусировался короткофокусным объективом (3.8×) до размера $\sim 72 \text{ мкм}$ на входной грани кристалла LN:Fe, который был помещен на трансляционный столик. Лазерный луч имел обыкновенную (o)-поляризацию относительно кристаллографической оси C кристалла LN:Fe. Профиль распространяющегося вперед лазерного луча на выходной грани кристалла проецировался линзой на вход CMOS-камеры, подключенной к компьютеру, что обеспечивало регистрацию и измерения временной эволюции поперечного профиля луча.

Для исследования эволюции профиля оптического пучка и формирования регулярных изображений важно иметь гауссовый профиль пучка на входе в кристалл. Профили лазерного луча на входной и выходной гранях кристалла измерялись оптическим профилометром (BP-106-VIS). Профили измерялись по

направлениям X и Y (оптическая ось C кристалла) и показали хорошую аппроксимацию функцией Гаусса. Измерения проводились для очень низкой мощности лазерного луча 20 мкВт, чтобы избежать каких-либо нелинейных искажений луча. Измеренные значения полной ширины на полувысоте (FWHM) пучка вдоль оси Y на входе и выходе кристалла показаны на рис.1 и составили 72 мкм и 124 мкм соответственно. Аналогичный результат был получен для X -компоненты профиля лазерного луча.

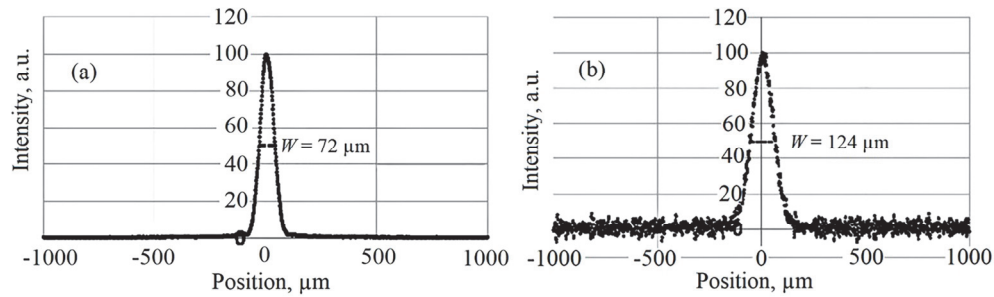


Рис.1. Поперечные профили входного пучка, сфокусированного на переднюю грань кристалла (а), и выходного пучка на задней грани кристалла (б). Профили пучка показывают результаты измерений при сканировании вдоль направления Y (оптическая ось C) кристалла. Лазерный луч имеет мощность 20 мкВт. Профили хорошо аппроксимируются функцией Гаусса.

3. Экспериментальные результаты и обсуждения

3.1. Распад лазерного пучка на регулярные оптические изображения при прохождении через кристалл $LN:Fe$

На рис. 2 показано временное изменение профиля лазерного луча на выходной поверхности кристалла длиной 10 мм для входной мощности луча 0.08 мВт. Интенсивность пучка оценивается в 2×10^4 Вт/м².

Эволюция во времени демонстрирует расщепление прошедшего через кристалл гауссова луча (рис. 2а) на два пучка (рис. 2б-е) вдоль оси C кристалла в

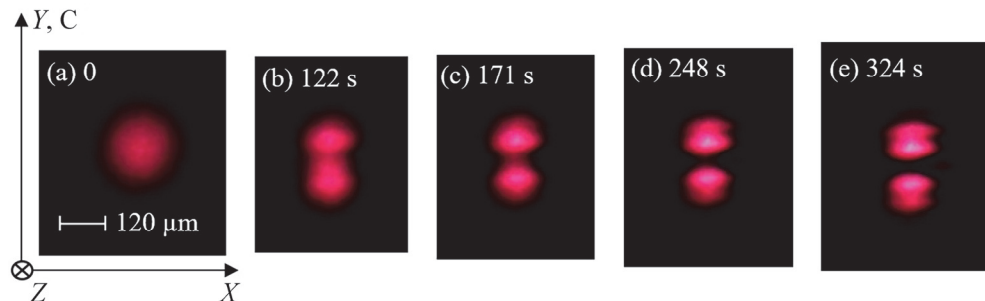


Рис.2. Эволюция во времени профиля o -поляризованного лазерного луча на выходной грани кристалла $LN:Fe$ длиной 10 мм при мощности входного луча 0.08 мВт.

течение временного интервала 122–324 с, с более выраженным разделением пучков с течением времени. Рис. 2d,e демонстрируют также тенденцию дальнейшего расщепления каждого пучка на два фрагмента.

На рис. 3 показаны поперечные распределения выходного пучка вдоль направлений X и Y в момент времени $t = 0$ (а) и расщепленных пучков в момент $t = 248$ с (б). Размеры расщепленных пучков вдоль оси C кристалла, измеренные на половине максимума контуров пучка, равны 56 мкм при $t = 248$ с (рис. 3б), что примерно в два раза меньше по сравнению с размером 124 мкм выходного пучка при $t = 0$ (рис. 3а). При этом интенсивность каждого расщепленного пучка примерно в 2 раза больше, чем интенсивность выходного пучка при $t = 0$. Таким образом, пространственная эволюция пучка ограничивается не только расщеплением, но и локализацией расщепленных пучков в фокальные пятна.

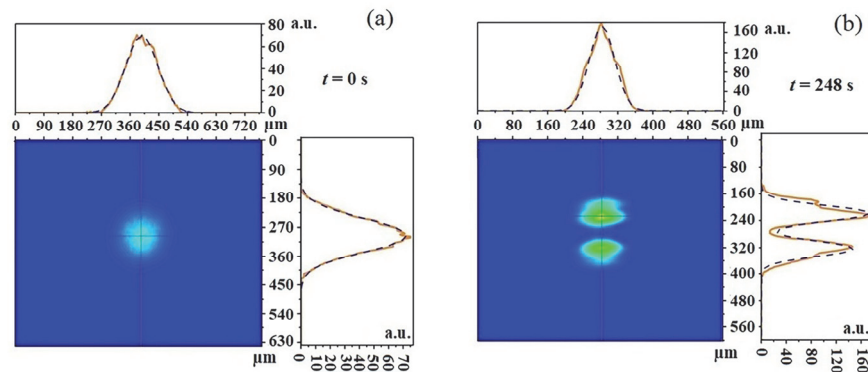


Рис.3. Компьютерная обработка изображений, показанных на рис. 2а и 2d, с использованием программы Origin путем сканирования профилей пучка по горизонтальному X и вертикальному Y (ось C кристалла) направлениям. Измеренные контуры выходного пучка при $t = 0$ и разделенных пучков при $t = 248$ с близко аппроксимируются функцией Гаусса (штриховые кривые). Поперечные размеры расщепленных пучков, измеренные на половине максимума контуров пучка в направлении Y (ось C кристалла), равны 56 мкм (б), что примерно в два раза меньше по сравнению с размером выходного пучка в 124 мкм при $t = 0$ (а). Интенсивности расщепленных пучков (показанные в произвольных единицах) примерно в 2 раза больше, чем интенсивность выходного пучка при $t = 0$.

Эволюция во времени поперечного профиля лазерного пучка мощностью 10 мВт прошедшего через кристалл длиной 10 мм показана на рис.4. Расщепление входного гауссова пучка (рис.4а) на два луча (рис.4б) происходит через 1 с развития фоторефрактивных процессов в кристалле. Дальнейшая эволюция показывает формирование регулярных оптических 2D изображений микрометрического масштаба (рис. 4с-ф) в течение 10 с. Зарегистрированные изображения хорошо воспроизводятся при фиксированной мощности входного лазерного луча.

Результаты экспериментов по эволюции профиля лазерного пучка на выходе кристалла LN:Fe толщиной 10 мм в зависимости от мощности входящего

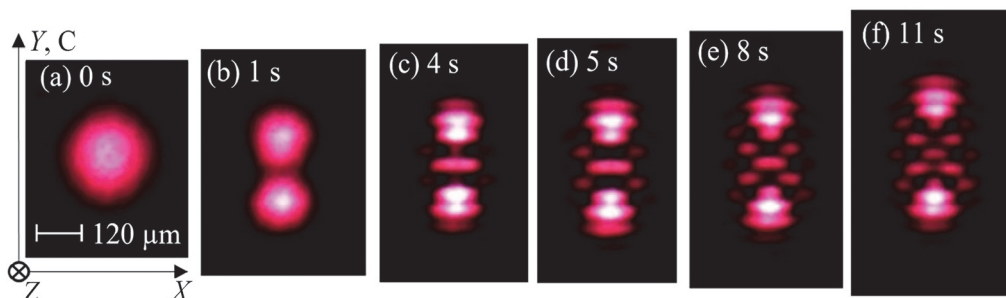


Рис.4. Эволюция во времени профиля *o*-поляризованного лазерного луча на выходной грани кристалла LN длиной 10 мм при мощности входного луча 10 мВт.

пучка в диапазоне 0.02–2 мВт при фиксированном времени освещения $t = 211$ с представлены на рис.5. Увеличение мощности входного пучка обеспечивает формирование более сложных регулярных оптических изображений при фиксированном времени освещения.

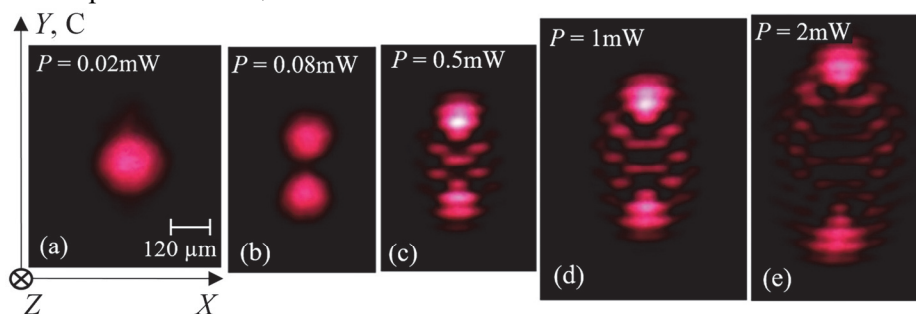


Рис.5. Эволюция профиля *o*-поляризованного лазерного луча на выходе кристалла LN с увеличением мощности входного луча в диапазоне 0.02–2 мВт при фиксированном времени освещения 211 с.

Сравнение рис. 4 и 5 показывает, что ярко выраженное регулярное оптическое изображение, сформированная за 8 с при мощности луча 10 мВт (рис.4е), было сформировано при существенно более длительном освещении 211 при мощности лазерного луча 0.5 мВт (рис.5с). Таким образом, увеличение мощности входного луча до 10 мВт существенно ускоряет формирование регулярных оптических изображений.

3.2. Запись квазикристаллической рефрактивной решетки в кристалле LN:Fe и ее тестирование пробным пучком

Оптические изображения с вращательной симметрией второго порядка, созданные в фоторефрактивном кристалле (рис. 4с-ф, и 5с-е), вызывают соответствующее изменение показателя преломления и регистрируют рефрактивную решетку внутри кристалла. Полученное результирующее распределение показателя преломления внутри кристалла LN будет представлять собой квазикристаллическую фотонную структуру с вращательной симметрией второго порядка.

Запись 2D квазикристаллической рефрактивной структуры в микрометрическом масштабе в кристалле LN:Fe длиной 4 мм была выполнена гауссовым пучком с длиной волны 632.8 нм, *о*-поляризацией и мощностью 5 мВт в течение 28 с. На рис.6а показано соответствующее оптическое изображение, сформированное лазерным лучом на выходной грани кристалла через 28 секунд. Такая картина формируется через ~15 с эволюции процесса и практически не меняется до 28 с. Можно предположить, что это оптическое изображение вносит основной вклад в процесс записи рефрактивной структуры и воспроизводится как соответствующее распределение показателя преломления внутри фоторефрактивного кристалла. Относительно небольшая длина кристалла (4 мм) позволяла проводить оптическое тестирование записанной рефрактивной структуры методом зондирующего луча без заметного поглощения и искажения дифрагированного луча. На рис.6б показана дифракционная картина в дальней зоне, полученная тестирующим оптическим пучком мощностью 2 мкВт от записанной квазикристаллической решетки. Время жизни сформированных квазикристаллических структур составляет несколько месяцев благодаря высокому сопротивлению кристалла LN:Fe.

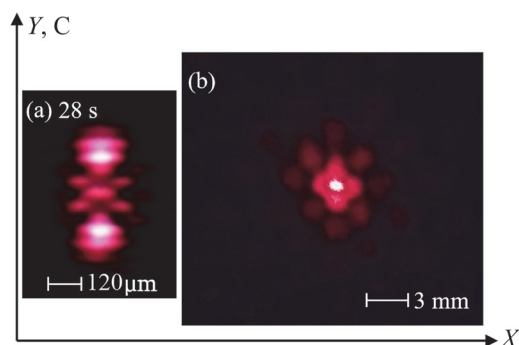


Рис.6. (а) Оптическое изображение лазерного луча с длиной волны 632.8 нм и мощностью 5 мВт на выходной поверхности кристалла LN:Fe длиной 4 мм, после 28 с облучения. (б) Дифракционная картина в дальней зоне, полученная с помощью пробного луча мощностью 2 мкВт от рефрактивной структуры в кристалле.

3.3. Физическая модель формирования оптических изображений

Физический механизм создания голографических решеток в фоторефрактивных материалах основан на электрооптическом эффекте. В кристаллах LN:Fe ионы железа находятся в двух валентных состояниях: Fe^{2+} и Fe^{3+} . Когда кристалл LN:Fe освещается светом, электроны из центров Fe^{2+} возбуждаются в зону проводимости (рис.7а), где они мигрируют и могут быть захвачены центрами Fe^{3+} в неосвещенных зонах кристалла. Перераспределение зарядов создает внутреннее электрическое поле пространственного разделения заряда E_{SC} , которое, в свою очередь, изменяет обыкновенную (n_o) и необыкновенную (n_e) показатели преломления среды за счет электрооптического эффекта: $\Delta n_o = -0.5n_o^3r_{13}E_{\text{SC}}$ и

$\Delta n_e = -0.5n_e^3 r_{33} E_{SC}$, где r_{13} и r_{33} – электрооптические коэффициенты, E_{SC} – компонента электрического поля пространственного разделения зарядов вдоль оси C^+ кристалла и $n_o = 2.28$, $n_e = 2.19$, $r_{13} = 9.1 \times 10^{-12} \text{ м} \cdot \text{В}^{-1}$ и $r_{33} = 30.9 \times 10^{-12} \text{ м} \cdot \text{В}^{-1}$ для длины волны 633 нм [26–28]. Величина плотности фототока вдоль оси C кристалла за счет объемного фотовольтаического эффекта определяется как $J_{PV} = k\alpha I$, где I – интенсивность света, k – коэффициент, зависящий от природы поглощающих центров и длины волны света и α – коэффициент поглощения [27]. Поле пространственного разделения зарядов из-за фотовольтаического эффекта определяется по формуле: $E_{SC} = k\alpha I / \sigma$, где σ – фотопроводимость освещенной части кристалла.

В кристалле LN:Fe вероятности переноса заряда в направлениях $\pm C$ различны из-за внутренней структуры кристалла LN:Fe [27]. При возбуждении светом электроны движутся в предпочтительном направлении C^+ . На рис.7а изображена энергетическая диаграмма для ионизации и дальнейшего перераспределения зарядов для кристалла одним активным центром. На рис.7б схематически показан лазерный луч с гауссовым профилем, а на рис.7с схематически показано распределение индуцированного светом электрического поля пространственного разделения зарядов относительно лазерного луча [18,28]. На рис.7д представлено соответствующее изменение показателя преломления вдоль оси C под действием света [28].

Таким образом, освещение кристалла LN:Fe лазерным лучом с гауссовым профилем приводит к специфическому светоиндуцированному комплексному изменению показателя преломления с глубоким центральным минимумом $\Delta n < 0$ (отрицательная линза) и боковыми максимумами $\Delta n > 0$ (положительные линзы) вдоль оси C^+ кристалла [18,27,28]. Отклонение света в область с большим показателем преломления вызывает серию бифуркаций пучка на ранней стадии фоторефрактивного процесса (рис.2,4,5). Светоиндуцированная комплексная линза вызывает дефокусировку луча от его центра и фокусировку на периферии. Взаимная интерференция лучей с разными фазами на пересечении лучей приводит к

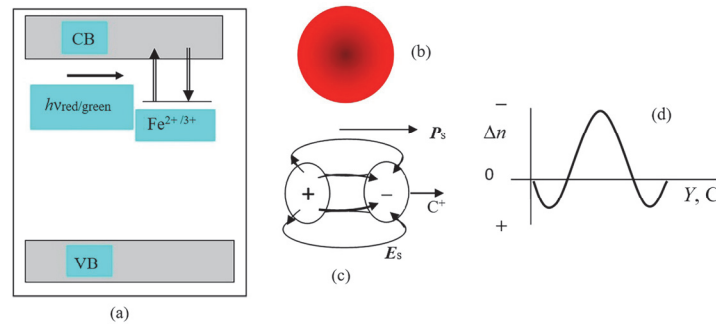


Рис.7. (а) Зонная диаграмма для кристалла с одним активным центром. VB – валентная зона, CB – зона проводимости. (б) Схема лазерного луча с гауссовым профилем. (в) Схема распределения электрического поля пространственного разделения зарядов, индуцированного светом. P_s – показывает направление спонтанной поляризации кристалла. (д) Схематическое представление изменения показателя преломления Δn под действием света.

формированию регулярных оптических изображений (рис.4,5). Соответствующее изменение показателя преломления формирует рефрактивную решетку внутри кристалла, которая является квазикристаллической фотонной структурой, поскольку не имеет трансляционной симметрии, но имеет вращательную симметрию второго порядка.

Особенностью проведенного эксперимента является формирование двумерных регулярных оптических изображений, состоящих из световых пятен микрометрического масштаба, симметрично расположенных относительно центра светового изображения. Изображение имеет вращательную симметрию второго порядка относительно направления Z распространения луча. На рис. 4с-f показаны регулярные изображения, сформированные в кристалле LN:Fe лазерным излучением на длине волны 632.8 нм и интенсивности $\sim 10^5$ Вт/м². Для сравнения в работе [23] распространение одиночного луча на длине волны 532 нм через волновод LN приводило к одномерному распаду оптического луча на световые пятна, расположенные симметрично относительно центра луча. В нелегированном кристалле лития ниобата [23] сформированный профиль показателя преломления быстро исчезает после выключения лазерного луча, тогда как в нашем эксперименте с кристаллом LN:Fe время жизни сформированных квазикристаллических структур составляет несколько месяцев.

Изменение показателя преломления в среде под действием света является физической основой наблюдаемой модификации профиля лазерного луча при распространении через LN:Fe кристалл и разработанного интерференционного механизма формирования регулярных оптических изображений.

Численное моделирование светоиндуцированной модификации показателя преломления в кристалле LN:Fe и формирование регулярных оптических 2D изображений микрометрического масштаба в зависимости от мощности и поляризации лазерного луча представлено в работе [25]. Моделирование проводилось на основе разработанной модели двух фотоактивных центров для кристалла LN:Fe [26,29–31], где и центры обусловленные ионами железа, и поляроны рассматриваются как фотоактивные центры. В кристалле LN:Fe дополнительные фотоактивные центры были идентифицированы как малые поляроны – квазичастицы локализованные на внутренних дефектах кристалла Nb_{Li} , которые имеют поглощение вблизи длины волны 500 нм и активизируются светом ($Nb_{Li}^{4+} \leftrightarrow Nb_{Li}^{5+} + e^-$) [29,30]. Под действием света поляроны совершают прыжковые перемещения между соседними дефектами Nb_{Li} в кристалле, что приводит к перераспределению зарядов и дает вклад в фотовольтаическое поле E_{sc} [30].

Распределение изменения показателя преломления Δn , смоделированное и численно рассчитанное в работе [25] хорошо совпадает с изменением показателя преломления Δn , схематически представленном на рис.7d и экспериментально измеренным в работе [28]. Моделирование, проведенное в работе [25] выявляет также интерференционный характер формируемых регулярных изображений при распространении излучения в среде, на поздних стадиях фоторефрактивного процесса (рис.4,5).

4. Заключение

Продemonстрировано формирование регулярных оптических 2D изображений микрометрического масштаба в одиночном лазерном луче, распространяющемся через фоторефрактивный кристалл LN:Fe. Экспериментальные результаты для лазерного луча с мощностью 0.02–10 мВт демонстрируют, что увеличение мощности входного луча до 10 мВт существенно ускоряет формирование регулярных оптических изображений. Эффективное формирование рефрактивных структур в кристалле LN:Fe происходит при световой мощности 5–10 мВт и времени записи в несколько десятков секунд приемлемых для практических применений. Регулярные оптические структуры с вращательной симметрией, сформированные в лазерном пучке при его распространении внутри кристалла, вызывают соответствующее изменение показателя преломления и записывают квазикристаллическую фотонную решетку в фоторефрактивном кристалле. Важно отметить, что квазикристаллические фотонные структуры имеют долгое время жизни в кристалле (несколько месяцев в темноте) из-за высокого сопротивления кристалла LN:Fe, что делает их перспективными для практических применений. Формирование регулярных оптических структур в лазерном пучке и одновременная запись рефрактивных решеток в фоторефрактивном кристалле LN:Fe открывает новый подход для оптической голографии с одним лазерным пучком.

Работа поддержана грантом Международного научно-технического центра (МНТЦ), проект А-2130. Автор благодарит доктора физ.-мат. наук Эдварда Коканяна за предоставление кристаллов LN:Fe в рамках проекта МНТЦ А-2130. Автор благодарен профессору Матье Шове (Mathieu Chauvet), профессору Фабрису Дево (Fabrice Devaux) (Институт FEMTO-ST, Университет Franche-Comte, Безансон, Франция) и доктору физ.-мат. наук Рафаэлю Дрампяну (Институт физических исследований Национальной академии наук Армении) за многочисленные и плодотворные обсуждения экспериментальных результатов.

ЛИТЕРАТУРА

1. **R.J. Collier, Ch.B. Buckhard, L.H. Lin.** Optical holography, New York: Academic Press, 1971.
2. **P. Günter, J.P. Huignard.** Photorefractive Materials and Their Applications III, Springer Series in Optical Sciences, vol. 115, New York, 2007.
3. **N.D. Lai, W.P. Liang, J.H. Lin, C.C. Hsu, C.H. Lin.** Opt. Express, **13**, 9605 (2005).
4. **N.D. Lai, J.H. Lin, Y.Y. Huang, Ch.Ch. Hsu.** Opt. Express, **22**, 10746 (2006).
5. **W.-H. Lee.** Computer generated holograms: Techniques and applications, Progress in Optics, North-Holland, XVI, chapter 3, p. 121, 1978.
6. **A. Badalyan, R. Hovsepyan, P. Mantashyan, V. Mekhitaryan, R. Drampyan.** Appl. Phys. B, **116**, 97 (2014).
7. **N. Chattrapiban, E.A. Rogers, D. Cofield, W.T. Hill, R. Roy.** Opt. Lett., **28**, 2183 (2003).
8. **P. Rose, M. Boguslawski, C. Denz.** New J. Physics, **14**, 033018 (2012).
9. **A. Badalyan, R. Hovsepyan, P. Mantashyan, V. Mekhitaryan, R. Drampyan.** Eur. Phys. J. D, **68**, 82 (2014).
10. **S. Trillo, W.E. Torruellas.** Spatial solitons, Berlin: Springer-Verlag, 2001.

11. **Yu.S. Kivshar, G.P. Agrawal.** Optical Solitons, New York: Academic Press, 2003.
12. **C. Denz, M. Schwab, C. Weillnau.** Transverse-pattern Formation in Photorefractive Optics, Berlin: Springer, 2003.
13. **R.A. Rupp.** Appl. Phys. A, **55**, 2 (1992).
14. **I.C. Khoo.** Liquid Crystals: Physical Properties and Nonlinear Optical Phenomena, New York: Wiley, 1995.
15. **F. Simoni.** Nonlinear Optical Properties of Liquid Crystals, Singapore: World Scientific, 1997.
16. **P. Cheben, M.L. Calvo.** Appl. Phys. Lett., **78**, 1490 (2011).
17. **F. Del Monte, P. Cheben, O. Martinez-Matos, J.A. Rodrigo, M.L. Calvo.** Adv. Mater., **18**, 2014 (2006).
18. **Q.W. Song, Ch.-P. Zhang, P.J. Talbot.** Applied Optics, **32**(35), 7266 (1993).
19. **S.M. Kostritskii, M. Aillerie.** J. Appl. Phys., **111**, 103504 (2012).
20. **M. Taya, M.C. Bashaw, M.M. Fejer, M. Segev, G.C. Valley.** Phys. Rev. A, **52**, 3095 (1995).
21. **M. Chauvet.** J. Opt. Soc. Am. B, **20**(12), 2515 (2003).
22. **J. Villarroel, J. Carnicero, F. Luedtke, M. Carrascosa, A. Garcia-Cabanes, J.M. Cabrera, A. Alcazar, B. Ramiro.** Opt. Express, **18**, 20852 (2010).
23. **J. Villarroel, O. Caballero-Caraero, B. Ramiro, A. Alcazar, A. Garcia-Cabanes, M. Carrascosa.** Opt. Materials, **33**, 103 (2010).
24. **L.M. Tsarukyan, A.M. Badalyan, R.K. Hovsepyan, R.Kh. Drampyan.** Proc. SPIE, **11030**, 1103017 (2019).
25. **L. Tsarukyan, A. Badalyan, F. Devaux, M. Chauvet, R. Drampyan.** Opt. Commun., **478**, 126396 (2021).
26. **F. Devaux, J. Safioui, M. Chauvet, R. Passier.** Phys. Rev A, **81**, 013825 (2010).
27. **A.M. Glass, D. von der Linde, T.J. Negran.** Appl. Phys. Lett., **25**, 233 (1974).
28. **F.S. Chen.** J. Appl. Phys., **40**, 389 (1969).
29. **F. Jermann, J. Otten.** J. Opt. Soc. Am. B, **10**, 2085 (1993).
30. **M. Imlau, H. Badorreck, Ch. Merschjann.** Appl. Phys. Rev., **2**, 040606 (2015).
31. **L. Tsarukyan, R. Hovsepyan, R. Drampyan.** Photonics and Nanostructures – Fundamentals and Applications, **40**, 100793 (2020).

LASER BEAM BREAK-UP TO REGULAR OPTICAL PATTERNS AND REFRACTIVE STRUCTURES FORMATION IN A PHOTOREFRACTIVE LITHIUM NIOBATE CRYSTAL

L.M. TSARUKYAN

Break-up of a cw 632.8 nm wavelength laser beam to regular optical patterns during propagation through a photorefractive iron doped lithium niobate (LN:Fe) crystal is demonstrated. The power of the laser beam is varied in the range of 0.02–10 mW and 4mm and 10 mm lengths LN:Fe crystals are used in the experiments. Time evolution of the laser beam profile at the output face of the LN:Fe crystal showed the splitting of a Gaussian beam into two lobes and then formation of 2D micrometric scale regular optical patterns. The input beam power increase essentially speeds-up the regular optical pattern formation. 2-fold rotation symmetry regular optical patterns induct the quasi-crystalline photonic structures in LN:Fe crystal. A physical model to explain the experimental results is discussed.

ДИСТАНЦИОННОЕ ОПТИЧЕСКОЕ ИЗМЕРЕНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПЛОСКОПАРАЛЛЕЛЬНОЙ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПЛАСТИНЫ

В.А. АРУТЮНЯН^{1*}, А.В. ПАПОЯН^{1,2}

¹Российско–Армянский университет, Ереван, Армения

²Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак, Армения

*e-mail: vazrud@gmail.com

(Поступила в редакцию 19 апреля 2021 г.)

Продemonстрирована возможность использования отраженного от толстой плоскопараллельной стеклянной пластины излучения одночастотного непрерывного лазера для точного дистанционного измерения температуры. Предлагаемый подход основан на том, что плоскопараллельная диэлектрическая пластина представляет собой низкодобротный интерферометр Фабри-Перо, оптическая толщина которого зависит от температуры из-за двух характеристик диэлектрического материала: коэффициента линейного расширения и термооптического коэффициента. Для использованной стеклянной пластины с показателем преломления 1.5183 и толщиной 15.75 мм температурное расстояние между соседними интерференционными пиками составляло 1.4825°C, что дало возможность измерить температуру со средней точностью 0.005°C. Проанализированы практические аспекты использования предложенного сенсора и его применимость для прикладных задач.

1. Введение

Бесконтактное, беспроводное дистанционное измерение температуры представляет неослабевающий интерес для решения многих промышленных, технологических, медицинских, научных и оборонных задач. Наиболее прямое решение данной проблемы – непосредственное обнаружение теплового излучения, испускаемого нагретым телом, с помощью инфракрасных камер переднего обзора (FLIR) или аналогичных устройств. Параллельно с этим ведутся работы по изучению и развитию новых, в частности, оптических методов измерения температуры. К таковым можно отнести оптическую термометрию с использованием ап-конверсии и безызлучательного перераспределения энергии электронного возбуждения в люминесцентных материалах [1,2], измерение температуры на основе эффекта Гуса-Хенхен [3], измерения с использованием одиночных азотно-вакансионных центров в алмазе [4], методы волоконной оптики [5,6] и другие. При этом ключевыми характеристиками дистанционных измерителей температуры считаются высокая точность, большой диапазон измерений, высокое быстродействие и устойчивость к побочным внешним воздействиям.

Высокая чувствительность измерения может быть достигнута с помощью методов, использующих оптическую интерференцию. В [7] было предложено использовать управление температурой диэлектрических пластин с высокой плоскопараллельностью для предотвращения потерь на отражение в оптических ячейках с парами металлов. Очевидно, что тот же самый физический механизм, лежащий в основе температурного управления отраженным светом, может быть использован также для измерения температуры – путем измерения интенсивности отраженного света.

В данной работе сообщается о реализации дистанционного температурного датчика (сенсора) на основе плоскопараллельной стеклянной пластины, работающей в режиме интерферометра Фабри-Перо. Чувствительность к температурным изменениям достигается благодаря термическим и оптическим характеристикам материала стекла, а канал связи между удаленными друг от друга датчиком температуры (пластиной) и системой передачи и приема (одночастотным лазером и фотоприемником) обеспечивается противонаправленными коллимированными световыми пучками в свободном пространстве. Такое решение позволяет совместить высокую чувствительность регистрации, присущую интерференционному методу, с дальностью действия без помех и влияния побочных внешних воздействий.

2. Экспериментальная установка

Измерения проводились на простой установке, изображенной на Рис.1. Для освещения стеклянной пластины использовалось падающее по нормали коллимированное излучение одночастотного непрерывного диодного лазера с внешним резонатором ECDL-7850R (Atrix Management S.A.), работающего на длине волны 780 нм со спектральной шириной 1 МГц. Для обеспечения линейного режима работы фотоприемников мощность лазерного луча была ослаблена до 10 мкВт; встроенная система стабилизации температуры и тока инжекции лазерного диода позволила снизить дрейф частоты излучения в процессе измерений до ± 50 МГц. Для предотвращения модового скачка частоты лазерного излучения, вызванного попаданием отраженного от пластины излучения на лазерный диод, использовался оптический изолятор. Диафрагма с диаметром отверстия 1 мм, установленная на пути лазерного луча, позволяла коллимировать излучение,

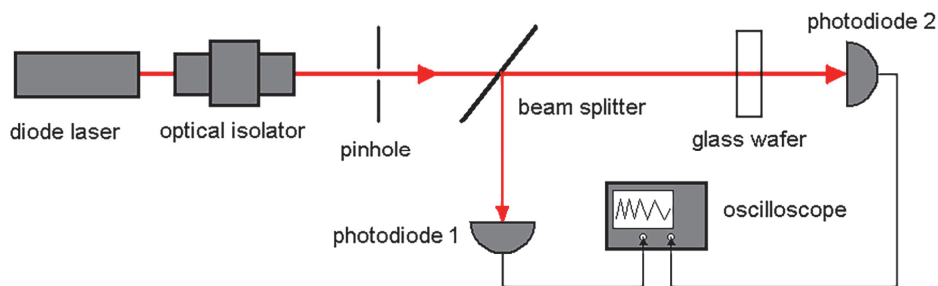


Рис.1. Схема экспериментальной установки.

направляемое на стеклянную пластину. В эксперименте использовалась стандартная стеклянная плоскопараллельная калибровочная пластина ПМ15 из кронowego стекла К8 с диаметром 30 мм и толщиной 15.75 мм (максимальное отклонение от взаимной параллельности поверхностей по апертуре пластины < 0.6 мкм).

Излучение, отраженное от передней и задней поверхностей пластины, направлялось на фотодиод 1 с помощью светоделителя (тонкая стеклянная пластина, установленная под углом 45° к направлению лазерного луча). При этом плоскопараллельная пластина юстировалась так, чтобы отраженное излучение было соосно с падающим. Это достигалось совмещением падающего и отраженного лучей на отверстиях диафрагмы. Излучение, проходящее через плоскопараллельную пластину, регистрировалось фотодиодом 2. Сигналы с обоих фотодиодов одновременно регистрировались цифровым запоминающим осциллографом Atten ADS1102. Фотодиоды (ФД-10ГА) изначально были откалиброваны с использованием измерителя мощности ThorLabs PM130D, чтобы гарантировать линейную зависимость сигнала от мощности. В данной конфигурации измерения сигнал фотодиода 1 можно легко откалибровать, чтобы определить процент отраженного света – независимо от мощности лазерного излучения (предполагая, что на стеклянной пластине не происходит поглощения или рассеивания).

Стеклянная пластина нагревалась с помощью термофена. Цифровой термометр с термопарой К-типа, прикрепленной к пластине, позволял непрерывно контролировать температуру пластины в процессе измерения.

3. Результаты и обсуждение

Для проведения измерений стеклянная пластина сначала нагревалась термофеном до определенной температуры, а измерения начинались после выключения нагрева. Такой режим измерения позволял получать режим «свободного охлаждения», при котором изменение температуры описывается экспоненциально затухающей функцией.

Типичная временная зависимость отраженного сигнала, записанного при охлаждении пластины представлена на Рис.2 синей (осциллирующей) кривой. Красная (экспоненциальная) кривая показывает соответствующее изменение температуры. Видно, что отраженный сигнал испытывает сильные колебания от 0 до 15%, что является явным свидетельством интерференции волн, отраженных от передней и задней поверхности плоскопараллельной пластины.

Коротко проанализируем полученный результат. В предположении отсутствия поглощения в пластине, доля мощности отраженного света в случае бесконечной плоской волны с длиной волны λ для пластины с толщиной d и показателем преломления n определяется как:

$$\frac{P_{refl}}{P_{inc}} = \left(\frac{(1-R)^2}{4R \sin^2(\phi/2)} + 1 \right)^{-1}, \quad (1)$$

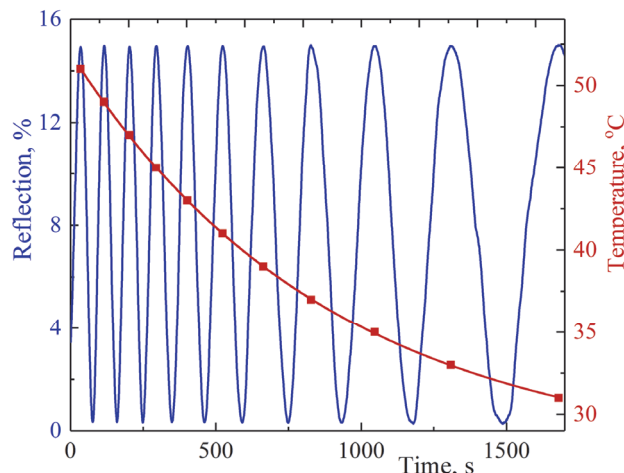


Рис.2. Осциллирующая кривая / левая шкала: временная динамика измеренного отраженного сигнала по мере охлаждения изначально нагретой стеклянной пластины толщиной 15.75 мм. Ноль по оси времени соответствует моменту выключения термофена. Экспоненциальная кривая / правая шкала: соответствующее изменение температуры; точки – измеренная температура, сплошная линия – аппроксимация экспоненциальным спадом с постоянной времени $\tau = 892.7$ с.

где P_{inc} и P_{refl} – мощности падающего и отраженного света, $R = \left(\frac{(n-1)}{(n+1)} \right)^2$, а $\phi = 4\pi nd/\lambda$ – набег фазы, полученный после двух отражений при нормальном падении луча (см., например [7]). В линейном приближении, зависимость фазы (ϕ) от температуры (T) дается формулой

$$\phi(T) - \phi(T_0) = \frac{4\pi d}{\lambda} \left(\frac{\partial n}{\partial T} + \alpha_T n \right) (T - T_0), \quad (2)$$

где $\partial n/\partial T$ и α_T – термооптический коэффициент и коэффициент линейного расширения, соответственно.

Для оптического стекла марки К8, использованного в эксперименте, показатель преломления $n = 1.5183$, соответственно $R = 0.042359$, а ожидаемое интерференционное изменение отраженной мощности должно находиться в диапазоне от 0 до 15.03% (см. уравнение (1)), что хорошо согласуется с экспериментом (Рис.2). Для того же стекла номинальные значения $\partial n/\partial T$ и α_T по ГОСТ 13659-78 составляют $2.4 \times 10^{-6} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$ и $7.6 \times 10^{-6} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$. Для $d = 15.75$ мм и $\lambda = 780$ нм ожидаемая разница температур для двух соседних интерференционных максимумов ($\Delta\phi = \pi$) согласно уравнению (2) составляет 1.1259°C . Различие с измеренным значением 1.4825°C следует отнести к тому, что указанные номинальные значения даны для $\lambda = 900$ нм и усреднены для диапазона $20\text{--}120^\circ\text{C}$. Более того, характеристики реального образца, использованного в эксперименте, могут отличаться от номинальных в допустимых пределах.

Вопросы практической возможности управления температурой и

требований, предъявляемых к пластинам, подробно обсуждены в [7]. Здесь стоит только отметить, что хотя в нашем эксперименте была использована диэлектрическая пластина с идеально параллельными поверхностями и качественной полировкой, реальные требования к пластинам могут быть гораздо менее строгими. Действительно, несовершенства параллельности и полировки могут снизить контраст интерференционных экстремумов в отраженном сигнале (уравнение (1)), но непосредственно не влияют на температурный период колебаний (уравнение (2)), который в большей степени зависит от оптических характеристик материала пластины, чем от качества обработки.

Что касается требований, предъявляемых к лазерному излучению, ключевыми характеристиками являются стабильность частоты (длины волны) и расходимости пучка. Для недорогих коммерчески доступных диодных лазерных систем стабильность частоты – не хуже $\Delta\omega/\omega \approx 10^{-6}$, что вполне приемлемо для данной задачи. Кроме того, не составляет труда коллимация лазерного луча до расходимости в несколько мрад, что может обеспечить удаленную работу датчика на расстоянии в несколько десятков метров, в том числе благодаря высокой направленности френелевского (зеркального) отражения. Дальность работы могут ограничивать, скорее, механические/акустические колебания, а также тепловые конвекции, приводящие к сильным отклонениям и искажениям светового пучка, особенно при высоких температурах.

4. Выводы и перспективы

Продемонстрирована возможность дистанционного измерения (мониторинга) температуры с помощью оптического метода, основанного на измерении интенсивности излучения одночастотного лазера, отраженного от плоскопараллельной диэлектрической пластины. В случае стеклянной пластины периодические (по закону $\sin^2$) колебания мощности отраженного света в зависимости от температуры изменяются в диапазоне примерно от 0 до $\approx 15\%$. При толщине пластины 15.75 мм зарегистрированная температурная разница соседних пиков (или провалов) отражения составила 1.4825°C , что с учетом большого амплитудного размаха осцилляций обеспечивает высокую точность определения температуры (реально достижимое значение $\pm 0.005^\circ\text{C}$ при использовании измерительных приборов с разрешением выше 12 бит).

Дальнейшее улучшение рабочих характеристик (диапазон измерения, точность, временной отклик и т. д.) может быть достигнуто путем подбора подходящего диэлектрического материала и толщины пластины. Ключевыми требованиями к материалу диэлектрика являются высокие значения ее показателя преломления, коэффициента теплового расширения и термооптического коэффициента, а также высокая теплопроводность и однородность.

Метод, предложенный в данной работе, может быть использован, в частности, для точного дистанционного измерения или непрерывного мониторинга температуры в условиях, когда электронные устройства нецелесообразны из-за сильного поля возмущающих помех или возможного отказа (например, при

мониторинге температуры корпуса ядерного реактора).

Более того, представленная методика при соответствующей доработке может быть использована для определения характеристик оптических материалов, что продолжает оставаться актуальной задачей. Так, в [8,9] были представлены методики оценки коэффициентов теплового расширения аморфных диэлектриков и диэлектрических кристаллов. На основе подхода, предложенного в настоящей статье, планируется разработка метода для одновременного определения неизвестных значений показателя преломления, термооптического коэффициента и коэффициента линейного теплового расширения.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Y. Zhao, X. Wang, Y. Zhang, Y. Li, X. Yao.** *J. Alloys Compd.*, **817**, 152691 (2020).
2. **А.Г. Демирханян, Г.Г. Демирханян, Э.П. Коканян.** *Изв. НАН Армении, Физика*, **52**, 515 (2017).
3. **C.W. Chen, W.C. Lin, L.S. Liao, Z.H. Lin, H.P. Chiang, P.T. Leung, E. Sijercic, W.S. Tse.** *Appl. Opt.*, **46**, 5347 (2007).
4. **P. Neumann, I. Jakobi, F. Dolde, C. Burk, R. Reuter, G. Waldherr, J. Honert, T. Wolf, A. Brunner, J. H. Shim, D. Suter, H. Sumiya, J. Isoya, J. Wrachtrup.** *Nano Lett.*, **13**, 2738 (2013).
5. **P. Roriz, S. Silva, O. Frazão, S. Novais.** *Sensors*, **20**, 2113 (2020).
6. **M. Mikolajek, R. Martinek, J. Koziorek, S. Hejduk, J. Vitasek, A. Vanderka, R. Poboril, V. Vasinek, R. Hercik.** *J. Sens.*, **2020**, 8831332 (2020).
7. **E. Jahier, J. Guéna, Ph. Jacquier, M. Lintz, A.V. Papoyan, M.A. Bouchiat.** *Appl. Phys. B*, **71**, 561 (2000).
8. **А.В. Еганян, А.С. Кузанын, В.Н. Статопоулос.** *Изв. НАН Армении, Физика*, **51**, 79 (2016).
9. **А.В. Еганян, Э.П. Коканян, К.Л. Ованесян, Т.И. Бутаева, Л.Э. Овсепян.** *Изв. НАН Армении, Физика*, **53**, 201 (2018).

REMOTE OPTICAL TEMPERATURE SENSING USING A FLAT-PARALLEL DIELECTRIC WAFER

V.A. HARUTYUNYAN, A.V. PAPOYAN

It is demonstrated that reflection of a continuous-wave single-frequency laser radiation from a thick flat-parallel glass wafer can be used for precise remote measurement of temperature. Such measurement relies on the low-finesse Fabry-Pérot nature of the dielectric wafer, whose optical thickness depends on temperature due to two characteristics of the dielectric material: the linear expansion coefficient and the thermo-optic coefficient. For the used glass wafer with a refractive index of 1.5183 and a thickness of 15.75 mm, the temperature distance between adjacent interference peaks was 1.4825°C, which made it possible to measure the temperature with a mean accuracy of 0.005°C. Performance aspects of the proposed temperature sensor and its practical applicability are analyzed.

МЕХАНИЗМ ОБЪЕМНОГО РАСШИРЕНИЯ ЛАЗЕРНО-ИНДУЦИРОВАННОЙ ГИДРОДИНАМИЧЕСКОЙ ПЕРЕОРИЕНТАЦИИ

В.С. АКОБЯН, М.Р. АКОПЯН, Р.С. АКОПЯН*

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

*e-mail: rhakob@ysu.am

(Поступила в редакцию 23 апреля 2021 г.)

Теоретически изучены лазерно-индуцированные гидродинамические движения в изначально гибридно ориентированных нематических жидких кристаллах. Движение приводит к углублению кривизны, когда скорость потока направлена в сторону изнутри кривизны гибкой ленты. Но когда скорость имеет противоположное направление, то мы имеем две различных возможностей, зависящих от значений поверхностных энергии. В том случае, когда имеем сильное граничное условие (энергия сцепления $> 10^{-1}$ эрг/см²) на планарно-ориентированной подложке и слабое граничное условие (энергия сцепления $\approx 10^{-1}$ эрг/см²) на гомеотропно-ориентированной подложке, то тогда молекулы жидкого кристалла следуют направлению потока. Кривизна гибкой ленты переворачивается, когда имеем слабое граничное условие на планарно-ориентированной подложке и сильное граничное условие на гомеотропно-ориентированной подложке.

1. Введение

Эффекты опто-гидродинамических переориентации директора нематического жидкого кристалла (НЖК) генерируются световой волной. Этот вид переориентации был подробно изучен во многих работах [1–4]. Как указано в [1], крайне малое поглощение может служить причиной значимой переориентацией директора жидкого кристалла (ЖК). Существуют три основных механизма, которые позволяют нам преобразовывать поглощенную энергию в энергию деформации молекулы ЖК: гравитационный или механизм Рэлея-Бенара, термокапиллярный или механизм Марангони, и механизм прямого расширения объема. В рамках модели классических несжимаемых жидких кристаллов недавно было исследовано влияние градиента температуры на процесс переориентации директора гибридно ориентированной ЖК и выявлено, что установившееся гидродинамическое течение с величиной и направлением зависит от градиента температуры и характера сцепления молекул жидкого кристалла на ограничивающих поверхностях [5]. Молекулярная ориентация жидкокристал-

лических материалов может контролироваться с помощью топографических узоров. Например, это контролируется на пленке пористого анодного оксида алюминия (АОА), которая имеет гексагональные массивы пор на верхней поверхности. Ориентация меняется из-за различных условий сцепления. Это управляется путем изменения размера пор и пористости пленки АОА [6,7]. Сегнетоэлектрические микропластинки в НЖК могут быть переориентированы благодаря взаимодействию с внешним электрическим полем. Вращение пластинок сопровождается переориентацией ЖК вокруг пластинок. Это происходит из-за сильного сцепления ЖК на поверхности пластинок [8]. В работе [9] впервые сообщается об экспериментальном исследовании динамики оптических свойств гибридно ориентированного НЖК под влиянием потока, вызванного механизмом объемного расширения.

В данной работе мы подробно обсудим динамику механизма прямого объемного расширения лазерно-индуцированных гидродинамических (ЛИГ) движений в гибридно-ориентированных НЖК при различных значениях энергий сцепления подложки. Этот механизм состоит из следующих процессов. Поглощенная световая энергия нагревает НЖК, вызывая тепловое расширение. Градиент давления становится причиной течения Пуазейля в НЖК. Оно и переориентирует молекулы из-за сильной связи гидродинамических и ориентационных движений в НЖК. В случае гибридной начальной ориентации НЖК, если гидродинамическая скорость потока направлена вне кривизны «гибкой ленты», градиент скорости приводит к небольшому увеличению кривизны. Когда скорость направлена на кривизну «гибкой ленты», оно становится более деформируемой. В этом случае «гибкая лента» переворачивает свою кривизну в тот момент, когда энергия деформации становится больше энергии поверхностного сцепления.

2. Уравнения нематодинамики

Механизм прямого объемного расширения может быть представлен по следующей схеме (Рис.1). Горизонтально расположенная плоская капиллярная ячейка с нематической жидкостью, сообщающейся с объемом жидкости, которая поглощает световую энергию. Нормалью к стенкам ячейки направлена ось z , а ось x – по длине ячейки. Начало координат будет расположено на левом нижнем краю капилляра. Благодаря поглощению, лазерное излучение нагревает объем ячейки и вызывает объемное расширение. Расширение жидкости создает градиент давления по ячейке. Чтобы позволить жидкости течь под действие градиента давления, нам придется предположить наличие свободного объема в ячейке, где поддерживается постоянное (например, атмосферное) давление. Для упрощения мы предполагаем градиент давления по x координате, что приводит к потоку Пуазейля с $\mathbf{v} = v\mathbf{e}_x$, где $\mathbf{v}$ – скорость гидродинамических потоков в ячейке, а $\mathbf{e}_x$ – единичный вектор по x координате. Мы рассматриваем

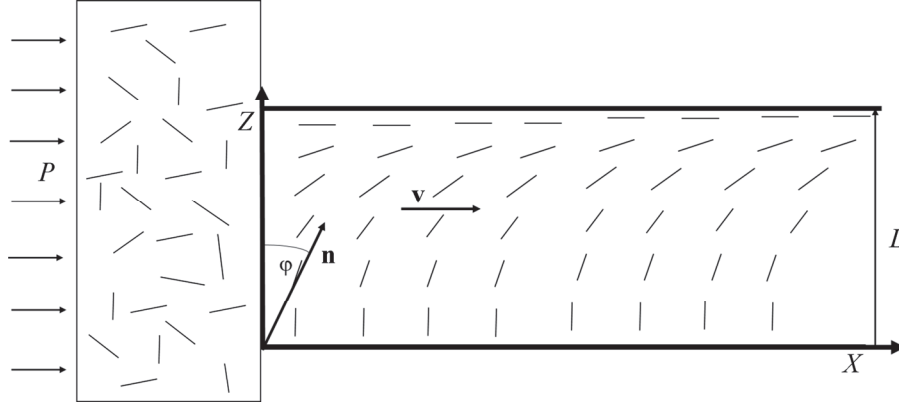


Рис.1. Рассматриваемая ячейка: P – интенсивность излучения, $\mathbf{v}$ – скорость потока, L – толщина капиллярной ячейки и $\mathbf{n}$ – директор НЖК.

однородность в плоскости ячейки (x, y): $\partial/\partial x = \partial/\partial y = 0$ и директор $\mathbf{n}$ остается в плоскости (x, z).

Поведение рассматриваемой системы в общем случае, описывается набором из трех нелинейных динамических уравнений: для переориентации директора НЖК, гидродинамического движения (уравнение Навье-Стокса) и теплопроводности [2].

Обозначим угол между директором $\mathbf{n}$ и осью z как $\varphi(z, t)$, тогда $n_x = \sin \varphi$, $n_z = \cos \varphi$ и уравнение для угла переориентации директор НЖК имеет вид:

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial \varphi}{\partial z} \right)^2 \sin \varphi \cos \varphi (K_1 - K_3) + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} (K_3 \cos^2 \varphi + K_1 \sin^2 \varphi) \\ &= \frac{6\beta\chi V}{\rho c_p l^3} P(2z - L) [\alpha_2 \cos^2 \varphi - \alpha_3 \sin^2 \varphi] + \frac{\partial \varphi}{\partial t} (\alpha_3 - \alpha_2), \end{aligned} \quad (1)$$

где K_1 и K_3 – коэффициенты упругости Франка, α_i – коэффициенты Лесли, ρc_p – теплоемкость удельного объема (эрг/см³К), χ – коэффициент поглощения (см⁻¹), P – интенсивность излучения (эрг/см²), V – объем поглощающей жидкости и β – коэффициент теплового расширения (К⁻¹).

Математически, более подходящим для численных расчетов является запись этого уравнения в следующем виде:

$$\frac{\partial \phi}{\partial \tau} = (K + \Delta \sin^2 \phi) \frac{\partial^2 \phi}{\partial \zeta^2} + \frac{1}{2} \Delta \sin 2\phi \left(\frac{\partial \phi}{\partial \zeta} \right)^2 + DeP(2\zeta - 1)(\alpha \sin^2 \phi - 1), \quad (2)$$

где мы сделали следующие обозначения: $K = K_3/K_1$, $\Delta = (K_1 - K_3)/K_1$, $\alpha = (\alpha_3 + \alpha_2)/\alpha_2$, $\zeta = z/L$, $\tau = K_1 t / (\gamma L^2)$, $\gamma = \alpha_3 - \alpha_2$ и $De = 6\beta\chi V \alpha_2 / (K_1 \rho c_p l)$.

Уравнение (2) – это обобщенное уравнение, описывающее свето-индуцированное гидродинамическое течение в НЖК с директором, ограниченным в плоскости (x, z).

3. Граничные условия

Для граничных условий здесь мы обсуждаем более общий случай, поэтому мы не рассматриваем бесконечную энергию сцепления, и вклад поверхности должен быть включен в свободную энергию. Для этой задачи в приближении Рапини, когда капилляр имеет гибридную ориентацию, граничные условия имеют следующий вид [10]:

$$(K_1 \sin^2 \phi + K_3 \cos^2 \phi) \frac{\partial \phi}{\partial z} - \sigma_1 \sin \phi \cos \phi = 0 \quad (3)$$

у нижней стены ($z = 0$). И у верхней стены ($z = L$):

$$(K_1 \sin^2 \phi + K_3 \cos^2 \phi) \frac{\partial \phi}{\partial z} - \sigma_2 \sin \phi \cos \phi = 0. \quad (4)$$

В приведенных выше уравнениях σ_1 и σ_2 являются коэффициентами энергии поверхностного сцепления (эрг/см²). Как уже обсуждалось ранее в некоторых статьях [11], энергия поверхностного сцепления находится в диапазоне $10^{-4} - 10^{-2}$ эрг/см². Мы обсуждали случай, когда энергия сцепления находится в этом диапазоне. И мы рассмотрели 10^{-1} эрг/см² как сильное граничное условие. Начальное условие для гибридно ориентированного ЖК имеет следующий вид:

$$\phi(0, \xi) = (\pi / 2) \xi. \quad (5)$$

4. Численные решения и обсуждения

Мы решили уравнение (2) для 2 направлений гидродинамического течения с вышеупомянутыми граничными и начальными условиями, используя «Mathematica-11». В этих расчетах для НЖК мы предположили, что $K_1 = 6 \cdot 10^{-7}$ эрг/см, $K_3 = 7.5 \cdot 10^{-7}$ эрг/см $\alpha_2 = -0.8 \Pi$, $\alpha_3 = -0.012 \Pi$, $\beta = 10^{-3} K^{-1}$, $\rho_{cp} = 1 \text{ Дж/см}^3$, $V = 1 \text{ см}^3$, $L = 12 \cdot 10^{-4} \text{ см}$, $l = 0.1 \text{ см}$. Мы изучаем переориентацию, вызванную лазерным излучением с интенсивностью $P = 0.5 \cdot 10^{-3} \text{ Вт/см}^2$.

В случае направления излучения, когда скорость потока направлена снаружи во внутрь кривизны «гибкой ленты», мы имеем разные результаты, зависящие от граничных условий. Когда энергия поверхностного сцепления нижней стенки (первоначально гомеотропно ориентированной стенки) составляет

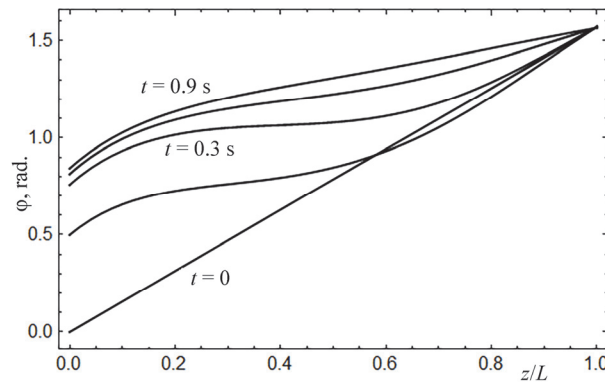


Рис.2. Угол между осями $\mathbf{n}$ и $\mathbf{z}$ для разных времен.

10^{-3} эрг/см²(слабое сцепление), а энергия верхней стенки (первоначально планарно ориентированной) составляет 10^{-1} эрг/см²(жесткое сцепление), гидродинамический поток заставляет гомеотропно ориентированных молекул принимать направление потока. Через 0.9 сек. переориентация молекул почти насыщается (Рис.2). Таким образом, ЖК становится почти планарно ориентированным по своему объему.

Фазовый набег увеличивается, потому что все молекулы меняют свою ориентацию одинаково: они пытаются быть ориентированными, как планарные молекулы. Фазовый набег увеличивается до тех пор, пока все молекулы переориентируются (Рис.3).

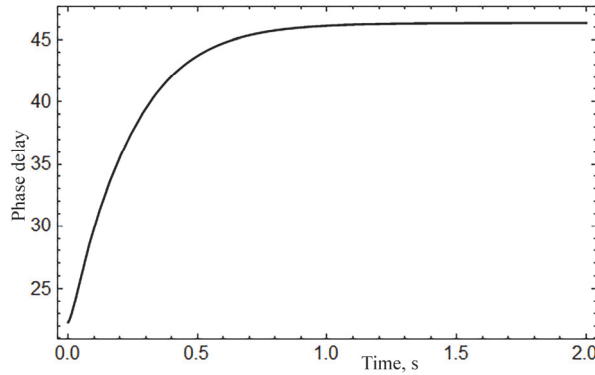


Рис.3. Зависимость фазовой набег от времени, когда энергия поверхностного сцепления нижней стенки составляет 10^{-3} эрг/см², а энергия верхней стенки составляет 10^{-1} эрг/см².

Когда энергия поверхностного сцепления нижней стенки (первоначально гомеотропно ориентированной стенки) составляет 10^{-1} эрг/см², а энергия верхней стенки (первоначально планарно ориентированной) составляет 10^{-3} эрг/см², «гибкая лента» разворачивает свою кривизну (Рис.4а) в тот момент, когда энергия деформации становится больше энергии поверхностного сцепления. Через 0.47 с. гидродинамическая скорость выходит за пределы обратной кривизны и приводит к небольшому дополнительному увеличению кривизны. Через 1 секунду уже ничего не меняется, и молекулы остаются такими, как на Рис.4б. Время реверсирования зависит от параметров НЖК, интенсивности лазерного излучения.

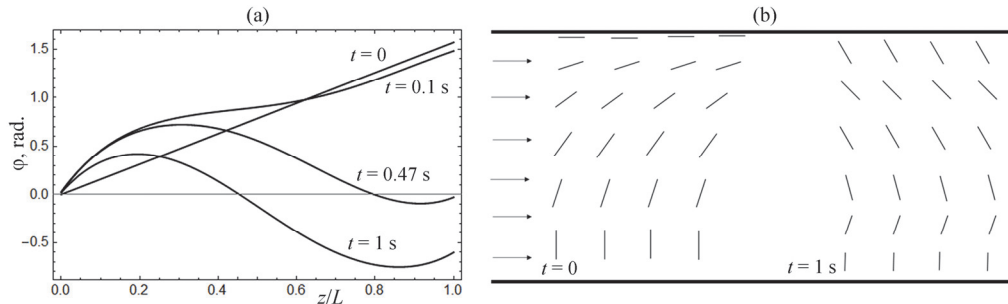


Рис.4. (а) Угол между осями $\mathbf{n}$ и $\mathbf{z}$ для разных времен, (б) молекулы ЖК в капилляре с начальной ориентацией ($t = 0$) и после переориентации ($t = 1$ с).

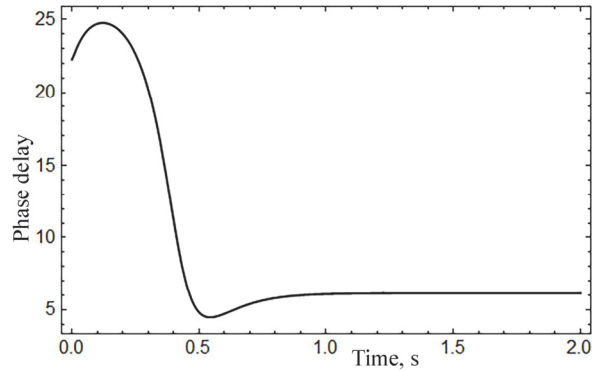


Рис.5. Зависимость фазовой набег от времени, когда энергия поверхностного сцепления нижней стенки составляет 10^{-1} эрг/см², а энергия верхней стенки составляет 10^{-3} эрг/см².

Фазовой набег также ведет себя в этом случае по-разному (Рис.5). Он увеличивается в течении первых миллисекунд, а затем сильно уменьшается, потому что молекулы по-разному меняют свою ориентацию до 0.47 с., когда гидродинамический поток меняет кривизну «гибкой ленты». Затем, фазовой набег немного увеличивается из – за небольшого увеличения кривизны и насыщается.

В случае обратного направления падения излучения, когда скорость потока направлена изнутри кривизны «гибкой ленты», градиент скорости приводит к увеличению кривизны. Когда у нас есть небольшая энергия сцепления на нижней стенке, ориентация на стенке меняется, и первоначально гомеотропно ориентированные молекулы становятся почти планарными (Рис.6а). Но, с другой стороны, когда у нас есть небольшая энергия сцепления на верхней стенке, где изначально молекулы ориентированы планарно, градиент скорости гидродинамического потока почти не меняет ориентацию молекул (Рис.6б). Когда энергия поверхностного сцепления нижней стенки (первоначально гомеотропно ориентированной стенки) составляет 10^{-3} эрг/см², а энергия верхней стенки (первоначально планарно ориентированной) составляет 10^{-1} эрг/см², молекулы получают свое окончательное положение через 0.5 с. В случае противоположного сцепления энергий требуется 0.7 с для окончательной переориентации.

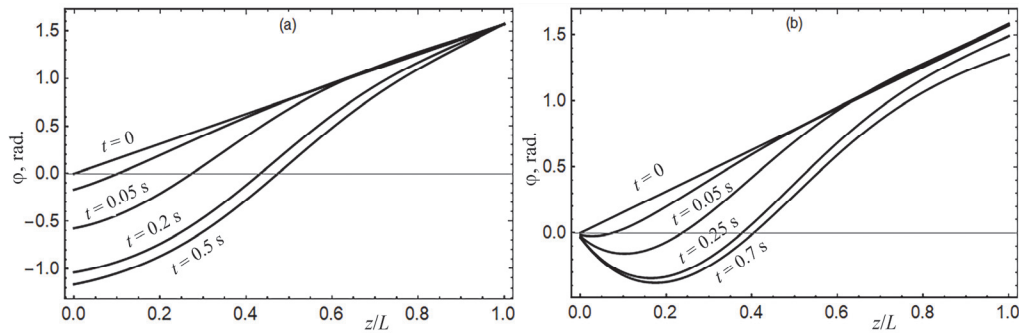


Рис.6. Угол между осями $\mathbf{n}$ и $\mathbf{z}$ для разных времен, (а) слабое граничное условие на нижней стенке, (б) слабое граничное условие на верхней стенке.

5. Заключение

Таким образом, в случае, когда гидродинамический поток направлен снаружи кривизны «гибкой ленты», мы получаем разные результаты в зависимости от граничных условий. В первом случае мы получаем почти планарные переориентированные молекулы в ячейке, когда на верхней стенке задано сильное граничное условие и слабое граничное условие на нижней стенке. А во втором случае, когда граничные условия меняются местами, гидродинамический поток разворачивает кривизну «гибкой ленты». В случае, когда гидродинамический поток направлен изнутри кривизны «гибкой ленты», поток приводит к увеличению кривизны.

ЛИТЕРАТУРА

1. N.V. Tabiryan, B.Ya. Zel'dovich, A.V. Sukhov. *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **136**, 1 (1986).
2. R.S. Hakobyan, K.M. Sargsyan, N.V. Tabirian. *Mol. Crystals and Liq. Crystals*, **453**(1), 239 (2006).
3. Y.-K. Kim, B. Senyuk, O.D. Lavrentovich. *Nat Commun*, **3**, 1133 (2012).
4. I. Nys. *Liquid Crystals Today*, **29**(4), 65 (2020).
5. A.V. Zakharov, A.A. Vakulenko. *Physics of the Solid State*, **52**(7), 1542 (2010).
6. S.H. Ryu, D.K. Yoon. *ACS Applied Materials & Interfaces*, **8**(27), 17707 (2016).
7. I. Gryn, E. Lacaze, R. Bartolino, B. Zappone. *Advanced Functional Materials*, **25**(1), 142 (2014).
8. M. Škarabot, M.M. Kržmanc, L. Rupnik, G. Lahajnar, D. Suvorov, I. Mušević. *Liquid Crystals*, **48**(3), 1 (2020).
9. T. Dadalyan, K. Petrosyan, R. Alaverdyan, R. Hakobyan. *Liquid Crystals*. **46**(5), 694 (2018).
10. F. Simoni. *Nonlinear Optical Properties of Liquid Crystals and PDLC.*, Teaneck, NJ: World Scientific, 1997.
11. D. Rivière, Y. Levy, E. Guyon. *J. de Physique Lettres*, Edp sciences, **40**(10), 215, (1979).

VOLUME EXPANSION MECHANISM OF LASER-INDUCED HYDRODYNAMIC REORIENTATION

V.S. HAKOBYAN, M.R. HAKOBYAN, R.S. HAKOBYAN

Laser-induced hydrodynamic (LIH) motions in nematic liquid crystal (NLC) which is an initially oriented hybrid have been studied theoretically. For the direction when the flow velocity is directed out of the "flexible ribbon's" curvature, it brings an increase of the curvature. But when the velocity has the opposite direction, we have two different cases depending on the surface anchoring energies. When there is a strong boundary condition (anchoring energy $> 10^{-3}$ erg/cm²) on the planar oriented wall, and there is a weak boundary condition (anchoring energy $\approx 10^{-3}$ erg/cm²) on the homeotropic oriented wall, the molecules of a liquid crystal (LC) take the direction of the flow. "Flexible ribbon's" curvature is reversed when is given a weak boundary condition on the planar oriented wall and on the homeotropic oriented wall is given strong boundary condition.

ФАЗНЫЕ ТОЧКИ ИНТЕРФЕРЕНЦИОННОЙ КАРТИНЫ ВОЛНОВОГО ПОЛЯ ДВУХ КОГЕРЕНТНЫХ ТОЧЕЧНЫХ ИСТОЧНИКОВ

А.Ж. ХАЧАТРЯН^{1*}, Ж.Р. ПАНОСЯН¹, Ж.Б. ХАЧАТРЯН²

¹Государственный инженерный университет Армении, Ереван, Армения

²Институт прикладных проблем физики НАН Армении, Ереван, Армения

*e-mail: ashot.khachatrian@gmail.com

(Поступила в редакцию 25 мая 2021 г.)

В работе обсуждается вопрос о характере фазности колебаний в различных точках волнового поля системы из двух точечных и изотропно излучающих источников. Данный вопрос рассматривается для точек расположенных на поверхностях максимумов и минимумов интерференционной картины. Показано также, что на поверхностях экстремумов амплитуды синфазность или противофазность колебаний определяется кратностью суммы хода волн к длине волны. Исследовано распределение точек фазности в различных плоскостных срезах.

1. Введение

Согласно общепринятому соглашению, интерференцией называется взаимное усиление или ослабление амплитуды колебаний при наложении двух или нескольких волн, генерированных когерентными источниками. Ниже мы будем рассматривать интерференцию на примере всем хорошо знакомой задачи о наложении двух сферических волн, генерированных двумя точечными источниками. Говоря об интерференционной картине, обычно ограничиваются указанием множества с максимальным и минимальным значением амплитуды колебаний. Вместе с тем, вопрос о фазовых соотношениях между колебаниями в двух разных точках интерференционной картины в традиционном изложении как бы опускается.

Однако, следует отметить выше отмеченного вопрос достаточно важен не только в плане полноты восприятия интерференционной картины, но также имеет важное практическое значение. Так, вопрос о фазовых соотношениях лежит в основе построений всевозможных фазовых решеток [1–7].

Данная работа посвящена выявлению фазовых соотношений между колебаниями в точках различных максимумов и минимумов интерференционной картины. Далее, те точки волнового поля, в которых колебания синфазны или противофазны, мы будем называть фазными.

2. Постановка задачи

Ниже мы рассматриваем стандартную постановку интерференционной задачи, о наложении сферических волн двух точечных источников. Пусть частоты волн и их амплитуды, а также фазы на источниках совпадают. В этом случае задача описания волнового поля сводится к исследованию выражения

$$U(\mathbf{r}, t) = \frac{a_0}{r_1} \cos(\omega t - kr_1) + \frac{a_0}{r_2} \cos(\omega t - kr_2), \quad (1)$$

где вектор $\mathbf{r}$ указывает пространственное расположение точки наблюдения, а r_1 и r_2 являются расстояниями от первого и второго источников до точки наблюдения, соответственно. Согласно (1), величина a_0 есть амплитуда волн, ω – частота и k – волновое число. В случае отсутствия дисперсии отношение ω / k является постоянной величиной, равной скорости распространения волны. Если векторы $\mathbf{d}_1$ и $\mathbf{d}_2$ указывают положения источников, то тогда

$$\mathbf{r}_1 = \mathbf{r} - \mathbf{d}_1, \quad \mathbf{r}_2 = \mathbf{r} - \mathbf{d}_2. \quad (2)$$

И, следовательно, $r_1 = |\mathbf{r}_1|$, $r_2 = |\mathbf{r}_2|$.

Обычно, записывая выражение (1) в виде (см. [1, 2])

$$U(\mathbf{r}, t) = A_1 \cos[\omega t - \varphi_1] + A_2 \cos[\omega t - \varphi_2], \quad (3)$$

где

$$A_1 = a_0 / r_1, \quad A_2 = a_0 / r_2, \quad (4)$$

и

$$\varphi_1 = kr_1, \quad \varphi_2 = kr_2. \quad (5)$$

Сложение колебаний, производится методом векторной диаграммы или методом комплексного представления гармонических колебаний. В результате такого сложения выражение (3) преобразовывается к виду:

$$U(\mathbf{r}, t) = A \cos[\omega t - \chi(t)], \quad (6)$$

где

$$A = \sqrt{A_1^2 + A_2^2 + 2A_1A_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2)} \quad (7)$$

и

$$\chi(t) = \arctg \frac{A_1 \sin[\omega t - \varphi_1] + A_2 \sin[\omega t - \varphi_2]}{A_1 \cos[\omega t - \varphi_1] + A_2 \cos[\omega t - \varphi_2]}. \quad (8)$$

Согласно (6) в каждой точке пространства имеет место гармоническое колебание с частотой равной частоте источников. Заметим также, что фаза $\chi(t)$ зависит от времени, т.е. в каждой фиксированной точке колебания происходят с фазовой модуляцией.

Основанный на формуле (8) традиционный подход описания интерференционной картины, т.е. указания мест расположения точек максимумов и минимумов, общеизвестен. Вместе с тем, как было отмечено выше, некоторые важные детали интерференционной картины как бы выбили из рассмотрения. Сказанное относится к вопросу фазности (синфазности или противофазности) колебаний в

различных точках поля, а именно, в точках максимумов и минимумов. Очевидно, что разбор данного вопроса на основе формулы (8) проблематичен. Во всяком случае, ответ прозрачным образом не прослеживается.

Исходя из этого, в данной работе, мы предлагаем разбор интерференционной картины исходя из другой формы записи интерференционного поля. Так, выражение (3) может быть преобразовано к виду:

$$U(\mathbf{r}, t) = (A_1 + A_2) \cos \left[\frac{\varphi_1 - \varphi_2}{2} \right] \cos \left[\omega t - \frac{\varphi_1 + \varphi_2}{2} \right] + (A_1 - A_2) \sin \left[\frac{\varphi_1 - \varphi_2}{2} \right] \sin \left[\omega t - \frac{\varphi_1 + \varphi_2}{2} \right]. \quad (9)$$

Ясно, что выражения (9) и (6) являются различными представлениями одного и тоже волнового поля, т.е. равны друг другу. Как будет показано ниже, разбор интерференционной картины на основе (9) позволяет получить соотношения фазности колебаний в различных точках максимумов и минимумов.

3. Условия максимума и минимума амплитуды

Прежде всего, рассмотрим вывод известных соотношений для максимума и минимума интерференционной картины на основе (9). Как видно из выражения (9), если в точке наблюдения выполняется условие:

$$\frac{\varphi_1 - \varphi_2}{2} = \pi n \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots), \quad (10)$$

то в данной точке колебания волнового поля происходит с максимально возможным отклонением:

$$U_{\max}(\mathbf{r}, t) = (-1)^n (A_1 + A_2) \cos \left[\omega t - \frac{\varphi_1 + \varphi_2}{2} \right]. \quad (11)$$

Если же в (9)

$$\frac{\varphi_1 - \varphi_2}{2} = \frac{\pi}{2} + \pi n \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots), \quad (12)$$

то колебания поля в точке Р происходит с минимально возможным отклонением

$$U_{\min}(\mathbf{r}, t) = (-1)^n (A_1 - A_2) \sin \left[\omega t - \frac{\varphi_1 + \varphi_2}{2} \right]. \quad (13)$$

Ясно, что (10), (12) являются условиями максимума и минимума интерференционной картины. Используя (5), а также связь волнового числа с длиной волны $k = 2\pi / \lambda$, данные условия могут быть представлены в виде:

$$r_1 - r_2 = \frac{\lambda}{2} 2n \quad (\text{maximum}), \quad (14)$$

$$r_1 - r_2 = \frac{\lambda}{2} (2n + 1) \quad (\text{minimum}). \quad (15)$$

Согласно (14), (15) если разность хода $r_1 - r_2$ кратна четному числу длины

полуволны, то наблюдается максимум, а если же она кратна нечетному числу длины полуволны, то наблюдается минимум.

Здесь следует отметить еще одно важное обстоятельство, что интерференция, а именно выполнение условия максиму (14) возможно лишь в том случае, когда длина волны меньше расстояния между источниками d (см. Рис.1). Если же $\lambda > d$, условие максимума может быть выполнено только при $n = 0$, т.е. когда разность хода равна нулю.

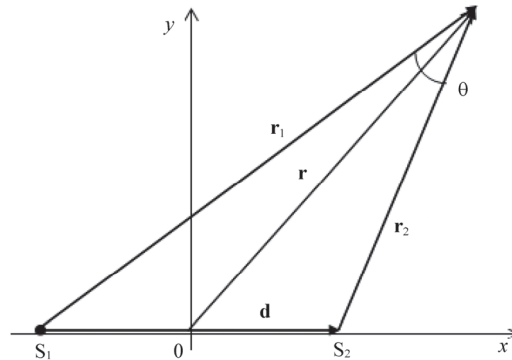


Рис.1. Схематическое представление интерференционного опыта. $\mathbf{d}$ – вектор, определяющий взаимное расположение источников, $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ – вектора, определяющие расположение точки наблюдения относительно источника.

Вышеотмеченное утверждение может быть доказано на основе рассмотрения следующих двух равенств:

$$r_1 - r_2 = n\lambda, \quad \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 = \mathbf{d}. \quad (16)$$

Возведя оба этих равенства в квадрат и вычитая одно от другого получим:

$$2r_1r_2(\cos\theta - 1) = n^2\lambda^2 - d^2, \quad (17)$$

где θ – угол между направлениями векторов $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ и $|\mathbf{d}| = d$ (см. Рис.1). Так как $|\cos\theta| \leq 1$, то значение левой части **Error! Reference source not found.** должно удовлетворять условию:

$$2r_1r_2(\cos\theta - 1) \leq 0. \quad (18)$$

Для правой части (17) аналогичное неравенство ($n^2\lambda^2 - d^2 \leq 0$) может иметь место лишь в том случае, когда

$$d \geq |n|\lambda. \quad (19)$$

Ясно, что при условии $\lambda < d$ данное неравенство определяет количество максимумов интерференции ($2n + 1$):

$$|n| \leq d / \lambda. \quad (20)$$

Если же $\lambda \geq d$, то (19) может быть выполнено, только если $n = 0$. Согласно (16) в этом случае $r_1 = r_2$. Из полученного следует, что когда длина волны больше расстояния между источниками, то интерференционная картина содержит один максимум, причем точки максимума расположены на плоскости проходящей перпендикулярно по центру отрезка соединяющего источники.

4. Фазовые соотношения колебаний точек интерференционной картины

Для дальнейшего изложения целесообразно сделать следующие обозначения. Обозначим посредством R_1^n , R_2^n и Ψ_1^n , Ψ_2^n расстояния r_1 , r_2 и фазы ϕ_1 , ϕ_2 в точках максимума, для различных значений n . В этом случае, согласно (10), (14), условие максимума будет выглядеть следующим образом:

$$R_1^n - R_2^n = \lambda n \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) - (\text{maximum}), \quad (21)$$

или $\Psi_1^n - \Psi_2^n = 2\pi n$. Аналогичные обозначения введем также для условия минимума, только вместо заглавных букв мы будем использовать строчные:

$$r_1^n - r_2^n = \lambda n + \lambda / 2 \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) - (\text{minimum}), \quad (22)$$

или $\phi_1^n - \phi_2^n = 2\pi n + \pi$. Введем также пространственные вектора:

$$\mathbf{R}^n, \mathbf{r}^n, \quad (23)$$

указывающих месторасположения точек максимумов и минимумов для различных значений n , т.е. если в (1) $\mathbf{r} = \mathbf{R}^n$, то в данной точке имеется максимум n -ого порядка и если $\mathbf{r} = \mathbf{r}^n$, то точка будет минимумом $n + 1$ порядка.

Воспользовавшись (21)–(23), а также (4) для обсуждения вопроса о фазовых соотношениях между колебаниями в различных точках максимумов и минимумов, запишем (11) и (13) в следующем виде:

$$U(\mathbf{R}^n, t) = a_0 \left(\frac{R_1^n + R_2^n}{R_1^n R_2^n} \right) \cos \left[\omega t - \frac{R_1^n + R_2^n}{\lambda} \pi + \pi n \right], \quad (24)$$

$$U(\mathbf{r}^n, t) = a_0 \left(\frac{r_2^n - r_1^n}{r_1^n r_2^n} \right) \sin \left[\omega t - \frac{r_2^n + r_1^n}{\lambda} \pi + \pi n \right]. \quad (25)$$

Как непосредственным образом следует из (24), (25) если условия максимума и минимума амплитуды колебаний определяются разностью хода волн (см. (21) и (22)), то условия синфазности и противофазности колебаний в этих точках определяется суммой хода; $R_1^n + R_2^n$ и $r_2^n + r_1^n$, соответственно. Далее, мы будем называть объединение множеств синфазно и противофазно колеблющихся точек множеством фазных точек.

Из (24) непосредственным образом следует, что если ($m = 1, 2, 3, \dots$)

$$\frac{R_1^n + R_2^n}{\lambda} \pi + \pi n = 2\pi m \quad (\text{cophase}), \quad (26)$$

то точка максимума колеблется синфазно с источниками. Если же

$$\frac{R_1^n + R_2^n}{\lambda} \pi + \pi n = \pi + 2\pi m \quad (\text{antiphase}), \quad (27)$$

то точка максимума колеблется в противофазе с источниками. Представим эти условия в виде:

$$R_1^n + R_2^n = (2m - n)\lambda \quad (\text{cophase}), \quad (28)$$

$$R_1^n + R_2^n = (2m + 1 - n)\lambda \quad (\text{antiphase}). \quad (29)$$

Как следует из данных формул, точки максимумов могут колебаться как

синфазно, так и противофазно источникам. Так, для точек максимума с четным номером ($n = 0, 2, 4 \dots$), если сумма хода равна четному числу длин волн, то их колебания синфазны с источника. Если же сумма хода равна четному числу длин волн, то их колебания противофазны источникам. Для нечетных максимумов ($n = 1, 3, 5 \dots$) ситуация обратная. Если сумма хода равна четному числу длин волн, то колебания противофазны колебаниям источника. Если же сумма хода равна нечетному числу длин волн, то они синфазны.

Далее расстояний до точек синфазных с источника, мы в обозначениях на верху букв будем добавлять соответствующий знак, а именно

$$R_1^n \equiv \tilde{R}_1^n \text{ и } R_2^n \equiv \tilde{R}_2^n, \quad (30)$$

где знак $\sim$ призван обозначать полное колебание. В обозначениях расстояний противофазных с источниками точек, мы будем пользоваться знаком $\cap$, призванным обозначать половину колебания:

$$R_1^n \equiv \hat{R}_1^n \text{ и } R_2^n \equiv \hat{R}_2^n. \quad (31)$$

Рассматривая (28), совместно с условием максимума (21) легко получить расстояния $\tilde{R}_1^n$ и $\tilde{R}_2^n$ точек (см. (30)), синфазных с колебаниями источников имеем:

$$\tilde{R}_1^n = m\lambda \text{ и } \tilde{R}_2^n = (m - n)\lambda. \quad (32)$$

Рассматривая теперь (29) и (21), для расстояний R_1^n и R_2^n точек максимума, колеблющихся в противофазе с источниками, получим:

$$\hat{R}_1^n = m\lambda + \lambda / 2 \text{ и } \hat{R}_2^n = (m - n)\lambda + \lambda / 2. \quad (33)$$

Полученный результат, по сити является алгебраическим воспроизведением известного геометрического подхода построения пространственного вида интерференционной картины, когда рассматриваются пересечения шаровых поверхностей с центрами в точках источников и радиусами кратными длине волны. Заметим также, что аналогичные с формулами (32), (33) соотношения могут быть получены для точек минимума интерференционной картины:

$$\hat{r}_1^n = m\lambda + \lambda / 2 \text{ и } \hat{r}_2^n = (m - n)\lambda, \quad (34)$$

$$\tilde{r}_1^n = m\lambda + \lambda \text{ и } \tilde{r}_2^n = (m - n)\lambda + \lambda / 2. \quad (35)$$

Далее мы будем рассматривать распределения точек максимумов колеблющихся синфазно и колеблющихся противофазно с источниками для различных срезов интерференционной картины.

5. Распределение фазных точек интерференционной картины в центральном перпендикулярном срезе

С практической и с теоретической точек зрения представляет интерес рассмотрение интерференционной картинки в определенном срезе. Так, интерференционная картина рассматривается в плоскостях перпендикулярных прямой

проходящей через источники (ось источников) или же параллельных данной прямой. В плане распределения интенсивности все эти картины являются хорошо известными и давно изученными. Вместе с тем нас будет интересовать другой вопрос, а именно распределение точек синфазных и противофазных колебаний в данных картинах. Так как данное распределение, как же, как и распределение интенсивности является пространственным, то его также удобно рассматривать в различных плоскостных срезах.

Прежде всего, рассмотрим фазный аспект интерференционной картины в плоскости, проходящей перпендикулярно и посередине отрезка соединяющего источники, т.е. на центральном перпендикулярном срезе. Т.к. произвольная точка данной плоскости равноудалена от источников, то ясно, что на этой плоскости будут располагаться точки максимума с номером $n = 0$. Согласно (32) и (33), в этом случае

$$\tilde{R}^0[m] = \tilde{R}_1^0 = \tilde{R}_2^0 = m\lambda \quad (36)$$

и

$$\hat{R}_1^0[m] = \hat{R}_1^0 = \hat{R}_2^0 = m\lambda + \lambda / 2. \quad (37)$$

Очевидно, что интерференционная картина центрального перпендикулярного среза обладает аксиальной симметрией по оси, проходящей сквозь источники. Поэтому достаточно ограничиться выявлением распределения фазных точек только для одной прямой, проходящей через центр отрезка источников. Ясно, что при повороте этой линейной картины по оси симметрии, будет вырисовываться вся плоскостная картина. Пусть ось X проходит через источники, тогда для координат точек источника (X, Y, Z) имеем $(-d/2, 0, 0)$ и $(d/2, 0, 0)$. Направим ось Z по центру отрезка источника, которая будет центрально перпендикулярной прямой. Так как точка наблюдения находится на оси Z , то расстояние от нее до точки источника будет равно:

$$R^0 = \sqrt{L^2 + d^2 / 4}. \quad (38)$$

Введя с соответствие с формулой (38) обозначения

$$\tilde{R}^0[m] = \sqrt{\tilde{L}_m^2 + d^2 / 4}, \quad \hat{R}^0[m] = \sqrt{\hat{L}_m^2 + d^2 / 4} \quad (39)$$

и используя равенства (36), (37) легко найти координаты $\tilde{L}_m$ и $\hat{L}_m$ точек фазности

$$\tilde{L}_m = \sqrt{m^2\lambda^2 - d^2 / 4} \quad \text{и} \quad \hat{L}_m = \sqrt{m^2\lambda^2 + m\lambda + (\lambda^2 - d^2) / 4}. \quad (40)$$

Как видно из (40), для каждого фиксированного значения m имеет место соотношение $\tilde{L}_m \leq \hat{L}_m$. Заметим также, что значения m ограничены снизу

$$m \geq d / 2\lambda. \quad (41)$$

Если расстояние между источниками $d = 2\lambda$, то $m = 1$ и как легко увидеть из (40)

$$\tilde{L}_m = 0 \quad \text{и} \quad \hat{L}_m = \sqrt{\lambda^2 / 4 + \lambda}.$$

Отметим также, что в зависимости от дискретной переменной m функции $\tilde{\rho}_m$, $\hat{\rho}_m$ являются монотонно возрастающими функциями и при $m \gg 1$ достигают следующих предельных значений:

$$\tilde{L}_m = m\lambda, \quad \hat{L}_m = m\lambda + \lambda / 2. \quad (42)$$

Согласно (42) при больших значениях m радиусы фазности перестают зависеть от расстояния между источниками d . Это означает не что иное, как то, что суммарное поле системы двух излучателей при больших расстояниях проявляет себя как поле одного излучателя. Действительно, результат (42) может быть получен из (40) также подстановкой $d = 0$.

6. Распределение фазных точек интерференционной картины в параллельном срезе

Далее мы будем рассматривать распределение точек фазности в параллельном срезе интерференционной картины, т.е. в плоскости параллельной отрезку источников и отстоящей от него на некотором расстоянии L . Выберем оси (X, Y) в плоскости параллельного среза. Кроме того, выберем ось X параллельно отрезку соединяющего источники, а ось Z направим по центру этого отрезка.

Если Z координата центра отрезка источников отрицательна, то в выбранной системе координат она будет иметь координату $(0, 0, -L)$, а координаты точек плоскости наблюдения будут иметь вид: $(x, y, 0)$. Координаты точек источников будут соответственно выглядеть следующим образом: $(-d/2, 0, -L)$, $(d/2, 0, -L)$. Из вышеизложенного следует, что расстояния от точки наблюдения до источников имеют вид:

$$R_{1,2} = \sqrt{(x \pm d/2)^2 + L^2 + y^2}. \quad (43)$$

Согласно (43) для расстояний точек фазности до источников можем написать (см. (32), (33)):

$$\tilde{R}_1^n = \sqrt{L^2 + \tilde{x}_m^2 + \tilde{y}_m^2 + d^2/4 + \tilde{x}_m d} = m\lambda, \quad (44)$$

$$\tilde{R}_2^n = \sqrt{L^2 + \tilde{x}_m^2 + \tilde{y}_m^2 + d^2/4 - \tilde{x}_m d} = (m - n)\lambda \quad (45)$$

и

$$\hat{R}_1^n = \sqrt{L^2 + \hat{x}_m^2 + \hat{y}_m^2 + d^2/4 + \hat{x}_m d} = m\lambda + \lambda/2, \quad (46)$$

$$\hat{R}_2^n = \sqrt{L^2 + \hat{x}_m^2 + \hat{y}_m^2 + d^2/4 - \hat{x}_m d} = (m - n)\lambda + \lambda/2. \quad (47)$$

Полученные соотношения (44), (45) и (46), (47) являются не чем иным, как системами уравнений для нахождения $\tilde{x}_m, \tilde{y}_m$ и $\hat{x}_m, \hat{y}_m$, соответственно. Для того, чтобы центральная точка фазовой плоскости ($\tilde{x}_m = 0, \tilde{y}_m = 0$) колебалась с источниками синфазно (см. (40)), то как ясно следует из (44), (45) это возможно, только если $n = 0$ и плоскость отстоит от источников на расстоянии $L = \sqrt{\tilde{m}^2 \lambda^2 - d^2/4}$ ($\tilde{m}$ – некоторое целое число). Если же центр плоскости наблюдения находится в противофазе с источниками $\hat{x}_m = 0, \hat{y}_m = 0$, то согласно

(46), (47) это возможно также если $n = 0$ и $L = \sqrt{\hat{m}^2 \lambda^2 + \hat{m} \lambda + (\lambda^2 - d^2) / 4}$ ($\hat{m}$ – некоторое целое число). Из соотношений (44)–(47) также следует, что

$$\tilde{x}_m = \frac{2nm - n^2}{2d} \lambda \text{ и } \hat{x}_m = \frac{2nm - n^2 + 1}{2d} \lambda. \quad (48)$$

Как видно из данных формул, при удалении точки от центра плоскости наблюдения распределение фазных точек принимает равномерный характер.

7. Заключение

Таким образом, мы рассмотрели известную интерференционную картину поля излучения двух когерентных точечных источников на предмет фазности колебаний в точках максимумов и минимумов. Как мы показали выше для полноты описания интерференционного поля помимо знания разности хода волн, важно также знание суммы их хода.

ЛИТЕРАТУРА

1. S.A. Carvalho, L.E.E. de Araujo. Phys. Rev. A, **84**, 043850 (2011).
2. B. Xie, X. Cai, Z.-H. Xiao. Opt. Commun., **285**, 133 (2012).
3. В.А. Бушуев, А.И. Франк, Г.В. Кулин. ЖЭТФ, **149**, 41 (2016).
4. Y. Yang, C.-S. Kim, R. G. Hobbs, P. Kruit, K.K. Berggren. Phys. Rev. A, **98**, 043621 (2018).
5. C.W. Clark, R. Barankov, M.G. Huber, M. Arif, D.G. Cory, D.A. Pushin. Nature, **525**, 504 (2015).
6. D. Hussey, C. Brocker, J. Cook, D. Jacobson, T. Gentile, W. Chen, E. Baltic, D. Baxter, J. Doskow, M. Arif. Physics Procedia, **69**, 48 (2015).
7. С.Б. Одинокоев, М.В. Шишова, А.Ю. Жердев, М.С. Ковалев, М.Л. Галкин, В.Ю. Венедиктов. Оптика и спектроскопия, **127**, 469 (2019).
8. М.А. Исакович. Общая акустика, Москва: Наука, 1973.
9. Г.С. Горелик. Колебания и волны, Москва: Физматлит, 2007.

PHASE POINTS OF THE INTERFERENCE PICTURE OF THE WAVE FIELD OF TWO COHERENT POINT SOURCES

A.Zh. KHACHATRIAN, Zh.R. PANOSYAN, Zh.B. KHACHATRYAN

The paper the question of the character of the oscillation phase at different points of the wave field of a system of two point and isotopically emitting sources is discussed. This issue is considered for the points located on the surfaces of the maxima and minima of the interference picture. It is also shown that on the surfaces of the amplitude extrema, the in-phase or antiphase oscillations are determined by the multiplicity of the sum of the wave path to the wavelength. The distribution of phase points in various plane cuts is investigated.

**ЭФФЕКТИВНОСТЬ РАБОТЫ ОРГАНИЧЕСКОГО
ТОНКОПЛЕНОЧНОГО ТРАНЗИСТОРА НА ОСНОВЕ
ПЕНТАЦЕНА С САМООРГАНИЗУЮЩИМСЯ
МОНОСЛОЕВЫМ ИНТЕРФЕЙСОМ
ОКТАДЕЦИЛТРИХЛОРСИЛАНА**

А. БАБАДЖАНЫАН^{1*}, Б. МИНАСЯН¹, А. МОВСИСЯН¹,
Б. ФРИДМАН², К. ЛИИ³

¹Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

²Сэма Хьюстонский государственный университет, Хантсвилл, Техас, США

³Университет Соганг, Сеул, Корея

*e-mail: barsen@ysu.am

(Поступила в редакцию 30 марта 2021 г.)

В статье обсуждается работа пентаценового органического тонкопленочного транзистора (ОТТ), в котором подложка состоит из самоорганизующихся монослоев (СМ), образованного из октадецилтрихлорсилана (ОТС) на затворном изоляторе. При смене подложки с гидрофильной на гидрофобную дефекты межфазной границы сводятся к минимуму. ОТС СМ исследовался для двух образцов ОТС с плотностью 0.5% и 1.0% по массе в пересчете на раствор хлороформа. Для исследования роста и распределения ОТС-а был измерен угол контакта с водой. Органическая тонкопленочная топография и морфология измерены с помощью сканирующего электронного микроскопа и атомно-силового микроскопа. ОТТ с 0.5% ОТС имеет более высокую подвижность и коэффициент включения/выключения, чем ОТТ с 1.0% ОТС, но имеет повышенное пороговое напряжение. В то же время гистерезис при комнатной температуре практически исчез из-за обработки СМ ОТС.

1. Введение

Октадецилтрихлорсилан (ОТС) с химической формулой $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{17}\text{SiCl}_3$ представляет собой металлоорганическое соединение, которое может быть использовано для образования тонких самоорганизующихся монослойных (СМ) пленок на подложке SiO_2 . ОТС легко воспламеняется и реагирует с водой; оно также чувствительно к воздуху. ОТС амфифильная молекула, состоящая из длинноцепочечной алкильной группы ($\text{C}_{18}\text{H}_{37}$) и полярной головной группы (SiCl_3), которая образует СМ в различных окислительных субстратах. Известно, что остаточные количества воды, присутствующие либо на поверхности подложки, либо в растворе осаждения, могут гидролизовать группы $-\text{Si}-\text{Cl}$ до групп

–Si–OH, которые затем подвергаются конденсации с поверхностью. Поверхностно–активные Si–O головные группы–это молекулы связи ОТС с субстратом SiO₂ в результате хемосорбции. Алкильная цепь наклоняется под углом 8–10° и образует монослой высотой 22–25 Å.

Среди наиболее популярных органических полупроводников пентацен широко изучается для изготовления р-канальных органических тонкопленочных транзисторов (ОТТ) как благодаря своей стабильности, так и высокой дрейфовой подвижности [1]. Были проведены исследования по улучшению электрических свойств ОТТ, но стабильность для практической работы устройства остается проблемой. Стабильность устройства, несмотря на внутренние и внешние факторы, является обязательным требованием для пользователя. Гистерезис – самая большая проблема в работе ОТТ при использовании изолятора в качестве затвора. Несколько исследовательских групп исследовали гистерезисную или вызванную напряжением смещения нестабильность пентаценового ОТТ с SiO₂ и полимерными диэлектрическими пленками затвора [2–4]. Однако происхождение ненадежного поведения, обнаруженного в двух типах ОТТ, до сих пор не ясно, хотя гистерезис, наблюдаемый в ОТТ с SiO₂, вероятно, связан с захваченными электронами на границе раздела пентацен/диэлектрик [10]. Предполагается, что гистерезис в работе пентаценового ОТТ на SiO₂ без СМ существует благодаря длительному времени жизни глубоких центров рекомбинации [5–7]. Некоторые эксплуатационные параметры пентаценового ОТТ улучшаются за счет использования самоорганизующегося материала, например, между диэлектриком затвора SiO₂ и активным слоем пентацена [8–11]. Однако причины этих улучшений до сих пор не выяснены.

В данной работе мы изучили эффективность работы пентаценового ОТТ с интерфейсом изолятора затвора ОТС/SiO₂. Во-первых, мы сосредоточились на электрических характеристиках ОТТ на основе пентацена, используя ОТС в качестве слоя изолятора затвора. Во-вторых, мы наблюдали морфологию и кристалличность тонких пленок пентацена с помощью сканирующего электронного микроскопа (СЭМ) и атомно-силового микроскопа (АСМ).

2. Эксперимент

Первой стадией получения монослоев ОТС с 0.5% по массе была использована 75 мкл ОТС на 150 мл хлороформа. Затем раствор подвергался ультразвуковой очистке в течение 20 мин. Одна сторона подложки SiO₂, покрытая высоколегированным р-кремниевым слоем, выдерживалась в этом растворе в течение 2 часов. После извлечения из раствора образец покрывался хлороформом для химического соединения и затвердевал при 100°C в течение 10 мин для завершения изготовления ОТС СМ. Для приготовления ОТС СМ с 1.0% по массе, 150 мкл ОТС растворялся в 150 мл хлороформе и повторялись все предыдущие процедуры.

На рис.1а показано гидрофильное свойство поверхности SiO_2 , где капля воды наклоняется под углом 22° к плоской поверхности SiO_2 . Для проверки гидрофобных свойств ОТС СМ мы измерили угол контакта воды с поверхностью этого монослоя. Угол контакта воды 98° (рис. 1(б)) и 94° (рис.1с) был измерен на ОТС с 0.5% и 10% по массе соответственно, что доказывает их гидрофобность.

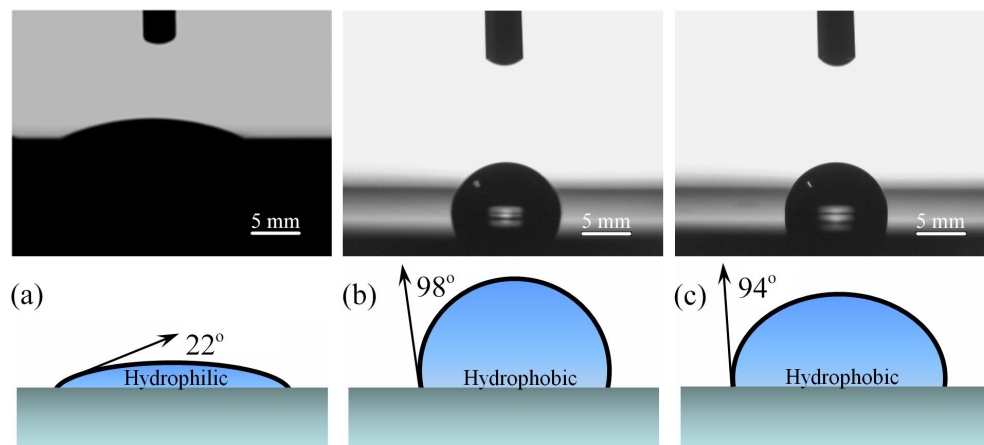


Рис.1. Оптическое и схематическое изображения капли воды на поверхности (а) SiO_2 (гидрофильный с углом контакта воды 22°), ОТС СМ с (б) 0.5% по массе (гидрофобный с углом контакта воды 98°) и (с) 1.0% по массе (гидрофобный с углом контакта воды 94°).

Верхний контактный пентаценовый ОТТ был изготовлен методом термического испарения при вакууме около 5×10^{-6} Торр. Пентациновая пленка шириной 50 нм осаждалась на ОТС СМ со скоростью примерно $0.1 \text{ \AA}/\text{с}$. После осаждения тонкой пленки пентацена слой Au толщиной 100 нм осаждался через металлическую маску с помощью термического испарителя. Длина канала и ширина изготовленного ОТТ составляли 50 мкм и 1.1 мм соответственно.

Электрические измерения характеристик прибора проводились с помощью источника-измерителя тока Keithley 2400-SCS при комнатной температуре (КТ). Структура, морфология и кристалличность тонких пленок пентацена, нанесенных на пустую подложку SiO_2 и ОТС СМ, были сравнительно исследованы с помощью СЭМ и АСМ.

3. Результаты и обсуждение

На рис.2 показана морфология поверхности тонких пленок пентацена, выращенных на слое SiO_2 (а), (д) без ОТС СМ, (б), (е) с ОТС СМ 0.5% по массе и (с), (ф) с ОТС СМ 1.0% по массе, полученных методом СЭМ. На СЭМ изображении пентацена выращенного на SiO_2 без ОТС СМ, имеются крупные ветвящиеся структуры без однородности, а поверхность имеет холмы. С другой стороны, тон-

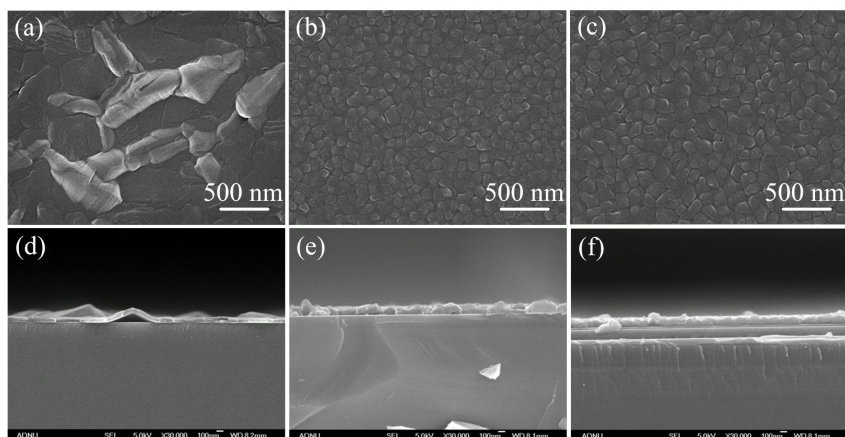


Рис.2. Поверхностное СЭМ изображение тонких пленок пентацена, выращенных на SiO_2 (a) без ОТС СМ и с ОТС СМ (b) 0.5% по массе, (c) 1.0% по массе. Поперечное сечение СЭМ изображения тонких пленок пентацена, выращенных на SiO_2 (d) без ОТС СМ и ОТС СМ с (e) 0.5% по массе, (f) 1.0% по массе.

кие пленки пентацена выращенные на ОТС СМ, состоят из таких же плотно упакованных зерен и имеют более плоскую поверхность по сравнению с пленкой пентацена, выращенной на слое SiO_2 . Размер зерен тонкой пленки пентацена выращенной на ОТС СМ с 1.0% по массе, немного больше, чем у выращенных на ОТС СМ с 0.5% по массе. Шероховатость диэлектрика оказывает отчетливое влияние на морфологию и структурные свойства, тогда как пленки на гладком термооксиде в целом высокоупорядочены и не зависят от условий осаждения [12].

На рис.3 показаны изображения АСМ тонких пленок пентацена, выращенных на слое SiO_2 (a) без ОТС СМ, (b) с ОТС SAM 0.5% по массе и (c) с ОТС СМ 1.0% по массе. Топология тонкой пленки, выращенной на SiO_2 без ОТС СМ, не является регулярной, шероховатость больше, чем шероховатость тонких пленок, нанесенных на ОТС СМ. Зерна тонких пленок пентацена на ОТС СМ расположены регулярно и плотно упакованы. Шероховатость тонкой пленки пентацена, нанесенной на ОТС СМ 0.5% по массе наименьшая.

На рис. 4 сравниваются вольт-амперные ($I-V$) выходные характеристики пентаценового ОТТ, собранного на слое SiO_2 (a) без ОТС СМ и с ОТС СМ (b)

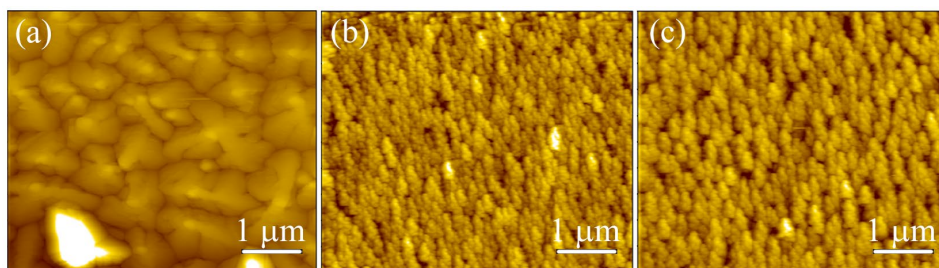


Рис.3. АСМ изображение тонких пленок пентацена, выращенных на SiO_2 (a) без ОТС СМ и с ОТС СМ (b) 0.5% по массе, (c) 1.0% по массе.

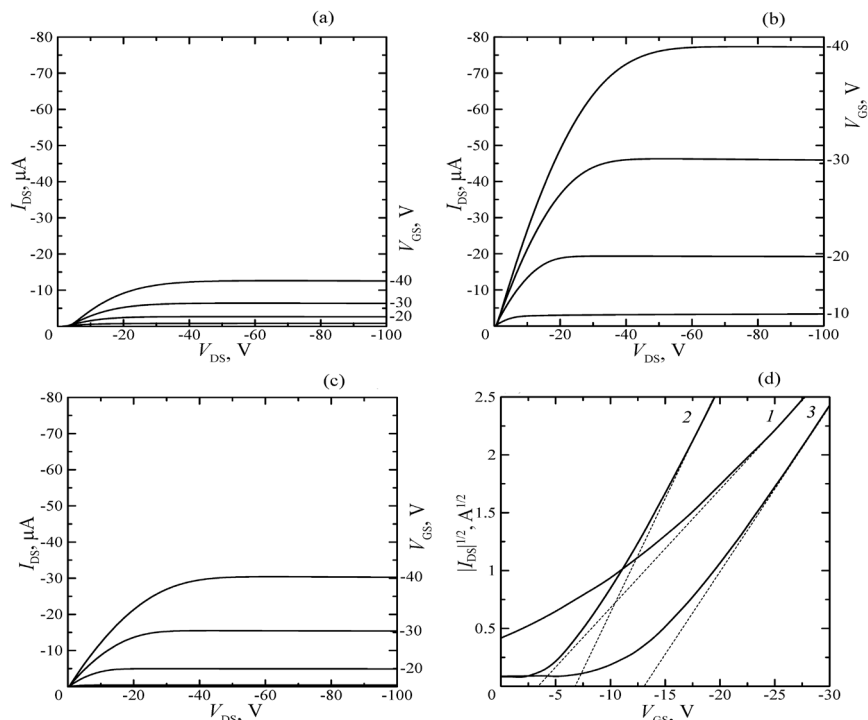


Рис.4. Выходные характеристики пентацевого ОТТ, собранного на SiO_2 (а) без ОТС СМ и с ОТС СМ (б) 0.5% по массе, (с) 1.0% по массе. (D) Передаточные характеристики пентацена ОТТ, собранного на SiO_2 (1) без ОТС СМ и с ОТС СМ (2) 0.5% по массе, (3) 1.0% по массе при $V_{DS} = -40$ В.

0.5% по массе, (с) 1.0% по массе. На рис.4d показаны передаточные характеристики этих ОТТ: SiO_2 (1) без ОТС СМ и с ОТС СМ (2) 0.5% по массе, (3) 1.0% по массе при $V_{DS} = -40$ В. Амплитуда тока стока (I_{DS}) для пентацевого ОТТ с интерфейсом ОТС / SiO_2 , очевидно, больше (примерно в 2–5 раз), чем для пентацевого ОТТ с SiO_2 без ОТС СМ при тех же напряжениях затвора (V_{GS}). Наилучшей передаточной характеристикой обладает пентаценовый ОТТ на основе интерфейса ОТС/ SiO_2 с концентрацией 0.5% по массе.

В таблице 1 (столбцы «прямой») приведены расчетные значения порогового напряжения (V_{th}), дрейфовой подвижности носителей (μ_{sat}) и коэффициента включения/выключения (On/off ratio) для пентацена ОТТ на основе SiO_2 без ОТС СМ, с ОТС СМ 0.5% по массе и ОТС СМ 1.0% по массе. Наибольшие значения подвижности и соотношения включение/выключение были достигнуты для ОТТ на основе интерфейса ОТС/ SiO_2 с концентрацией 0.5% по массе.

Передаточные характеристики пентацевого ОТТ, собранного на SiO_2 (а) без ОТС СМ, (б) с ОТС СМ 0.5% по массе и (с) ОТС СМ 1.0% по массе с развёрткой в диапазоне от -30 В до $+30$ В в обоих направлениях при фиксированном $V_{DS} = -40$ В, приведены на рис. 5. Для этих серий измерений расчетные значения V_{th} , μ_{sat} и коэффициент включения/выключения для ОТТ собранного на

Табл.1. Рабочие параметры пентаценового ОТТ

Образец	Пороговое напряжение, V_T , V		Дрейфовая подвижность носителей, μ_{sat} , $\text{m}^2/\text{V}\cdot\text{s}$		Коэффициент включения/выключения	
	прямой	обратный	прямой	обратный	прямой	обратный
без ОТС СМ	−3	−6.5	0.054	0.070	43.7	59.5
с ОТС СМ 0.5% по массе	−6.5	−6.5	0.203	0.206	3094	1278
с ОТС СМ 1.0% по массе	−12.5	−12.5	0.100	0.105	787	715

SiO_2 без ОТС СМ, с ОТС СМ 0.5% по массе и ОТС СМ с 1.0% по массе, были сведены в таблицу 1 (столбцы «обратный»). Как видно из результатов, направление развёртки напряжения затвора не изменяет порогового напряжения. По-видимому, это оказывает слабое влияние на подвижность носителей ОТТ с ОТС/ SiO_2 , в то время как коэффициент включения/выключения ОТТ с ОТС/СМ с 0.5% по массе изменяется более чем в два раза.

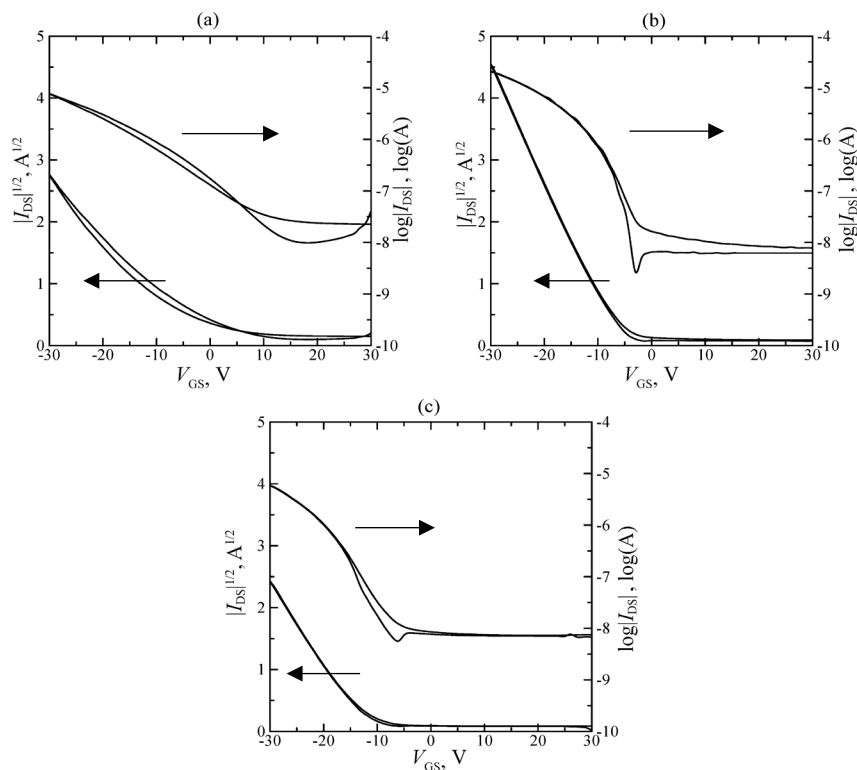


Рис.5. Передаточные характеристики пентацена ОТТ, собранного на SiO_2 (a) без ОТС СМ и с ОТС СМ (b) 0.5% по массе, (c) 1.0% по массе с развёрткой V_{GS} в обоих направлениях с фиксированным $V_{\text{DS}} = -40$ В.

Интересно также, что гистерезис в передаточных характеристиках пентацена ОТТ с ОТС СМ практически исчез. Отметим, что ванадил-фталодианин/пара-сексифенильный ОТТ с очень низким гистерезисом был изготовлен с использованием производных бензоциклобутенодина (БЦБО)/диэлектрика тройного затвора пятиокиси тантала [13], а для выяснения механизма гистерезиса были изучены устройства с различными диэлектриками. Установлено, что нижние производные БЦБО (в контакте с затворным электродом) блокируют инжекцию электронов от затворного электрода к диэлектрикам. Авторы в работе [14] сообщили о влиянии связей гидроксильных групп-ОН на электрическую надежность пентаценового ОТТ с поли-4-винилфенольными (ПВФ) затворными диэлектриками. Было подтверждено, что большой гистерезис, наблюдаемый в устройствах ОТТ, сильно связан с гидроксильными группами, существующими внутри полимерных диэлектриков, и может быть уменьшен снижением ОН. В целом анализ литературы по полимерным затворным диэлектрикам показывает, что устройство с гидрофильными полимерными диэлектриками имеет тенденцию проявлять гистерезис в выходах характеристик ток-напряжение ($I-V$) и емкость-напряжение ($C-V$), тогда как в устройствах с гидрофобным полимерным диэлектриком во многих случаях этого не наблюдается [15]. В нашем случае исчезновение гистерезиса при работе пентаценового ОТТ с ОТС/ SiO_2 можно объяснить гидрофобным свойством ОТС СМ, как показано на рис.1.

4. Заключение

Дрейфовая подвижность пентаценового ОТТ с интерфейсом ОТС СМ с 0.5% по массе на изоляторе SiO_2 была в четыре раза больше, чем для ОТТ на основе SiO_2 без ОТС СМ, в то время как с ОТС СМ 1.0% по массе на SiO_2 увеличивал дрейфовую подвижность пентаценового ОТТ в 2 раза. Та же тенденция наблюдалась и для соотношения включения/выключения пентаценового ОТТ. По-видимому, эти изменения достигаются уменьшением размера зерен и упорядочением зерен, что улучшает скачкообразность электронов. Мы предполагаем, что ОТС СМ уменьшает длительность периода жизни глубоких центров рекомбинации и, таким образом, устраняет гистерезис пентаценового ОТТ. Хотя пороговое напряжение для ОТС СМ увеличилось по сравнению с SiO_2 без ОТС СМ, оно показало положительное напряжение затвора в выключенном режиме.

Наилучшие показатели и почти полное исчезновение гистерезиса в передаточных характеристиках ОТТ с ОТС СМ 0.5% по массе ОТС/ SiO_2 наблюдались при наиболее гидрофобном свойстве СМ, выявленном при измерении угла контакта воды.

Данная работа поддержана в рамках программы международного сотрудничества под управлением NRF Кореи (NRF-2020K2A9A2A08000165), грантом на научные исследования через SC MESCS Армении (20DP-1C05) и программой финансирования научных исследований факультетов 2020, реализуемая EIF при поддержке PMI Science.

ЛИТЕРАТУРА

1. C.D. Sheraw, L. Zhou, J.R. Huang, D.J. Gundlach, T.N. Jackson, M.G. Kane, I.G. Hill, M.S. Hammond, J. Campi, B.K. Greening, J. Franc, J. West. Appl. Phys. Lett., **80**, 1088 (2002).
2. A. Volkel, R.A. Street, D. Knipp. Phys. Rev. B, **66**, 195336 (2002).
3. G. Gu, M.G. Kane, J.E. Doty, A.H. Firester. Appl. Phys. Lett., **87**, 243512 (2005).
4. T. Jung, A. Dodabalapur, R. Wenz, S. Mohapatra. Appl. Phys. Lett., **87**, 182109 (2005).
5. G. Gu, M.G. Kane, S.C. Mau. J. Appl. Phys., **101**, 014504 (2007).
6. G. Gu, M.G. Kane. Appl. Phys. Lett., **92**, 053305 (2008).
7. G. Gu, M.G. Kane, J.E. Doty, A.H. Firester. Appl. Phys. Lett., **87**, 243512 (2005).
8. Y.Y. Lin, D.J. Gundlach, S. Nelson, T.N. Jackson. IEEE Electron. Device. Lett., **18**, 606 (1997).
9. D.J. Gundlach, C.C. Shelby Kuo, C.D. Sherav, J.A. Nichols, T.N. Jackson. Proc. SPIE, **4466**, 54 (2001).
10. T.N. Jackson, Y.Y. Lin, D.J. Gundlach. IEEE J. Sel. Top. Quantum. Electron., **4**, 100 (1998).
11. M. Shtein, J. Mapel, J.B. Benziger, S.R. Forrest. Appl. Phys. Lett., **81**, 4383 (2002).
12. D. Knipp, R.A. Street, J. Ho. J. Appl. Phys., **193**, 347 (2003).
13. C. Li, F. Pan, F. Zhu, D. Song, H. Wang, D. Yan. Semicond. Sci. Technol., **24**, 085009 (2009).
14. S.C. Lim, S.H. Kim, J.B. Koo, J.H. Lee, Ch.H. Ku, Y.S. Yang, T. Zyung. Appl. Phys. Lett., **90**, 173512 (2007).
15. H. Klauk, M. Halik, F. Eder, G. Schmid, C. Dehm, D. Rohde, R. Brederlow, S. Briole, S. Maisch, F. Effenberger, U. Zschieschang. IEDM Tech. Dig. IEEE Int. Electron Dev. Meet., 369 (2004).

PERFORMANCE OF PENTACENE BASED ORGANIC THIN FILM TRANSISTOR WITH AN OCTADECYLTRICHLOROSILANE SELF-ASSEMBLED MONOLAYER INTERFACE

A. BABAJANYAN, B. MINASYAN, A. MOVSISYAN, B. FRIEDMAN, K. LEE

The performance of a pentacene organic thin film transistor (OTFT) is discussed here where the substrate consists of a self-assembled monolayer (SAM) formed from octadecyltrichlorosilane (OTS) on the gate insulator. By changing the substrate from hydrophilic to hydrophobic interface defects are minimized. OTS SAM was studied for two samples according to OTS density 0.5 w% and 1.0 wt.% based on chloroform solution. The water contact angle was measured to investigate OTS growth and distribution. AFM and SEM were measured to give organic thin film topography and morphology. The OTFT with 0.5 w% OTS has a higher mobility and on/off ratio than the OTFT with 1.0 w% OTS but has an increased threshold voltage. At the same time, the hysteresis at room temperature almost disappeared due to the OTS SAM processing.

РАСЧЕТ ЭНЕРГИИ СВЯЗИ БИЭКСИТОНА В ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ КВАНТОВОЙ ТОЧКЕ С ПОТЕНЦИАЛОМ МОРСА

Г.Ц. ХАРАТЯН^{1*}, Г.С. ГЕВОРКЯН¹, П.А. МАНТАШЯН^{1,2}

¹Российско–Армянский университет, Ереван, Армения

²Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак, Армения

*e-mail: gor.kharatyan13@gmail.com

(Поступила в редакцию 8 апреля 2021 г.)

В данной статье рассмотрены биэкситонные состояния в цилиндрической квантовой точке в режиме сильного размерного квантования и показана стабильность биэкситона. Цилиндрическая квантовая точка ограничена по аксиальному направлению параболическим потенциалом, а в радиальном направлении – потенциалом Морса. Рассчитана зависимость энергии основного состояния биэкситона от геометрических параметров квантовой точки с помощью принципа неопределенностей Гейзенберга. Построена зависимость энергии связи биэкситона от частоты параболического потенциала. Оценено время жизни экситона и биэкситона в цилиндрической квантовой точке для различных параметров квантовой точки.

1. Введение

В полупроводниковой наноэлектронике одним из современных и актуальных направлений является изучение ряда задач в разных типах квантовых точках (КТ) [1–6]. КТ представляет собой часть полупроводника, у которого движение носителей заряда ограничено в пространстве по всем направлениям [7–10]. Они имеют настолько маленькие размеры (порядка нм), что квантовые эффекты становятся существенными, и энергетический спектр становится дискретным. Благодаря этому они имеют широкий спектр поглощения, узкий и симметричный пик флуоресценции, высокую яркость и фотостабильность [11–13]. Изменяя размеры, формы и барьерные материалы КТ можно управлять их свойствами, в особенности излучением, что делает актуальным их использование в оптоэлектронных приборах. Квантовые точки являются перспективными материалами для использования в таких сферах, как хранение данных высокой плотности, квантовая обработка информации, квантовые вычисления и квантовая криптография [13]. Так же в медицине, биологии, оптике, оптоэлектронике, микроэлектронике, полиграфии, энергетике.

Большой интерес представляет исследование многочастичных КТ, в частности экситонных систем (экситоны, трионы, кватернионы, т.д.) [14–16]. В КТ, из-за сильного размерного квантования и локализации, энергия и стабильность, следовательно, и время жизни этих систем увеличивается по сравнению с объемными полупроводниками, где, из-за малого значения времени жизни, такие системы иногда даже невозможно реализовать [17–19]. Одним из интересных задач является изучение четырехчастичных систем, особенно биэкситонов.

Биэкситон переставляет собой нейтральную квазичастицу, состоящую из двух электронов и двух дырок. Биэкситонные системы благодаря эффекту размерного квантования имеют большую энергию связи и стабильность. В них возникают такие эффекты, как двухфотонное поглощение, изменение нелинейной восприимчивости, смещение пиков излучения фотолюминесценции [19–23]. Поэтому изучение биэкситонных систем в разных типах квантовых точек является актуальной задачей.

В данной статье рассмотрены биэкситонные состояния в сильно сплюснутой цилиндрической квантовой точке с ограничивающим потенциалом Морса.

2. Теория

Как уже отметили, мы рассматриваем цилиндрическую КТ с ограничивающим потенциалом Морса по аксиальному направлению и параболическим потенциалом в радиальном направлении. Все длины и энергии в статье измеряются боровским эффективным радиусом электрона $a_e = \hbar^2 \varepsilon / m_e^* e^2$, а энергии – Ридберговской эффективной энергией $E_R = \hbar^2 / 2m_e^* a_e^2$. Здесь m_e^* – эффективная масса электрона, а ε – диэлектрическая проницаемость среды. Гамильтониан биэкситонной системы, который состоит из двух электронов и двух дырок, в цилиндрических координатах будет иметь следующий вид:

$$\hat{H}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) = \sum_j \left(\frac{1}{2m_j^*} \hat{P}_j^2 + U(\rho_j, z_j) \right) + V_{\text{conf}} + V_{\text{int}}, \quad (1)$$

где $j = \{1, 2, a, b\}$, $q_{1,2} = -|e|$, $q_{a,b} = |e|$, $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$ – координаты электронов, $\mathbf{r}_a$ и $\mathbf{r}_b$ – координаты дырок. Здесь $\hat{P}_j$ – оператор импульса частицы, $U_{\text{conf}}(\rho_j, z_j)$ – потенциальная энергия частицы в КТ, V_{int} – энергия межчастичного взаимодействия:

$$U_{\text{conf}}(\rho_j, z_j) = \frac{1}{2} m_j \omega^2 \rho_j^2 + \left(U_0 + U_0 \left(e^{-2z_j/\beta} - 2e^{-z_j/\beta} \right) \right), \quad (2)$$

$$V_{\text{int}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) = \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \frac{q_i q_j}{\varepsilon |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}. \quad (3)$$

В данной работе мы будем рассматривать случай сильно сплюснутого цилиндра, когда высота цилиндра намного меньше, чем радиус основания. Это значит, что энергию межчастичного взаимодействия можно считать двумерной.

Поэтому, полный гамильтониан системы представим в виде сумм двух гамильтонианов аксиальной и радиальной подсистем $\hat{H}_\rho$ и $\hat{H}_z$, которые имеют данный вид:

$$H_\rho(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_a, \mathbf{p}_b) = \sum_j \frac{1}{2m_j^*} (\hat{P}_{\rho j})^2 + \sum_j \left(\frac{1}{2} m_j \omega_j^2 \rho_j^2 \right) + V_{\text{int}}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_a, \mathbf{p}_b) \quad (4)$$

$$H_z(z_1, z_2, z_a, z_b) = \sum_j \frac{1}{2m_j^*} (\hat{P}_{zj})^2 + \sum_j (U_0 + U_0 (e^{-2z/\beta} - 2e^{-z/\beta})). \quad (5)$$

Оценим энергию основного состояния биэкситона в КТ, используя принцип неопределенности Гейзенберга. Очевидно, что при сплюснутой геометрии КТ, расположение заряженных частиц имеет вид, представленный на Рис.1.

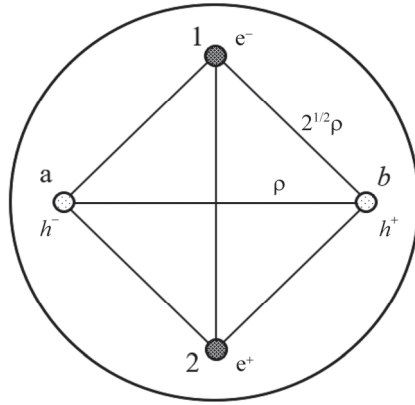


Рис.1. Расположение электронов и дырок в цилиндрической КТ. Вид сверху.

Из-за кулоновского попарного взаимодействия однотипные частицы будут находиться друг перед другом на вершинах квадрата. Другие конфигурационные системы будут иметь больше энергии и их реализация невозможна. В общем случае электроны и дырки находятся на вершинах ромба. Однако после соответствующих расчетов, а именно после минимизации энергии системы биэкситона по диагоналям ромба, видно, что соотношение диагоналей ромба зависит от соотношения эффективных масс электронов и дырок. А для использованного материала GaAs это соотношение равно 0.9, поэтому можем рассматривать квадрат [22]. В этом случае для двух электронов и двух протонов будем иметь

$$\begin{cases} \rho_1 = \rho_2 = \rho_a = \rho_b \equiv \rho, \\ p_1 = p_2 = p_a = p_b \equiv p. \end{cases} \quad (6)$$

Следовательно, для расстояний между частицами получим

$$\begin{cases} |\rho_1 - \rho_a| = |\rho_2 - \rho_a| = |\rho_1 - \rho_b| = |\rho_2 - \rho_b| = \sqrt{2}\rho, \\ |\rho_1 - \rho_2| = |\rho_a - \rho_b| = 2\rho. \end{cases} \quad (7)$$

Используя выражения для расстояний между частицами в уравнении (7), потенциал межчастичного взаимодействия можем трансформировать к следующему виду

$$V_{\text{int}} = \frac{e^2}{\varepsilon \rho} (1 - 2\sqrt{2}). \quad (8)$$

Для оценки основного состояния биэкситонной системы применим принцип неопределенности Гейзенберга для каждой подсистемы по отдельности. Учитывая (8) для упрощенного вида аксиальной и радиальной энергии в безразмерных величинах, получим следующие выражения

$$E_\rho = \frac{2}{\rho^2} + \frac{2}{\rho} (1 - 2\sqrt{2}) + \sigma \gamma^2 \rho^2, \quad (9)$$

$$E_z = \frac{2}{z^2} + 8U_0 (1 + e^{-2z/\beta} - 2e^{-z/\beta}), \quad (10)$$

где $\sigma = \frac{(m_e + m_h)^2}{m_e m_h}$, $\gamma = \sqrt{\frac{2}{E_R}} \omega$. Условие минимизация двух энергии подсистем имеет вид

$$\begin{cases} \frac{dE_\rho(\rho)}{d\rho} = 0, \\ \frac{dE_z(z)}{dz} = 0. \end{cases} \quad (11)$$

После некоторых преобразований для определения минимального радиуса и z получаем уравнения:

$$\begin{cases} 2\sigma \gamma^2 \rho^4 - \rho (1 - 2\sqrt{2}) - 2 = 0, \\ -\frac{1}{z^3} + 4U_0 (-e^{-2z/\beta} + e^{-z/\beta}) = 0. \end{cases} \quad (12)$$

Решая уравнение (11) численно, можно найти зависимость минимального радиуса и z от геометрических параметров КТ. И, соответственно, подставляя полученные значения в уравнения (8) и (9), можно численно вычислить минимальную энергию биэкситона для основного состояния.

3. Обсуждение результатов

Перейдем к обсуждению результатов. В качестве материала использован GaAs, который имеет следующие материальные параметры $m_e^* = 0.067m_0$, $m_h^* = 0.45m_0$, $\varepsilon = 12.9$, где m_0 – масса электрона.

На Рис.2 приведена зависимость минимального значения координаты ρ_{min} от частоты параболического потенциала γ . Как видно из рисунка с

увеличением параметра γ минимальный радиус уменьшается. Используя вышеприведенную зависимость, можно в соответствии с формулой (7) рассчитать зависимость энергии основного состояния радиальной подсистемы от частоты параболического потенциала γ (см. Рис.2). Эта зависимость имеет линейный характер и с увеличением частоты параболического потенциала радиальная энергия увеличивается, что является следствием увеличения размерного квантования.

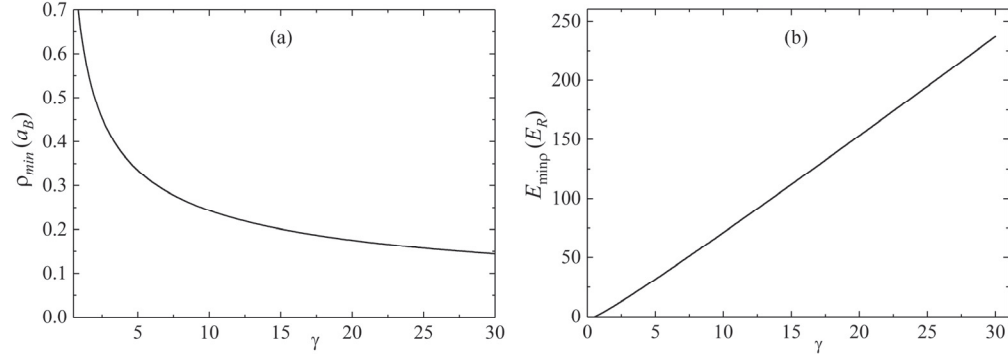


Рис.2. Зависимость минимального значения $\rho_{\min}$ (a), а также радиальной энергии основного состояния бикситона (b) от частоты параболического потенциала γ .

Аналогично вышесказанному, был проведен расчет для аксиальной подсистемы. Первым шагом была рассчитана зависимость минимального значения $z_{\min}$ от ширины потенциальной ямы. Результаты расчетов приведены на Рис.3а, где приведена зависимость $z_{\min}$ от ширины потенциальной ямы при трех фиксированных значениях глубины потенциальной ямы.

Как видно из рисунка, с увеличением ширины потенциальной ямы увеличивается и значение $z_{\min}$. Обратная зависимость наблюдается у минимального значения аксиальной энергии основного бикситонного состояния (см. Рис.3б). С увеличением ширины потенциальной ямы энергия уменьшается. При этом

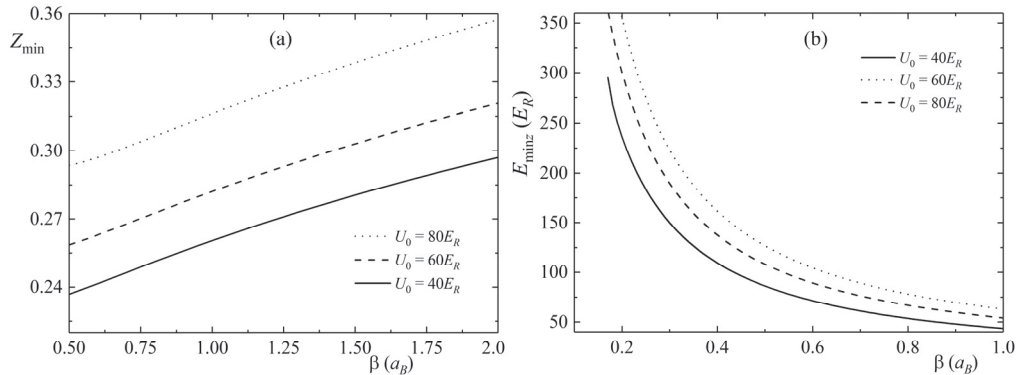


Рис.3. Зависимость минимального значения $z_{\min}$ (a), а также аксиальной энергии основного состояния бикситона (b) от ширины потенциальной ямы при фиксированных значениях глубины потенциальной ямы.

уровни, соответствующие большим значениям глубины ямы, расположены выше, чем уровни, соответствующие малым значениям глубины ямы.

На Рис.4 показана зависимость минимальной аксиальной энергий биэкситона от глубины потенциальной ямы при трех фиксированных значениях ширины потенциальной ямы. С увеличением глубины потенциальной ямы аксиальная энергия системы увеличивается.

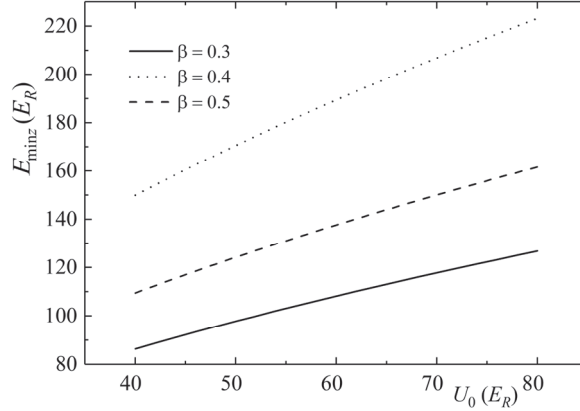


Рис.4. Зависимость минимальной аксиальной энергии системы от глубины потенциальной ямы при фиксированных значениях ширины потенциальной ямы.

Наконец, на Рис.5 приведена зависимость энергии связи биэкситона от параметра γ параболического потенциала. Энергия связи биэкситона $E_{bind}(XX)$ определяется как разница энергий двух экситонов $E(X)$ и энергии биэкситона $E(XX)$:

$$E_{bind}(XX) = 2E(X) - E(XX). \quad (13)$$

Как видно из рисунка, энергия связи увеличивается с увеличением частоты γ , при этом энергия связи биэкситона положительна. Следовательно, биэкситон в исследуемой цилиндрической КТ является стабильной квазичастицей. В массивных полупроводниковых структурах стабильность биэкситона является

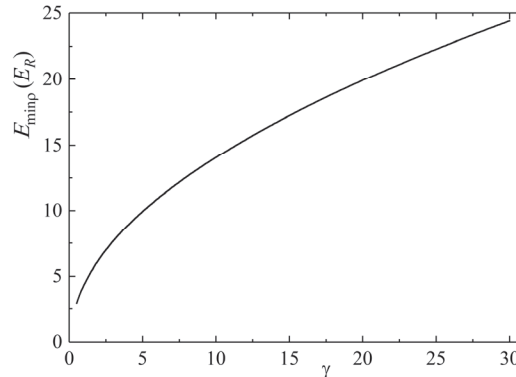


Рис.5. Зависимость энергии связи биэкситона в радиальном направлении от частоты параболического потенциала.

проблемой и эти системы неустойчивы. В таких трехмерных системах отсутствуют альтернативные факторы, которые компенсируют разрушающее действие отталкивающего кулоновского взаимодействия внутри биэкситона. А вот в КТ, ограничивающий потенциал играет роль стабилизирующего фактора, который «склеивает» частицы между собой. И соответственно, с увеличением этого фактора, то есть с увеличением влияния ограничивающего потенциала, стабильность биэкситона возрастает. Так как по аксиальному направлению мы пренебрегли кулоновским взаимодействием из-за сильного размерного квантования, энергия связи актуальна только для радиального направления.

Как последний шаг, было бы логично оценить время жизни биэкситона. Для оценки используем формулу связывающую время жизни биэкситона с временем жизни экситона [24]:

$$\tau(XX) \approx 0.25\tau(X). \quad (14)$$

Таким образом, для оценки излучательной времени жизни биэкситона можно оценить время жизни экситона. Для оценки времени жизни экситона воспользуемся формулой, полученной в [25]:

$$\tau(X) = \frac{2\pi\epsilon_0 m c^3 \hbar^2}{\sqrt{\epsilon} e^2 E(X)^2 f}, \quad (15)$$

где ϵ_0 электрическая постоянная, m – масса электрона, ϵ – диэлектрическая проницаемость материала, и f – сила осциллятора, определяемая по формуле:

Табл. Время жизни экситона и биэкситона в цилиндрической КТ

Полуширина	Глубина U_0 и частота γ	Время жизни, ps	
		Экситон	Биэкситон
$\beta = 0.3a_B$	$U_0 = 40, \gamma = 5$	509.96	127.49
	$U_0 = 40, \gamma = 10$	399.13	99.78
	$U_0 = 80, \gamma = 5$	372.97	93.24
	$U_0 = 80, \gamma = 10$	310.01	77.50
$\beta = 0.4a_B$	$U_0 = 40, \gamma = 5$	639.53	159.88
	$U_0 = 40, \gamma = 10$	474.34	118.58
	$U_0 = 80, \gamma = 5$	481.59	120.39
	$U_0 = 80, \gamma = 10$	381.53	95.38
$a = 0.5a_B$	$U_0 = 40, \gamma = 5$	748.47	187.12
	$U_0 = 40, \gamma = 10$	531.75	132.93
	$U_0 = 80, \gamma = 5$	576.79	144.19
	$U_0 = 80, \gamma = 10$	438.93	109.73

$$f = \frac{E_p}{E(X)} \left| \int_V \Psi_{exc}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) d\mathbf{r} \right|^2, \quad (16)$$

где E_p – энергия Кейна и для GaAs равна $E_p = 22.71$ eV. Отметим, что эффекты взаимодействия экситона с фононами не учитываются в формуле (16) для времени жизни экситона.

В Таблице приведены значения времени жизни экситона и биэкситона для различных значений параметров цилиндрической КТ. Как следует из результатов, время жизни обоих экситонных комплексов увеличивается с увеличением полуоси β , поскольку увеличивается область локализации и уменьшается вероятность рекомбинации. Обратная картина наблюдается при увеличении глубины потенциала Морса и частоты параболического потенциала. При увеличении обоих параметров время жизни экситонных комплексов уменьшается. Таким образом, излучательное время жизни биэкситона в сильно сплюснутой цилиндрической КТ из GaAs лежит в интервале $75 \div 160$ пс.

4. Заключение

В заключение отметим, что в данной работе, рассчитана энергия основного состояния биэкситона в цилиндрической квантовой точке с ограничивающим потенциалом Морса при помощи принципа неопределенностей Гейзенберга. Рассчитана энергия основного состояния биэкситона для аксиальной и радиальной подсистем, и построены зависимости от параметров цилиндрической КТ. Показана, что энергия связи биэкситона увеличивается с увеличением частоты параболического потенциала, и следовательно, биэкситон в цилиндрической КТ является стабильной квазичастицей. Оценена излучательное время жизни биэкситона в сильно сплюснутой цилиндрической КТ из GaAs, который лежит в интервале $75 \div 160$ пс.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Государственного комитета по науке МОН РА в рамках базового научного проекта №10-2/I-5.

ЛИТЕРАТУРА

1. **P. Harrison.** Quantum Wells, Wires and Dots. Wiley, 2005.
2. **A.L. Rogach.** Semiconductor Nanocrystal Quantum Dots., Heidelberg, Springer, 2008.
3. **D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan, H.A. Sarkisyan.** J. Contemp. Phys., **48**, 32 (2013).
4. **D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan, H.A. Sarkisyan.** Optics Communications, **371**, 138 (2016).
5. **D.B. Hayrapetyan, G.L. Ohanyan, D.A. Baghdasaryan, H.A. Sarkisyan, S. Baskoutas, E.M. Kazaryan.** Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, **95**, 27 (2018).
6. **D.A. Baghdasaryan, D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan, H.A. Sarkisyan.** Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, **101**, 1 (2018).
7. **L. Jacak, P. Hawrylak, A. Wojs.** Quantum dots, 2013.

8. **S.M. Reimann, M. Manninen.** Electronic structure of quantum dots, 2002.
9. **L. Kouwenhoven, C. Marcus.** Phys. World, **11**, 35 (1998).
10. **U. Woggon.** Springer Tracts Mod. Phys. **136**, 103 (1997).
11. **T. Chakraborty.** Quantum Dots: A survey of the properties of artificial atoms. The Netherlands, Amsterdam: Elsevier, 1999.
12. **A.D. Yoffe.** Advances in Physics, **50**, 1 (2001).
13. **D. Lalitha, A.J. Peter, C.W. Lee.** International Journal of Modern Physics B, **28**, 27 (2014).
14. **D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan, T.V. Kotanjyan, H.K. Tevosyan.** Superlattices and Microstructures, **78**, 40 (2015).
15. **S.I. Pokutnyi, Y.N. Kulchin, V.P. Dzyuba, D.B. Hayrapetyan.** Crystals, **8**, 148 (2018).
16. **Y.Y. Bleyan, D.B. Hayrapetyan.** J. Contemp. Phys., **54**, 153 (2019).
17. **B. Patton, W. Langbein, U. Woggon.** Phys. Rev. B, **68**, 125316 (2003).
18. **R.A. Suris.** Optical Properties of 2D Systems with Interacting Electrons, NATO Science ebook Series. Dordrecht: Springer, 2003.
19. **C. Zhang, H. Wang, W. Chan, C. Manolatu, F. Rana.** Phys. Rev. B, **89**, 205436 (2014).
20. **T. Takagahara.** Physical Review B, **39**, 10206 (1989).
21. **S. Baskoutas, A.F. Terzis.** Journal of Computational and Theoretical Nanoscience, **5**, 88 (2008).
22. **S. Baskoutas, A.F. Terzis.** Journal of applied physics, **98**, 044309 (2005).
23. **D.B. Hayrapetyan, Y.Y. Bleyan, D.A. Baghdasaryan, H.A. Sarkisyan, S. Baskoutas, E.M. Kazaryan.** Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, **105**, 47 (2019).
24. **G.A. Narvaez, G. Bester, A. Zunger,** Phys. Rev. B, **72**, 041307 (2005).
25. **V.A. Fonoberov, A.A. Balandin,** Appl. Phys. Lett., **85**, 5971 (2004).

CALCULATION OF THE BINDING ENERGY OF A BIEXCITON IN A CYLINDRICAL QUANTUM DOT WITH A MORSE POTENTIAL

G.Ts. KHARATYAN, G.S. GEVORGYAN, P.A. MANTASHYAN

In the current article the biexciton states in a cylindrical quantum dot in the strong size quantization regime have been discussed and the stability of the biexciton has been shown. A cylindrical quantum dot is confined in the axial direction by the parabolic potential, and in the radial direction by the Morse potential. The dependences of the ground state energy state of the biexciton on the geometric parameters of the quantum dot are calculated using the Heisenberg uncertainty principle. The dependence of the biexciton binding energy on the frequency of the parabolic potential is plotted. The lifetime of an exciton and biexciton in a cylindrical quantum dot is estimated for various parameters of the quantum dot.

МАГНИТОПОГЛОЩЕНИЕ И ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ В ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ КВАНТОВОЙ ТОЧКЕ С МОДИФИЦИРОВАННЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ ПЁШЛЬ–ТЕЛЛЕРА

Г.С. ГЕВОРКЯН*, Г.Ц. ХАРАТЯН, О.Х. ТЕВОСЯН

Российско–Армянский университет, Ереван, Армения

*e-mail: gevorgyan.georgi@yahoo.com

(Поступила в редакцию 12 апреля 2021 г.)

Исследованы электронно-дырочные состояния в цилиндрической квантовой точке с ограничивающим параболическим потенциалом, а также модифицированным потенциалом Пешля–Теллера при режиме сильного размерного квантования. Выявлены выражения как для энергии, так и для волновых функций частиц в радиальном и аксиальном направлениях. Получены выражения для радиальной энергии при различных режимах магнитного квантования. Рассмотрены спектры оптического межзонного поглощения, а также спектры фотолюминесценции в зависимости от энергии падающего света.

1. Введение

Благодаря улучшенным оптоэлектронным свойствам, наноструктурам и, в частности, квантовым точкам (КТ) в последнее время были посвящены многочисленные теоретические и экспериментальные исследования [1–8]. Основным свойством квантовых точек является возможность ограничения движения носителей заряда во всех трех направлениях, что делает управление физическими характеристиками таких структур намного эффективнее. Уменьшение размера квантовых точек, приводящее к частичному или полному квантованию уровней энергии, и сильная зависимость энергетического спектра от геометрической формы и размеров КТ, позволяет этим системам производить значительное улучшение квантовых эффектов в их физических характеристиках. Это делает их особенно интересными для оптических приложений, например в лазерных диодах, светодиодах и твердотельном освещении, дисплеях и фотоэлектрических устройствах [9–13].

В настоящее время изучаются КТ различных геометрий: кубические, сферические, цилиндрические, конические, пирамидальные и другие [14–23]. В данной работе будет рассматриваться цилиндрическая квантовая точка с модифицированным потенциалом Пёшль–Теллера [25].

Внешние воздействия, такие как напряженность электрического поля, температура, гидростатическое давление и т. д., могут в значительной степени

контролировать многие свойства и основные характеристики этих систем. Нас, в частности, интересует влияние внешнего магнитного поля, поскольку оно является добавочным фактором локализации носителей заряда [26,27]. В частности, интересно рассматривать влияние магнитного поля на спектр поглощения КТ.

Кроме магнитопоглощения, интересно также изучать фотолюминесценционные свойства КТ, так как они поглощают в широком диапазоне и излучают фотолюминесценцию в узком диапазоне, который можно настраивать в зависимости от материала, из которого изготовлена квантовая точка, и размера КТ [28,29]. Используя размерно-квантовые эффекты в КТ, можно легко манипулировать спектром ФЛ, когда квантовые точки меньших размеров излучают с более высокой энергией (более низкая длина волны, Blue Shift), а более крупноразмерные квантовые точки излучают с более низкой энергией (более высокая длина волны, Red shift). Это позволяет получить информацию о свойствах исследуемого образца, что в свою очередь даёт возможность применять КТ с высокими ФЛ свойствами в разных областях науки.

В данной статье исследованы межзонное магнитопоглощение падающего света и спектр ФЛ в цилиндрической КТ с модифицированным потенциалом Пёшль-Теллера.

2. Теория

Рассмотрим движение частицы (электрона и дырки) в цилиндрической КТ при наличии внешнего магнитного поля, которая ограничена по оси z модифицированным потенциалом Пёшль-Теллера (МППТ) и параболическим потенциалом в радиальном направлении. Отметим, что магнитное поле направлено по аксиальной оси, а это означает, что добавочная квантование, обусловленное магнитным полем, действует в радиальном направлении. В режиме сильного размерного квантования энергия кулоновского взаимодействия между электроном и дыркой намного меньше энергии, обусловленной стенками КТ. В этом приближении кулоновским взаимодействием между частицами можно пренебречь. Тогда задача сводится к нахождению энергетических состояний электронов и дырок по отдельности. В этом случае потенциальную энергию частиц в КТ в цилиндрических координатах можно записать как

$$\tilde{U}(\rho, Z) = \tilde{U}_0 - \frac{\tilde{U}_0}{\text{ch}^2(Z/\tilde{\beta})} + \frac{m_p^* \omega^2 \rho^2}{2}, \quad (1)$$

где $\tilde{U}_0$ и $\tilde{\beta}$ – соответственно глубина и полуширина МППТ, m_p^* – эффективная масса частицы. Связь между высотой цилиндрической КТ и полушириной потенциальной ямы задается как $h_0 = \delta_h \tilde{\beta}$, а частота ω связана с радиусом цилиндра R_0 уравнением $\omega = \delta_\omega(h) / (m_p^* R_0^2)$, где параметры δ_h и δ_ω определяются экспериментально.

Гамильтониан системы, с учетом внешнего магнитного поля, примет вид:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_p^*} \left(\hat{\mathbf{P}} - \frac{e}{c} \hat{\mathbf{A}} \right)^2 + U(\rho, Z), \quad (2)$$

где $\hat{\mathbf{P}}$ – оператор импульса частицы, $\hat{\mathbf{A}}$ – векторный потенциал магнитного поля, c – скорость света в вакууме, а e – заряд частицы. Калибровку векторного потенциала возьмём в виде: $A_\rho = 0$, $A_\varphi = B\rho/2$, $A_z = 0$. Гамильтониан системы будет равен:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -\frac{\hbar^2}{2m_p^*} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{\partial}{\rho \partial \rho} + \frac{\partial^2}{\rho^2 \partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z^2} \right] - i \frac{\hbar \omega_c}{2} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{m_p^* \omega_c^2}{8} \rho^2 \\ & + \tilde{U}_0 - \frac{\tilde{U}_0}{\text{ch}^2(Z/\tilde{\beta})} + \frac{m_p^* \omega^2 \rho^2}{2}, \end{aligned} \quad (3)$$

где $\omega_c = eB/(cm_p^*)$.

Гамильтониан системы в цилиндрических координатах и безразмерных переменных можно представить в виде суммы гамильтонианов подсистем.

$$\begin{cases} \hat{H}_1 = -\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - i\gamma_m \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{1}{4} \gamma_m^2 r^2 + \frac{1}{4} \gamma_0^2 r^2, \\ \hat{H}_2 = -\frac{\partial^2}{\partial z^2} + U_0 - \frac{U_0}{\text{ch}^2(z/\beta)}. \end{cases} \quad (4)$$

Безразмерные величины выбраны следующим образом: $r = \frac{\rho}{a_B}$, $z = \frac{Z}{a_B}$,

$U_0 = \frac{\tilde{U}_0}{E_R}$, $\beta = \frac{\tilde{\beta}}{a_B}$, $\gamma_m = \frac{\hbar \omega_c}{2E_R}$ и $\gamma_0 = \frac{m_p^* \omega^2 a_B^2}{\hbar}$, где $E_R = \frac{\hbar^2}{2m_p^* a_B^2}$ – эффективная

энергия Ридберга, $a_B = \frac{\kappa \hbar^2}{m_p^* e^2}$ – эффективный радиус Бора, κ – диэлектрическая константа, и e – заряд частицы.

Полную волновую функцию системы будем искать в следующем виде:

$$\Phi(r, \varphi, z) = C e^{im\varphi} R(r) \chi(z), \quad (5)$$

где m – магнитное квантовое число и C – коэффициент нормировки.

Тогда задача сводится к нахождению электронных состояний подсистем по отдельности. После несложных преобразований волновой функции, которая задается вырожденной гипергеометрической функцией, и энергией радиальной подсистемы, получаем

$$\begin{aligned} R(r) = & e^{\frac{-r^2 \sqrt{\gamma_0^2 + \gamma_m^2}}{4}} \left(\frac{r^2 \sqrt{\gamma_0^2 + \gamma_m^2}}{2} \right)_1^{|m|/2} \\ & \times F_1 \left\{ - \left(\frac{\varepsilon_r}{4\sqrt{\gamma_0^2 + \gamma_m^2}} - \frac{|m|+1}{2} \right), |m|+1, \frac{r^2 \sqrt{\gamma_0^2 + \gamma_m^2}}{2} \right\}, \end{aligned} \quad (6)$$

$$\varepsilon_r = m\gamma_m + 4\sqrt{\gamma_0^2 + \gamma_m^2} (N+1), \quad (7)$$

где используются следующие обозначения: $N = 2n_r + |m|$, $N = 0, 1, 2, \dots$. Здесь n_r и N – радиальное и осцилляторное квантовые числа соответственно.

Волновая функция второй подсистемы задается гипергеометрическими функциями Гаусса и имеет следующий вид:

$$\chi(z) = \left(1 - \text{th}^2\left(\frac{z}{\beta}\right)\right)^{\varepsilon_z/2} F_1\left\{\varepsilon_z - s, \varepsilon_z + s + 1, \varepsilon_z + 1, \frac{1 - \text{th}(z/\beta)}{2}\right\}, \quad (8)$$

где $s = (1/2)\left[-1 + \sqrt{1 + 4\beta^2 U_0}\right]$. Для энергии той же подсистемы имеем:

$$\varepsilon_z = U_0 - \left(\frac{1}{4\beta^2}\right)\left[-(1 + 2n_z) + \sqrt{1 + 4\beta^2 U_0}\right]^2, \quad (9)$$

где n_z – квантовое число в z направлении, которое принимает значения $n_z = 0, 1, 2, \dots$. Обратим внимание, что для более низких уровней энергии МППТ совпадает с параболическим потенциалом, потому что разлагая МППТ в ряд, мы получим параболический случай.

Полная энергия системы получается как сумма энергий двух подсистем:

$$\varepsilon = \varepsilon_r + \varepsilon_z. \quad (10)$$

Рассмотрим теперь межзонное оптическое поглощение в КТ в режиме сильного размерного квантования. Согласно [30] мы будем иметь следующее выражение для коэффициента поглощения света для режима сильного квантования:

$$\alpha(\omega) = \alpha_0 \sum_{v_e, v_h} J^2 \delta(\hbar\omega_{e,h} - E_g^L - E_e - E_h), \quad (11)$$

где E_g – ширина запрещенной зоны полупроводника, α_0 – величина, пропорциональная квадрату матричного элемента дипольного момента, взятого по блоховским функциям. Уширение спектральных линий будет учтено заменой дельта-функции в выражении (11) контуром Лоренца:

$$\delta(\hbar\omega_{e,h} - E_g^L - E_e - E_h) \rightarrow \frac{\Gamma}{\left((\hbar\omega_{e,h} - E_g^L - E_e - E_h)^2 + \Gamma^2\right)}, \quad (12)$$

где Γ – ширина лоренцевского параметра. Для расчетов примем $\Gamma = 5m \text{ eV}$, согласно [31]. Следующим этапом исследования оптических свойств цилиндрической КТ является расчет спектров фотолюминесценции (ФЛ) на основе оптического спектра поглощения. Спектры ФЛ могут быть рассчитаны с использованием соотношения Росбрека–Шокли [32,33]:

$$R(\hbar\omega) = R_0 \hbar\omega \alpha(\hbar\omega) \frac{f_c(1-f_v)}{f_v - f_c}, \quad (13)$$

где R_0 пропорционально квадрату матричного элемента дипольного момента, взятого по блоховским функциям, а f_c и $1-f_v$ – вероятности заполнения состояний зоны проводимости и пустоты состояний валентной зоны, соответственно. Для высоких температур член $f_c(1-f_v)/(f_v - f_c)$ в соотношении Русбрука–Шокли переходит в форму Больцмана.

3. Обсуждение и результаты

Перейдем к обсуждению результатов. Для проведения численных расчетов рассмотрим КТ из GaAs. Ниже приведены материальные параметры GaAs, которые будем использовать далее: $m_e^* = 0.067m_0$, $m_h^* = 0.45m_0$, $\varepsilon = 12.9$, $E_g = 1.519$ эВ, где m_0 – масса электрона.

Так как в рассматриваемой системе в радиальном направлении имеется двойное воздействие размерного квантования и магнитного поля, то возможно рассмотрение трех режимов магнитного квантования: сильного, когда $\gamma_m \gg \gamma_0$, промежуточного, когда $\gamma_m \sim \gamma_0$, и слабого, когда $\gamma_m \ll \gamma_0$. Исходя из общего вида энергии для радиальной подсистемы (см. уравнение (7)), можно получить асимптотические выражения для режимов сильного и слабого магнитного квантования, а именно:

$$\varepsilon_r = (m + 4(N + 1))\gamma_m + \frac{2\gamma_0^2}{\gamma_m}(N + 1), \quad \gamma_m \gg \gamma_0, \quad (14)$$

$$\varepsilon_r = m\gamma_m + 4\gamma_0(N + 1) + \frac{2\gamma_m^2}{\gamma_0}(N + 1), \quad \gamma_m \ll \gamma_0. \quad (15)$$

Как видно из уравнения (14) при режиме сильного магнитного квантования для основного состояния зависимость от магнитного поля становится приближенно линейной, $\varepsilon_r = 4\gamma_m + 2\gamma_0^2/\gamma_m \approx 4\gamma_m$, так как $2\gamma_0^2/\gamma_m$ стремится к нулю. Зависимость от магнитного поля при слабом магнитном квантовании становится очень слабой: $\varepsilon_r = 4\gamma_0 + 2\gamma_m^2/\gamma_0$.

Все вышеприведенные суждения хорошо видны на Рис.1, где приведена зависимость энергии радиальной подсистемы от величины магнитного поля для первых трех уровней. Отметим, что безразмерной величине $\gamma_m = 1$ соответствует магнитное поле с магнитудой 0.16 Т. Как видно из рисунка, с увеличением величины магнитного поля радиальная энергия частицы увеличивается. При этом

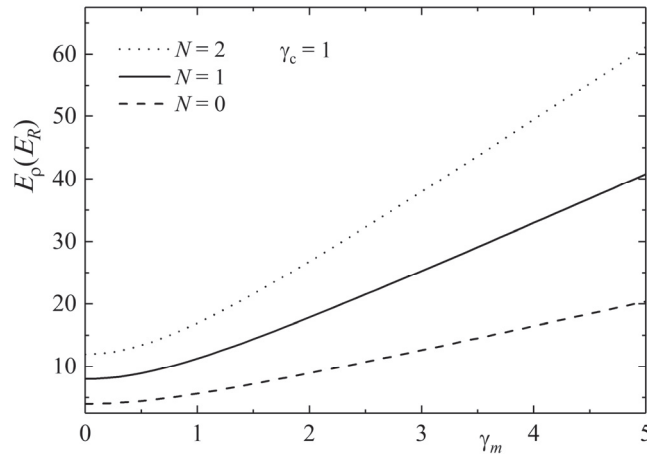


Рис.1. Зависимость энергии радиальной подсистемы от величины магнитного поля для первых трех уровней.

если для слабых магнитных полей зависимость имеет нелинейный характер (см. уравнение (15)), то после некоторого значения, как и отмечалось выше, зависимость становится подчеркнуто линейной (см. уравнение (14)). Увеличение энергии с увеличением магнитного поля является следствием того, что область локализации заряженной частицы уменьшается. И вследствие этого, энергия частицы увеличивается.

На Рис.2а,б приведены зависимости аксиальной энергии от полуширины и глубины МППТ. Как видно из Рис.2а, с увеличением полуширины МППТ энергия системы уменьшается, так как уменьшается энергия размерного квантования.

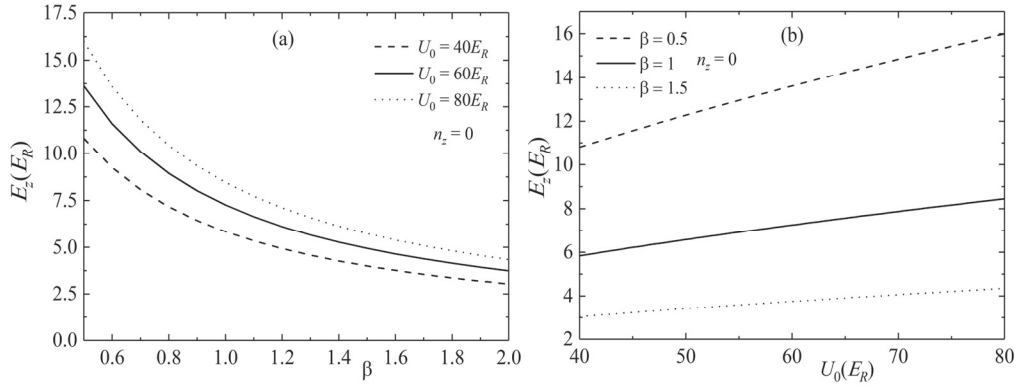


Рис.2. Зависимость аксиальной энергии от полуширины (а) и глубины (б) МППТ.

При этом графики, соответствующие большим значениям глубины ямы, расположены выше. Обратная картина наблюдается в случае зависимости от глубины МППТ: энергетические уровни увеличиваются с увеличением параметра U_0 (см. Рис.2б). Эта зависимость близка к линейной.

Зависимости спектральных линий межзонного оптического поглощения

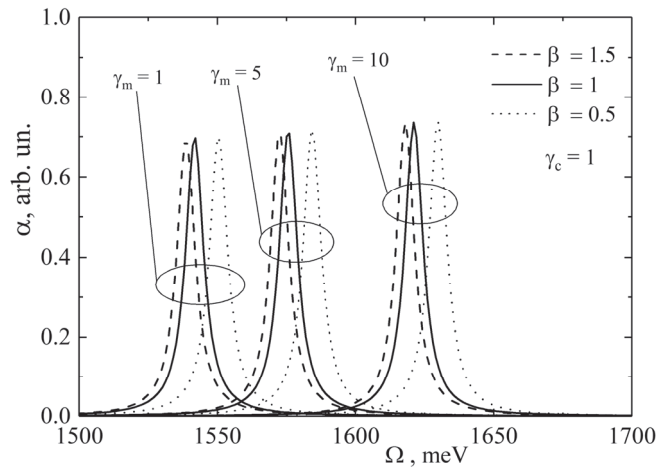


Рис.3. Зависимость межзонного оптического поглощения от энергии падающего света для различных значений магнитного поля и полуширины МППТ.

падающего света от энергии фотона показаны на Рис.3. Приведены спектральные линии для трех значений магнитного поля, а также полуширины МППТ. Более высоким значениям магнитного поля соответствуют пики с высокими энергиями, в то время как более высоким значениям полуширины МППТ соответствуют пики с малыми энергиями.

Наконец, на Рис.4 приведена зависимость спектра фотолюминесценции от энергии падающего света для различных значений магнитного поля. С увеличением значения величины магнитного поля спектральные линии фотолюминесценции смещаются в сторону высоких энергий (синее смещение). Отметим, что максимумы пиков, которые соответствуют более высоким значениям магнитного поля, незначительно ниже максимумов пиков, соответствующих более слабым полям.

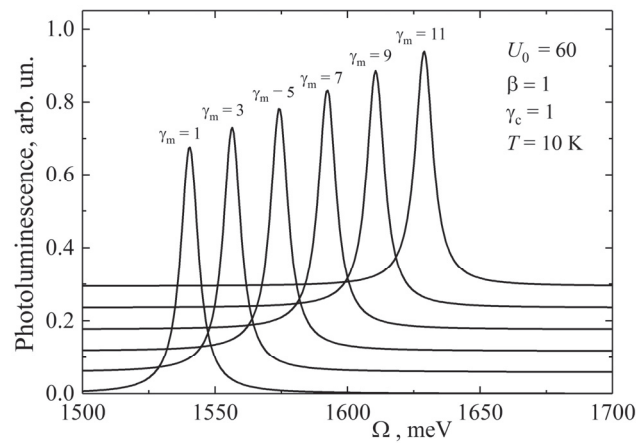


Рис.4. Зависимость спектра фотолюминесценции от энергии падающего света для различных значений магнитного поля.

4. Заключение

В заключение отметим, что в данной работе рассчитана энергия электронно-дырочной пары в режиме сильного размерного квантования в цилиндрической квантовой точке с ограничивающим МППТ и параболическим потенциалом. Рассчитаны энергии основного состояния при режимах сильного и слабого магнитного квантования. Построены зависимости первых трех энергетических уровней электрона от величины магнитного поля, при этом если для слабых магнитных полей зависимость имеет нелинейный характер, то для сильных полей зависимость становится подчеркнуто линейной. Исследованы также зависимости спектральных линий межзонного оптического поглощения и фотолюминесценции от энергии падающего фотона. С увеличением значения величины магнитного поля спектральные линии фотолюминесценции смещаются в сторону высоких энергий.

ЛИТЕРАТУРА

1. **P. Michler.** Single Quantum Dots: Fundamentals, Applications and New Concepts, 1-st ed., NY: Springer, 2003.
2. **Z.M. Wang.** Self-Assembled Quantum Dots, 1-st ed., NY: Springer, 2008.
3. **A. Mizel, D.A. Lidar.** Physical Review B, **70**, 11 (2004).
4. **D.B. Hayrapetyan, G.L. Ohanyan, D.A. Baghdasaryan, H.A. Sarkisyan, S. Baskoutas, E.M. Kazaryan.** Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, **95**, 27 (2018).
5. **V.A. Fonoberov, A.A. Balandin.** Journal of Physics: Condensed Matter, **17**, 7 (2005).
6. **K. Yamaguchi, K. Yujobo, T. Kaizu.** Japanese journal of applied physics, **39**, L1245 (2000).
7. **K.M. Gambaryan.** Nanoscale research letters, **5**, 587 (2010).
8. **K.M. Gambaryan, V.M. Aroutiounian, V.G. Harutyunyan.** Applied Physics Letters, **101**(9), 093103 (2012).
9. **D. Bimberg, N. Ledentsov.** Journal of Physics: Condensed Matter, **15**(24), R1063 (2003).
10. **S. Coe-Sullivan, W. Liu, P. Allen, J.S. Steckel.** ECS Journal of Solid State Science and Technology, **2**, R3026 (2012).
11. **D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan, H.A. Sarkisyan.** Optics Communications, **371**, 138 (2016).
12. **H. Kim, J.Y. Han, D.S. Kang, S.W. Kim, D.S. Jang, M. Suh, A. Kirakosyan, D.Y. Jeon.** Journal of crystal growth, **326**, 90 (2011).
13. **K. Mukai.** Journal of nanoscience and nanotechnology, **14**, 2148 (2014).
14. **E. Lifshitz, M. Bashouti, V. Kloper, A. Kigel, M.S. Eisen, S. Berger.** Nano Letters, **3**, 6 (2003).
15. **A.A.R. Watt, P. Meredith, J.D. Riches, S. Atkinson, H. Rubinsztein-Dunlop.** Current Applied Physics, **4**(2-4), 320 (2004).
16. **V.M. Fomin, V.N. Gladilin, J.T. Devreese, E.P. Pokatilov, S.N. Balaban, S.N. Klimin.** Physical Review B, **57**, 4 (1998).
17. **D.A. Baghdasaryan, D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan.** Journal of Nanophotonics, **10**(3), 033508 (2016).
18. **C. Wang, G. Xiong.** Microelectronics journal, **37**(9), 847 (2006).
19. **D.A. Baghdasaryan, D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan, H.A. Sarkisyan.** Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, **101**, 1 (2018).
20. **D.B. Hayrapetyan, A.V. Chalyan, E.M. Kazaryan, H.A. Sarkisyan.** Journal of Nanomaterials, **2015**, ID 915742 (2015).
21. **G. Bester, A. Zunger.** Physical Review B, **71**(4), 045318 (2005).
22. **D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan, H.A. Sarkisyan.** Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, **75**(4), 353 (2016).
23. **D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan, H.A. Sarkisyan.** J. Contemp. Phys., **48**, 32 (2013).
24. **D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan, H.K. Tevosyan.** J. Contemp. Phys., **49**, 119 (2014).
25. **T.A. Sargsian, M.A. Mkrtchyan, H.A. Sarkisyan, D.B. Hayrapetyan.** Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, **126**, 114440 (2021).
26. **Z. Zeng, C.S. Garoufalis, S. Baskoutas, A.F. Terzis.** Journal of Applied Physics, **112**,

064326 (2012).

27. **Z. Zeng, C.S. Garoufalis, S. Baskoutas.** Journal of Physics D: Applied Physics, **45**, 235102 (2012).
28. **S. Baskoutas, A.F. Terzis.** Journal of Computational and Theoretical Nanoscience, **5**, 88 (2008).
29. **X. Zhang, S. Hou, H. Mao, J. Wang, Z. Zhu.** Applied surface science, **256**(12), 3862 (2010).
30. **Al.L. Efros, A.L. Efros.** Sov. Phys. Semicond, **16**, 772 (1982).
31. **K. Brunner, U. Bockelmann, G. Abstreiter, M. Walther, G. Böhm, G. Tränkle, G. Weimann.** Physical review letters, **69**, 3216 (1992).
32. **W. Van Roosbroeck, W. Shockley.** Physical Review, **94**(6), 1558 (1954).
33. **R. Bhattacharya, B. Pal, B. Bansal.** Applied Physics Letters, **100**, 222103 (2012).

ՄԱԳՆԻՍԱԲՍՈՐԲՅՈՒՆ ԵՎ ՖՈՏՈԼՅՈՒՄԻՆԵՍԵՆՍԻԱՆ ՊՅՈՇԼ-ԹԵԼԼԵՐԻ
ՁԵՎԱՓՈԽՎԱԾ ՊՈՏԵՆՑԻԱԼՈՎ ԳԼԱՆԱԶԵՎ ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ԿԵՏՈՒՄ

Գ.Ս. ԳԵՎՈՐԳՅԱՆ, Գ.Տ. ԽԱՌԱՏՅԱՆ, Հ.Խ. ԹԵՎՈՍՅԱՆ

Ուսումնասիրվել են Պյոշլ-Թելլերի ձևափոխված պոտենցիալով և պարաբոլիկ պոտենցիալով սահմանափակում ունեցող գլանաձև քվանտային կետում էլեկտրոնա-խոռոչային վիճակները ուժեղ քվանտացման ռեժիմում: Դուրս են բերվել ինչպես էներգիայի, այնպես էլ մասնիկների ալիքային ֆունկցիաները բնութագրող ատահայտությունները աքսիալ և ռադիալ ուղղություններով: Ստացվել են մագնիսական քվանտացման տարբեր ռեժիմներում ռադիալ էներգիայի արժեքները: Դիտարկվել են օպտիկական միջգոտային կլանման սպեկտրները, ինչպես նաև ֆոտոլյումինեսցիայի սպեկտրները՝ կախված ընկնող լույսի էներգիայից:

MAGNETIC ABSORPTION AND PHOTOLUMINESCENCE IN A CYLINDRICAL QUANTUM DOT WITH A MODIFIED PESCHL-TELLER POTENTIAL

G.S. GEVORGYAN, G.Ts. KHARATYAN, H.Kh. TEVOSYAN

The electron-hole states in a cylindrical quantum dot with a limiting parabolic potential, as well as a modified Pöschl-Teller potential in the strong dimensional quantization regime are investigated. Expressions are found for both the energy and the wave functions of particles in the radial and axial directions. Expressions for the radial energy are obtained for various modes of magnetic quantization. Optical interband absorption spectra and photoluminescence spectra are reviewed as functions of the incident light energy.

ОДНОВАЛЕНТНЫЕ И ДВУХВАЛЕНТНЫЕ ПРИМЕСНЫЕ СОСТОЯНИЯ В ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ НАНОПЛАСТИНКЕ

В.А. АРУТЮНЯН, А.А. САРКИСЯН*

Российско–Армянский университет, Ереван, Армения

*e-mail: shayk@ysu.am

(Поступила в редакцию 12 апреля 2021 г.)

В рамках вариационного метода исследованы водородоподобные примесные состояния в полупроводниковой нанопластинке, имеющей форму прямоугольного параллелепипеда малой толщины. Показано, что вследствие малой толщины наноструктуры примесь можно рассматривать двумерной. В случае двухвалентной примеси электрон-электронное взаимодействие также рассматривается двумерным и учитывается как возмущение. По аналогии с теорией атома гелия определена энергия электрон-электронного взаимодействия для парасостояния.

1. Введение

Полупроводниковые нанопластинки являются сравнительно недавно реализованными наноструктурами, занимающими промежуточное положение между квантовыми точками и квантовыми ямами [1–5]. Геометрия этих систем соответствует прямоугольному параллелепипеду, одна из сторон которого значительно меньше двух других (рис.1). Одноэлектронный спектр таких систем обладает ярко выраженным подзонным характером, так как размерное квантование в направлении Oz значительно сильнее чем в плоскости xOy , и соответствующие уровни находятся на существенно большем расстоянии друг от друга, по сравнению с теми, которые реализуются в плоскости нанопластинки. Это позволяет рассматривать движение в xOy чисто двумерным, в привязке к одному из

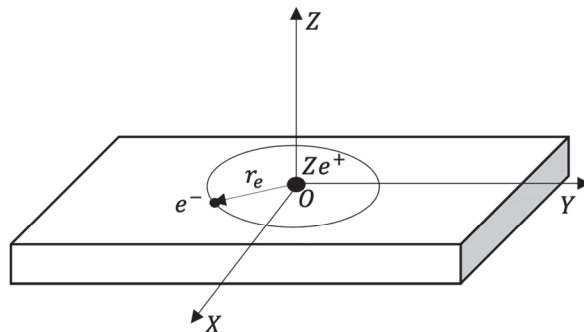


Рис.1. Одновалентная примесь в полупроводниковой нанопластинке.

уровней z -квантования [6]. Ясно, что подобный характер энергетического спектра позволяет осуществлять гибкую манипуляцию энергетических уровней носителей заряда, что может найти непосредственное приложение в технологиях. В частности, полупроводниковые нанопластины уже рассматриваются как перспективные кандидаты на роль элементной базы полупроводниковых приборов нового поколения. Так в работе [7] изучались фотолюминесцентные характеристики коллоидальных CdSe/CdS нанопластинок и возможность их применения в качестве активной среды светодиодов на основе этих структур. Авторы [8] сообщали о реализации гибридных светодиодов на базе коллоидальных CdS нанопластинок и органических материалов. При этом, особо отмечалась необходимость всестороннего исследования нанопластинок CdSe для изготовления указанных светодиодов, обладающих низким напряжением и спектрально чистым цветом, что исключительно важно с точки зрения их непосредственного применения.

Для широкого технологического использования нанопластинок в оптоэлектронных приборах необходимо знать характер как одночастичного, так и многочастичного спектров локализованных в них носителей заряда. В работе [9] была рассмотрена простейшая модель нанопластины с непроницаемыми стенками. Автор изучал электронные и экситонные состояния с учетом квазидвумерности нанопластины, а также учитывал поляризационные эффекты при построении кулоновского потенциала взаимодействия между электроном и дыркой.

Наряду с экситонными комплексами в нанопластинках могут реализовываться примесные системы как одновалентные, так и двухвалентные. При этом примесные комплексы в нульмерных структурах изучали во многих работах [см. 11–16], в которых, в частности, было получено, что энергетические уровни примеси можно манипулировать, изменяя геометрические размеры квантовой точки. Ясно, что исследование примесных состояний в нанопластинках может дать полезную информацию о характере несколько-частичных уровней в нанопластинках, что в свою очередь, позволит использовать полученные результаты при описании трионных и биэкситонных комплексов.

Целью данной работы является теоретическое исследование одновалентных и двухвалентных примесных состояний в нанопластинке CdSe имеющей форму прямоугольного параллелепипеда малой толщины.

2. Теория

2.1. Одновалентное примесное состояние

Рассмотрим задачу одновалентной примеси локализованной в геометрическом центре нанопластины из CdSe. Сразу отметим, что вдоль оси Oz размерное квантование настолько велико ($\{L_x, L_y\} \gg L_z$), что в данном направлении мы не будем учитывать кулоновское взаимодействие между электроном и примесным центром и предположим, что оно двумерно (см. рис.1):

$$V_c = -\frac{Ze^2}{\varepsilon\sqrt{x^2 + y^2}}, \quad (1)$$

где ε – диэлектрическая постоянная CdSe ($\varepsilon = 9.4$), Z – валентность примеси, e – заряд электрона.

В указанном приближении уравнение Шредингера имеет вид:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu_{\parallel}} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2\mu_{\perp}} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right\} \Psi + V_{conf}(x, y, z) \Psi - \frac{Ze^2}{\varepsilon\sqrt{x^2 + y^2}} \Psi = E \Psi, \quad (2)$$

$\Psi(x, y, z)$ – волновая функция электрона, а также учтено, что тензор обратной эффективной массы имеет вид

$$\mu_{ij}^{-1} = \begin{pmatrix} \mu_{\parallel}^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & \mu_{\parallel}^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & \mu_{\perp}^{-1} \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Ограничивающий потенциал нанопластины аппроксимируем прямоугольными бесконечно высокими стенками:

$$V_{conf}(x, y, z) = V_{conf}^{(1)}(x, y) + V_{conf}^{(2)}(z) = \begin{cases} 0, & \{x, y, z\} \in G \\ \infty, & \{x, y, z\} \notin G \end{cases}, \quad (4)$$

где G область

$$\left. \begin{aligned} -L_x/2 \leq x \leq L_x/2 \\ -L_y/2 \leq y \leq L_y/2 \\ -L_z/2 \leq z \leq L_z/2 \end{aligned} \right\}. \quad (5)$$

Решение уравнение (3) с ограничивающим потенциалом (5) будем искать на основе вариационного метода. Вариационную волновую функцию для основного состояния ($n_x = 1, n_y = 1, n_z = 1$) представим в виде следующего произведения:

$$\Psi_0(x, y, z; \lambda) = f_0(x, y; \lambda) \sqrt{\frac{2}{L_z}} \cos\left(\frac{\pi}{L_z} z\right), \quad (6)$$

где

$$f_0(x, y; \lambda) = N(\lambda) \cos\left(\frac{\pi}{L_x} x\right) \cos\left(\frac{\pi}{L_y} y\right) e^{-\lambda\sqrt{x^2 + y^2}}, \quad (7)$$

λ – вариационный параметр, $N(\lambda)$ – нормировочная постоянная вариационной волновой функции $f_0(x, y; \lambda)$ описывающей основное состояние в плоскости xOy и удовлетворяющей уравнению:

$$\begin{aligned} \hat{H}^{2D} f_0(x, y; \lambda) = & -\frac{\hbar^2}{2\mu_{\parallel}} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) f_0(x, y; \lambda) - \frac{Ze^2 f_0(x, y; \lambda)}{\varepsilon\sqrt{x^2 + y^2}} \\ & + V_{conf}^1(x, y) f_0(x, y; \lambda) = E_0^{2D} f_0(x, y; \lambda) \left(E_0^{2D} = E - \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu_{\perp} L_z^2} \right). \end{aligned} \quad (8)$$

По стандартной процедуре, из условия нормировки, находим нормировочную постоянную $N(\lambda)$:

$$N(\lambda) = \left\{ \int_{-L_x/2}^{L_x/2} \int_{-L_y/2}^{L_y/2} \cos^2\left(\frac{\pi}{L_x}x\right) \cos^2\left(\frac{\pi}{L_y}y\right) e^{-2\lambda\sqrt{x^2+y^2}} dx dy \right\}^{-1/2}. \quad (9)$$

Подставив вариационную волновую функцию (8) в выражение для среднего значения энергии $\langle E_0^{2D}(\lambda) \rangle$:

$$\langle E_0^{2D}(\lambda) \rangle = \int_{-L_x/2}^{L_x/2} \int_{-L_y/2}^{L_y/2} f_0(x, y) \hat{H}^{2D} f_0(x, y) dx dy, \quad (10)$$

придем к условию минимизации:

$$\frac{d\langle E_0^{2D}(\lambda) \rangle}{d\lambda} = 0. \quad (11)$$

Из (12) можно определить зависимость $\lambda_{\min}$ от геометрических параметров нанопластинки $L_x = L_y = L$, а, следовательно, и зависимость энергии основного состояния примеси, от этих параметров. Отметим, что в дальнейших расчетах для нанопластинки из CdSe длина измеряется в эффективных боровских радиусах $a_B^* = \hbar^2 \epsilon / (\mu_{\parallel} e^2) = 4.25$ нм, а энергия в эффективных энергиях Ридберга $E_R = \hbar^2 / (2\mu_{\parallel} a_B^{*2}) = \mu_{\parallel} e^4 / (2\hbar^2 \epsilon^2) = 18.01$ мэВ ($\mu_{\parallel} = 0.12m_e$).

На рис.2. представлена зависимость вариационного параметра λ от размеров двумерной ямы. С увеличением L величина λ растет, приближаясь к безразмерному значению 2, что соответствует точному результату для двумерного атома водорода [10].

На рис.3. представлена зависимость энергии основного состояния одновалентной примеси от L . Из рисунка следует, что при малых значениях L энергия примеси положительна. Это является следствием влияния сильного

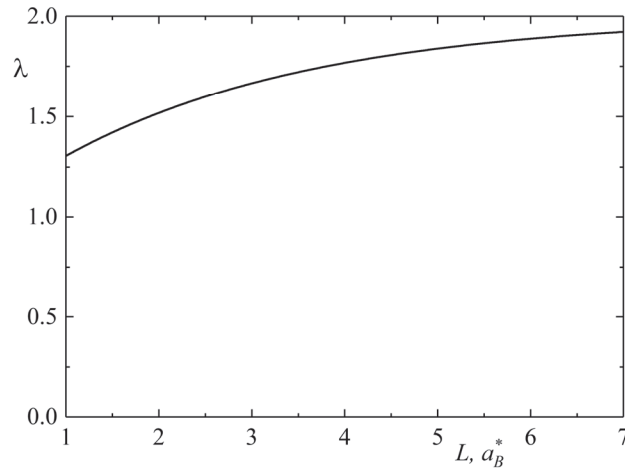


Рис.2. Зависимость вариационного параметра λ от L .

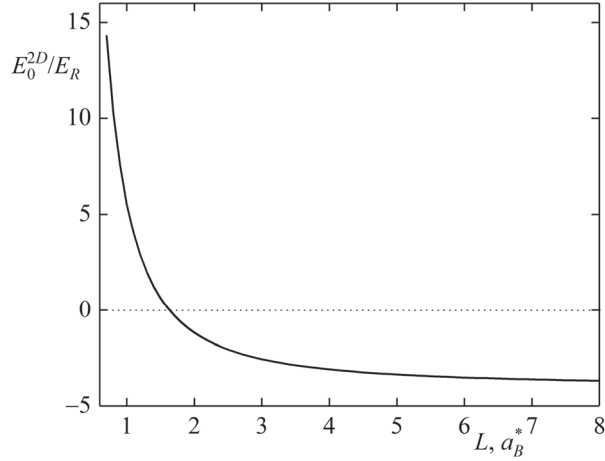


Рис.3. Энергия основного состояния одновалентной примеси в зависимости от L .

размерного квантования, которое доминирует над кулоновским, и суммарная энергия системы принимает положительное значение. С ростом L влияние стенок постепенно ослабевает, и энергия начинает уменьшаться. При значении $L \approx 1,7a_B^*$ полная энергия системы становится равной нулю. При дальнейшем увеличении размеров нанопластины уровень энергии основного состояния будет стремиться к известному значению [10]

$$E_0^{2D} = -4E_R. \quad (12)$$

2.2. Двухвалентное примесное состояние

Гамильтониан двухвалентной примеси имеет вид:

$$\begin{aligned} \hat{H}(1,2) = & -\frac{\hbar^2}{2\mu_{\parallel}} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2\mu_{\parallel}} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} \right) + V_{conf}(x_1, y_1) + V_{conf}(x_2, y_2) \\ & - \frac{Ze^2}{\epsilon\sqrt{x_1^2 + y_1^2}} - \frac{Ze^2}{\epsilon\sqrt{x_2^2 + y_2^2}} + \frac{e^2}{\epsilon\sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2}}, \end{aligned} \quad (13)$$

где последний член описывает электрон-электронное взаимодействие, которое будем считать возмущением. Задачу решаем по аналогии с теорией атома гелия. Для этого заметим, что невозмущенный гамильтониан можно представить в виде суммы

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_1^{2D} + \hat{H}_2^{2D}, \quad (14)$$

где

$$\hat{H}_1^{2D} = -\frac{\hbar^2}{2\mu_{\parallel}} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} \right) + V_{conf}(x_1, y_1) - \frac{Ze^2}{\epsilon\sqrt{x_1^2 + y_1^2}}, \quad (15)$$

$$\hat{H}_2^{2D} = -\frac{\hbar^2}{2\mu_{\parallel}} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} \right) + V_{conf}(x_2, y_2) - \frac{Ze^2}{\varepsilon \sqrt{x_2^2 + y_2^2}}. \quad (16)$$

Воспользовавшись результатами предыдущего пункта, поправку электрон-электронного взаимодействия к основному состоянию определим в рамках теории возмущений. Для этого заметим, что двухэлектронная волновая функция запишется как произведение

$$\Phi_0^{2D}(1, 2) = f_0(x_1, y_1; \lambda) f_0(x_2, y_2; \lambda), \quad (17)$$

где $f_0(x, y; \lambda)$ определяется согласно (8). Что касается спиновой составляющей двухчастичной волновой функции, то она соответствует синглетному терму (парасостояние) и имеет стандартный вид в z -представлении по σ -матрицам Паули:

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (18)$$

$$\chi_A(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1) \},$$

где $\alpha = (1 \ 0)^T$, $\beta = (0 \ 1)^T$.

Таким образом для определения кулоновской поправки электрон-электронного взаимодействия получаем:

$$\delta E = \int_{-L_x/2}^{L_x/2} \int_{-L_x/2}^{L_x/2} \int_{-L_y/2}^{L_y/2} \int_{-L_y/2}^{L_y/2} \Phi_0^{2D*}(1, 2) \frac{e^2}{\varepsilon \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2}} \Phi_0^{2D}(1, 2) dx_1 dx_2 dy_1 dy_2. \quad (19)$$

На рис.4. Представлена зависимость δE от геометрических размеров нанопластинки. Как следует из приведенного графика с увеличением размеров нанопластинки кулоновская поправка электрон-электронного взаимодействия уменьшается. Это естественно, так как взаимное отталкивание электронов отдаляет их друг от друга. При больших значениях L влияние стенок становится не существенным и δE будет стремиться к постоянному значению E_R .

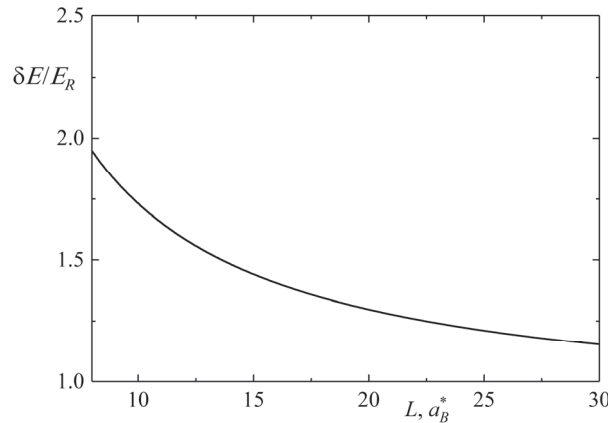


Рис.4. Зависимость кулоновской энергии электрон-электронного взаимодействия двухвалентной примеси в полупроводниковой нанопластинке.

3. Заключение

Таким образом, в полупроводниковых нанопластинках могут реализоваться одновалентные примесные состояния имеющие двумерный характер. При этом энергия примеси может принимать как положительные значения обусловленные влиянием сильного размерного квантования стенок нанопластинки, так и отрицательные. С ростом геометрических размеров нанопластинки данная энергия стремится к известному точному значению основной энергии двумерной примеси $-4E_R$.

В случае двухвалентной примеси электрон-электронное взаимодействие, при сравнительно больших размерах нанопластинки, можно рассматривать как поправку и вычислять в рамках теории возмущений. Расчеты показывают, что с ростом размеров нанопластинки энергия электрон-электронного взаимодействия уменьшается приближаясь к значению E_R .

Авторы выражают глубокую благодарность к.ф.м.н., Д. Багдасаряну за полезные дискуссии. Данная работа выполнена в рамках программы № 10-2/1-5 базового финансирования со стороны КН РА.

ЛИТЕРАТУРА

1. A.O. Bochkarev, M.A. Grekov. Physical Mesomechanics, **22**, 209 (2019).
2. B. Karami, S. Karami. Advances in nano research, **7**, 51 (2019).
3. E.V. Shornikova et al. Nano letters, **20**, 1370 (2020).
4. B. Jin, H. Wang, M.L. Sushko, C. Jin, R. Tang. Nanoscale, **12**, 19592 (2020).
5. D. Xiang, Y. Li, L. Wang, Y. Zhao, K. Wu. ACS Photonics, **8**, 745 (2021).
6. D.A. Baghdasaryan, E.M. Kazaryan, H.A. Sarkisyan, K.D. Moiseev. Physica E. **90**, 170 (2017).
7. Y. Yanget al. IEEE Transactions on Nanotechnology, **18**, 220 (2019).
8. A.G. Vitukhnovsky et al. Chem. Phys. Letters, **619**, 185 (2015).
9. J. Planelles. Theor. Chem. Acc., **136**, 81 (2017).
10. Л.Г. Мардоян, Г.С. Погосян, А.Н. Сисакян, В.М. Тер-Антонян. Теоретическая и математическая физика, **66**, 99 (1984).
11. Д.Б. Айрапетян, Э.М. Казарян, О.Х. Тевосян. Изв. НАН Армении, Физика, **49**, 190 (2014).
12. О.Х. Тевосян. Изв. НАН Армении, Физика, **47**, 427 (2012).
13. Р.Г. Погосян. Изв. НАН Армении, Физика, **49**, 114 (2014).
14. A.K. Manaselyan, A.V. Ghazaryan, A.A. Kirakosyan. J. Contemp. Phys., **43**, 211 (2008).
15. A.K. Manaselyan, A.V. Ghazaryan, A.A. Kirakosyan. J. Contemp. Phys., **45**, 269 (2010).
16. T.A. Sargsian. J. Contemp. Phys., **54**, 168 (2019).

ՄԻԱՐԺԵՔ ԵՎ ԵՐԿԱՐԺԵՔ ԽԱՌՆՈՒՐԴԱՅԻՆ ՎԻՃԱԿՆԵՐԸ
ԿԻՍԱՀԱՂՈՐԴՉԱՅԻՆ ՆԱՆՈԹԻԹԵՂՈՒՄ

Վ.Ա. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ, Հ.Ա. ՍԱՐԳՍՅԱՆ

Վարիացիոն մեթոդի շրջանակներում ուսումնասիրվում են ջրածնանման խառնուրդի վիճակները կիսահաղորդչային նանոթիթեղում, որն ունի ուղղանկյուն զուգահեռանիստի տեսք: Ցույց է տրված, որ նանոկառուցվածքի փոքր հաստության շնորհիվ խառնուրդը կարելի է դիտարկել երկչափ: Երկարժեքի խառնուրդի դեպքում էլեկտրոն-էլեկտրոն փոխազդեցությունը նույնպես դիտարկվում է երկչափ, և խնդիրը լուծվում է խոտորումների տեսության հիման վրա: Հելիումի ատոմի տեսության համանմանությամբ որոշված է էլեկտրոն-էլեկտրոնային փոխազդեցության պարավիճակի էներգիան:

MONOVALENT AND DIAVALENT IMPURITY STATES
IN A SEMICONDUCTOR NANOPATELETS

V.A. HARUTYUNYAN, H.A. SARKISYAN

Within the framework of the variational method, hydrogen-like impurity states in the semiconductor nanoplatelets with the shape of a rectangular parallelepiped of a small thickness are investigated. Due to the small thickness of the nanostructure, it is shown that, the impurity can be considered two-dimensional. In the case of a divalent impurity, the electron-electron interaction is also considered two-dimensional and taken into account as a perturbation. By the analogy with the theory of the helium atom, the electron-electron interaction energy is determined for the para-state.

АТОМАРНО-ТОНКИЕ СЛОИ MoS_2 , ВЫРАЩЕННЫЕ МЕТОДОМ ИМПУЛЬСНО-ЛАЗЕРНОГО ОСАЖДЕНИЯ

С.Г. ПЕТРОСЯН^{1,2*}, А.М. ХАЧАТРЯН¹

¹Институт радиофизики и электроники НАН Армении, Аштарак, Армения

²Российско–Армянский университет, Ереван, Армения

*e-mail: stepan.petrosyan@rau.am

(Поступила в редакцию 4 мая 2021 г.)

В работе приведены результаты по синтезу и исследованию свойств монослойных и многослойных пленок MoS_2 , полученных с помощью импульсно-лазерного осаждения на стеклянных подложках. Для характеристики структурных, морфологических, оптических и электрических свойств пленок были использованы атомно-силовая микроскопия (AFM), рентгеновская дифрактометрия, спектроскопия комбинационного рассеяния, оптическое поглощение, фотолюминесценция и холловские измерения. Обнаруженные экспериментальные особенности ультратонких пленок MoS_2 свидетельствуют об эволюции всех свойств такого квазидвумерного материала с ростом числа атомных слоев. В пределе толщин в один-два монослоя материал становится прямозонным, причем оптическое поглощение и фотолюминесценция при комнатной температуре обусловлены генерацией и рекомбинацией двумерных экситонов, имеющих энергию связи порядка 0.45 эВ. В зависимости от режимов осаждения слои могут содержать вакансии или избыток атомов серы, проводящие к проводимости *n*- или *p*-типов, соответственно.

1. Введение

В настоящее время двумерные (2D) материалы привлекают большой интерес благодаря их уникальным свойствам, вызванным особенностями структуры и действием квантово-механических ограничений [1,2]. В 2D материале, состоящем из кристаллического слоя толщиной в один-два атома, все атомы по сути дела находятся на поверхности, и поэтому имеются множество свободных или некомпенсированных связей. Эти обстоятельства обуславливают появление у таких материалов уникальных свойств, не характерных обычным трехмерным материалам [2]. В первую очередь это касается высокой чувствительности таких материалов к окружающей среде и внешним полям. Семейство 2D-материалов включает металлы, полуметаллы, полупроводники и изоляторы. Наиболее известный 2D-материал, графен, представляет собой монослойную пленку углерода, обладающую рекордной подвижностью носителей заряда [3]. Однако

отсутствие запрещенной зоны при нормальных условиях во-многом ограничивает его применимость на практике. В отличие от графена, квазидвумерные дихалькогениды переходных металлов, такие как, например, MoS_2 , WS_2 , обладают конечной и оптимальной шириной запрещенной зоны для использования в новом семействе полупроводниковых приборов [4]. Каждый слой MoS_2 (WS_2) представляет собой сэндвич: слой атомов молибдена (вольфрама) в окружении слоев атомов серы. Благодаря простой возможности, а именно с помощью подбора числа атомных слоев в тонкой пленке управлять многими его свойствами (шириной запрещенной зоны, структурой энергетических зон, плотностью свободных носителей тока, типом проводимости, долей поверхностных атомов и т.д.), квазидвумерные слои дихалькогенидов переходных металлов, а также гомо- и гетеро-переходы на их основе могут стать перспективными материалами для создания прозрачных и гибких электронных устройств, оптической коммуникации в компьютерах нового поколения и других изделий нанoeлектроники и оптоэлектроники [2,4,5].

В настоящее время активно развиваются различные методы получения 2Д материалов: механическое или химическое отшелушивание слоев из объемного кристалла, химическое осаждение из газовой фазы (CVD), импульсно-лазерное осаждение, сульфуризация тонких металлических пленок и т.д. [1]. Наиболее качественные 2Д слои с поперечными размерами достигающими до сантиметров, получают методом CVD [6]. Однако эта технология требует высокие температуры роста ($\sim 1000^\circ\text{C}$) и поэтому поиск альтернативных технологий, позволяющих выращивать слои 2Д материалов на разных подложках является важной задачей. В качестве одной из таких технологий выступает метод импульсно-лазерного осаждения (ИЛО) [7,8].

В данной работе приводятся результаты по росту и исследованию свойств монослойных и многослойных пленок MoS_2 , осажденных методом ИЛО на стеклянных подложках. Обнаруженные особенности тонких пленок MoS_2 свидетельствуют об эволюции всех структурных, электрических и оптических свойств таких материалов с ростом числа атомных слоев.

2. Экспериментальная часть

Как уже говорилось в данной работе мы будем применять метод ИЛО для выращивания сверхтонких слоев MoS_2 на стеклянных подложках. Этот метод уже давно нами применяется для создания тонких пленок, гетеропереходов и фоточувствительных приборов в ИК области [9]. С помощью подбора числа и мощности лазерных импульсов можно в данном методе легко и достаточно точно управлять числом атомных слоев в растущей пленке.

Для осаждения тонких пленок толщиной до десятки атомных монослоев, был использован работающий в режиме модуляции добротности неодимовый лазер со следующими параметрами: длина волны 1.064 мкм, длительность

импульсов 30 нс, энергия в импульсе 0.35 Дж, частота повторения импульсов 0.1 Гц, диаметр луча 20 мм. Пленки были выращены путем испарения мишени, представляющей собой прессованную таблетку из порошков MoS_2 и S, взятых в таком весовом соотношении, чтобы в мишени атомное соотношение Mo: S составило 1:4. Известно, что такой состав мишени позволяет получить пленки с наиболее совершенной кристаллической структурой, характеризуемых дефицитом атомов молибдена (или избытком атомов серы), приводящих, как правило, к проводимости p -типа [8].

Для процесса роста мишень и подложка были расположены в ростовой камере на расстоянии 3–6 см друг от друга, причем вакуум в камере поддерживался на уровне не хуже 10^{-5} мм.рт.ст. Подложка была нагрета до 650–700°C. Пленки, после прекращения роста, в течении 5 мин были подвергнуты кратковременному отжигу при температуре 700°C, затем они охлаждались до комнатной температуры. В среднем для выращивания одного монослоя достаточно было 5 импульсов лазера. Для характеристики структурных, морфологических, оптических и электрических свойств пленок были использованы следующие методы: AFM, рентгеновская дифрактометрия, спектроскопия комбинационного рассеяния, оптическое поглощение, фотолуминесценция и холловские измерения.

3. Результаты измерений и их обсуждения

Топологические тонкости поверхности осажденных слоев были характеризованы атомно-силовым микроскопом (AFM) SolvernanoEducatorII (РФ) (рис.1а,б). Поверхности пленок были сплошные, со средней шероховатостью порядка 10 нм, определяющей в основном шероховатостью поверхности стекла.

На рис.2а представлены результаты измерений спектров рентгеновской дифракции полученных пленок, осажденных на стеклянных подложках. Толщина пленки в данном случае была 4.7 нм, что составляет около 7 атомных слоев.

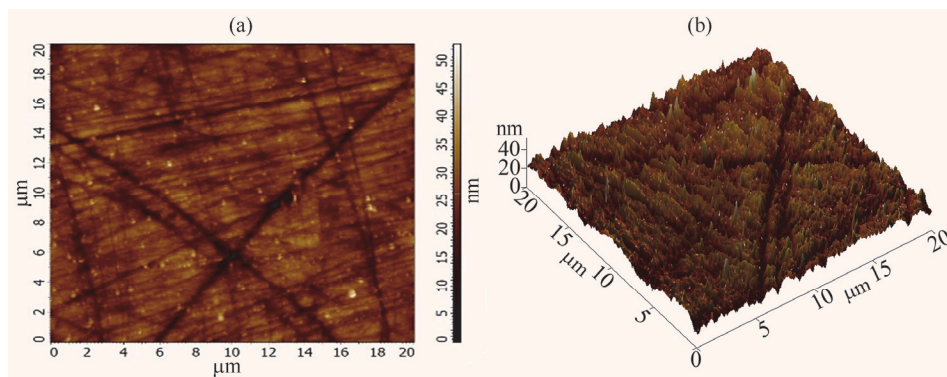


Рис.1. AFM (а-2D, б-3D) картины поверхности пленки MoS_2 , осажденной на стеклянной подложке.

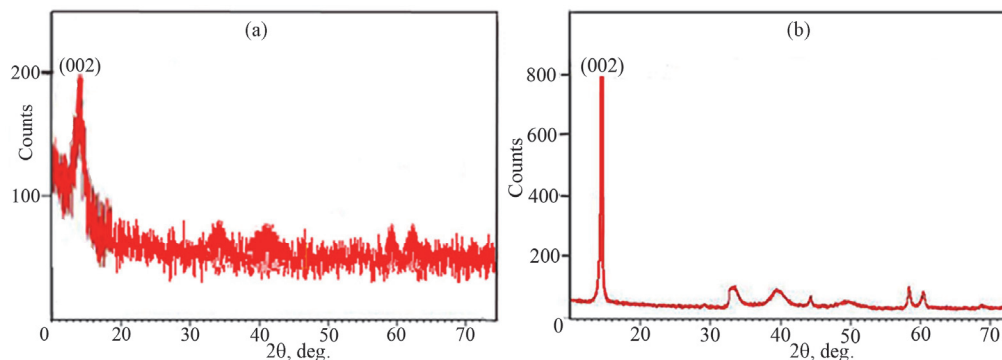


Рис.2. Спектры рентгеновской дифракции тонкой пленки (a) и мишени MoS₂ (b).

Спектры были сняты с помощью дифрактометра PANalytical B.V. (Holland), используя излучение $\lambda = 1.5406 \text{ \AA}$ (K_{α} , Cu). Регистрированные в интервале углов дифракции $10\text{--}70^\circ$ пики использовались для идентификации кристаллических плоскостей. Для сравнения на рис.2b приведен спектр дифракции для мишени, из которой были осаждены пленки. Виден четко выраженный дифракционный пик при $2\theta = 14^\circ$, характерный для кристаллографической плоскости (002) как объемного материала MoS₂, так и для пленок, состоящих из нескольких его атомных слоев [10], что свидетельствует об одном и том же фазовом составе мишени и выращенных пленок.

Спектроскопия комбинационного рассеяния также широко применяется для характеристики тонких пленок MoS₂ [11]. При этом четко выделяются два пика рассеяния в интервалах $(375\text{--}380) \text{ см}^{-1}$ и $(400\text{--}405) \text{ см}^{-1}$, которые соответствуют колебательным модам E_{2g}^1 и A_{1g} , соответственно. Известно, что мода E_{2g}^1 соответствует противофазным колебаниям атомов S по отношению к атомам Mo в плоскости монослоя, а A_{1g} -колебаниям атомов S вне плоскости монослоя опять в противоположных направлениях по отношению к атомам Mo [12]. Экспериментально установлено, что в зависимости от числа монослоев в пленке изменяется интенсивность межслойного взаимодействия в MoS₂, что в свою очередь сказывается на частоты указанных атомных колебаний [11]. Причем с уменьшением числа монослоев в материале для E_{2g}^1 моды наблюдается красный сдвиг, а для A_{1g} -голубой сдвиг. В результате разность в пиках комбинационного рассеяния зависит от числа монослоев и она может послужить показателем перехода от многослойной пленки к монослойной. Если для пленки с толщиной более чем 10 атомных слоев эта разность составляет 25.4 см^{-1} , что практически совпадает со случаем объемного материала, то в случае монослойного материала она уменьшается до 20.1 см^{-1} [7].

Такие же закономерности наблюдались и в наших экспериментах. На Рис.3 представлены спектры комбинационного рассеяния пленок MoS₂ разной

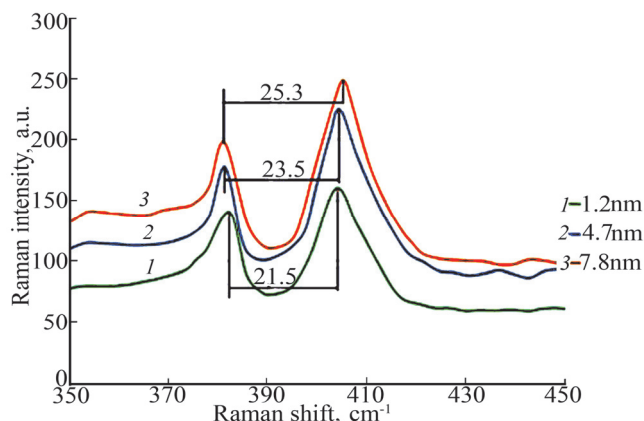


Рис.3. Спектры комбинационного рассеяния пленок MoS₂ разной толщины, выращенных на стеклянных подложках.

толщины (1.2 нм, 4.7 нм, 7.8 нм), возбужденные лазером с длиной волны 532 нм, откуда видно, что разность в пиках E_{2g}^1 и A_{1g} уменьшается с уменьшением толщины пленки и для образца толщиной 1.2 нм (два атомных слоя) эта разность уменьшается до 21.5 см^{-1} , что соответствует результатам работы [7], где выведена эмпирическая формула зависимости разности в волновых числах пиков комбинационных сдвигов от толщины пленки:

$$\Delta k = 26.45 - \frac{15.42}{1 + 1.44n^{0.9}} \text{ см}^{-1}. \quad (1)$$

Согласно (1) при $n = 2$, $\Delta k = 22.6 \text{ см}^{-1}$, что на 3% больше, чем полученный нами сдвиг. По-видимому такая разница обусловлена влиянием подложки [13,14], так как пленки MoS₂ в работе [7] были выращены на кристаллических подложках сапфира, в то время как у нас были использованы некристаллические (стеклянные) подложки.

Изменение электронной структуры ультратонких слоев MoS₂ в зависимости от числа монослоев отражается и на их оптических свойствах. Хорошо известно [15], что при переходе от многослойного (объемного) полупроводника MoS₂ с непрямой запрещенной зоной (шириной 1.2 эВ) к атомарно тонким пленкам, материал становится прямозонным, ширина запрещенной зоны увеличивается до 1.8–1.9 эВ, вследствие чего существенны изменения претерпевают спектры оптического поглощения и фотолюминесценции.

На рис. 4 представлены измеренные при комнатной температуре спектры поглощения пленок MoS₂, имеющих толщину 1.2 нм (2 монослоя), 4.7 нм (7 монослоев) и 7.8 нм (12 монослоев). Видно, что в области энергии фотонов меньше 1.7 эВ поглощение меньше 15%, причем с уменьшением толщины пленок до 2 монослоев поглощение становится меньше 5%. Для всех пленок наблюдается рост поглощения в области 1.8–2 эВ, причем выделяются два перехода, обычно обозначаемые как А и В [15,16]. Эти максимумы соответствуют прямым

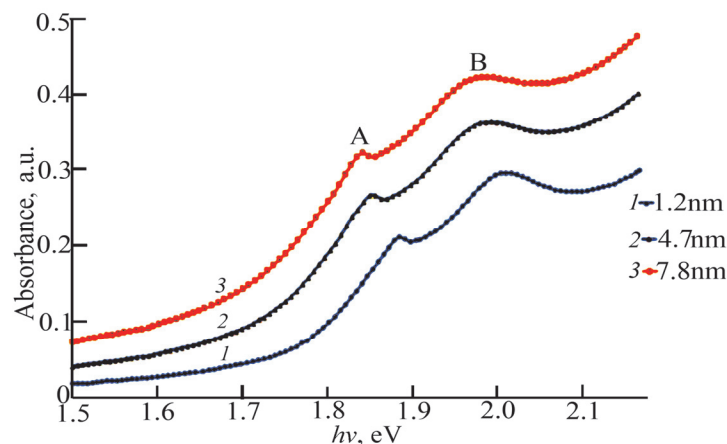


Рис.4. Спектры поглощения пленок MoS₂ разной толщины.

экситонным переходам, между двумя спин-орбитально отщепленными максимумами валентной зоны и минимумом зоны проводимости в точке K зоны Бриллюэна [17,18].

Сравнение спектров показывает, что при уменьшении толщины слоев вплоть до атомных размеров характер энергетических зон в точке симметрии $K(K')$ зоны Бриллюэна и оптических переходов между ними сохраняется. По мере увеличения числа атомных слоев и перехода к объемному MoS₂ наблюдается лишь длинноволновой сдвиг спектров и увеличение абсолютного значения поглощения света. Разность в энергиях указанных переходов составляет около 0.15–0.17 эВ, что соответствует теоретическому значению расщепления валентных зон в точке K зоны Бриллюэна [18,19]. Эти закономерности проявляются и в спектрах фотолуминесценции этих же образцов, представленных на рис.5.

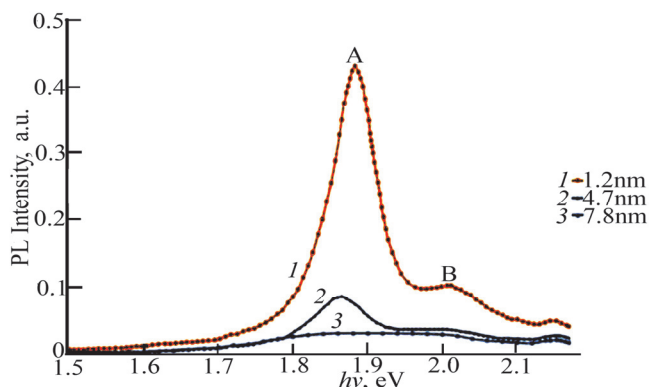


Рис.5. Спектры фотолуминесценции тонких слоев MoS₂ снятых при комнатной температуре. Для возбуждения был использован лазер с длиной волны излучения 0.63 мкм.

В спектрах фотолуминесценции тоже выделяются два пика приблизительно при энергиях 1.87 эВ (A) и 2.02 эВ (B). Известно, что оптически генерированные электроны и дырки могут образовывать стабильные экситонные

состояния даже при комнатной температуре из-за сильного усиления кулоновского взаимодействия в атомарно-тонких двумерных материалах [16]. Пики А и В связаны с прямыми излучательными переходами в точке $K(K')$ зоны Бриллюэна, а разность в энергиях пиков А и В составляет около 0.15 эВ и соответствует расщеплению валентной зоны из-за спин-орбитального взаимодействия в MoS_2 . С другой стороны, если взять величину прямой щели в точке K зоны Бриллюэна, равной 2.31–2.33 эВ [17,19], то можно прийти к выводу о том, что экситоны типа А и В имеют энергию связи порядка 0.45–0.46 эВ. Также видно, что интенсивность фотолуминесценции резко возрастает по мере уменьшения толщины пленки и перехода к прямозонному полупроводнику в пределе монослойной пленки. Пленка толщины 7.8 нм является непрямоzonной, ведет себя наподобие объемного материала и, соответственно, обладает очень малой вероятностью излучательной рекомбинации электронно-дырочных пар после фотовозбуждения. Полученные особенности фотолуминесценции тонких слоев находятся в соответствии со сообщениями других авторов [16,18].

Для электрической характеристики полученных слоев MoS_2 были проведены холловские измерения при комнатной температуре с помощью установки EcoriaHMS-5000 (South Korea). Эти измерения показали, что несмотря на избыток серы в мишени ($\text{Mo:S} = 4:1$) образец с толщиной 4.7 нм по видимому содержал большое количество вакансии серы, которые играли роль доноров и приводили к проводимости n -типа [7]. Образец с толщиной 7.8 нм по-видимому имел большой избыток атомов серы и проявлял проводимость p -типа. Причем объемная концентрация электронов была на уровне $(2-10) \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$, а дырок – $(2-4) \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$. Соответственно подвижности были равны $38 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$ для электронов, и $2.2 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$ для дырок. Относительно высокие значения подвижности и большой квантовый выход ФЛ свидетельствуют о кристаллическом совершенстве полученных пленок.

4. Заключение

Таким образом методом ИЛО были синтезированы атомарно тонкие (монослойные, бислойные и многослойные) пленки MoS_2 . Путем вариации числа импульсов можно получить сплошные, монослойные и многослойные, пленки с поперечными размерами до сантиметров, оптические и электронные свойства которых сильно зависят от числа атомных слоев. В пределе толщин в один-два монослоя материал становится прямозонным, причем оптическое поглощение и фотолуминесценция даже при комнатной температуре обусловлены генерацией и рекомбинацией двумерных экситонов с энергией связи порядка 0.45 эВ. В зависимости от режимов осаждения слои могут содержать вакансии или избыток атомов серы, приводящие к проводимости n - или p - типов, соответственно.

ЛИТЕРАТУРА

1. Л.А. Чернозатонский, А.А. Артюх. УФН, **188**, 3 (2018).
2. X.C. Duan, C. Wang, A. Pan, R. Yu. Chem. Soc. Rev., **44**, 8859 (2015).
3. K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, et al. Science, **306**, 666 (2004).
4. E. Singh, P. Singh, K.S. Kim, et.al. ACS Mater. Interfaces, **11**, 11061 (2019).
5. A. Rai, H.C.P. Movva, A. Roy, et al. Crystals, **8**, 316 (2018).
6. Y.-H. Lee, X.-Q. Zhang, et al. Advanced Materials, **24**, 2320 (2012).
7. G. Siegel, V.P. VenkataSubbaiah, M.C. Prestgard, et al. APL Materials, **3**, 056103 (2015).
8. R.S. Claudi, A.M. Diamond, S.-L. Hsu, et al. Appl. Phys.Lett., **106**, 052101 (2015).
9. А. Маргарян, С. Петросян, Л. Матевосян, К. Авджян. Изв. НАН Армении, Физика, **51**, 272 (2016).
10. S.S. Chou, M. De, J. Kim, et al. J. Am. Chem Soc., **135**, 4584 (2013).
11. H. Li, Q. Zhang, C.C.R. Yap, B.K. Tay, et al. Adv. Fanc. Mater., **22**, 1385 (2012).
12. R. Ganatra, Q. Zhang. ACS Nano, **8**, 4074 (2014).
13. Y. Sun, R. Wang, K. Liu. Appl. Phys. Rev., **4**, 011301 (2017).
14. L. Yang, X. Cui, J. Zhang, et al. Scientific Reports, **4**, 5649 (2014).
15. J. Kopaczek, S.J. Zalewski, M.P. Polak, et al. J. Appl. Phys., **125**, 135701 (2019).
16. A. Splendiani, L. Sun, Y. Zhang, et.al. Nano Lett., **10**, 1271 (2010).
17. G. Wang, I.C. Gerber, L. Bouet, et al. 2D materials, **2**, 045005 (2015).
18. K.F. Mak, C. Lee, J. Hone, et al. Phys. Rev. Lett., **105**, 136805 (2010).
19. E.S. Kadantsev, P. Hawrylak, Solid State Comm., **152**, 909 (2012).

ATOMICALLY THIN LAYERS OF MoS₂ GROWN BY THE METHOD OF PULSED LASER DEPOSITION

S.G. PETROSYAN, A.M. KHACHATRYAN

This paper presents the results on the synthesis and study of the properties of monolayer and multilayer MoS₂ films obtained by pulsed laser deposition on glass substrates. Atomic force microscopy (AFM), X-ray diffractometry, Raman spectroscopy, optical absorption, photoluminescence and Hall measurements were used to characterize the structural, morphological, optical and electrical properties of the films. The observed experimental features of ultra-thin MoS₂ films indicate the evolution of all properties of such a quasi-two-dimensional material with an increase in the number of atomic layers. In the limit of one - two monolayer thicknesses, the material becomes direct-gap, and optical absorption and photoluminescence at room temperature are due to the generation and recombination of two-dimensional excitons with a binding energy of the order of 0.45 eV. Depending on the deposition regimes, the layers may contain vacancies or an excess of sulfur atoms, leading to the *n*- or *p*-type conductivity, respectively.

АНТИОТРАЖАЮЩИЕ СВОЙСТВА ЧЕРНОГО КРЕМНИЯ, ПОКРЫТОГО ТОНКИМИ ПЛЕНКАМИ ОКСИДОВ МЕТАЛЛОВ МЕТОДОМ АТОМНО-СЛОЕВОГО ОСАЖДЕНИЯ

Г.Е. АЙВАЗЯН^{1*}, М.В. КАТКОВ^{2,3}, М.С. ЛЕБЕДЕВ², В.Р. ШАЯПОВ²,
М.Ю. АФОНИН², Д.Е. ПЕТУХОВА², И.В. ЮШИНА²,
Е.А. МАКСИМОВСКИЙ², А.В. АГАБЕКЯН¹

¹Национальный политехнический университет Армении, Ереван, Армения

²Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск, Россия

³Durban University of Technology, Institute of Systems Science, Durban, South Africa

*e-mail: agagarm@gmail.com

(Поступила в редакцию 02 мая 2021 г.)

Представлены результаты экспериментальных исследований антиотражающих свойств слоев черного кремния (b-Si), покрытых тонкими пленками оксидов металлов TiO₂, HfO₂ и Sc₂O₃ методом атомно-слоевого осаждения (АСО). Показано улучшение антиотражающих свойств b-Si в широком спектральном диапазоне. Исследованные АСО пленки целесообразно использовать в солнечных элементах в качестве эффективного пассивирующего покрытия поверхности b-Si.

1. Введение

Черный кремний (b-Si) или «кремниевая трава» представляет собой игольчатую поверхностную структуру Si [1–3]. Этот тип пористого Si обеспечивает градиентный показатель преломления между поверхностью Si и воздухом, что приводит к низкой отражательной способности и высокому поглощению видимого света [4–6]. Благодаря своим оптическим свойствам b-Si является перспективным материалом при создании фотоэлектрических устройств, в частности, солнечных элементов.

Структурирование поверхности Si может быть выполнено влажным химическим травлением, лазерным текстурированием, плазменной иммерсионной ионной имплантацией или реактивным ионным травлением (Reactive Ion Etching, RIE). Среди перечисленных способов формирование слоя b-Si методом RIE имеет определенные преимущества – это быстрый, надежный и воспроизводимый процесс, не требующий использования технологии маскирования. В отличие от влажного химического травления, RIE оставляет поверхностную наноструктуру свободной от химических загрязнений. Кроме того, RIE может быть использовано для различных типов Si (например,

кристаллического или аморфного) и не зависит от кристаллической ориентации исходных подложек [7].

Несмотря на то, что с помощью b-Si было получено особенно низкое поверхностное отражение, эффективность солнечных элементов на основе этого материала снижается из-за повышенной скорости рекомбинации носителей в силу большой площади поверхности, что приводит к плохим спектральным характеристикам, особенно для коротких длин волн [8]. Уменьшение такой рекомбинации, обычно называемое пассивацией поверхности, достигается за счет комбинированного эффекта – уменьшения состояний ловушек, присутствующих на поверхности, через химическую составляющую пассивации, и уменьшения носителей заряда, доступных для процесса рекомбинации, за счет составляющей полевого эффекта [9]. Кроме того, b-Si подвержен процессам, происходящим во времени: развитая внутренняя поверхность игл имеет тенденцию постепенно окисляться и загрязняться примесями при контакте с воздухом. Недостаточная стабильность структурных и оптических свойств b-Si отрицательно сказывается на работе фотоэлектрических устройств.

Эффективным способом преодоления вышеперечисленных проблем является нанесение тонких пассивирующих пленок на поверхность слоя b-Si [10–12]. Помимо эффективного подавления рекомбинации носителей и защиты от окисления, эти пленки могут дополнительно увеличивать антиотражательную способность, что достигается путем выбора материала с подходящим показателем преломления и регулировки толщины пленки.

Атомно-слоевое осаждение (АСО)/Atomic Layer Deposition (ALD) наиболее полно отвечает требованиям пассивации поверхности планарных и текстурированных Si подложек в силу конформности нанесенных пленок, отсутствия в них пор, а также высокой степени контроля толщины [13]. Кроме того, этот метод можно использовать для осаждения на большой площади и при низкой температуре.

Было показано, что высокая эффективность пассивации слоя b-Si может быть достигнута посредством использования АСО пленок оксида алюминия (Al_2O_3) [14–18]. Однако отрицательный фиксированный заряд, присутствующий в пленках Al_2O_3 , обеспечивает хорошую пассивацию на основе полевого эффекта только для слоев b-Si p-типа и, возможно, на поверхностях p^+ -типа с высоким уровнем легирования. Другие тонкопленочные АСО материалы практически не были исследованы для пассивации слоя b-Si. Между тем, например, диоксид гафния (HfO_2) может служить альтернативой для пассивации слоев b-Si n- и p^+ -типов, так как этот материал имеет положительный связанный заряд на поверхности Si [19]. Таким же кандидатом в качестве пассивирующего материала является диоксид титана (TiO_2), который известен своими фотокаталитическими свойствами и может быть использован для покрытия, самоочищающегося от органических загрязнителей под действием света, что является полезным при

эксплуатации солнечных элементов [20,21]. При этом HfO_2 , TiO_2 и оксид скандия (Sc_2O_3) являются хорошей альтернативой Al_2O_3 в качестве антиотражающего покрытия, способные улучшить свойства b-Si слоев. Эти материалы за счет более высокого показателя преломления позволяют достичь желаемого эффекта снижения коэффициента отражения при использовании пленок меньшей толщины [22].

В работе представлены результаты исследований антиотражающих свойств слоев b-Si, пассивированных тонкими пленками оксидов металлов (TiO_2 , HfO_2 и Sc_2O_3) посредством технологии ALD.

2. Эксперимент

Слой b-Si был сформирован на поверхности подложек монокристаллического Si(100) методом RIE в газовой смеси гексафторида серы (SF_6) и кислорода (O_2) в камере плазменного травления. Детали параметров процесса и описание оборудования приведены в [4,22].

Подготовка подложек со слоями b-Si к осаждению тонких пленок состояла из следующих этапов: (1) кипячение в деионизированной воде; (2) кипячение в смеси растворов $\text{NH}_3\text{:H}_2\text{O}_2\text{:H}_2\text{O}$ (1:1:7); (3) выдерживание в 5% растворе HF в течение 30 с. Подложки промывались деионизированной водой после каждого из этапов. По этой же процедуре готовились Si(100) планарные подложки-спутники для измерения толщины осажденных пленок.

Тонкие пленки оксидов металлов TiO_2 , HfO_2 и Sc_2O_3 наносились методом ACO. В эксперименте использовалась установка PICOSUNTM R-200 Advanced ALD System. Применялся стандартный цикл ACO: импульс паров летучего предшественника металла; продувка реакционной камеры инертным газом (азот чистотой 99.999%); импульс паров источника кислорода; продувка. Циклы ACO повторялись заданное число раз для получения требуемой толщины пленок. Общими параметрами для всех ACO процессов являлись температура реакционной камеры ($T_{\text{dep}} = 300^\circ\text{C}$), температура испарительного контейнера с деионизированной водой ($T_{\text{H}_2\text{O}} = 20^\circ\text{C}$) и время продувки газом-носителем реакционной камеры между импульсами подачи паров предшественников металлов и H_2O (7 с). Используемые предшественники металлов, температура их испарительных контейнеров и длительности импульсов подачи представлены в табл. 1.

На основании наших данных о приросте толщины за один реакционный цикл [23–25], было выбрано число циклов ACO для получения пленок толщиной ~20, 40 и 60 нм, а именно, для HfO_2 – 250, 500 и 750, для Sc_2O_3 – 250, 500, 750 и для TiO_2 – 380, 750 и 1130 циклов соответственно.

Толщина пленок была измерена на подложках-спутниках методом монокроматической нулевой эллипсометрии (эллипсометр ЛЭФ-3М, длина волны $\lambda = 632.8$ нм, угол падения $\phi = 70^\circ$). При решении обратной задачи использована модель однослойной непоглощающей пленки (метод Холмса).

Табл.1. Предшественники металлов, температура их испарительных контейнеров и длительность импульсов подачи

Пленка	Предшественник	$T_{\text{evap}}, ^\circ\text{C}$	$t_{\text{pulse}}, \text{c}$	$t_{\text{H}_2\text{O pulse}}, \text{c}$
HfO ₂	Тетракис-диэтиламидгафния $\text{Hf}[\text{N}(\text{C}_2\text{H}_5)_2]_4$	120	3.0	0.2
Sc ₂ O ₃	Трис-метилциклопентадиенил скандия $\text{Sc}(\text{CH}_3\text{C}_5\text{H}_4)_3$	180	5.0	0.5
TiO ₂	Тетрахлорид титана TiCl_4	25	0.1	0.5

Морфология поперечного сечения структур оксид/b-Si была исследована с помощью сканирующего электронного микроскопа (SEM) JEOL JSM-6700F при напряжении 5 кВ. Измерение оптической отражательной способности поверхности b-Si проводилось на спектрофотометре UV-3101PC с интегрирующей сферой. В качестве эталона отражения использовался BaSO₄.

3. Результаты и обсуждение

На рис.1 представлены результаты исследования морфологии поперечного сечения структур HfO₂/b-Si с пленками разной толщины, а также измеренные зависимости коэффициента отражения R этих структур от длины волны λ . На графиках указаны толщины d оксидных АСО пленок по данным эллипсометрических измерений на подложках-спутниках. Эти же данные были получены для структур Sc₂O₃/b-Si (рис.2) и TiO₂/b-Si (рис.3).

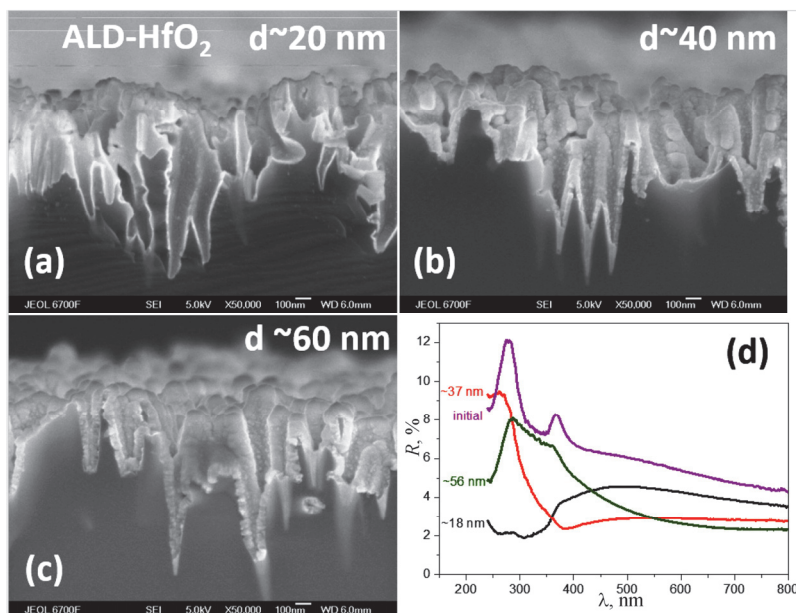


Рис.1. SEM микрофотографии поперечного сечения структур HfO₂/b-Si с пленками разной толщины: (a) – 20 нм, (b) – 40 нм, (c) – 60 нм и (d) – спектры отражения этих же структур.

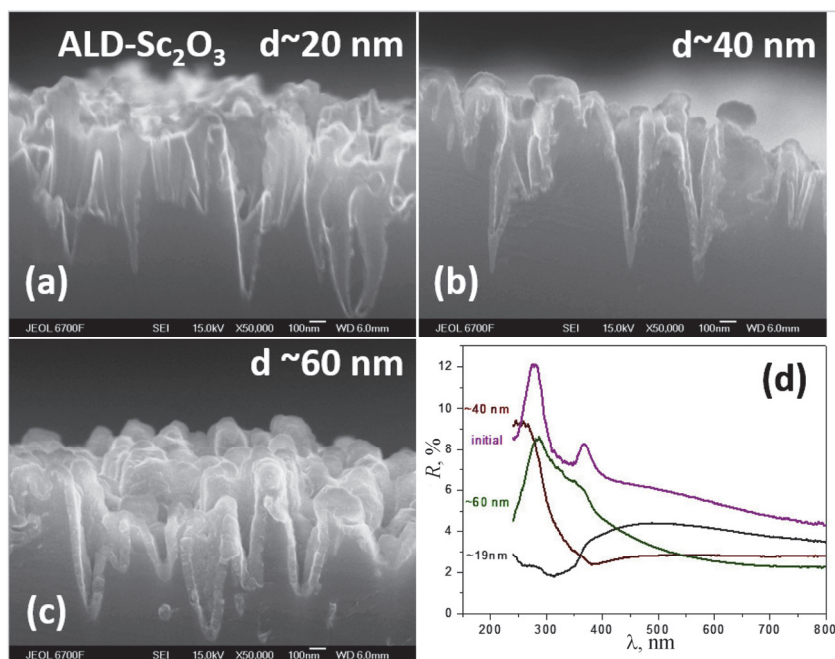


Рис.2. SEM микрофотографии поперечного сечения структур $\text{Sc}_2\text{O}_3/\text{b-Si}$ с пленками разной толщины: (a) – 20 нм, (b) – 40 нм, (c) – 60 нм и (d) – спектры отражения этих же структур.

Из SEM микрофотографий поперечного сечения структур $\text{HfO}_2/\text{b-Si}$ (рис.1а-с) видно, что пленка HfO_2 покрывает поверхность b-Si сплошным слоем высокой степени конформности и равномерности, без пор и проколов. Толщина пленки хорошо соответствует ожидаемым значениям в соответствии с количеством проведенных АСО циклов и совпадает с данными эллипсометрических измерений на подложках-спутниках.

Коэффициент отражения заметно снижается уже при толщине пленки $d \sim 20$ нм (рис.1d). Наибольшее снижение проявляется в УФ области, а в видимом диапазоне спектра, актуальном для солнечной энергетики, R уменьшается на 50%. Увеличение толщины HfO_2 до $d \sim 40$ нм еще более улучшает антиотражающие характеристики структур в видимом диапазоне, и R снижается с 6 до 3%. При этом отражение УФ излучения ($\lambda \sim 250$ нм) от поверхности слоя b-Si без АСО пленки (initial) является близким по значению. Увеличение толщины пленки до $d \sim 60$ нм приводит к ухудшению антиотражающих свойств даже в видимом диапазоне спектра.

Для структур $\text{Sc}_2\text{O}_3/\text{b-Si}$ (рис.2) наблюдается практически та же зависимость коэффициента отражения от толщины, что и для структур с пленкой HfO_2 . Очевидно, это связано с близкими значениями показателей преломления этих оксидов.

Структуры $\text{TiO}_2/\text{b-Si}$ (рис.3) демонстрируют подобные характеристики,

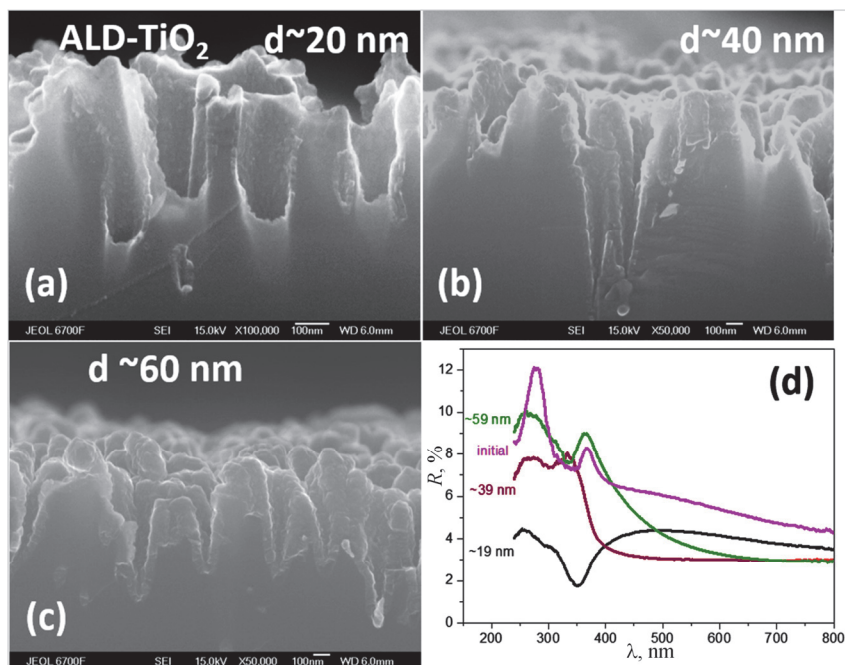


Рис.3. SEM микрофотографии поперечного сечения структур $\text{TiO}_2/\text{b-Si}$ с пленками разной толщины: (a) – 20 нм, (b) – 40 нм, (c) – 60 нм и (d) – спектры отражения этих же структур.

но деградация антиотражающих характеристик после увеличения толщины покрытия до $d \sim 60$ нм проявляется более заметно. В том числе наблюдается даже повышение R в УФ области по сравнению с поверхностью b-Si без АСО пленки.

Для удобства сравнения и оценки влияния толщины пленок на спектры отражения, на рис.4 представлены нормированные на b-Si без АСО пленки зависимости коэффициента отражения R/R_{initial} исследованных структур от длины волны.

Из рис. 4а можно видеть, что при толщине $d = 18\text{--}20$ нм материал пленки практически не влияет на антиотражающие характеристики структур пленка/b-Si. В видимой области R/R_{initial} снижается на 20–30%, а значительное уменьшение достигается лишь при длинах волн $\lambda = 250\text{--}400$ нм. Наблюдается хорошее соответствие с результатами численного моделирования, проведенного нами ранее в [22].

Толщина $d = 38\text{--}41$ нм (рис. 4б) дает максимальный эффект и снижает коэффициент отражения в видимом диапазоне на 40–60% по сравнению с b-Si без АСО пленки, но в УФ области начинает проявляться максимум интерференции, подчиняющийся условию $2dn = (2m + 1)\lambda/2$, где n – показатель преломления и m – целое число с нуля, как и в случае пленки на планарной поверхности. Повышение толщины до $d = 56\text{--}60$ нм приводит к сдвигу данного максимума интерференции уже в видимую область, что наиболее очевидно для пленок TiO_2 ,

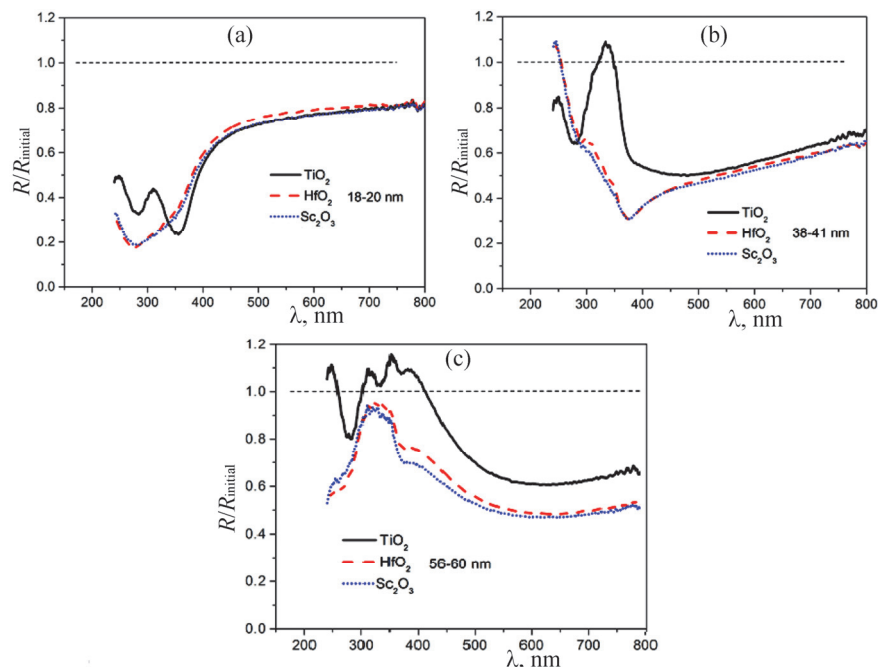


Рис.4. Спектры отражения структур пленка/b-Si, нормированные на b-Si без АСО пленок для разных толщин пленок: (a) – 18–20 нм; (b) – 38–41 нм; (c) – 56–60 нм.

обладающих наибольшим показателем преломления – $n(632.8 \text{ нм}) = 2.41\text{--}2.45$. В этом отношении экспериментальные результаты также коррелируют с результатами численного моделирования [22], где данный эффект обнаруживался только при толщинах пленки $d \sim 100 \text{ нм}$ и более. При этом антиотражающие характеристики TiO_2 незначительно деградировали по сравнению с более тонкими покрытиями. Коэффициент отражения увеличивался, но никогда не достигал значений, демонстрируемых b-Si без АСО пленок.

Для объяснения наблюдаемого явления следует учитывать отличия морфологии модельной структуры пленка/b-Si от структуры, образующейся в реальном процессе осаждения АСО пленок. Эти отличия схематично иллюстрируются на рис.5.

При моделировании спектров отражения по программе Lumerical FDTD Solutions [22], пленка вводится в модель посредством вертикального сдвига поверхности слоя b-Si на величину d_{film} (рис.5a). Рельеф пленки полностью повторяет рельеф слоя b-Si. При этом эффективная толщина пленки в среднем существенно ниже, чем номинально заложенная в модель. Такие пленки формируются при физическом напылении. В то время как при использовании метода АСО формирующаяся пленка не повторяет рельеф поверхности слоя b-Si, а ее поверхность является огибающей (рис.5b). Происходит «схлопывание» растущих навстречу друг другу слоев и сглаживание рельефа. В результате, реальные

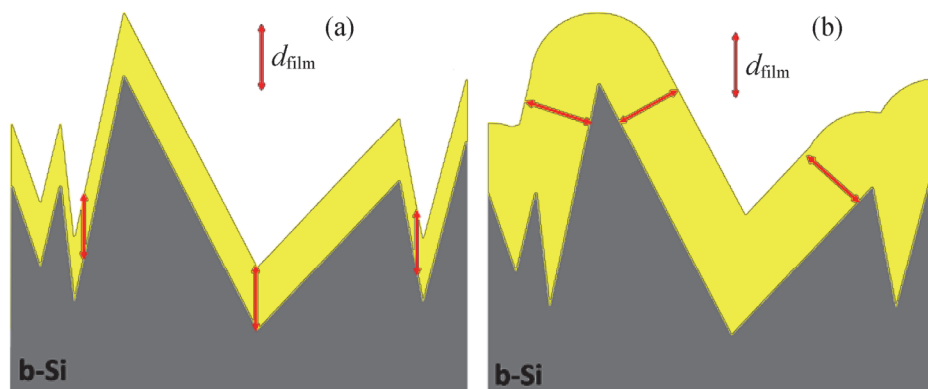


Рис.5. Модельный (а) и реальный (b) схемы морфологий структур пленка/b-Si. d_{film} – величина толщины пленки, используемая при обработки данных.

пленки имеют большую толщину по сравнению с модельными объектами. При малой толщине пленок отклонения от модели не столь значительны, поэтому результаты эксперимента хорошо соответствуют результатам численного моделирования. С увеличением толщины пленок происходит заметное расхождение между модельным и реальным объектами. Это не позволяет напрямую использовать результаты расчетов для количественных оценок коэффициента отражения структур пленка/b-Si с АСО пленками толщиной $d > 40$ нм и требует учета различий морфологии модельной и реальной поверхностей.

4. Заключение

Были изготовлены и исследованы антиотражающие свойства слоев b-Si, покрытых методом АСО тонкими пленками оксидов металлов TiO_2 , HfO_2 и Sc_2O_3 . Показано, что пленки поглощают до 98% падающего света в диапазоне длин волн от 250 нм до 800 нм. Экспериментально продемонстрировано, что исследованные пленки являются хорошими кандидатами в качестве пассивирующего материала, способного существенно улучшить антиотражающие свойства слоев b-Si при оптимальном выборе толщины пленки в наиболее значимой области светового спектра для применения в солнечных элементах. Показаны и объяснены различия в эффективной толщине АСО пленок для модельной и реальной структур.

Работа выполнена в рамках госзадания ИНХ СО РАН (проект FWUZ-2021–0006) и партнерского соглашения о научном сотрудничестве между Национальным политехническим университетом Армении и Институтом неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского отделения Российской АН.

ЛИТЕРАТУРА

1. H.M. Branz, V.E. Yost, S. Ward, B. To, K. Jones, P. Stradins. Appl. Phys. Lett., **94**, 231121 (2009).
2. Y.-T. Lua, A.R. Barronw. Phys. Chem. Chem. Phys., **15**, 9862 (2013).

3. **Z. Fan, D. Cui, Z. Zhang, Z. Zhao, H. Chen, Y. Fan, P. Li, Z. Zhang, C. Xue, S. Yan.** *Nanomaterials*, **11** (41), 1 (2021).
4. **G.Y. Ayvazyan, R.N. Barseghyan, S.A. Minasyan.** *Green Energy and Smart Grids. E3S*, **69**, 01008 (2018).
5. **Z.H. Mkhitarian, V.M. Aroutiounian.** *J. Contemp. Phys.*, **46**, 135 (2011).
6. **L. Jian, T. Zhang, P. Zhang, S. Li.** *Nanoscale Res. Letters.*, **13**, 10 (2018).
7. **M. Steglich, T. Käsebier, M. Zilk, T. Pertsch, E.-B. Kley, A. Tünnermann.** *J. Appl. Phys.*, **116**, 173503 (2014).
8. **P. Repo, A. Haarahiltunen, L. Sainiemi, M. Yli-Koski, H. Talvitie, M.C. Schubert, H. Savin.** *IEEE J. Photovolt.*, **3**(1), 90 (2013).
9. **R.S. Bonilla, P.R. Wilshaw.** *J. Appl. Phys.*, **104**, 232903 (2014).
10. **M. Steglich, A. Bingel, G. Jia, F. Falk.** *Sol. Energy Mater. & Sol. Cells*, **103**, 62 (2012).
11. **A. Leszek, L. Dobrzański, M. Szindler, A. Drygala, M.M. Szindler.** *Central European J. Phys.*, **12** (9) 666 (2014).
12. **I.T.S. Heikkinen, G. Koutsourakis, S. Virtanen, M. Yli-Koski, S. Wood, V. Vähänissi, E. Salmi, F.A. Castro, H. Savin.** *J. Vac. Sci. Technol. A*, **38**, 022401 (2020).
13. **J. Schmidt, F. Werner, B. Veith, D. Zielke, S. Steingrube, P.P. Altermatt, S. Gatz, T. Dullweber, R. Brendel.** *Energy Procedia*, **15**, 30, (2012).
14. **W.C. Wang, C.W. Lin, H.J. Chen, C.W. Chang, J.J. Huang, M.J. Yang, B. Tjahjono, J.J. Huang, W.C. Hsu, M.J. Chen.** *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **5**, 9752 (2013).
15. **E. Calle, P. Ortega, G. Gastrow, I. Martín, H. Savin, R. Alcubilla.** *Energy Procedia*, **92**, 341 (2016).
16. **W.C. Wang, M.-C. Tsai, J. Yang, C. Hsu, M.-J. Chen.** *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **7**, 10228 (2015).
17. **G. Gastrow, R. Alcubilla, P. Ortega, M. Yli-Koski, S. Conesa-Boj, A. Morral, H. Savin.** *Sol. Energy Mater. & Sol. Cells*, **142**, 29 (2015).
18. **H. Savin, P. Repo, G.V. Gastrow, P. Ortega, E. Calle, M. Garin, R. Alcubilla.** *Nat. Nanotechnol.*, **10**, 624 (2015).
19. **X.-Y. Zhang, C.-H. Hsu, S.-Y. Lien, S.-Y. Chen, W. Huang, C.-H. Yang, C.-Y. Kung, W.-Z. Zhu, F.-B. Xiong, X.-G. Meng.** *Nanoscale Res. Lett.*, **12**, 324 (2017).
20. **S. Jana, B.C. Mitra, P. Bera, M. Sikdar, A. Mondal.** *J. Alloys Compd.*, **602**, 42 (2014).
21. **H. Oladipo, C. Garlisi, Kh. Al-Ali, E. Azar, G. Palmisano.** *J. Environ. Chem. Eng.*, **7**, 102980 (2019).
22. **M.V. Katkov, G.Y. Ayvazyan, V.R. Shayapov, M.S. Lebedev.** *J. Contemp. Phys.*, **55**(1), 16 (2020).
23. **I.B. Mishchenko, D.E. Petukhova, M.S. Lebedev.** *Int. Conf. on Micro/Nanotechn. and Electron Dev.*, EDM 2018-July, **8434943**, 26 (2018).
24. **M.S. Lebedev, V.N. Kruchinin, M.Yu. Afonin, I.V. Korolkov, A.A. Saraev, A.A. Gismatulin, V.A. Gritsenko.** *Appl. Surf. Sci.*, **478**, 690 (2019).
25. **M.S. Lebedev, V.N. Kruchinin, M.I. Lebedeva, E.V. Spesivtsev.** *Thin Solid Films*, **642**, 103 (2017).

ԱՏՈՄԱՇԵՐՏԱՅԻՆ ՆՍԵՑՄԱՆ ՄԵԹՈԴՈՎ ՄԵՏԱՂԱԿԱՆ ՕՔՍԻԴԱՆԵՐԻ
ԲԱՐԱԿ ԹԱՂԱՆԹՆԵՐՈՎ ՊԱՏՎԱԾ ՍԵՎ ՍԻԼԻՑԻՈՒՄԻ
ՀԱԿԱԱՆԴՐԱԴԱՐՁՆՈՂ ՀԱՏՎՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԸ

Գ.Ե. ԱՅՎԱԶՅԱՆ, Մ.Վ. ԿԱՏԿՈՎ, Մ.Ս. ԼԵԲԵԴԵՎ, Վ.Ռ. ՇԱՅԱՊՈՎ, Մ. Յ. ԱՖՈՆԻՆ,
Դ.Ե. ՊԵՏՈՒԽՈՎԱ, Ի.Վ. ՅՈՒՇԻՆԱ, Է.Ա. ՄԱԿՍԻՄՈՎՍԿԻ, Ա.Վ. ԱՂԱԲԵԿՅԱՆ

Ներկայացված են ատոմաշերտային նստեցման (Atomic Layer Deposition - ALD) մեթոդով TiO_2 , HfO_2 և Sc_2O_3 մետաղների օքսիդների բարակ թաղանթներով պատված սև սիլիցիումի (b-Si) շերտերի հակաանդրադարձնող հատկությունների փորձարարական ուսումնասիրությունների արդյունքները: Ցույց է տրվել b-Si-ի հակաանդրադարձնող հատկությունների լավացումը սպեկտրային լայն տիրույթում: Հետազոտված ALD թաղանթները նպատակահարմար է կիրառել արևային էլեմենտներում որպես b-Si-ի մակերևույթի արդյունավետ մեկուսացնող ծածկույթ:

ANTI-REFLECTION PROPERTIES OF BLACK SILICON COATED WITH THIN
FILMS OF METAL OXIDES BY ATOMIC LAYER DEPOSITION

G.Y. AYVAZIAN, M.V. KATKOV, M.S. LEBEDEV, V.R. SHAYAPOV,
M.Yu. AFONIN, D.E. PETUKHOVA, I.V. YUSHINA,
E.A. MAKSIMOVSKII, A.V. AGHABEKYAN

The results of experimental studies of the anti-reflection properties of black silicon (b-Si) layers coated with thin films of TiO_2 , HfO_2 , and Sc_2O_3 metal oxides by atomic layer deposition (ALD) are presented. An improvement in the antireflection properties of b-Si in a wide spectral range is shown. It is expedient to use the investigated ALO films in solar cells as an effective passivating coating of the b-Si surface.

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ И ФОТООТКЛИК ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ «УГЛЕРОДНАЯ НАНОПЛЕНКА НА КРЕМНИИ»

Г.А. ДАБАГЯН, Л.А. МАТЕВОСЯН, К.Э. АВДЖЯН*

Институт радиофизики и электроники НАН Армении, Аштарак, Армения

*e-mail: avjyan@gmail.com

(Поступила в редакцию 21 апреля 2021 г.)

Исследованы электрические характеристики и фотоотклик гетероструктуры «углеродная нанопленка на кремнии» полученной методом лазерно-импульсного осаждения, где толщина углеродной нанопленки выбрана из условия максимального просветляющего эффекта подложки. Установлено, что полученный переход выпрямляющий с коэффициентом выпрямления 35 при 1 В. Прямая вольт-амперная характеристика от 0.1 В до 0.35 В удовлетворительно согласуется выражением $J = J_0 \exp(eU/\eta kT)$. Увеличение напряжения в прямом направлении приводит к появлению токов ограниченных объемным зарядом ($J = AU^2$). Линеаризация зависимости $C^{-2} - U$ указывает на резкость распределения примеси в области объемного заряда. Механизм фотоотклика гетероструктуры подобен фотоотклику анизотипных гетероструктур с эффектом «окна». Длинноволновый край (1.1 мкм) fotocувствительности определяется кремниевой подложкой, а поглощение в углеродной нанопленке приводит к дополнительному расширению области fotocувствительности. Гетероструктура обладает равномерной fotocувствительностью на уровне относительного фотоотклика 0.8 в диапазоне длин волн 0.55–1.1 мкм. Коротковолновой хвост достигает до 0.4 мкм.

1. Введение

Для решения некоторых задач в оптоэлектронике требуются фотоприемники с хорошей чувствительностью в широком спектральном диапазоне. Например, такие фотоприемники нужны для проведения спектральных измерений, их потребность обусловлена развитием литографии, астрофизики. Вместе с тем, традиционные кремниевые (Si) диффузионные фотодиоды обладают ярко выраженной неоднородной спектральной характеристикой с максимумом в ближней инфракрасной области спектра. При этом они имеют значительно худшую чувствительность в коротковолновой области видимого диапазона длин волн, что сужает их спектральный диапазон и ограничивает применение. Для расширения спектрального диапазона чаще всего используют инверсионные и поверхностно-барьерные типы фотодиодов. Фотодиоды с инверсионным слоем, формируемым на поверхности подложки непосредственно под окисной плёнкой, обладают

невысокой надежностью, так как при воздействии высокоэнергетическими фотонами коротковолновой части видимого диапазона инверсный слой со временем деградирует. Вторым вариантом фотоэлементов, с барьером Шоттки, фоточувствительная область которого покрыта тонкой полупрозрачной металлической пленкой, характеризуется трудностями в достижении воспроизводимости и контроле формирования тонких металлических пленок. Кроме того, невысокое качество барьера Шоттки может приводить к большим значениям обратного темнового тока. Более интересным, на наш взгляд, является р-п ГС фотоэлемент, который должен быть свободен от указанных недостатков. Во всяком случае, известно, что ГС фотоэлементы имеют некоторые преимущества по сравнению с гомопереходами, обусловленные в первую очередь наличием эффекта «окна», уменьшающего потери, связанные с поверхностной рекомбинацией носителей и с высоким сопротивлением слоя. Во-вторых, при подходящем выборе широкозонной пары п типа для р-Si, можно довольно расширить спектральный диапазон чувствительности перехода. Известно, что для обеспечения перечисленных преимуществ при выборе полупроводниковых пар для гетероструктур существенную роль играют совпадение их кристаллических структур и постоянных решеток [1]. Для Si существует идеальная гетеропара в лице полупроводникового соединения GaP. В работе [2] продемонстрирована возможность получения ГС GaP/Si методом ЛИО. Исследования электрических и фотоэлектрических характеристик полученных переходов указывает на возможность их использования в оптоэлектронике видимого диапазона и солнечной энергетике. Однако, нужно отметить, что несмотря на определенные преимущества ГС фотоэлементов GaP/Si, технологические неудобства (необходимый глубокий вакуум и высокая до 700°C температура эпитаксиального роста, дорогостоящий контроль технологического маршрута изготовления) не позволяют конкурировать с промышленными образцами традиционных кремниевых диффузионных фотоэлементов. По этой причине, поиск как новых материалов для гетеропары с Si, так и технологий изготовления можно считать уместным. В статье в качестве гетеропары для р-Si выбрана углеродная нанопленка (УНП; carbon nano-film (CNF)). Такой выбор, во первых, обоснован тем, что УНП в зависимости от технологических режимов получения могут иметь электронную проводимость и запрещенную энергетическую зону больше чем кремний. Во-вторых, УНП пленки могут пассивировать поверхность кремниевой подложки, тем самым уменьшая поверхностные состояния на гетерогранице. В-третьих, пленки из аморфного углерода (a-C) могут быть использованы в качестве просветляющих покрытий для полупроводниковых структур [3]. И, что важно, С является распространенным материалом как Si. Но, несмотря на очень привлекательные физические свойства различных форм углеродных покрытий, использование таких материалов в функциональной электронике сильно ограничено из-за высокой плотности дефектных состояний, что связано с тем, что они состоят из случайно распределенных наноразмерных sp^2 (алмаз), sp^3 (графитовый) и смешанных кластеров sp^2 и sp^3 . Их успешное применение в основном носит взаимодополняющий характер (например, биосовместимость [4], защита [5] и антиотражающие покрытия [3]). Тем не менее, ранее были изготовлены

гетероструктуры a-C/c-Si для регистрации α -частиц [6] и солнечных элементов [7] с удовлетворительной степенью успеха. Помимо всего этого, современный этап развития электронной техники характеризуется значительным вниманием к УНП и алмазоподобным углеродным пленкам, как к материалу для создания элементной базы быстродействующей и радиационно стойкой электроники. Отметим, что в данной работе УНП была нанесена на подложку p-Si методом лазерно-импульсного осаждения (ЛИО). Метод ЛИО, являющийся разновидностью гибкой и универсальной технологии вакуумного осаждения тонкопленочных структур самого широкого назначения [8–11], основан на использовании физических явлений возникающих при воздействии лазерного излучения на твердые мишени, приводящих к разлету (абляции) вещества из зоны облучения. Методу ЛИО присущи уникальные свойства:

1. возможность испарения практически любых веществ, включая самые тугоплавкие, и конгруэнтного осаждения пленок сложных веществ,
2. возможность испарения практически любых веществ, включая самые тугоплавкие, и конгруэнтного осаждения пленок сложных веществ.

В настоящее время эта технология позволяет получать слои керамических материалов, сегнетоэлектрических веществ, оксидов, сверхпроводников, карбида кремния, нитридов, полупроводников, углерода, алмазоподобного углерода, фуллеренов и полимеров. Однако, применение лазерных технологий в тонкопленочной технологии ограничено лишь мониторингом технологических процессов и скрайбированием полученных структур [12–14]. К применению метода ЛИО особенно не было уделено внимание из-за того, что возможность получения равномерных покрытий на больших площадях при лазерном осаждении материалов слишком ограничено (примерно несколько сантиметров в диаметре). Можно считать, что усовершенствование лазерных технологических установок (в частности сканирование лазерного луча) коренным образом повлияет на возможность удачного применения метода ЛИО. Отметим, что углеродные пленки с высокими (до 85%) связями sp^3 и оптической шириной запрещенной зоны большей, чем у кремния, были получены ранее именно этой технологией [15].

В данной работе подробно исследованы электрические характеристики и фотоотклик изготовленных ГС УНП/p-Si. Также проведены исследования по подавлению отражения видимого диапазона от изготовленной структуры.

2. Детали эксперимента

УНП были получены вакуумным (2×10^{-5} Тор) ЛИО (длительность импульса ~ 30 нс, энергия лазера 0.35 Дж, интенсивность излучения на мишени 6.6×10^8 Вт/см², частота повторения 1 Гц) при комнатной температуре из плоской мишени чистого мелкозернистого изотропного графита (расстояние мишень-подложка – 4 см). В качестве подложки использован высокоомный ($\geq 10^4$ ом см) Si p- типа (толщина 525 мкм, шероховатость – 3 нм, кристаллографическая ориентация – (100)) заводского качества. Подложки предварительно обезжиривались в чистом ацетоне, промывались в бидистиллированной воде и сушились под струей сжатого воздуха. p-Si подложки были подвергнуты кратковременному

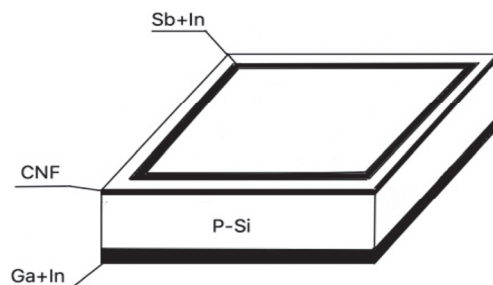


Рис.1. Топология ГС УНП/p-Si.

(20–30 мин) отжигу в вакууме 2×10^{-5} Тор при 100°C перед осаждением УНП. Толщину слоя наносимого одиночным лазерным импульсом определяли путем деления измеренного на SurfTest SJ-410 (Mitutoyo) профиломере относительно толстого слоя на число лазерных импульсов (~ 0.12 нм за импульс).

Для снятия электрических характеристик и фотоотклика проведено осаждение контактов. Обратный контакт с p-Si выполнялся перед нанесением УНП путем термического осаждения галлия с последующим трехчасовым отжигом в вакууме при 350°C . Верхний контакт с УНП получен методом ЛИО сурьмы (Sb). Высокоэнергетические ионы лазерной плазмы Sb имплантируются в УНП на несколько нанометров и улучшают адгезию контакта. Затем полученные контакты были металлизированы термическим осаждением индия (In). Светочувствительная площадь изготовленной структуры составляет $4 \times 4 \text{ мм}^2$. Топология окончательно изготовленных ГС УНП /p-Si представлена на рис.1.

Отметим, что омичность обратного контакта к p-Si проверена двухзондовым методом. На рис.2 приведена ВАХ контакта. Имеет место удовлетворительная линейность контакта.

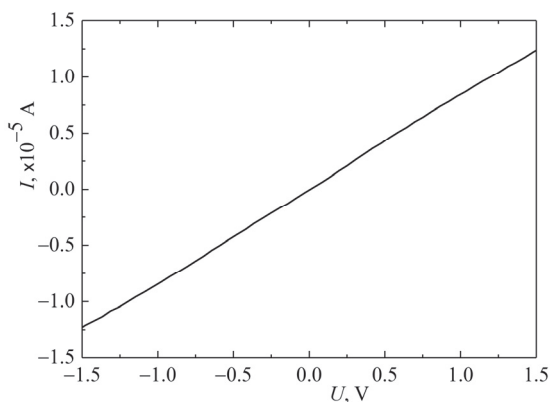


Рис.2. ВАХ обратного контакта к p-Si.

3. Результаты исследований и обсуждения

В этом разделе обобщены основные результаты исследований. Обратим внимание на то, что сначала было оптимизировано отражение от изготовленных структур, а затем были исследованы электрические свойства и свето-

восприимчивость. Интерпретация результатов проводилась путем качественного объяснения, поскольку для полноценного анализа необходимо использовать модель, которая должна учитывать данные реальных значений смещения полос и состояний поверхности раздела. В нашем случае это очень сложная задача, поскольку не существует единой теории, объясняющей физические свойства характеристик аморфных материалов. Основные результаты представленной статьи качественно объяснены на основе имеющихся моделей кристаллических ГС при наличии точного совпадения.

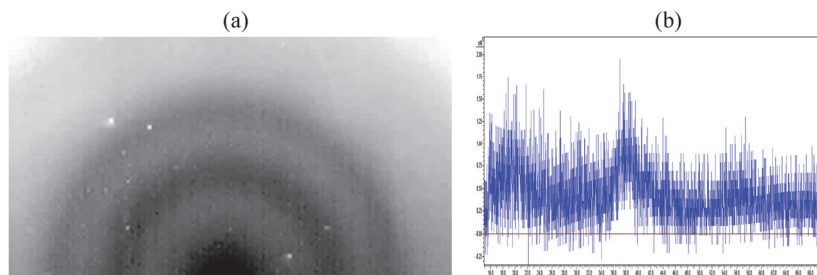


Рис.3. Картины (а) дифракции быстрых электронов и (б) рентгеновской дифракции от УНП с 71 нм толщиной осажденной на p-Si подложку.

Электроннографические и рентгеновские исследования (рис.3) показывают, что осажденные на p-Si подложки УНП имеют аморфную структуру (a-C). Нанесение УНП (≤ 100 нм) не меняют шероховатость подложки (рис.4).

3.1. Подавление отражения видимого света от ГС УНП/p-Si

Очевидно, что подавление отражения видимого света от поверхностей материалов важно для различных структур, таких как светодиоды, солнечные элементы, плоские дисплеи и т. д. Поэтому внимание к разработке технологий и выбора новых материалов для антиотражающих покрытий (АОП) пользуется спросом. Исследования в этой области привели к использованию

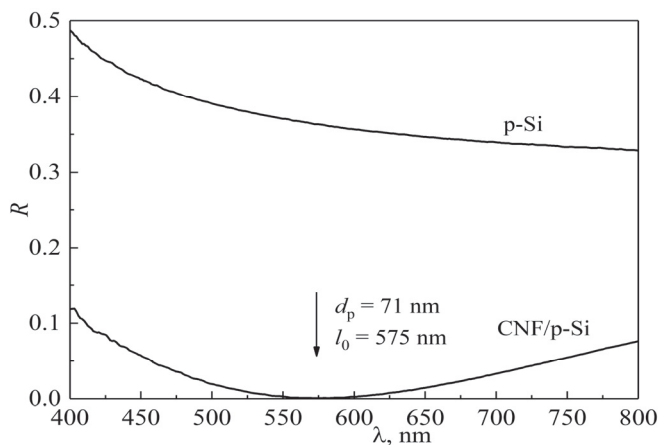


Рис.4. Коэффициент отражения от ГС УНП/p-Si и p-Si.

метаповерхностей (двумерных структур) в качестве промежуточного слоя для АОП видимого света. В частности, была разработана структура АОП на основе слоя серебряных нанодисков толщиной 10 нм (эффективный показатель преломления менее 1.0), что позволило сильно подавить отражение от подложки [16]. Но мы придерживаемся мнения, что однослойный АОП технологически более практичен в случае УНП, так как УНП состоит всего из одного элемента, который имеет возможность изменения показателя преломления и ширины запрещенной зоны в зависимости от технологических условий получения. Мы продолжили исследование возможностей применения УНП в качестве однослойной АОП видимого (0.4–0.75 мкм) света. Отметим, что наличие антиотражающей моды (коэффициент отражения $R \rightarrow 0$ на определенной длине волны $\lambda_0 = 0.575$ мкм (середина видимого диапазона)) обязательно для однослойного АОП.

На основании исследований спектров оптического отражения установлено, что однослойное покрытие УНП эффективно снижает высокое отражение подложки (в среднем до 5% в диапазоне волн 0.4–0.75 мкм). Минимум отражения (0.086%) от структуры УНП/p-Si наблюдается на длине волны $\lambda_0 = 0.575$ мкм (рис. 4). Толщина на рис. 4 есть значение, измеренное на профилометре, которое мало отличается от расчетной толщины 72 нм. Примечательно, что хорошее подавление света достигается только изменением толщины одной из пар ГС - УНП. Это слишком упрощает технологию изготовления светочувствительной структуры.

3.2. Электрические характеристики ГС УНП/p-Si

Исследованы ВАХ и ВЕХ полученной ГС УНП/p-Si при комнатной температуре. Установлено, что полученный переход выпрямляющий с коэффициентом выпрямления (отношение прямого тока к обратному) 35 при 1 В (рис.5а). Установлено также, что прямой ВАХ (+ на p-Si) выше 0.1 В и до 0.35 В удовлетворительно соответствует выражению $J = J_0 \exp(eU/\eta kT)$ (J_0 – плотность тока насыщения, η – коэффициент неидеальности).

Расчет η выполняется из отношения $\eta = \Delta \ln(J)/kTU$ с использованием графических значений ($\eta \approx 3.5$). Такое большое отклонение по сравнению с

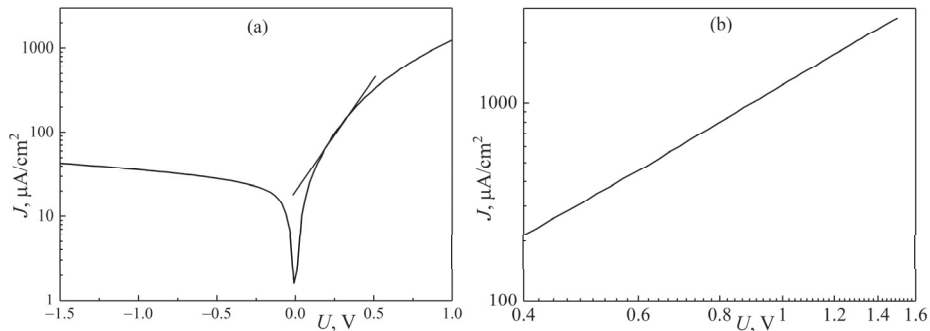


Рис.5. ВАХ ГС УНП/p-Si.

идеальным диодом ($\eta = 1$) объясняется наличием оборванных связей на гетерогранице и дефектами в УНП. Увеличение напряжения в прямом направлении приводит к появлению токов, ограниченных объемным зарядом ($J = AU^2$, рис.5b). Обратный ток перехода не насыщается из-за дефектов высокой плотности в УНП и гетерогранице и изменяется как $J = BU$ при $U > -0.3V$. Эти дефекты приводят к дополнительным каналам тока (например, туннелированию через ловушки), что создает дополнительную составляющую обратного тока. Значение напряжения отсечки по току (контактный потенциал на гетерогранице) составляет 0.65 В.

ВЕХ ГС УНП/p-Si измерены в диапазоне частот 100–500 кГц. На рис.6 показана $C^{-2} - U$ зависимость, измеренного на частоте 200 кГц (+ на p-Si). Линеаризация зависимости $C^{-2} - U$ указывает на резкость распределения примеси в области объемного заряда. Диффузионный барьер, полученный из данных $C^{-2} - U$, равен $V_d = 0.55$ В ($V_d = U_{C \text{ cutoff}} + kT/e$), что, по причине дефектности гетерограницы и УНП, сильно отличается от контактного потенциала на гетерогранице установленной из ВАХ.

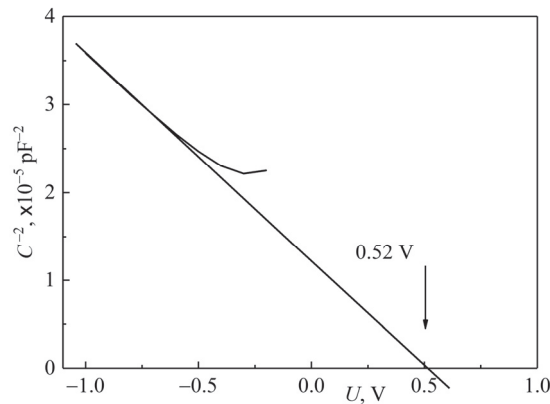


Рис.6. $C^{-2} - U$ зависимость для УНП/p-Si.

3.3. Фотоотклик ГС УНП/p-Si

Широкополосное фотодетектирование занимает центральное место в различных технологических приложениях, включая визуализацию, зондирование и оптическую связь. Ниже мы покажем, что диапазон светочувствительности изготовленной нами структуры шире, чем у обычного Si p-n-перехода.

Фотоотклик ГС УНП/p-Si исследован на стенде (рис. 7), которое состоит из источника света (LS), механического модулятора (ММ; частота вращения 2000 Гц), решеточного монохроматора (М, МДР-3 (СССР; ЛОМО) с рабочими длинами волн 0.2–2 мкм, усилителя, который собран на малошумящей микросхеме АДА 4004-2. В этом же блоке усилителя монтирован синхродетектор (автономное питание усилителя и синхродетектора ± 12.5 В). Синхронизирующий импульс формируется пространственно разделенной оптикой (ОС), между которыми вращается ММ. Метод синхронного детектирования сигнала часто используется

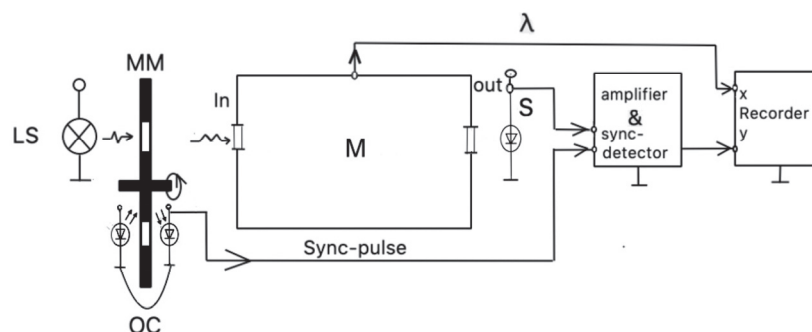


Рис.7. Блок-схема экспериментальной установки регистрации фотоотклика LS-источник света; OC – оптопара; MM – механический модулятор; S – образец, M – решеточный монохроматор.

для обнаружения сигналов с различными типами модуляции – амплитудой, частотой и фазовой.

Широкополосная (0.35–1.1 мкм) лампа ТН1-5РАК использовалась в качестве LS. Эта лампа в основном используется в спектрофотометре F20. Спектр LS модулируется MM и направляются на вход монохроматора. Спектр лампы разбивается на отдельные λ дифракционной решеткой и направляется на выход монохроматора с помощью оптомеханической части с возможностью сканирования. Тестовый образец (S) устанавливается на определенном расстоянии от выхода M. Электрический сигнал с тестового образца поступает на вход усилителя. Выходной сигнал с блока синхродатчика и усилителя подается на Y-вход двухкоординатного самописца. На другой вход (X) поступает λ -сканирование от монохроматора. Запись фотоотклика осуществляется в режиме реального времени.

На рис. 8 показан фотоотклик ГС УНП/p-Si, измеренный при нулевом смещении. Видно, что фотоотклик на уровне 0.8 однороден в спектральном диапазоне 0.55–1.1 мкм и шире, чем у обычного Si p-n-перехода. Хвост фотоотклика достигает 0.4 мкм (уровень 0.1).

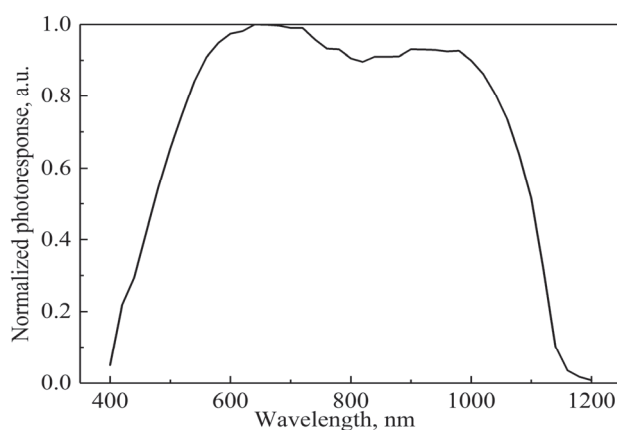


Рис.8. Фотоотклик ГС УНП/p-Si.

Длинноволновый край фоточувствительности связан с подложкой p-Si. Уширение фоточувствительности в коротковолновой части фотоотклика связано с УНП. Если предположить, что УНП обладает свойством полупроводника с оптической щелью больше, чем p-Si, то мы имеем обычный p-n гетеропереход, а экспериментально наблюдаемый фотоотклик связан с эффектом «окна». Со стороны p-Si существует барьер для дырок, генерируемых в УНП с помощью коротких волн, в то время как для электронов барьер отсутствует, и они эффективно собираются на металлическом контакте p-Si. Для дырок, генерируемых длинными волнами в p-Si, барьер со стороны УНП отсутствует, но для электронов он существует, и они снова собираются на металлическом контакте p-Si.

4. Заключение

Широкополосная фоточувствительная ГС УНП/p-Si была изготовлена путем импульсного лазерного осаждения УНП на подложку p-Si, где толщина УНП в 71 нм хорошо подавляет отражение от ГС в среднем до 5% в диапазоне длин волн 0.4–0.75 мкм.

Установлено, что вольтамперная характеристика выполненной структуры является диодной, а диапазон фотоотклика более шире (0.4–1.1 мкм), чем у обычного Si p-n-перехода. Полученные экспериментальные результаты качественно объяснены на основе традиционных моделей кристаллических ГС. Несмотря на то, что электронографические и рентгеновские исследования показывают аморфность УНП, с помощью просвечивающей электронной микроскопии с высоким разрешением уже было экспериментально доказано, что углеродная пленка состоит из нано кристаллического графита и кластеров алмаза [17]. Такие наноструктурированные пленки несут ответственность за новые функции, которые расширяют характеристики материалов и структур. Объяснение соответствия наших результатов общепринятым моделям кристаллических ГС мы связываем с нано кристаллическостью УНП. Кроме того, мы утверждаем, что для изготовления УНП/p-Si использовалась простая технология ЛИО исключая высокотемпературные процессы отжига, диффузии и осаждения, а хорошее подавление света достигается только за счет изменения толщины УНП, которая является гетеропарой ГС. Эти моменты слишком упрощают технологию изготовления светочувствительной структуры. В целом, разработанная технология изготовления как однослойных антиотражающих покрытий, так и фотоприемников методом ЛИО весьма проста и исключает высокотемпературные процессы отжига, диффузии и осаждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. **A.G. Milnes, D.L. Feucht.** Heterojunctions and Metal-Semiconductor Junctions. New York, London: Academic press, 1972, 418 p.
2. **L.S. Lunin, M.L. Lunina, O.V. Devitsky, I.A. Sysoev.** Semiconductors, **51(3)**, 387 (2017).
3. **D.S. Da Silva, A.D.S. Côrtes, M.H. Oliveira Jr., E.F. Motta, G.A. Viana, P.R. Mei, F.C. Marques.** Journal of Applied Physics, **110**, 043510 (2011).

4. **R. Hauert.** Diamond and Related Materials, **12**, 583 (2003).
5. **A.C. Ferrari.** Surface and Coatings Technology, **180-181**, 190 (2004).
6. **K.E. Avjyan, L.A. Matevosyan, K.S. Ohanyan, L.G. Petrosyan.** Instruments and Experimental Techniques, **59(1)**, 60 (2016).
7. **Z.Q. Ma, B.X. Liu.** Solar Energy Materials & Solar Cells, **69**, 339 (2001).
8. **S.V. Gaponov, A.A.Gudkov, E.V. Klunov, M.D. Strikovskij.** Sov. Electronnaja Promishlennost, **5-6**, 110 (1981).
9. **J.C. Miller.** Laser Ablation – Principles and Applications, Berlin: Springer-Verlag, 1994.
10. **R. Eason.** Pulsed Laser Deposition of Thin Films, John Wiley & Sons, 2006.
11. **A.G. Alexanian, N.S. Aramyan, K.E. Avjyan, A.M. Khachatryan, R.P. Grigoryan, A.S. Yeremyan.** Technology of PLD for photodetector materials. in: Combinatorial and High-Throughput Discovery and Optimization of Catalysts and Materials, edited by R.A. Potirailo and W.F. Maier, CRC/Taylor & Francis, 2006.
12. **S. Nakano, T. Matsuoka, S. Kiyama, et al.** Jpn. J. Appl. Phys., **25(12)**, 1936 (1986).
13. **A.D. Compaan, I. Matulionis, S. Nakade.** Opt. Lasers Eng., **34(1)**, 15 (2000).
14. **D. Bäuerle.** Laser Processing and Chemistry. 3rd ed., Berlin: Springer, 2000.
15. **Y. Miyajima, S.J. Henley, G. Adamopoulos, V. Stolojan, E. Garcia-Caurel, B. Drévil-lon, J.M. Shannon, S.R.P. Silva.** Journal of Applied Phys., **105**, 073521 (2009).
16. **H. Yasuda, R. Matsuno, N. Koito, H. Hosoda, T. Tani, M. Naya.** Appl. Phys Lett., **111**, 231105 (2017).
17. **B. Fan, K. Nose, D. Diao, T. Yoshida.** Appl. Surface Science, **273**, 816 (2013).

ELECTRICAL CHARACTERISTICS AND PHOTORESPONSE OF THE "CARBON NANOFILM ON SILICON" HETEROSTRUCTURE

G. A. DABAGHYAN, L.M. MATEVOSYAN, K.E. AVJYAN

The electrical characteristics and photoresponse of the “carbon nanofilm on silicon” heterostructure obtained by pulsed-laser deposition, where the thickness of the carbon nanofilm is selected from the condition of the maximum antireflection effect of the substrate, have been investigated. It was found that the obtained heterostructure is rectifying with a rectifying coefficient of 35 at 1 V. The direct current-voltage characteristic from 0.1 V to 0.35 V is in satisfactory agreement with the expression $J = J_0 \exp(eU/\eta kT)$. An increase in the voltage in the forward direction leads to the appearance of the space charge-limited currents ($J = AU^2$). Linearization of the $C^{-2} - U$ dependence indicates the sharpness of the impurity distribution in the space charge region. The mechanism of the photoresponse of the heterostructure is similar to the photoresponse of anisotype heterostructures with the “window” effect. The long-wavelength edge (1.1 μm) of the photosensitivity is determined by the silicon substrate, and absorption in the carbon nanofilm leads to an additional expansion of the photosensitivity region. The heterostructure has uniform photosensitivity at the level 0.8 of a relative photoresponse in the wavelength range of 0.55–1.1 μm . The short-wavelength tail reaches up to 0.4 μm .

ВЛИЯНИЕ ИНТЕНСИВНОГО ТЕРАГЕРЦЕВОГО ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА НАМАГНИЧЕННОСТЬ ПОЛУПРОВОДНИКОВОГО КВАНТОВОГО КОЛЬЦА

Н.А. МОВСИСЯН, А.Х. МАНАСЕЛЯН*

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

*e-mail: amanasel@ysu.am

(Поступила в редакцию 2 июля 2021 г.)

В работе теоретически исследовано совместное влияние интенсивного лазерного терагерцевого излучения и внешнего однородного магнитного поля на электронные состояния и намагниченность квантового кольца из GaAs. Влияние лазерного поля вычислено в дипольном приближении с использованием унитарного преобразования Крамерса–Хеннебергера. Рассмотрено также влияние температуры на намагниченность квантового кольца. Показано, что с увеличением параметра лазерного поля в кольце наблюдаются необычные колебания Ааронова–Бома. Для фиксированных значений индукции магнитного поля намагниченность кольца может быть как возрастающей, так и уменьшающейся функцией от температуры. Найдены резонансные значения индукции магнитного поля, когда намагниченность с увеличением температуры остается практически постоянной.

1. Введение

Последние достижения в области квантовых наноразмерных структур свидетельствуют, что полупроводниковые квантовые точки (КТ) и квантовые кольца (КК) могут привести к значительным успехам в исследовании новых физических явлений и их практических применений [1,2]. Огромный потенциал таких систем в прикладном приборостроении делает их чрезвычайно интересными исследовательскими объектами как для теоретической, так и для экспериментальной физики. В этом контексте особого внимания заслуживают КК с их двумерной геометрией [2]. Уникальная структура КК позволяет наблюдать некоторые интересные физические явления только в таких системах. Например, недавняя экспериментальная реализация КК с несколькими электронами [3] и наблюдение эффекта Ааронова–Бома (АБ) [4] и незатухающих токов [5] в КК сделали их привлекательными объектами для экспериментальных и теоретических исследований, в которых было продемонстрировано и исследовано несколько новых квантовых эффектов [6,7]. В частности, в некоторых работах показана возможность использования КК в качестве базовых элементов в терагерцевых детекторах, эффективных солнечных элементах, в устройствах памяти, однофотонных излучателях и т.д. [2].

Последние достижения в области лазерных технологий открыли новые возможности для изучения взаимодействия света с материей в различных отраслях физики. Быстрое развитие современных настраиваемых и мощных лазерных источников позволило исследовать поведение носителей заряда в различных полупроводниковых структурах под действием интенсивных лазерных полей (ИЛП), главным образом в терагерцевом частотном диапазоне [8]. Влияние ИЛП с круговой поляризацией на электронные состояния в КК было недавно изучено в [9–13]. Было показано, что ИЛП с круговой поляризацией может создать намагниченность в системе даже без внешнего магнитного поля. Влияние линейно поляризованного ИЛП на электронные состояния и внутризонные оптические характеристики изотропных КК из GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As исследовано в [14]. Авторы показали, что лазерное поле может разрушить цилиндрическую симметрию кольца, а эффективный ограничивающий потенциал, «одетый» лазерным полем, приобретает эллиптическую форму. В работе [15] изучено одновременное воздействие терагерцевого ИЛП и магнитного поля на изотропные и анизотропные КК. Показано, что в случае изотропных КК ИЛП может создавать необычные колебания АБ, которые обычно наблюдаются в анизотропных кольцах, а в случае анизотропных КК линейно поляризованный ИЛП может быть использован в качестве инструмента управления анизотропией, с помощью которого можно демонстрировать как изотропные, так и анизотропные свойства на одном и том же КК. В качестве примера показано, что необычные осцилляции АБ, полученные для эллиптического КК, могут быть преобразованы в обычные с помощью ИЛП. В этом отношении ИЛП может объединить все электронные свойства изотропных и анизотропных колец в единую систему, тем самым обеспечивая упрощенный путь их исследований.

В данной работе представлены результаты исследований совместного воздействия терагерцевого ИЛП и однородного магнитного поля на электронные состояния и намагниченность полупроводникового КК из GaAs. Учтено также влияние температуры на намагниченность КК.

2. Теория

Рассмотрим двумерное изотропное КК круговой симметрии с внутренним радиусом R_1 и внешним радиусом R_2 в нерезонансном интенсивном лазерном поле частоты ν , линейно поляризованным в плоскости КК. Система также находится под воздействием однородного магнитного поля, направленного перпендикулярно плоскости КК (ось z). Запишем зависящий от времени гамильтониан системы в форме [15]:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} (\mathbf{A}(t) + \mathbf{A}_m) \right)^2 + V(x, y), \quad (1)$$

где m – эффективная масса электрона, e – его заряд, $\hat{\mathbf{p}}$ – оператор импульса.

Зависящий от времени векторный потенциал лазерного излучения $\mathbf{A}(t) = \mathbf{e}_x A_0 \cos(2\pi\nu t)$, где $\mathbf{e}_x$ – единичный вектор по направлению оси x , A_0 – его амплитуда. Для векторного потенциала однородного магнитного поля выберем калибровку Ландау: $\mathbf{A}_m = (0, Bx, 0)$, где B – индукция магнитного поля. В этом случае скалярное произведение $(\mathbf{A}(t) \cdot \mathbf{A}_m)$ равно нулю, что упрощает дальнейшие расчёты. Для ограничивающего потенциала КК выберем модель прямоугольной потенциальной ямы конечной глубины:

$$V(x, y) = \begin{cases} 0, & \text{если } R_1 \leq \sqrt{x^2 + y^2} \leq R_2, \\ V_0, & \text{в противном случае.} \end{cases} \quad (2)$$

Для нахождения электронных состояний в КК следует решить соответствующее нестационарное уравнение Шрёдингера

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(x, y, t) = \hat{H} \Phi(x, y, t). \quad (3)$$

В высокочастотном режиме для ИЛП, в дипольном приближении и с помощью унитарного преобразования Крамерса–Хеннебергера [16,17] энергетический спектр электронов и волновые функции в КК при совместном воздействии лазерного и однородного магнитного полей могут быть получены из следующего стационарного уравнения Шрёдингера [15,18]:

$$\left[\frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}_m \right)^2 + V_d(x, y) \right] \Phi_d(x, y) = E_d \Phi_d(x, y), \quad (4)$$

где усредненный по времени и «одетый» лазером эффективный ограничивающий потенциал $V_d(x, y)$ получен с использованием высокочастотного приближения Флоке и имеет вид [14,15,18,19]:

$$\begin{aligned} V_d(x, y) = \frac{V_0}{\pi} Re \left[\pi - \theta(\alpha_0 - x - \Gamma_1) \arccos \left(\frac{\Gamma_1 + x}{\alpha_0} \right) \right. \\ \left. + \theta(\alpha_0 - x - \Gamma_2) \arccos \left(\frac{\Gamma_2 + x}{\alpha_0} \right) - \theta(\alpha_0 + x - \Gamma_1) \arccos \left(\frac{\Gamma_1 - x}{\alpha_0} \right) \right. \\ \left. + \theta(\alpha_0 + x - \Gamma_2) \arccos \left(\frac{\Gamma_2 - x}{\alpha_0} \right) \right]. \end{aligned} \quad (5)$$

Детали расчетов (4) и (5) можно найти в дополнительных материалах [14]. В выражении (5) $\Gamma_i = Re(\sqrt{R_i^2 - y^2})$, $\theta(u)$ – функция единичного скачка Хевисайда, $\alpha_0 = (e^2 I / 2\pi^3 m^2 \epsilon_h^{1/2} c \nu^4)^{1/2}$ – параметр лазерного поля, зависящий от интенсивности ИЛП I , частоты ν и высокочастотной диэлектрической проницаемости ϵ_h . Следует отметить, что I и ν можно выбирать в широком диапазоне в единицах кВт/см² и терагерцах, соответственно [8].

Мы рассчитали собственные значения E_d и собственные функции $\Phi_d(x, y)$ численно, используя метод точной диагонализации. Собственные функции представлены как линейное расширение собственных функций двумерной прямоугольной потенциальной ямы с бесконечно высоким ограничивающим потенциалом и с радиусом $R \gg R_2$ [14,15,19]. В расчетах было использовано 289 базисных состояний, что достаточно для определения собственных значений энергий основного и нескольких низлежащих возбужденных состояний.

При нулевой температуре намагниченность определяется соотношением $M = -\partial E_0 / \partial B$, где E_0 – энергия основного состояния системы [20,21]. В данной работе рассчитана зависимость намагниченности от магнитного поля, с помощью оценки средних значений оператора намагниченности $\hat{m} = -\partial \hat{H} / \partial B$, где $\hat{H}$ – гамильтониан системы с «одетым» лазером потенциалом (4). Далее, средние значения оператора намагниченности $\hat{m}$ найдены с использованием «одетыми» лазером волновых функций системы. Исследована также температурная зависимость намагниченности в соответствии с термодинамической моделью, рассмотренной в [21,22], и вычислена её температурная зависимость по формуле:

$$M = - \sum_i \frac{\partial E_i}{\partial B} e^{-E_i / kT} / \sum_i e^{-E_i / kT}, \quad (6)$$

где частные производные – средние значения оператора $\hat{m}$ для состояния i .

3. Обсуждение результатов

Численные расчёты проведены для КК из GaAs с внутренним и внешним радиусами $R_1 = 5$ нм, $R_2 = 25$ нм и для значений параметров $V_0 = 128$ мэВ, $m = 0.067m_0$ (m_0 – масса свободного электрона) [23].

На рис.1 представлены зависимости энергетических уровней в КК от индукции магнитного поля для трех различных значений параметра лазерного поля α_0 . Без лазерного поля ($\alpha_0 = 0$, рис.1а) наблюдается обычный эффект АБ, соответствующий случаю КК с круговой симметрией. ИЛП в КК создает анизотропию в ограничивающем потенциале, в результате чего эффективная длина ограничения в нижней части потенциальной ямы в КК вдоль оси x уменьшается [15]. Следует отметить, что с увеличением α_0 анизотропия КК усиливается, в результате чего вырождение возбужденных состояний при $B = 0$ исчезает. С увеличением α_0 , из-за уменьшения симметрии системы из C_∞ до C_2 , энергетический спектр делится на пары состояний, которые, в свою очередь, многократно пересекаются друг с другом при увеличении B [15]. Аналогичное поведение уровней энергии, названное необычными осцилляциями АБ, было исследовано в КК ранее другими авторами, и было обусловлено анизотропией эффективной массы [24,25] и структурной неоднородностью в КК [26]. Для $\alpha_0 = 2$ нм, только

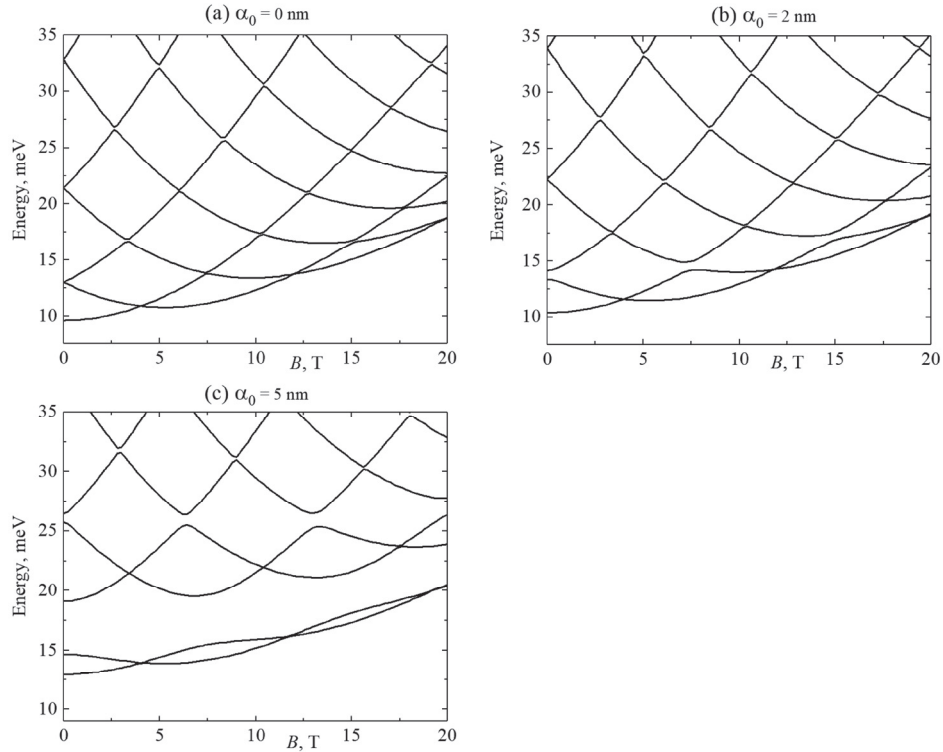


Рис.1. Зависимость низлежащих энергетических уровней КК от индукции магнитного поля для различных значений параметра лазерного поля α_0 .

основное и первое возбужденное состояния чувствуют деформацию потенциала (рис.1b). Аналогично, для больших значений α_0 большее число возбужденных состояний начинают ощущать деформацию ограничивающего потенциала КК (на рис.1c) видны две периодически пересекающиеся пары уровней).

В рис.2 представлены зависимости намагниченности системы от индукции магнитного поля для различных значений температуры (рис.2a–c) и от температуры для различных значений индукции магнитного поля (рис.2d–f). Результаты представлены для трех различных значений параметра лазера α_0 . При нулевой температуре зависимости намагниченности от индукции магнитного поля во всех случаях имеют скачкообразное поведение с несколькими периодическими скачками намагниченности (рис.2a–c, сплошные кривые), что характерно для полупроводниковых КК и является прямым следствием осцилляций АБ в КК. С усилением магнитного поля основное состояние периодически меняется, и после каждого изменения основного состояния значение орбитального квантового числа увеличивается на единицу. Такое изменение углового момента основного состояния проявляется в незатухающих токах и в намагниченности в КК [5]. С повышением температуры основное состояние смешивается с ближайшими возбужденными состояниями, из-за чего меняется населённость уровней электронами. Поэтому следует также рассчитать влияние

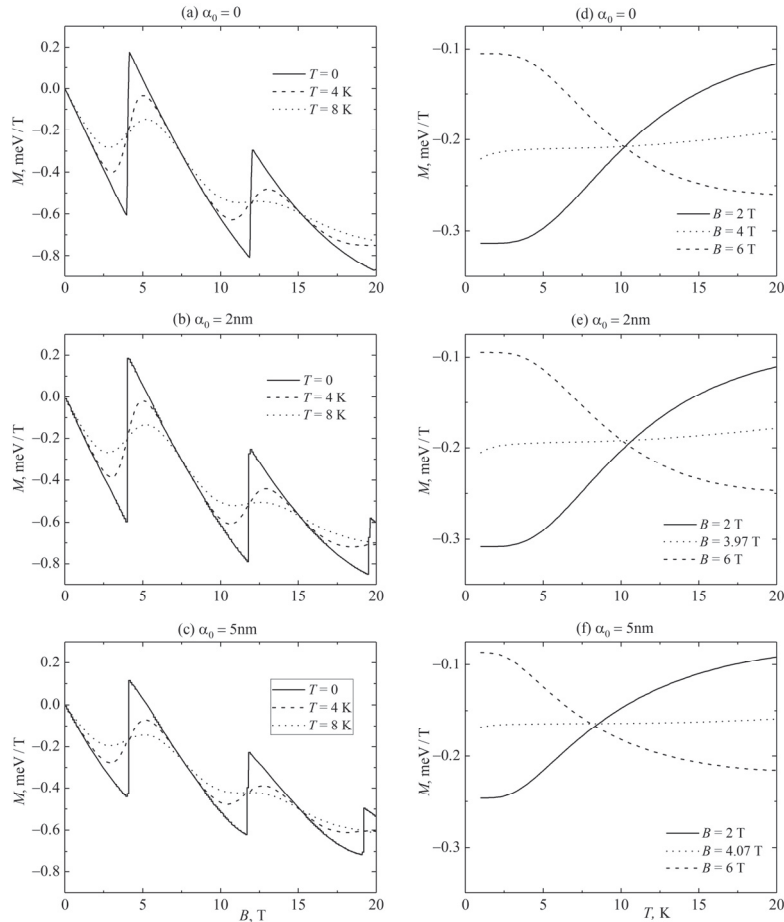


Рис.2. Зависимости намагниченности КК от индукции магнитного поля (а–с) и от температуры (d–f) для различных значений параметра лазерного поля α_0 .

возбужденных состояний на намагниченность системы с помощью формулы (6). В результате, вместо резких скачков наблюдаются гладкие кривые зависимости намагниченности от индукции магнитного поля (рис.2а, пунктирные и точечные линии). С увеличением параметра α_0 , из-за нарушения осевой симметрии КК, первые два состояния энергетически удаляются от остальных и периодически пересекаются друг с другом (рис.1с). В результате все явления, отмеченные на рис.2а, ослабевают.

Для температурных зависимостей намагниченности при фиксированных значениях индукции магнитного поля и лазерного параметра можно наблюдать интересное явление. Для небольших значений магнитного поля, ниже первой точки пересечения энергии (например, при $B = 2$ Т), намагниченность является монотонно возрастающей функцией температуры (рис.2d, сплошная кривая). С другой стороны, для значений магнитного поля выше первой точки пересечения для энергии основного состояния (например, при $B = 6$ Т), намагниченность

является монотонно уменьшающейся функцией температуры (рис.2d, пунктирная кривая). Существуют также несколько резонансных значений индукции магнитного поля, соответствующих точкам пересечения энергии на рис.1, для которых намагниченность остается почти постоянной с увеличением температуры (рис.2d, точечная кривая). С увеличением параметра лазерного поля резонансные значения индукции магнитного поля претерпевают малые изменения.

4. Заключение

Таким образом, в работе исследовано совместное воздействие интенсивного терагерцевого излучения и однородного магнитного поля на электронные состояния и намагниченность полупроводникового КК круговой симметрии из GaAs. Показано, что с увеличением параметра лазерного поля в кольце из-за нарушенной симметрии ограничивающего потенциала кольца наблюдаются необычные колебания Ааронова–Бома, которые, в свою очередь, влияют на намагниченность системы. При нулевой температуре зависимости намагниченности от индукции магнитного поля имеют скачкообразное поведение с несколькими периодическими скачками. Для фиксированных значений магнитного поля намагниченность КК может быть как возрастающей, так и уменьшающейся функцией температуры. Существуют резонансные значения индукции магнитного поля, когда намагниченность с увеличением температуры остается практически постоянной. С увеличением параметра лазерного поля все зависимости намагниченности от индукции магнитного поля и температуры ослабевают.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Комитета по науке РА в рамках научного проекта № 20TTWS-1C014.

Авторы декларируют отсутствие конфликта интересов.

ЛИТЕРАТУРА

1. **T. Chakraborty**. Quantum Dots, Amsterdam: Elsevier, 1999.
2. **V.M. Fomin (ed.)**. Physics of Quantum Rings, Switzerland: Springer, 2018.
3. **A. Lorke et al.**, Phys. Rev. Lett., **84**, 2223 (2000).
4. **Y. Aharonov, D. Bohm**. Phys. Rev., **115**, 485 (1959).
5. **M. Büttiker, Y. Imry, R. Landauer**. Phys. Lett. A, **96**, 365 (1983).
6. **T. Chakraborty**. Advances in Solid State Physics, **43**, 79 (2003).
7. **S. Viefers, P. Koskinen, P. Singha Deo, M. Manninen**, Physica E, **21**, 1 (2004).
8. **S.D. Ganichev, W. Prettl (eds.)**. Intense Terahertz Excitation of Semiconductors. Semiconductor Science and Technology, Oxford: Oxford University Press, 2006.
9. **O.V. Kibis**. Phys. Rev. Lett., **107**, 106802 (2011).
10. **O.V. Kibis, O. Kyrienko, I.A. Shelykh**. Phys. Rev. B, **87**, 245437 (2013).
11. **K.L. Koshelev, V.Yu. Kachorovskii, M. Titov**. Phys. Rev. B, **92**, 235426 (2015).
12. **K.L. Koshelev, V.Yu. Kachorovskii, M. Titov, M.S. Shur**. Phys. Rev. B, **95**, 035418 (2017).

13. **S.O. Potashin, V.Yu. Kachorovskii, M.S. Shur.** Phys. Rev. B, **102**, 085402 (2020).
14. **A. Radu, A.A. Kirakosyan, D. Laroze, H.M. Baghramyan, M.G. Barseghyan.** J. Appl. Phys., **116**, 093101 (2014).
15. **T. Chakraborty, A. Manaselyan, M. Barseghyan, D. Laroze,** Phys. Rev. B, **97**, 041304(R) (2018).
16. **H.A. Kramers.** Collected Scientific Papers, North-Holland, 1956.
17. **W.C. Henneberger.** Phys. Rev. Lett., **21**, 838 (1968).
18. **H.M. Baghramyan, M.G. Barseghyan, A.A. Kirakosyan, J.H. Ojeda, J. Bragard, D. Laroze.** Scientific Reports, **8**, 6145 (2018).
19. **A. Radu, A.A. Kirakosyan, D. Laroze, M.G. Barseghyan.** Semicond. Sci. Technol., **30**, 045006 (2015).
20. **S. Avetisyan, T. Chakraborty, P. Pietiläinen.** Physica E, **81**, 334 (2016).
21. **T. Chakraborty, A. Manaselyan, M. Barseghyan.** J. Phys.: Condens. Matter, **29**, 215301 (2017).
22. **T. Chakraborty, P. Pietiläinen.** Phys. Rev. Lett., **76**, 4018 (1996).
23. **S. Adachi.** Handbook on Physical Properties of Semiconductors Vol. 2, New York: Kluwer Academic Publishers, 2004.
24. **G.O. de Sousa, D.R. da Costa, A. Chaves, G.A. Farais, F.M. Peeters.** Phys. Rev. B, **95**, 205414 (2017).
25. **M.M. Milošević, M. Tadić, F.M. Peeters.** Nanotechnology, **19**, 455401 (2008).
26. **J. Planeles, F. Rajadell, J.I. Climente.** Nanotechnology, **18**, 375402 (2007).

THE EFFECT OF INTENSE TERAHERTZ LASER RADIATION ON MAGNETIZATION OF SEMICONDUCTOR QUANTUM RING

N.H. MOVSISYAN, A.KH. MANASELYAN

In this paper the combined effect of intense terahertz laser radiation and external homogeneous magnetic field on electron states and magnetization of GaAs quantum ring is investigated theoretically. The effect of laser field is calculated using the dipole approximation and Kramers–Henneberger unitary transformation. The temperature effect on magnetization of the system is also considered. It is shown that with the increase of laser field parameter the unusual Aharonov–Bohm oscillations can be observed in the ring. For constant values of magnetic field, the magnetization can be as increasing, as well as decreasing function of temperature. There are some resonant values of magnetic field, for which the magnetization of the ring remains almost constant with the increase of temperature.

ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ ГРАФЕНОВЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК И УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК СИНТЕЗИРОВАННЫХ В КОЛЛОИДНОМ РАСТВОРЕ

Н.Б. МАРГАРЯН^{1,2*}, Н.Э. КОКАНЯН^{3,4}, Э.П. КОКАНЯН^{5,6}

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

²Национальный политехнический университет Армении, Ереван, Армения

³Университет Лорена, лаборатория Mate'riaux Optiques,
Photonique et Systeme's, Франция.

⁴Лаборатория Mate'riaux Optiques, Photonique et Systeme's, CentraleSupe'lec,
Университет Paris-Saclay, Франция

⁵Армянский государственный педагогический университет
имени Хачатура Абовяна, Ереван, Армения

⁶Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак, Армения

*e-mail: n.margaryan@yerphi.am

(Поступила в редакцию 25 мая 2021 г.)

В данной работе описывается простой и эффективный метод синтеза углеродных нанотрубок и графеновых квантовых точек. Атомносиловым и сканирующим электронным микроскопами изучены топологические свойства этих наноструктур. Потенциал квантовых точек исследован методом зонда Кельвина. Для изучения образовавшихся связей и для детального структурного анализа проводится спектроскопия рамановского рассеяния. Другие самоорганизованные структуры на основе графена также выявлены с помощью рамановской спектроскопии. Кроме того, влияние рассеяния на продольных фононах на рамановский спектр также рассматривается в данной работе.

1. Введение

Как известно, графен представляет собой слой атомной толщины sp^2 -гибридизованных атомов углерода. В основном благодаря sp^2 гибридизации атомов и соответствующих сильным химическим, так называемым σ -связям, графеновые наноструктуры обладают уникальными физическими свойствами и огромным потенциалом применения [1–6]. И поэтому они вызвали большой интерес в науке и технике. Получение графеновых слоев, углеродных нанотрубок (УНТ) и графеновых квантовых точек (ГКТ) наиболее эффективным методом является целью многих исследовательских групп [7–12]. В мире используются разные методы для синтеза графена. В последнее десятилетие активно развиваются методы, основанные на отслоения графита. В свою очередь, отслоение в разных

жидкостях (так называемое, расщепление в жидкой фазе), как простой и эффективный метод, выделяется среди других методов [1,13,14]. Основными преимуществами этого метода являются большая площадь поверхности полученных слоев графена, простота синтеза и осаждения на подложку, комнатные условия (температура и давление), а также недорогое стоимость эксперимента и производства. Этим методом получают не только целостные слои графена, но и углеродные нанотрубки и графеновые квантовые точки. Эти углеродные наноструктуры применяются в различных сенсорах, в изображении и исследовании биологических клеток, в квантовой информатике и других областях инженерии. Поэтому очень важно изучить их физические свойства и связанные с ними физические явления. В настоящее время существует много статей, посвященных изучению физических свойств УНТ и ГКТ. В частности, в работах [7–12,15,16] представлены разные методы синтеза УНТ и ГКТ разных геометрических форм. В них геометрические особенности УНТ и ГКТ были выявлены с помощью атомно-силовой микроскопии (АСМ) и сканирующей электронной микроскопии (СЭМ). С другой стороны, если углеродные наноструктуры получены путем самоорганизации, то они имеют фрактальную форму [17]. Фрактальный характер графеновых квантовых точек и некоторые физические явления в этих структурах, такие как квантовый эффект Холла, обсуждаются в различных статьях [18]. Но главным показателем графена и графеновых наноструктур, как отпечаток пальцев для людей, является спектр комбинационного рассеяния (Рамановский спектр). Рамановская спектроскопия УНТ и ГКТ обсуждаются в статьях [19–21]. В свою очередь, в публикации нашей группы [1] представлены синтез и физические свойства фрактальных графеновых слоев, полученных методом отслаивания в жидкой фазе и самоорганизации на поверхности соответствующего раствора. Но при синтезе этих графеновых слоев, путем самоорганизации также получают и другие низко-размерные структуры на основе графена. В данной работе, обсуждаются синтез и спектроскопия углеродных нанотрубок и квантовых точек, полученных в коллоидном растворе.

2. Описание эксперимента

Как известно, высоко ориентированный пиролитический графит (ВОПГ) состоит из слоев графена, связанные друг с другом с хрупкими химическими связями (π -связи). И в эксперименте порошок такого графита используется в качестве источника частиц для отслаивания. В основном процесс синтеза состоит из двух этапов. В первую очередь, графитовый порошок отслаивается в соответствующем растворе. Чтобы способствовать отслаиванию графита, в процессе синтеза используются ультразвуковые волны с частотой 40 кГц и с мощностью 55 Вт. Эти волны вызывают вращательную деформацию между слоями графита. Впоследствии хрупкие π -связи разрушаются и слои графита отделяются друг от друга. Отслаиванию графита также способствует и наличие растворителя. Таким образом, образуется коллоидный раствор, содержащий хлопья графена. Затем,

путем самоорганизации, формируются целостные слои графена, углеродные нанотрубки и графеновые квантовые точки. Дела в том, что хлопья графена супергидрофобные и отталкиваются от водяных молекул. Благодаря своей гидрофобной природе и под воздействием ультразвуковых волн графеновые хлопья объединяются и образуют графеновые слои с довольно большой поверхностью. Процесс формирования и физические свойства плоских и целостных графеновых слоев подробно обсуждаются в работе [1]. Но кроме упомянутых слоев, при определенных условиях, получают графеновые слои, имеющие параллельные трубчатые складки с определенным порядком. Эти слои и складки на них самоорганизуются и обладают фрактальными симметриями. С другой стороны, некоторые графеновые хлопья, соединенные с другими хлопьями, скручиваются в жидкости и образуют углеродные нанотрубки. Это случается, поскольку супергидрофобные атомы графена избегают от водяных молекул и тянутся друг к другу. Но, а графеновые хлопья, не соединенные с другими, скручиваются и формируют хаотично распределенные графеновые квантовые точки.

3. Исследования топологии и потенциала

В последние годы атомно-силовая микроскопия (АСМ) широко используется в качестве хорошего метода для изучения геометрических форм наноструктур. Для АСМ-анализа графеновые квантовые точки из раствора переносятся на кремниевую подложку полированного до 14 проба. Но все же, может возникнуть проблема идентификации, поскольку поверхность подложки может быть гранулированным и ГКТ могут приниматься как гранулы поверхности подложки. Для решения этой проблемы, параллельно топологии также измеряется поверхностный потенциал методом зонда Кельвина. Метод основан на измерении работы выхода. Для данной поверхности работы выхода определяется разностью $A = -e\phi - E_F$, где e – заряд электрона, ϕ – электростатический потенциал в вакууме вблизи поверхности, а E_F – уровень Ферми (электрохимический потенциал электронов) внутри материала. Член $-e\phi$ – это энергия покоя электрона в вакууме вблизи поверхности. Когда на материал подается напряжение, электростатический потенциал ϕ , создаваемый в вакууме, будет определенно ниже приложенного напряжения. Причем, эта разница зависит от работы выхода поверхности материала. Метод зонда Кельвина основан на обнаружения напряжения между образцом и зондом: $e\Delta V = A_s - A_p$, где A_s и A_p являются работами выхода материалов образца и зонда соответственно [22]. Таким образом, измерения методом зонда Кельвина упрощают идентификацию квантовых точек.

Как показано на Рис.1, все углеродные нано и микрообъекты представляют собой потенциальные ямы по отношению к кремниевой подложке. Более того, глубина потенциальных ям достигают до -400 мВ, что типично для графеновых структур [23].

Атомно-силовая микроскопия также используются для изучения геометрических форм хаотических расположенных углеродных нанотрубок. Но очень

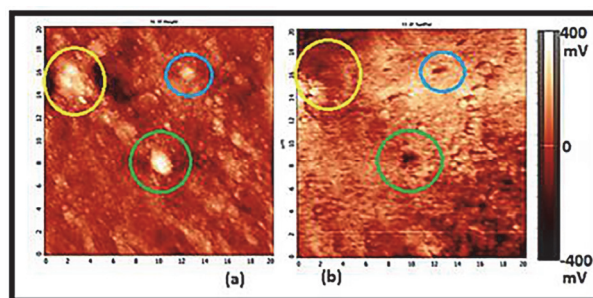


Рис.1. (а) АСМ изображение и (б) измерение потенциала углеродных квантовых точек.

часто эти изображения получают искаженными (Рис.2), потому, что когда нанотрубки пересекаются, зонд атомно-силового микроскопа взаимодействует (силами Ван-дер-Ваальса) с обоими нанотрубками и не может различить их. А поскольку упомянутые нанотрубки расположены хаотично, то такие пересечения не редкость. В таком случае, как альтернативный и более эффективный метод для изучения топологии, была использована сканирующая электронная микроскопия. Используя СЭМ, мы изучили поверхностную топологию графеновых пленок, имевшихся трубчатые складки (Рис.3). Как показывает СЭМ изображение, углеродные нанотрубки хаотично расположены в пространстве между складками. А также следует, что между двумя складками периодически находятся более мелкие складки и так дальше.

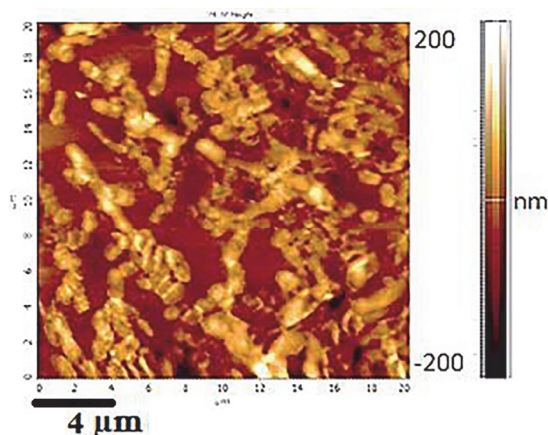


Рис.2. АСМ изображение УНТ.

4. Рамановская спектроскопия

Одним из наилучших методов структурного анализа и оценки уровня дефектов для графена и углеродных нанотрубок является рамановская спектроскопия. В наших исследованиях используется рамановский спектрометр с лазером возбуждения с длиной волны 532 нм. Поскольку спектры рамановского рассеяния для плоских графеновых слоев, полученных в нашем эксперименте, уже

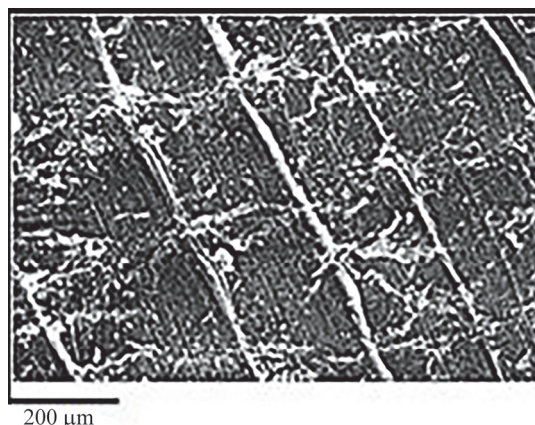


Рис.3. СЭМ изображение УНТ между складками графеновой пленки.

представлены в работе [1], в этой работе мы обсудим рамановский спектр образца представленного на рис.3.

Как видно, этот образец содержит складки и нанотрубки. Наличие упомянутых структур также выражено на спектре рамановского рассеяния. В частности, пик, расположенный примерно в 230 см^{-1} , указывает на присутствие углеродных нанотрубок [11,19,21]. Оно также известно как радиально дышащая мода (radial breathing mode), поскольку с расширением и укорочением радиуса нанотрубки. Точное местоположение этого пика зависит от радиуса нанотрубки. Если обсуждаемый пик типичен для углеродных нанотрубок, то сравнительно интенсивный пик расположенный на 1000 см^{-1} не типичен для графеновых наноструктур. Такие пики встречаются в спектрах рамановского рассеяния само собранных полимеров и углеродных колец [24]. Соответствуют они вибрациям атомов углерода большого количества и построенных кольцеобразно. Эти структуры являются планарными и называются ароматическими кольцами углерода. Их тоже называют дышащими, поскольку радиус кольца периодически изменяется в ходе вибрацией атомов. Интенсивность пика значительно превосходит интенсивность пиков G и 2D, которые соответствуют углеродным C=C связям и sp^2 гибридизованных атомов и расположены на 1585 см^{-1} и 2700 см^{-1} , соответственно. На 2950 см^{-1} находится пик, форма и местоположение которого типично для связей атомов углерода и водорода (C-H связи) [25]. Наличие таких связей объясняется тем, что изучаемая структура синтезирована в раствор воды и ацетона. По сравнению с C=C связями, C-H связи смещены в сторону высоких частот, поскольку атомы водорода 12 раз легче атомов углерода. А в свою очередь, энергетические уровни вибрацией зависят от массы согласно формуле

$$E_n = h \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}},$$

где n – это квантовое число, m – масса, k – коэффициент квазиупругости системы, а h – постоянная Планка.

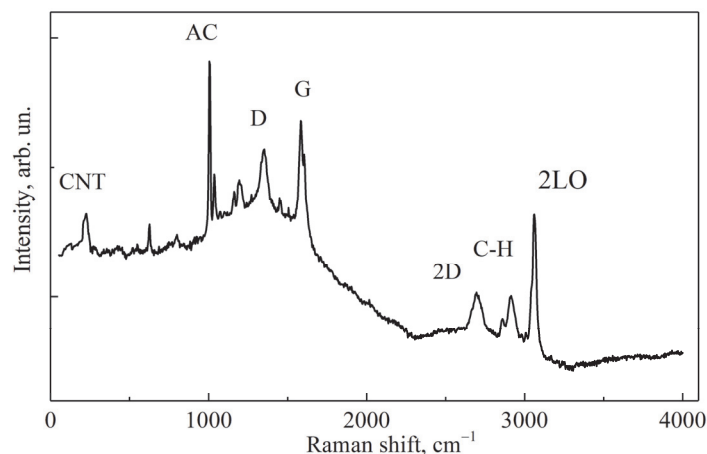


Рис.4. Рамановский спектор графеновой структуры с складками и нанотрубками.

Другой интенсивный пик размещен на приблизительно 3230 см^{-1} и на рис.4 упомянут как 2LO пик. Этот пик связан с рассеянием фотонов света на продольных оптических фононах. Такие частотные моды были замечены и на спектрах рамановского рассеяния целостных графеновых слоев [1,26], но сравнительно с малым интенсивностью.

5. Заключение

Таким образом, получены углеродные нанотрубки, графеновые квантовые точки и графеновые слои с трубчатыми, периодичными складками простым, низкотемпературным (комнатная температура) методом, на основе процессов жидко-фазового отслоения и самоорганизации. Геометрические формы и распределение этих наноструктур изучены с использованием микроскопов АСМ и СЭМ. Как следует из результатов между линейными, непрерывными складками, по принципу само подобия (или фрактальности) находятся складки с более маленьким радиусом и так далее. А между складками находятся углеродные нанотрубки, которые оказались там, изолировавшись с водяных молекул. Измерения потенциала методом зонда Кельвина показывают, что все графеновые квантовые точки являются потенциальными ямами по сравнению кремневой подложкой. На спектре рамановской спектроскопии есть пики, которые доказывают наличия углеродных нанотубок и так называемых ароматических углеродных колец, сформированных путём самоорганизации. Спектр так же содержит пик характерный для углеводных связей. Сильно выраженный пик в области $3225\text{--}325\text{ см}^{-1}$ показывает, что механизм рассеяния на продольных оптических фононах вносит существенный вклад в процесс общего рассеяния.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Государственного комитета по науке МОНКС РА в рамках научного проекта № 18Т-1С271.

ЛИТЕРАТУРА

1. **N.B. Margaryan, N.E. Kokanyan, E.P. Kokanyan.** Journal of Saudi Chemical Society, **23**, 13 (2019).
2. **I. Levchenko, S. Xu, G. Teel, D. Mariotti, M.L.R. Walker, M. Keidar.** Nat. Commun., **9**, art. numb. 879 (2018).
3. **J. Chen, C. Li, G. Shi.** Phys. Chem. Lett., **4**, 1244 (2013).
4. **I. Levchenko, K. Bazaka, Y. Ding, et al.** Appl. Phys. Rev., **5**, 011104 (2018).
5. **F. Perrozzi, S. Prezioso, L. Ottaviano.** J. Phys.: Condens. Matter, **27**, 013002 (2014).
6. **L.A. Ponomarenko, F. Schedin, M.I. Katsnelson, et. al.** Science, **320**, 356 (2008).
7. **K. Geim, K.S. Novoselov,** Nat. Mater., **6**, 183 (2007).
8. **M.Y. Han, B. Ozyilmaz, Y. Zhang, P. Kim.** Phys. Rev. Lett., **98**, 206805 (2007).
9. **D. Pan, J. Zhang, Z. Li, M. Wu.** Adv. Mater., **22**, 734 (2010).
10. **W. Qian, T. Liu, F. Wei, H. Yuan.** Carbon, **41**, 1851 (2003).
11. **M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, R. Saito, A. Jorio.** Phys. Rep., **409**, 47 (2005).
12. **J. Zhao, M. Shaygan, J. Eckert, M. Meyyappan, M.H. Rummeli.** Nano Lett., **14**, 306 (2014).
13. **S. Haar, M. Bruna, J.X. Lian.** J. Phys. Chem. Lett., **7**, 2714 (2016).
14. **A.S. Pavlova, E.A. Obraztsova.** J. Nanophotonics, **10**(1), 012525 (2016).
15. **J. Chen et al.** FlatChem, **5**, 25 (2017).
16. **K. Safarova, A. Dvorak, R. Kubinek, M.Vujtek, A. Rek.** Modern Research and Educational Topics in Microscopy, 513, Formatex, 2007.
17. **N. Margaryan.** J. Phys. Sci. Appl., **7**(2), 46 (2017).
18. **M. Massicotte et al.** Nanotechnology, **24**, 325601 (2013).
19. **S. Costa, E. Borowiak-Palen, M. Kruszyńska, A. Bachmatiuk, R.J. Kaleńczuk.** Materials Science Poland, **26**(2), 433 (2008).
20. **J. Wu, P. Wang, F. Wang, Y. Fang.** Nanomaterials **8**, 864 (2018).
21. **L. Bokobza, J. Zhang.** eXPRESS Polymer Letters, **6**(7), 601 (2012).
22. **N. Lang, W. Kohn.** Physical Review B, **3**(4), 1215 (1971).
23. **A. Nazarov et al.** Phys. Status Solidi C, **10** (7–8), 1172 (2013).
24. **R. Arenal, A.C.Y. Liu.** Appl. Phys. Lett., **91**, 211903 (2007).
25. **J.L. Koenig.** Analytical Chemistry, **65**(1), 207 (1999).
26. **A. Niilisk et al.** Carbon, **98**, 658 (2016).

INVESTIGATION OF PROPERTIES OF GRAPHENE QUANTUM DOTS AND CARBON NANOTUBES SYNTHESIZED IN A COLLOID SOLUTION

N.B. MARGARYAN, N.E. KOKANYAN, E.P. KOKANYAN

In this paper a simple and effective method for the synthesis of carbon nanotubes, graphene based quantum dots is described. The topological properties of these nanostructures are studied by atomic force and scanning electron microscopes. The potential of quantum dots is investigated by the Kelvin probe method. To study the formed bonds and for a detailed structural analysis, Raman spectroscopy is performed. Other self-organized structures based on graphene are also disclosed using Raman spectroscopy. The effect of photon-phonon scattering on the Raman scattering spectrum is discussed.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ МОЛЕКУЛ ВОДЫ С ДВУМЕРНЫМ ДИОКСИДОМ ОЛОВА

А.А. УНАНЯН*

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

*e-mail: areg.hunanyan.ah@gmail.com

(Поступила в редакцию 19 июня 2021 г.)

Двумерный диоксид олова – перспективный материал, на основе которого создаются газовые сенсоры. В работе методом первых принципов исследовано взаимодействие молекул воды с двумерным диоксидом олова. Для различных адсорбционных структур рассчитаны энергии адсорбции, перенос заряда, плотность состояний и функция локализации электронов (ELF). В результате расчетов показано, что при взаимодействии молекул воды и двумерного диоксида олова, имеет место не химическая, а физическая адсорбция.

1. Введение

Диоксид олова (SnO_2) – металлооксидный полупроводник n-типа с широкой прямой запрещенной зоной 3.6 эВ при 300 К. SnO_2 интересен для различных применений из-за своей высокой химической и термодинамической стабильности, оптической прозрачности и других свойств [1]. SnO_2 применяется в различных областях, таких как газовые сенсоры [2], солнечные батареи [3], суперконденсаторы [4], литий-ионные батареи [5] и т.д. В частности, SnO_2 применяется в области газовых сенсоров из-за высокой химической чувствительности, низкой цены и быстрого газового отклика на газ [6–8]. Сегодня спрос на более чувствительные и селективные сенсоры растет. Параметры газовых сенсоров могут быть значительно улучшены за счет уменьшения размерности материала, что приводит к изменению его физических свойств. В частности, двумерные (2D) материалы имеют большое преимущество при применении в газовых сенсорах, потому что тонкие 2D-листы имеют большое отношение поверхности к объему и количество активных центров [9, 10]. В литературе по 2D SnO_2 имеется несколько работ, где теоретически описаны его свойства [11]. Кроме того экспериментально получены структуры с несколькими слоями SnO_2 [12].

Вода и водород являются наиболее распространенными материалами в окружении человека. Они оказывают огромное влияние на характеристики газовых сенсоров. Из экспериментальных и теоретических работ известно, что вода имеет тенденцию к диссоциации на поверхности объемного SnO_2 (110) [13]. В

данной работе изучен механизм адсорбции молекулы воды на 2D SnO₂ при помощи теории функционала плотности.

2. Теории и методы расчетов

Структурные и электронные свойства были исследованы с использованием первых принципов на основе теории функционала плотности [14,15]. Расчеты проводились с помощью программного пакета Vienna ab initio simulation package (VASP [16, 17]). Для структурной оптимизации используется функционал обменно-корреляционного обобщённого градиентного приближения (GGA), предложенного Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) [18]. Для расчетов мы выбрали 4×4×1 суперячейку, которая состоит из 48 атомов, после чего был сделан расчет сходимости граничной энергии и *k*-точек. В результате для интегрирования в обратном пространстве использовалась схема Г-центрированного Monkhorst-Pack [19] с сеткой 3×3×1 *k*-точек зоны Бриллюэна, а граничная энергия была выбрана 600eV.

Энергия адсорбции E_{ads} рассчитывается по следующей формуле:

$$E_{\text{ads}} = E_{\text{system}} - E_{2\text{D}} - E_{\text{molecule}}.$$

Здесь E_{system} – полная энергия системы с молекулами H₂O и 2D SnO₂, $E_{2\text{D}}$ – полная энергия 2D материала, а E_{molecule} – полная энергия молекулы.

Для изучения связей и вида адсорбции были рассчитаны функции локализации электронов, плотность состояний и был сделан Bader - анализ носителей заряда [20,21]. Кристаллические структуры были визуализировали с помощью программного обеспечения VESTA [22].

3. Обсуждение результатов

Прежде чем исследовать адсорбцию мы провели оптимизацию структуры. 2D SnO₂ имеет гексагональную (honeycomb) структуру (Рис.1), он принадлежит к тригональной кристаллической системе и имеет симметрию $\bar{R}3m1$ (пространственная группа № 164). Параметры кристаллической решетки и координат атомов приведены в таблице 1.

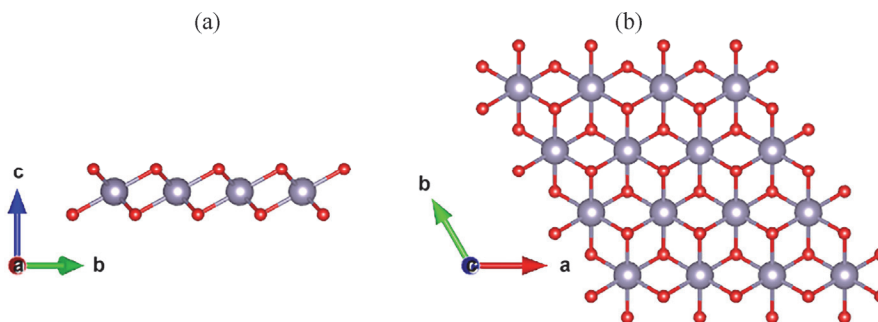


Рис.1. Структура 2D SnO₂, вид сбоку и сверху

Табл.1. Параметры кристаллической решетки 2D SnO₂

Кристаллическая система	a, Å	b, Å	c, Å	α	β	γ	Атомные дробные координаты
Тригональная	3.225	3.225	20.0	90.0	90.0	119.99	Sn (0.166 0.166, 0.500) O (0.500,0.833,0.550), (0.833, 0.500, 0.449)

Для суперячейки были выбраны несколько возможных адсорбционных центров. Мы выбрали две ориентации молекулы - при первом положении ближе к точке находится атом водорода, а при втором положении атом кислорода. Молекула была расположена над атомами Sn, O, а также в промежуточных двух точках (см. положения M1, M2 на рис.2). Расстояние между молекулой и центрами приблизительно равно 1.9–2.7 Å. Наименьшая энергия адсорбции получена в по-

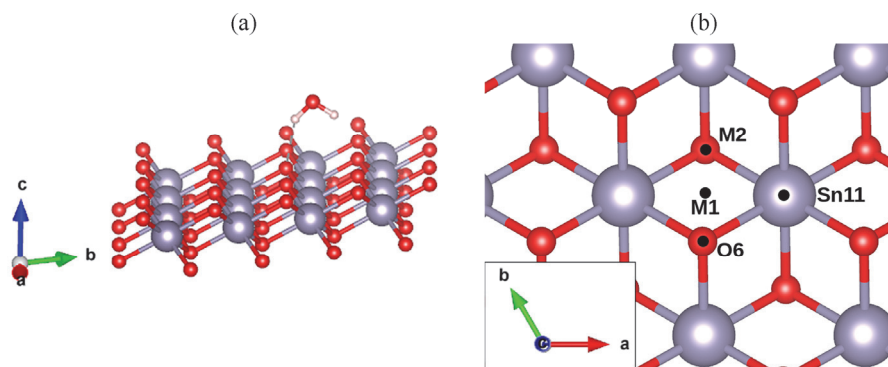


Рис.2. (a) Финальная структура адсорбции и (b) точки адсорбции.

ложении M1. Молекула расположена так, что атом водорода находится над атомом O (Рис.2а). Энергия адсорбции в этом случае –1.77 eV (Таблица 2) а дистанция между атомами H и O – 2.028 Å. Bader-анализ заряда показал, что суммарный заряд структуры и суммарный заряд молекулы не меняются (256e для структуры, 8e для молекулы). Это означает, что между молекулой и 2D

Табл.2. Энергии адсорбции и минимальная дистанция молекулы от структуры

Точка адсорбции	Положение молекулы	Энергия адсорбции, eV	Минимальная дистанция молекулы от структуры, Å
Sn11	1	–1.719	2.075
O6	1	–1.689	2.424
M1	1	–1.772	2.028
M2	1	–1.676	1.958
Sn11	2	–1.708	2.559
O6	2	–1.615	2.564
M1	2	–1.716	2.315
M2	2	–1.693	2.664

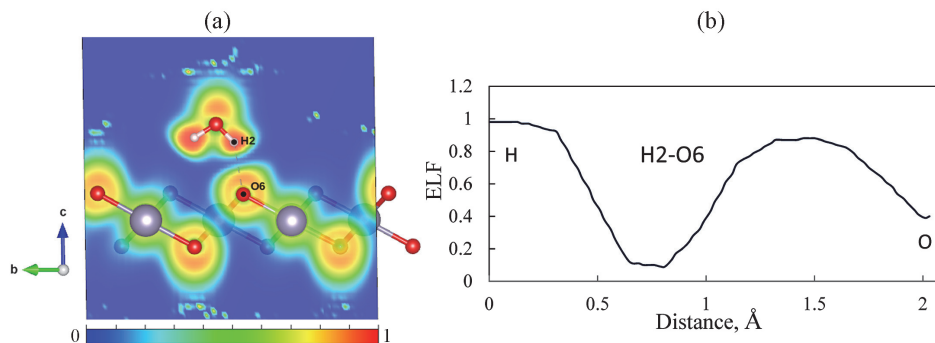


Рис.3. Функции локализации электронов (a) для финальной структуры (b) с H2 на O6.

материалом переноса заряда не наблюдается. Функция локализации электронов показала, что между молекулами Н и О накопление носителей отсутствует. Из этого следует что адсорбция не химическая, а физическая (Рис.3).

Расчеты плотности состояний показали, что в адсорбционной структуре состояния не меняются, а только добавляются состояния молекулы (Рис.4), что еще раз доказывает, что адсорбция – физическая.

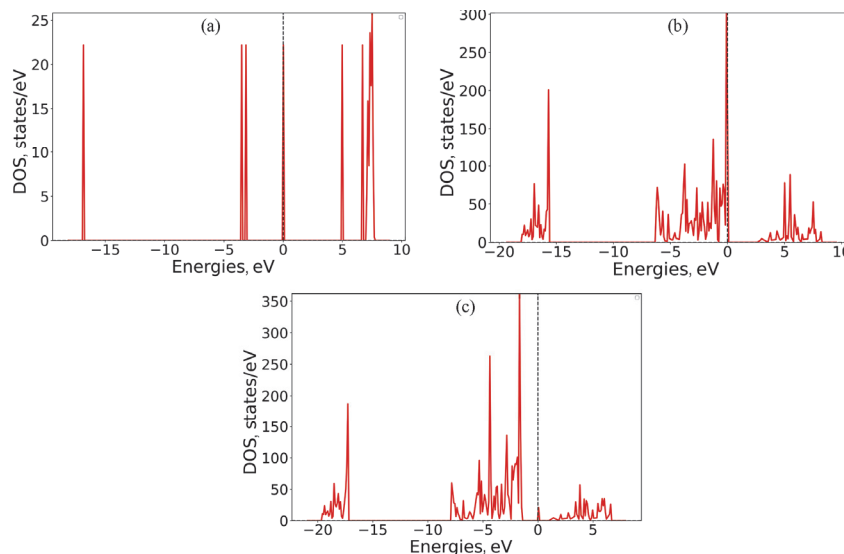


Рис.4. Плотность состояний для (a) молекулы воды, (b) двумерной SnO_2 и (c) адсорбционной структуры.

4. Заключение

В данной работе было изучено взаимодействие молекул воды с двумерным диоксидом олова с помощью теории функционала плотности. Были изучены 8 стартовых конфигураций молекулы и двумерной структуры. Bader-анализ заряда, функция локализации электронов и плотности состояний для релаксированных структур показали, что имеет место физическая адсорбция.

В процессе работы за содержательные обсуждения и техническую поддержку автор благодарен Айку Закарян. Автор благодарен Институту проблем информатики и автоматизации НАН РА (<http://cloud.asnet.am/>) за компьютерные ресурсы, предоставленные для вычислений. Исследование выполнено при финансовой поддержке Комитета по науке РА в рамках научного проекта № 20AA-2F022.

ЛИТЕРАТУРА

1. S. Das, V. Jayaraman. Prog. Mater. Sci., **66**, 112 (2014).
2. Q. Zhang, Q. Zhou, Z. Lu, Z. Wei, L. Xu, Y. Gui. Front. Chem., **6**, 364 (2018).
3. D. Liu, Y. Wang, H. Xu, H. Zheng, T. Zhang, P. Zhang, F. Wang, J. Wu, Z. Wang, Z. Chen, S. Li. Sol. RRL, **3**, 1 (2019).
4. Y. Zhang, Z. Hu, Y. Liang, Y. Yang, N. An, Z. Li, H. Wu. J. Mater. Chem. A, **3**, 15057 (2015).
5. L. Song, S. Yang, W. Wei, P. Qu, M. Xu, Y. Liu. Sci. Bull., **60**, 892 (2015).
6. V. Aroutiounian, V. Arakelyan, M. Aleksanyan, G. Shahnazaryan, P. Kacer, P. Picha, J. Kovarik, J. Pekarek, B. Joost. J. Sensors Sens. Syst., **7**, 281 (2018).
7. V. Aroutiounian, V. Arakelyan, M. Aleksanyan, A. Sayunts, G. Shahnazaryan, M. Vrnata, P. Fitl, J. Viček, K. Gharajyan, H. Kasparyan. Armen. J. Phys., **10**, 122 (2017).
8. V.M. Arakelyan, V.M. Aroutiounian, M.S. Aleksanyan, A.G. Sayunts, G.E. Shahnazaryan, P. Kacer, P. Picha, J.A. Kovarik, J. Pekarek, B. Joost. The 18th Int. Conference on Sensors and Measurement Technology (AMA Conferences – SENSOR 2017). 2017, p.714.
9. G. Gerasimov. Adv. Environ. Anal. Appl. Nanomater. vol. 2, The Royal Society of Chemistry, 2017, pp. 133–152.
10. K. Rajkumar, R.T.R. Kumar. Gas Sensors Based on Two-Dimensional Materials and its Mechanisms, Elsevier Ltd, 2019.
11. A. Patel, B. Roondhe, P.K. Jha. AIP Conf. Proc., **1961**, 1 (2018).
12. W. Wan, Y. Li, X. Ren, Y. Zhao, F. Gao, H. Zhao. Nanomaterials, **8**(2), 112 (2018).
13. H. Zakaryan. Armen. J. Phys., **9**, 283 (2016).
14. W. Kohn, L.J. Sham. Phys. Rev., **140**, A1133 (1965).
15. P. Hohenberg, W. Kohn. Phys. Rev., **136**, B864 (1964).
16. G. Kresse, J. Furthmüller. Phys. Rev. B, **54**, 11169 (1996).
17. G. Kresse, D. Joubert. Phys. Rev. B, **59**, 1758 (1999).
18. J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof. Phys. Rev. Lett., **77**, 3865 (1996).
19. H.J. Monkhorst, J.D. Pack. Phys. Rev. B, **13**, 5188 (1976).
20. R.F.W. Bader. Atoms in Molecules : A Quantum Theory, Oxford: Clarendon Press, 1990.
21. G. Henkelman, A. Arnaldsson, H. Jónsson. Comput. Mater. Sci., **36**, 354 (2006).
22. K. Momma, F. Izumi. J. Appl. Crystallogr., **44**, 1272 (2011).

ՋՐԻ ՄՈԼԵԿՈՒԼԻ ԵՎ ԵՐԿՉԱՓ ԱՆԱԳԻ ԵՐԿՕՔՍԻՐԻ
ՓՈԽԱԶԴԵՑՈՒԹՅՈՒՆԸ

Ա.Ա. ՀՈՒՆԱՆՅԱՆ

Երկչափ անագի երկօքսիդը խոստումնալից նյութերից է, որը կարող է օգտագործվել գազային տվիչներում: Այս աշխատության մեջ ուսումնասիրվել են ջրի մոլեկուլների փոխազդեցությունը երկչափ անագի երկօքսիդի հետ՝ օգտագործելով առաջին սկզբունքների մեթոդները: Ադսորբցիայի էներգիաները, լիցքի փոխանակումը, վիճակների խտությունը և էլեկտրոնների տեղայնացման ֆունկցիաները հաշվարկվում են տարբեր ադսորբցիոն կառուցվածքների համար: Արդյունքում ցույց է տրվել, որ ջրի մոլեկուլների և երկչափ անագի երկօքսիդի փոխազդեցության ընթացքում տեղի է ունենում ոչ թե քիմիական, այլ ֆիզիկական ադսորբցիա:

INTERACTION OF WATER MOLECULE WITH
TWO-DIMENSIONAL TIN DIOXIDE

A.A. HUNANYAN

Two-dimensional tin dioxide is a promising material that can be widely used in gas sensors. The interaction of water molecules with two-dimensional tin dioxide was investigated in this work using first principles (ab initio) methods. The adsorption energies, charge transfer, density of states and electron localization functions (ELF) are calculated for various adsorption structures. As a result, it was shown that during the interaction of water molecules and two-dimensional tin dioxide physical adsorption occurs (not chemical).

АКУСТОГАЛЬВАНИЧЕСКОЕ ЯВЛЕНИЕ В ВОДЕ

И.Г. ГРИГОРЬЯН*

Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак, Армения

*e-mail: irina.g.grigoryan@gmail.com

(Поступила в редакцию 17 мая 2021 г.)

В работе приведены результаты экспериментального исследования возникновения электрического тока в воде при взаимодействии с акустическими волнами. Помимо наличия слабого акустоэлектрического эффекта, обнаружено также новое, резонансное акустогальваническое явление в воде. Обсуждаются возможные причины малого значения акустоэлектрического тока и физический механизм возникновения акустогальванического эффекта, связанный с деполяризацией гальванического элемента системы (электроды-вода).

1. Введение

Известно, что при распространении акустических волн в металлах и полупроводниках, возникает электрический ток [1]. Это явление, названное акустоэлектрическим явлением, было теоретически предсказано и представлено Р.П. Парментером в 1952 году [2], а затем и Н.Г. Гуревичем в 1957 году [3]. Акустоэлектрическое явление экспериментально впервые было обнаружено также в 1957 году в кристаллах германия (Ge) Уэйном Греем, Уайтом [4], а также японскими исследователями Сасаки В. Джошида Е. [5].

Акустаэлектрические токи в полупроводниковых кристаллах с центром симметрии, таких как германий (Ge) и кремний (Si), а также в металлах, довольно слабые. Однако, в кристаллах CdS, CdSe, ZnO, CaAs, InSb и в других пьезоэлектрических средах это явление повышается на 5–6 порядков. Согласно принятому представлению о физическом механизме этого явления, генерация электрического тока вызвана передачей части энергии импульсов звука электронам проводимости. Акустоэлектрическое явление широко используется в технике для контроля и управления сложными технологическими процессами. С этой целью разрабатываются различные акустоэлектрические преобразователи [9–11], которые в сочетании с вспомогательными техническими средствами позволяют решать достаточно сложные технические задачи. Нам не удалось в научно-технической литературе получить ответ на многие вопросы, связанные с физико-химическими процессами при воздействии акустического излучения с жидкостями и, в частности, с водой и водными растворами. Возможно, что в обычной воде и водных растворах отсутствие регистрации акустоэлектрического явления

обусловлено большой массой токопроводящих зарядов. В данной работе представлены результаты попытки экспериментального обнаружения и исследования акустоэлектрического явления в обычной воде.

2. Условия эксперимента

Для исследования возможного акустоэлектрического явления в воде использовалась экспериментальная установка, принципиальная схема которой представлена на рис. 1. В качестве источника акустических колебаний использовалось устройство на основе пьезокерамических излучателей (1), с резонансной частотой 17,6 кГц, при котором уровень звука достигал 120 дБ. Исследуемая вода находилась в химическом стакане ёмкостью 50 мл (2). Тонкая медная пластина (3) была установлена на дне стакана и была соединена в измерительную электрическую цепь. Конец концентратора акустического излучателя (4) был погружен в воду в центральной части стакана. Электропитание пьезокерамического генератора осуществлялось от звукового усилителя (5), на входе которого был подключен звуковой генератор (6). Медный электрод (3) через микроамперметр (7) соединен к вольтметру (8). К другой клемме вольтметра подключен корпус концентратора акустического излучателя, изготовленного из титана цилиндрической формы, диаметром 6 мм. При отсутствии акустических колебаний, из-за разности электрохимических потенциалов электродов (3 и 4) в измерительной цепи регистрируются небольшие значения разности потенциалов и тока, которые через некоторое время становятся незначительными. При наличии акустического излучения в спектральном диапазоне вдали от резонансной частоты, не наблюдались изменения в показаниях измерительных приборов. Однако, при изменении

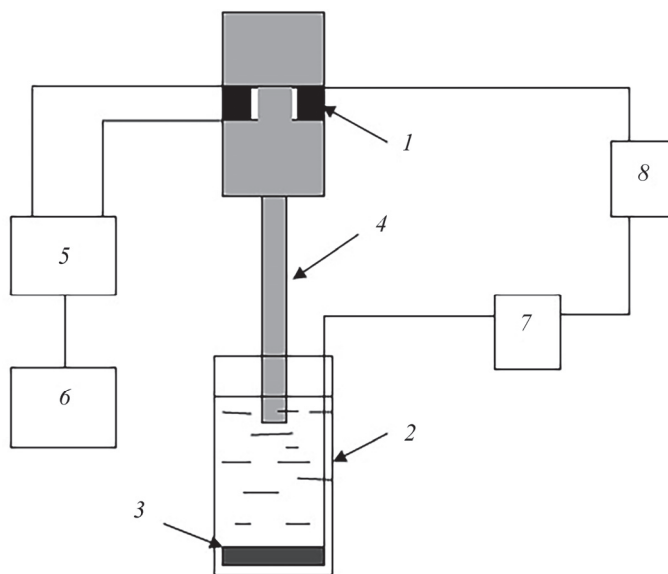


Рис.1. Принципиальная схема экспериментального измерительного оборудования.

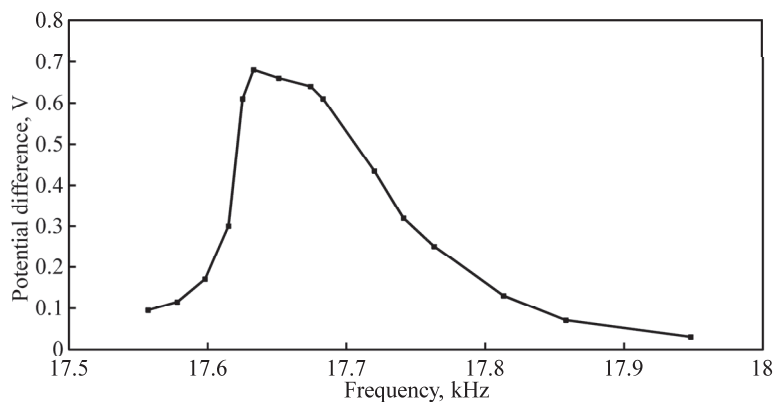


Рис.2. Зависимость разности потенциалов от частоты в области акустического резонанса.

частоты акустического излучения в области резонанса, регистрировались значительные изменения в показаниях измерительных приборов.

На рисунках 2 и 3 представлены графики зависимости разности потенциалов (рис.2) и величины тока (рис.3) в цепи от частоты акустического излучения. Из графиков следует, что они получают максимальные значения при резонансной частоте генератора акустических колебаний. В соответствии с механизмом возникновения акустоэлектрического тока в металлах и полупроводниках, это явление приводит к повышению электропроводности, т.е. к изменению физических характеристик среды.

Следовательно, возможной причиной появления разности потенциалов и резкого изменения величины тока может быть изменение физико-химических характеристик воды. Поэтому исследовалась вольтамперная характеристика водной среды между электродами 3 и 4.

На основе приведенных измерений на рис.4 представлена вольтамперная характеристика исследуемого образца воды, из которой следует, что не наблюдается изменение характеристик параметров воды при воздействии на него синусоидальных акустических колебаний. Следовательно, такие резкие изменения

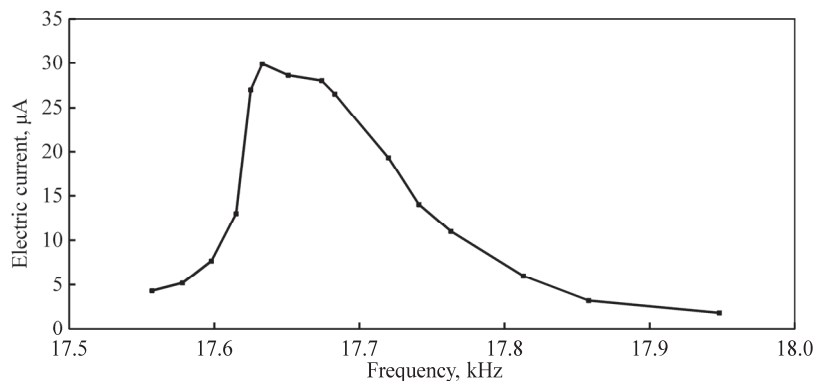


Рис.3. Зависимость электрического тока от частоты в области акустического резонанса.

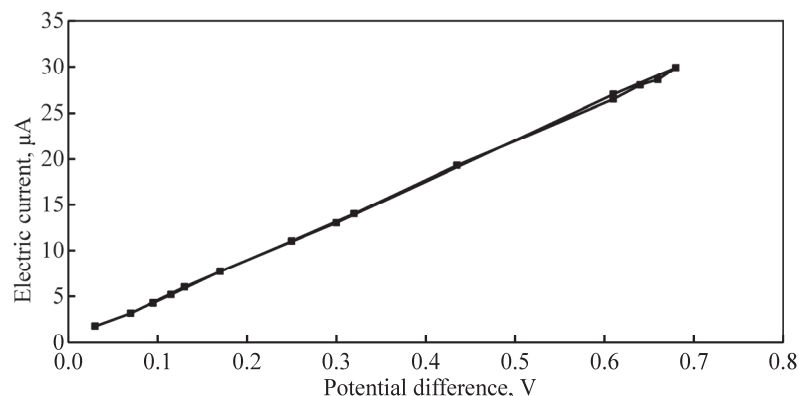


Рис.4. Вольтамперная характеристика испытуемой воды в области акустического резонанса.

разности потенциалов (рис.2) и величины тока (рис.3) не связаны с изменениями физико-химических свойств воды.

Известно, что электропроводность воды осуществляется при помощи диссоциированных в воде H^+ и OH^- ионов и под воздействием акустических волн осуществляется смещение зарядов в определенном направлении. Кроме того, известно, что акустоэлектрический ток обратно пропорционален массе зарядов, а массы ионов H^+ и OH^- значительно превосходят массу электронов. Возможно, что по причине большой разницы масс токопроводящих ионов воды и электронов можно объяснить неизменность электрического сопротивления воды под воздействием акустических волн (рис.4).

Весьма интересным явлением является то, что после выключения генерации акустических волн акустоэлектрический ток должен был немедленно прекратиться, но в наших измерениях он не исчезал в течение относительно длительного периода времени. Электрический ток медленно уменьшался до значений, соответствующих исходным величинам тока. На рисунке 5 показано изменение электрического тока с течением времени после выключения акустических колебаний.

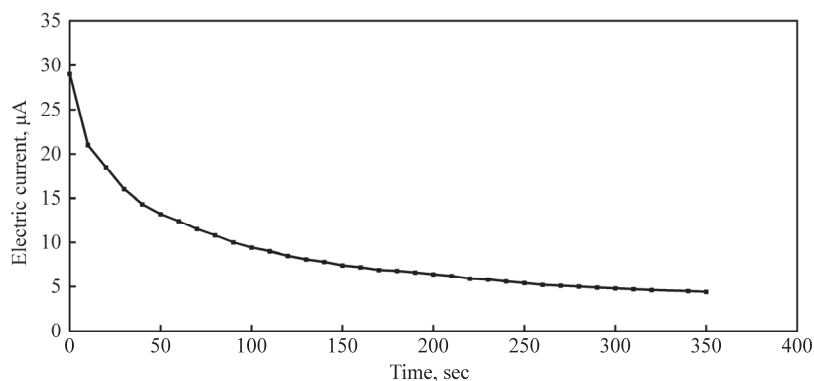


Рис.5. Изменение тока во времени после отключения акустических колебаний.

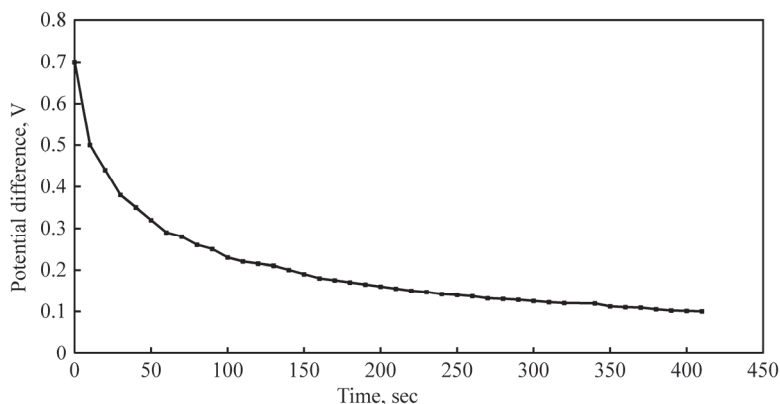


Рис.6. Изменение разности потенциала после отключения акустических колебаний.

Такое же изменение наблюдается в изменении величины разности потенциалов от времени (рис.6) после выключения генерации акустических волн.

Отметим, что представленные временные зависимости величин регистрированы при нагрузке 150 кОм. Очевидно, что полученные результаты не могут быть представлены как акустоэлектрическое явление.

Показанные на рис.5 и 6 графики соответствуют явлению деполяризации гальванического элемента [6]. Следовательно, причиной зарегистрированного явления (рис. 5 и 6) может быть изменение взаимодействия поверхностей металлических электродов с обычной водой. Известно, что при контакте различных сред, между ними образуются двойные электрические слои и, в результате, возникает разность потенциалов между средами [6–8]. В приведенном эксперименте образуются две двойные слои: один при контакте концентратора акустического излучателя из титана с водой и второй, при погружении медной пластины в воду. Возможно, что под воздействием акустических колебаний могут происходить изменения в структурах указанных двойных электрических слоев. Для выявления воздействия на результаты измерений двойного слоя с медной пластиной, после воздействия акустических волн и достижения максимального значения разности потенциалов, медная пластина была заменена на аналогичный медный электрод, неподвергнутой акустическим колебаниям. Замена пластины не привела к изменению в результатах измерений. Следовательно, при акустических колебаниях в условиях резонанса происходят изменения в структуре двойного слоя, образованного у поверхности титанового концентратора в области контакта с водой. В соответствии с моделью двойного электрического слоя Гельмгольца можно приграничные образования представить в виде конденсатора на границе соприкосновения двух сред, характеризующие определенным значением электрической емкости. Основываясь на этой модели двойного электрического слоя, проводились исследование изменения величины емкости испытуемой системы из двух двойных электрических слоев в зависимости от значения индуцированной акустическим воздействием разности потенциалов. Измерения электроемкости

проводились при выключенном устройстве акустического излучателя и в процессе деполяризации гальванического элемента. На рис.7 представлена зависимость величины электроёмкости исследуемой системы двойных слоев от величины разности потенциалов.

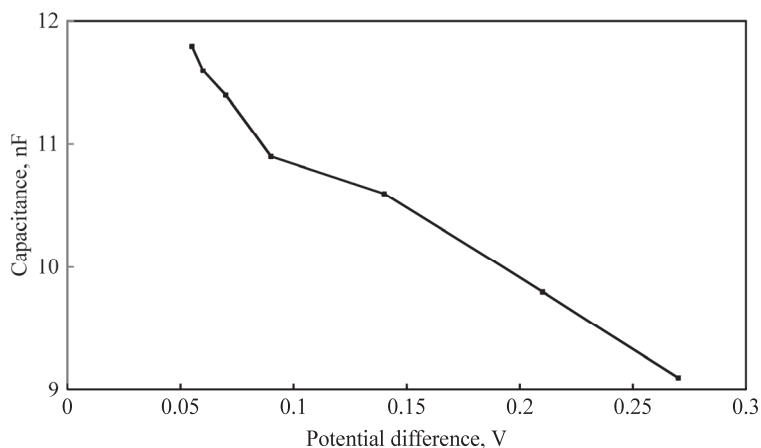


Рис.7. Зависимость электроёмкости системы из двойных электрических слоев медного и титанового электродов от разности потенциалов после выключения акустического воздействия.

Из графика следует, что с увеличением величины разности потенциалов уменьшается суммарная ёмкость системы из двух двойных электрических слоев, т.е. из двух конденсаторов. В соответствии со схемой измерения эти конденсаторы соединены последовательно и, как указано выше, если двойной электрический слой медного электрода не подвергся изменению, то меняется электроёмкость двойного электрического слоя второго электрода – титана.

Следовательно, повышение разности потенциалов между электродами сопровождается уменьшением электроёмкости двойного слоя электрода из титана, т.е. при колебаниях с большой амплитудой уменьшается заряд двойного слоя у титанового электрода. Таким образом, повышение величины разности потенциалов между медным и титановым электродами под действием акустических колебаний и при условии акустического резонанса, связано с разрушением двойного электрического слоя у титанового электрода, что и приводит к уменьшению электрохимического потенциала титанового электрода. При условиях акустических колебаний с достаточно большой амплитудой, которая достигается при резонансной частоте колебания акустического излучателя, электрохимический потенциал может уменьшиться до нуля, тогда величина измеряемой разности потенциалов будет соответствовать электрохимическому потенциалу другого металлического электрода, введенного в воду по схеме измерения, представленной на рис.1. Поэтому, приведенный метод измерения может быть рекомендован как возможный способ для измерения величины гальванического потенциала материалов. Исходя из вышеизложенного, можно заключить, что обнаруженное явление, индуцированное акустическими колебаниями при условии резонанса, представляет собой гальванический эффект, т.е. наблюдается акустогальваническое явление.

3. Заключение

Таким образом, выявлено, что акустоэлектрическое явление в воде весьма мало по причине большой массивности носителей электропроводимости воды по сравнению с электронами. Под воздействием акустических колебаний на воду в условиях акустического резонанса обнаружено акустогальваническое явление. Предложен физический механизм возникновения этого явления.

Автор выражает благодарность руководителю, академику НАН РА Р.Б. Костяному за весьма полезные обсуждения результатов измерений.

ЛИТЕРАТУРА

1. Л.М. Беляев и др. Кристаллография, **10**(2), 252 (1965).
2. R.H. Parmenter. Phys. Rev., **89**, 990 (1953).
3. L.E. Gurevich. Izvest. Akad. Nauk. SSSR., ser. Phys., **21**, 112 (1957).
4. G. Weinreich, H.G. White, Phys. Rev., **106**, 1104 (1957).
5. W. Sasaki, E. Yoshida, J. Phys. Soc. Japan, **12**, 979 (1957).
6. В.С. Багоцкий, Основы электрохимии, Москва: Химия, 1988.
7. А.Л. Ротинян, К.И. Тихонов, И.А. Шошина. Теоретическая электрохимия. Л.: Химия, 1981.
8. А.Н. Фрумкин, В.С. Багоцкий, З.А. Иофа, Б.Н. Кабанов. Кинетика электродных процессов, Москва: Изд-во Моск. ун-та, 1952.
9. В.Е. Курочкин, В.А. Сергеев, Б.П. Шарфарец, Ю.В. Гуляев. Докл. Акад. наук., **483**(3), 260 (2018).
10. Б.П. Шарфарец, В.Е. Курочкин, В.А. Сергеев, Ю.В. Гуляев. Акуст. журн., **66**(4), 453 (2020).

ACOUSTOGALVANIC EFFECT IN WATER

I.G. GRIGORYAN

The paper presents the results of an experimental study of the occurrence of electric current in water when interacting with acoustic waves. In addition to the presence of a weak acoustoelectric effect, a new, resonant acoustogalvanic phenomenon in water was also discovered. Possible reasons for the small value of the acoustoelectric current and the physical mechanism of the appearance of the acoustogalvanic effect associated with depolarization of the galvanic element of the system (electrodes-water) are discussed.

МОДЕЛЬ АНАЛОГО-ЦИФРОВОГО ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЯ С НИЗКИМ ЭНЕРГОПОТРЕБЛЕНИЕМ

В.Ш. МЕЛИКЯН¹, Г.А. АБГАРЯН², П.С. ПЕТРОСЯН^{2*}, Н.А. АВАКЯН²

¹Synopsys Armenia, Ереван, Армения

²Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

*e-mail: petros.petrosyan9722@gmail.com

(Поступила в редакцию 7 апреля 2021 г.)

В технологиях нанометрового размера статическое и динамическое энергопотребление интегральных схем становится эквивалентным. С другой стороны, явления старения и самонагрев существенно влияют на работу схемы. В этой работе была разработана модель трех битного, параллельного аналого-цифрового преобразователя с низким энергопотреблением, в результате чего в схеме не используются резисторы и компараторы. Отсутствие резисторов улучшает статическое энергопотребление схемы и снижает проблемы, связанные со старением и самонагреванием, а отсутствие компараторов положительно влияет на динамическое энергопотребление. Параллельный аналого-цифровой преобразователь был разработан для 14нм технологического процесса, при температуре 25°C, для входных сигналов с амплитудой 1.8 В. Полученные результаты показывают, что разработанный преобразователь использует примерно в 100 раз меньше энергии, по сравнению с классической архитектурой. Так как восемь резисторов были удалены из схемы, площадь полученного преобразователя была уменьшена как минимум с размером $8R_{\text{ном}}$, где $R_{\text{ном}} = 0.7225 \text{ мкм}^2$ является площадь 1 КОм резистора.

1. Введение

В связи с уменьшением размеров технологии и интеграцией новых материалов в производстве металл-оксид-полупроводник (далее МОП) полевых транзисторов, выявляются проблемы, связанные с надежностью интегральных схем [1]. В свою очередь в современных интегральных схемах, при расчетах физических параметров, классическая механика все более уступает позиции квантовой механике (толщина оксидного слоя в транзисторе составляет 1–2 атомных слоя) [1–2]. Именно поэтому современная промышленность стремится найти такие системные решения для проектирования интегральных схем, которые обеспечат малое энергопотребление системы, что в итоге приведет к улучшению бесперебойной работы устройства с учетом факторов старения и самонагревания устройства. Явления, вызывающие изменения параметров устройства со временем,

связанные с изменением свойств полупроводникового материала, называются явлениями старения [3], а повышение температуры устройства со временем из-за собственного энергопотребления называется самонагревом [4].

Повышение температуры из-за самонагрева влияет на множество параметров элементов и может привести к неправильной работе схемы. Изменение температуры в МОП транзисторах влияет на очень много параметров, но основные из них трое: зависимость подвижности(мобильности) электронов, зависимость скорости насыщения транзистора, зависимость порогового напряжения транзистора [5]. Для резисторов повышение температуры из-за самонагрева называется Джоулевым нагреванием. Джоулевое нагревание прямо пропорционально зависит от мощности резистора. У МОП транзисторов самонагрев также зависит от мощности [6]. Изменение температуры транзисторов из-за самонагрева представляется по уравнению $\Delta T = R_{th}P$ [7]. Коэффициент R_{th} называется температурным коэффициентом или температурным сопротивлением. Температурный коэффициент зависит от вида и размеров МОП транзистора. Чтобы уменьшить повышение температуры из-за самонагрева, нужно уменьшить температурный коэффициент, либо уменьшить мощность транзистора. Уменьшение температурного коэффициента можно осуществить, увеличивая количество или размер транзисторов, что в свою очередь приведет к увеличению площади схемы. Увеличение площади схемы всегда нежелательно и даже может быть невозможным. Температурный коэффициент повышается по уменьшению технологического процесса [7] и все больше становится понятно, что уменьшение мощности, если это возможно, самый эффективный способ, чтобы уменьшить повышение температуры из-за самонагрева.

Так как у резисторов и транзисторов повышения температуры из-за самонагрева прямо пропорционально зависит от мощности элемента, уменьшение мощности схемы и замена резисторов, который выполнен в этой работе, приведёт к уменьшению нежеланных изменений в схеме из-за самонагрева.

В предыдущих работах были созданы модели аналого-цифровых преобразователей с уменьшенным числом компараторов, чтобы снизить энергопотребление [8–9]. В этой работе предложена новая модель параллельного аналого-цифрового преобразователя, на основе инверторов с низким энергопотреблением и преобразователей уровня напряжения, которая по сравнению с классической моделью лишена компараторов и делителя напряжения на основе резисторов.

Было сделано проектирование предложенной модели, используя 14 нм технологический процесс, который позволяет модифицировать входной аналоговый сигнал с амплитудой 1.8 В в выходной цифровой, трех битовой сигнал, с амплитудой 0.8 В, в результате чего энергопотребление снижается примерно в 100 раз, обеспечивая снижение влияния выше перечисленных явлений на устройство.

2. Классический аналого-цифровой преобразователь

Для передачи данных между аналоговыми и цифровыми системами применяются аналого-цифровые преобразователи и цифро-аналоговые преобразователи.

Если комментировать проще, то аналого-цифровой преобразователь трансформирует выходной, постоянный аналоговый сигнал в дискретный цифровой сигнал. Главные параметры аналого-цифрового преобразователя являются пропускная способность и сигнал/шум отношение. Пропускная способность ограничивает частотный диапазон входного сигнала аналого-цифровых преобразователей, что обусловлено скоростью дискретизации сигнала. Факторами, влияющими на отношение сигнал-шум, являются ошибка дискретизации сигнала, классификация аналого-цифрового преобразователя, линейность, точность и т. д. Оно в основном описывается по количеству эффективных битов аналого-цифрового преобразователя. Увеличение количества эффективных битов приводит к сложности проектирования аналого-цифрового преобразователя. Есть различные архитектуры преобразователей, которые отличаются друг от друга степенью сложности. Увеличение количества битов легко реализуется в параллельных аналого-цифровых преобразователях, однако из-за большого расхода мощности оно не часто используется. Поэтому возникает необходимость в разработке новых методов, которые будут способствовать увеличению порядка параллельных аналого-цифровых преобразователей без существенного роста мощности.

Параллельные аналого-цифровые преобразователи с классической архитектурой представляют собой группировку компараторов и линейных резисторов, являющихся разделителем напряжения (см. рис.1а) [10].

Однако в этих преобразователях расход мощности велик, в результате чего часто ограничивается применение данного аналого-цифрового преобразователя. Резистор в основном оказывает влияние на статическое энергопотребление, что является сверхзадачей для проектов, достигающих нанометров. Увеличение одного порядка параллельного аналого-цифрового преобразователя приводит к удвоению количества резисторов и компараторов.

В классических параллельных аналого-цифровых преобразователях к отрицательному входу каждого компаратора подключены различные напряжения, которые получают благодаря последовательному соединению резисторов, а к положительным входам подключен входной аналоговый сигнал. Эти компараторы сравнивают входной сигнал со значениями опорного напряжения, полученными через делитель напряжения. В результате получается термический код, который можно преобразовать в цифровой код с использованием приоритетного шифратора. В данной работе пара резистор-компаратор (см. рис.1б), составляющая часть классического преобразователя, заменяется схемой, основанной на инверторах и преобразователе уровня напряжения. Это изменение приводит к удалению резисторов из схемы, что предотвращает также воздействие тепловых искажений на работу схемы, а также уменьшает площадь схемы.

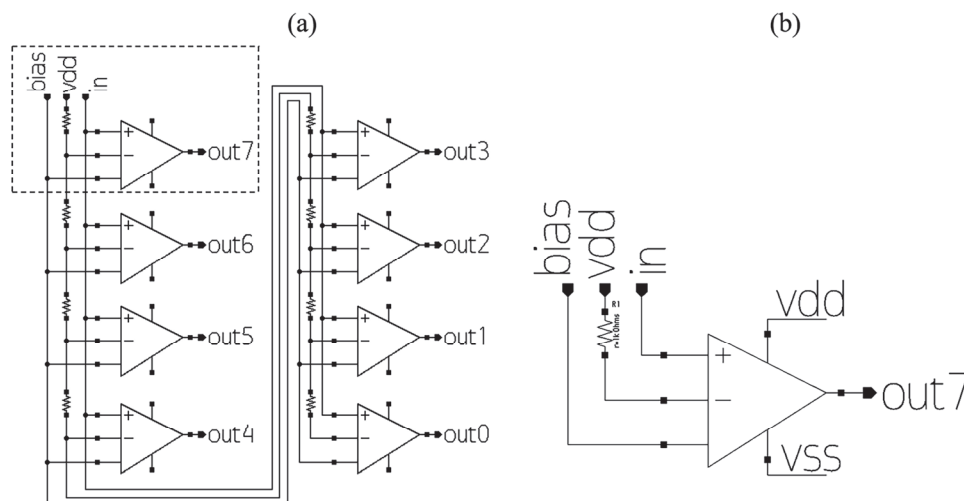


Рис.1. Структура классического параллельного аналого-цифрового преобразователя (а), резистор и компаратор (b, отмечен квадратом в (а)).

3. Моделирование аналого-цифрового преобразователя с низким энергопотреблением

Для проектирования схемы с низким энергопотреблением использовались восемь видов разных инверторов, один повышающий преобразователь уровня напряжения и один понижающий преобразователь уровня напряжения. В рис.2 представлен данный проект.

Инверторы, используемые в схеме, отличаются друг от друга позициями точек переключения, тем самым выполняя роль компараторов, используемых в классической схеме.

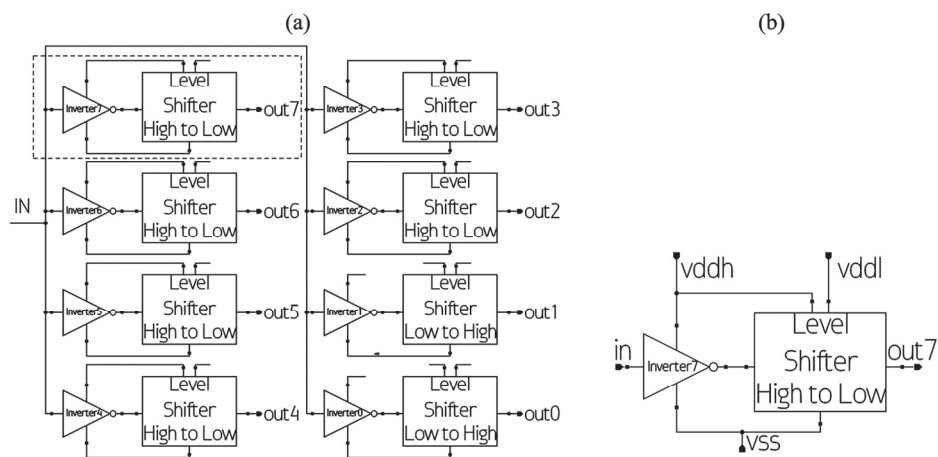


Рис.2. Структура параллельного аналого-цифрового преобразователя с низким энергопотреблением (а), инвертор и преобразователь уровня напряжения (b, отмечен квадратом в (а)).

3.1. Проектирование и результаты инверторов

На первом этапе проекта было выполнено моделирование и симуляция инверторов с восьмью необходимыми точками переключения. Каждому из инверторов необходимы разные уровни напряжения.

В качестве примера, в рис.3 представлены характеристики двух спроектированных инверторов, с точками переключения соответственно 0.6 В и 0.8 В. Различные точки переключения были получены с изменением размеров канала полевых транзисторов.

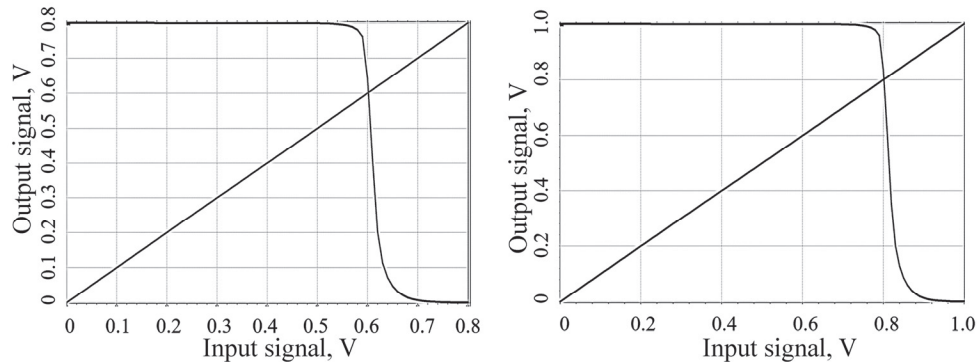


Рис.3. Характеристика инверторов с точками переключения 0.6В и 0.8В.

3.2. Проектирование и результаты преобразователя уровня напряжения

В интегральных схемах существуют источники питания на более чем двух разных уровнях, при которых иногда возникает необходимость в преобразовании значения напряжения от одного уровня к другому. На втором этапе проектирования было проведено моделирование и улучшение преобразователя уровня напряжения (см. рис.4). Преобразователи уровня напряжения, подключенные к выходам инверторов, превращают сигнал, пришедший к их входу, в сигнал с амплитудой 0.8 В. Были использованы понижающие и повышающие преобразователи уровня напряжения, так как амплитуда выходного сигнала некоторых инверторов меньше 0.8 В.

3.3. Проектирование параллельного аналого-цифрового преобразователя и полученные результаты

Имея спроектированные и улучшенные модели инверторов и преобразователей уровня напряжения, спроектирован параллельный аналого-цифровой преобразователь, в выходе которого получен тепловой код (см. рис.2). В рис.5 представлены результаты анализа постоянного тока параллельного аналого-цифрового преобразователя. Как видно из полученных результатов, выходной сигнал реагирует на изменения входных сигналов в рабочем диапазоне 0–0.8 В.

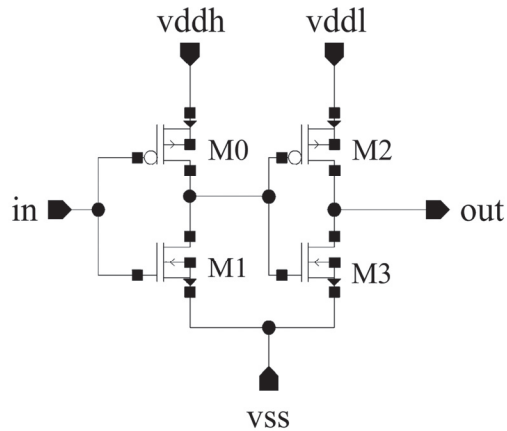


Рис.4. Схема преобразователя с высокого до низкого уровня напряжения.

В табл. показано сравнение параметров классических аналого-цифровых преобразователей и аналого-цифровых преобразователей с низким энергопотреблением. Наряду со значительным снижением энергопотребления, спроектированная схема по сравнению с классической имеет значительно меньшую площадь благодаря замене резисторов и компараторов.

Табл. Сравнение энергопотребления классической и спроектированной аналогово-цифровой преобразователей

	Классическая архитектура	Архитектура с низким энергопотреблением
Энергопотребление	$8.033 \times 10^{-03} \text{ W}$	$7.358 \times 10^{-05} \text{ W}$

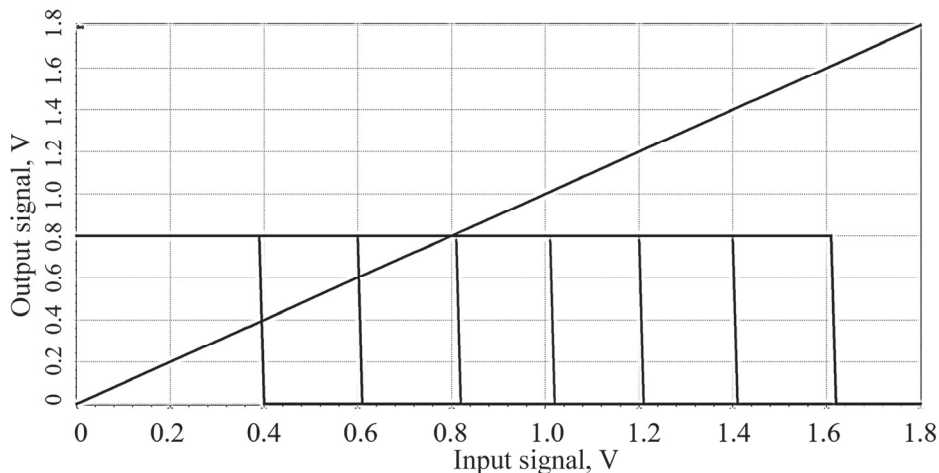


Рис.5. Результаты анализа постоянного тока параллельной аналого-цифрового преобразователя.

4. Заключение

В работе была предложена новая модель параллельного аналого-цифрового преобразователя с низким энергопотреблением на основе инверторов и преобразователя уровня напряжения. Была произведена разработка схемы, моделирование, оптимизация и оценка параметров, оптимизация поверхности. Из результатов становится ясно, что, применяя предлагаемую модель, энергопотребление снижается примерно в 100 раз. Как следствие, в схеме значительно уменьшаются проблемы, обусловленные явлениями самонагрева и старения.

ЛИТЕРАТУРА

1. **H. Wong, H. Iwai.** Microelectronic Engineering, **83**, 1867 (2006).
2. **C. Mohan, S. Choudhary, B. Prasad.** International Journal of Advance Research in Science and Engineering, **6**, 561 (2017).
3. **D. Lorenz.** Aging Analysis of Digital Integrated Circuits. Chair of Design Automation of Technical University of Munich: Dissertation, 2012.
4. **S. Zimin, L. Litian, L. Zhijian.** 1998 5th International Conference on Solid-State and Integrated Circuit Technology. Proceedings (Cat. No.98EX105), 1998, pp. 572-574.
5. **T. Cheung, M. Butson, P. Yu.** Physics in medicine and biology, **49**, 191 (2004).
6. **L.T. Su, J.E. Chung, D.A. Antoniadis, K.E. Goodson, M.I. Flik.** IEEE Transactions on Electron Devices, **41**, 69 (1994).
7. **D. Jang et al.** IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM), 2015, p. 11.6.1.
8. **P.V. Rahul, A.A. Kulkarni, S. Sankanur, M. Raghavendra.** International conference on Microelectronic Devices, Circuits and Systems (ICMDCS), 2017, p. 1.
9. **T.M. Ignatius, J.K. Antony, S.R. Mary.** Annual International Conference on Emerging Research Areas: Magnetism, Machines and Drives (AICERA/iCMMD), 2014, p. 1.
10. **P. Kumar, A. Kolhe.** Int. J. Electronics and Electrical Engineering, **1**, 89 (2012).

MODEL OF LOW POWER ANALOG TO DIGITAL CONVERTER

V. S. MELIKYAN, G.A. ABGARYAN, P.S. PETROSYAN, N.A. AVAGYAN

In nanometre-sized technologies, static and dynamic power consumption of integrated circuits becomes equivalent. On the other hand, the phenomena of aging and self-heating significantly affect the operation of the circuit. In this work, a model of a three-bit, parallel analog-to-digital converter with low power consumption was developed, as a result of which the circuit does not use resistors and comparators. The absence of resistors improves the static power consumption of the circuit and reduces the problems associated with aging and self-heating, while the absence of comparators has a positive effect on the dynamic power consumption. The parallel analog-to-digital converter has been designed for 14 nm technology, at 25°C, for input signals with an amplitude of 1.8 V. The results obtained show that the developed converter uses about 100 times less energy, compared with the classical architecture. Since the eight resistors were removed from the circuit, the area of the resulting converter was reduced by a size of $8R_{\text{nom}}$, where $R_{\text{nom}} = 0.7225 \mu\text{m}^2$ is the area of the 1 kΩ resistor.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ГЕНЕРАЦИИ ТЕРАГЕРЦОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В НЕЛИНЕЙНОМ КРИСТАЛЛЕ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ПАРАМЕТРОВ ВОЗБУЖДАЮЩИХ ЛАЗЕРНЫХ ПУЧКОВ

А.О. МАКАРЯН, Ю.С. СААКЯН*

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

*e-mail: yuri.sahakyan@ysumail.am

(Поступила в редакцию 16 апреля 2021 г.)

Рассмотрена генерация ТГц излучения в нелинейном однодоменном кристалле ниобата лития. Исследована эффективность генерации в зависимости от угла между направлениями распространения возбуждающих лазерных пучков, при разных соотношениях радиусов пучков и длины волны ТГц излучения. Исследовано угловое распределение генерируемого излучения. Показано, что при соответствующем выборе радиусов возбуждающих пучков, угла между ними, а также размеров и формы нелинейного кристалла можно получить остронаправленное ТГц-излучение с возможностью регулировки диаграммы направленности и спектрального состава.

1. Введение

Терагерцовые (ТГц) волны (~ 0.1 – 10 ТГц) представляют значительный интерес для спектроскопии, медицинской диагностики, визуализации различных объектов, систем безопасности и т. д. [1,2]. Несмотря на это, из-за отсутствия высокоэффективных и доступных терагерцовых источников, эта область по-прежнему остается одним из технически слабо оснащенных участков спектра. В последние десятилетия для получения терагерцового излучения широко используются генерация разностной частоты и оптическое выпрямление фемтосекундных лазерных импульсов в нелинейном кристалле.

Для эффективной генерации ТГц излучения необходимо обеспечить волновой синхронизм взаимодействия. Как показано во многих теоретических (см. напр. [3,4]) и экспериментальных работах (см. напр. [5,6]), мощность ТГц излучения увеличивается пропорционально квадрату интенсивности возбуждающего лазерного излучения. Следовательно, добиться большей мощности ТГц излучения можно путем увеличения мощностей и фокусировки возбуждающих лазерных пучков. При фокусировке, когда поперечные размеры области пучков становятся намного меньше длины ТГц волны $r \ll \lambda$, вступает силу черенковский механизм генерации [3]. В этом случае получается достаточно эффективное

ТГц излучение под углом черенкова. Так например, в [6,7] широкополосное ТГц излучение было получено при фокусировке лазерных пучков до 70 и 40 и. Однако, при использовании современных фемтосекундных лазеров большой пиковой мощности (≥ 1 ГВт), недопустима сильная фокусировка лазерных пучков из-за ограниченного предела электрической прочности нелинейного кристалла. Следовательно, увеличения мощности ТГц излучения можно добиться только за счет увеличения апертур возбуждающих пучков. В таком случае, для получения эффективного преобразования лазерного излучения в терагерцовое, следует применить определенные методы для обеспечения условия волнового синхронизма.

В [8–10] было показано, что при применении широкоапертурных пучков в кристалле ниобата лития, периодически поляризованном в поперечном направлении, может быть получена генерация квазимонохроматического терагерцового излучения с центральной частотой, определяемой пространственным периодом Λ периодически поляризованного кристалла ниобата лития (ППНЛ).

Однако, в этом случае частота генерации предопределена пространственным периодом доменной структуры ППНЛ, и поэтому она не может быть изменена после изготовления образцов. Кроме того, само изготовление ППНЛ кристаллов с большим поперечным сечением связано с определенными трудностями.

Для преодоления этих трудностей в [11,12] были использованы монодоменные кристаллы ниобата лития, оснащенные теневыми или бинарными фазовыми масками (ФМ), а для эффективной генерации широкополосных терагерцовых импульсов в работе [13] был предложен использовать ступенчатую фазовую маску.

В настоящей работе рассмотрена генерация ТГц излучения в нелинейном однодоменном кристалле ниобата лития. Исследована эффективность генерации в зависимости от угла между направлениями распространения возбуждающих пучков, при разных соотношениях r/λ . Исследовано также угловое распределение генерируемого излучения.

2. Волновое уравнение для углового спектра ТГц поля

Предположим, что дуплет гауссовских возбуждающих лазерных пучков распространяются в плоскости xz , а направление распространения одной из волн (с частотой ω_1) совпадает с осью z (см. рис.1.), т. е.

$$E_1(x, y, z, t) = E_{10} \exp\left[-\frac{x^2 + y^2}{r^2}\right] \exp[i(\omega_1 t - k_1 z)], \quad (1)$$

$$E_2(x, y, z, t) = E_{20} \exp\left[-\frac{x'^2 + y'^2}{r'^2}\right] \exp[i(\omega_2 t - k_2 z')], \quad (2)$$

где $x' = x \cos \psi + z \sin \psi$, $y' = y$, $z' = z \cos \psi + x \sin \psi$, ψ – угол между направлениями распространения возбуждающих лазерных пучков.

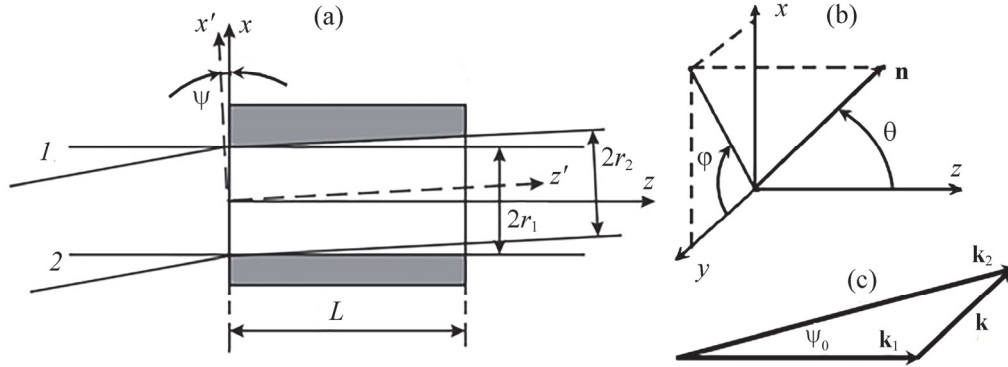


Рис.1. (а). Взаимное расположение лазерных пучков и нелинейного кристалла, (б). Координатная система и направление излучения ТГц волны, (с). Диаграмма волновых векторов, при векторном синхронизме.

Для упрощения математических выкладок предположим, что эффективные радиусы обоих возбуждающих пучков одинаковы ($r_1 = r_2 = r$).

Волновое уравнение для угловых спектральных компонент ТГц поля имеет следующий вид [3]:

$$\frac{d^2 E(\alpha, \beta, z, \Omega_0)}{dx^2} + g^2 E(\alpha, \beta, z, \Omega_0) = -\gamma F(\alpha, \beta, z), \quad (3)$$

где: $\gamma = 4\pi\chi_{\text{ef}}(\Omega/c)^2$, $k = \Omega n_\Omega/c$, $\Omega = \omega_2 - \omega_1$ – частота ТГц излучения, $\alpha = k \sin \theta \cos \varphi$, $\beta = k \sin \theta \sin \varphi$, $g = \sqrt{k^2 - \alpha^2 - \beta^2} = k \cos \theta$, χ_{ef} – эффективная нелинейная восприимчивость среды; n_Ω – коэффициент преломления среды на терагерцовой частоте Ω ; функция $F(\alpha, \beta, z)$ определяется сверткой угловых спектров возбуждающих пучков:

$$F(\alpha, \beta, z) = \int \int_{-\infty}^{\infty} E_1(\xi_1, z) E_2^*(\xi_2, z) \delta(\xi + \xi_1 - \xi_2) d\xi_1 d\xi_2, \quad (4)$$

где $d\xi = d\alpha_j d\beta_j$.

Решим задачу в приближении заданных полей, что обычно соответствует реальной экспериментальной ситуации.

Для свертки угловых спектров возбуждающих волн получим:

$$F(\alpha, \beta, z) = E_{10} E_{20} D(\alpha, \beta) \exp(-az^2 - ibz), \quad (5)$$

где

$$D(\alpha, \beta) = \frac{2\pi^3 r^2}{\sqrt{1 + \cos^2 \psi}} \exp \left[-\frac{r^2 \beta^2}{8} - \frac{r^2 (\alpha - k_2 \sin \psi)^2}{4(1 + \cos^2 \psi)} \right],$$

$$a = \frac{\sin^2 \psi}{r^2 (1 + \cos^2 \psi)}, \quad b = k_2 \cos \psi - k_1 + \frac{\sin \psi \cos \psi (k_2 \sin \psi - \alpha)}{1 + \cos^2 \psi}.$$

3. Угловое распределение ТГц излучения

При решении уравнения (3) множитель $\exp(-az^2)$ в формуле (5) можно заменить единицей. Это следует из следующих соображений: естественно ожидать, что наиболее интенсивное ТГц излучение получится при обеспечении векторного синхронизма, т.е. когда возбуждающие лазерные пучки распространяются под углом $\psi = \psi_0$ (см. рис.1б).

При генерации ТГц волн в большинстве нелинейных кристаллов угол синхронизма не превышает пару градусов. Так, напр., для кристалла LiNbO₃, при генерации ТГц волны с длиной 0.3 мм (длина волны возбуждающих волн ~ 1 мкм) этот угол составляет всего 0.05° . Следовательно, даже при достаточно больших значениях длин кристаллов ($z \sim 20$ мм) имеет место соотношение $az^2 \ll 1$, т.е. $\exp(-az^2) \approx 1$.

При таком приближении, решая уравнение (1) для углового спектра мощности ТГц излучения, получим [4]

$$P(\alpha, \beta, z) = \frac{\gamma^2}{4\pi^2} r^4 E_{10}^2 E_{20}^2 z^2 \frac{(\sin^2 \varphi \sin^2 \theta + \cos^2 \theta)}{(b+g)^2} \frac{\text{sinc}^2[(b-g)z/2]}{1 + \cos^2 \psi} \times \exp \left[-\frac{r^2 \beta^2}{4} - \frac{r^2 (\alpha - k_2 \sin(\psi))^2}{2(1 + \cos^2 \psi)} \right]. \quad (6)$$

В формуле (6) множитель $\text{sinc}^2[(b-g)z/2]$ определяет синхронизм взаимодействия угловых компонент спектра возбуждающих волн, а экспонента обусловлена угловым спектром волны нелинейной поляризации. При решении предполагалось, что поляризации возбуждающих пучков и оптическая ось нелинейного кристалла выбраны таким образом, чтобы вектор нелинейной поляризации на ТГц частоте был направлен по у. Это обстоятельство учтено введением множителя $(\sin^2 \varphi \sin^2 \theta + \cos^2 \theta)$ в (6).

На Рис 2. приведены угловые распределения ТГц излучения генерированного в нелинейном кристалле LiNbO₃ ($n_\omega \approx 2.23$, $n_\Omega \approx 5.1$) параллельными

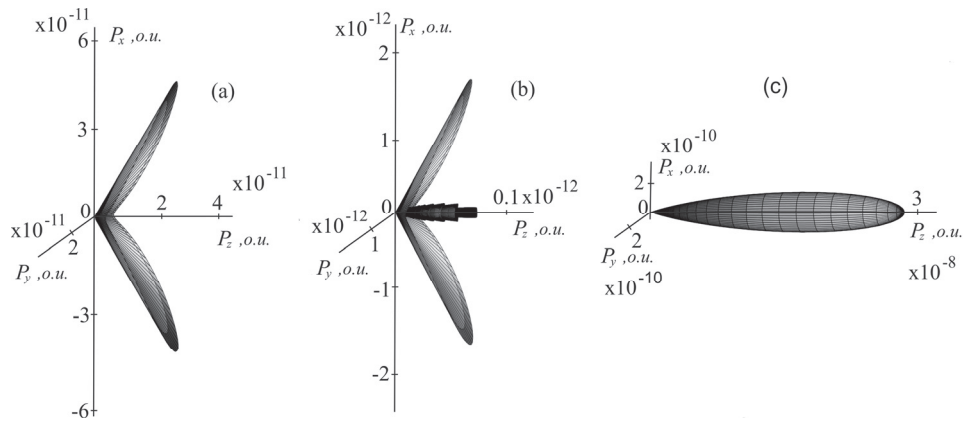


Рис.2. Угловые распределения мощности излучения с $\lambda = 0.3$ мм, генерированного в нелинейном кристалле LiNbO₃ при $\psi = 0$. Длина кристалла – $z = 5$ мм (a) $r = 0.05$ мм, (b) $r = 0.067$ мм, (c) $r = 1$ мм.

возбуждающими пучками ($\psi = 0$), при разных соотношениях r/λ . Лазерные пучки поляризованы по y , оптическая ось кристалла также направлен по y . В этом случае действует наибольший нелинейный коэффициент кристалла χ_{33} . Длина кристалла – $z = 5$ mm, частота ТГц излучения – $f = 1$ THz ($\lambda = 0.3$ mm).

Как было отмечено выше, при $r/\lambda \ll 1$ вступает в силу черенковский механизм излучения, и основная мощность излучается под углом θ_0 к оси z , где

$$\theta_0 = \arccos \frac{g}{k}.$$

Для кристалла ниобата лития этот угол составляет $\sim 64^\circ$.

При увеличении радиусов возбуждающих пучков эффективность преобразования падает (с учетом того, что с увеличением радиусов увеличиваются мощности лазеров), а излучение постепенно концентрируется вокруг оси z .

Картина кардинально меняется, когда лазерные пучки распространяются под углом векторного синхронизма ψ_0 . На Рис.3 представлены угловые распределения ТГц излучения при $\psi = \psi_0$.

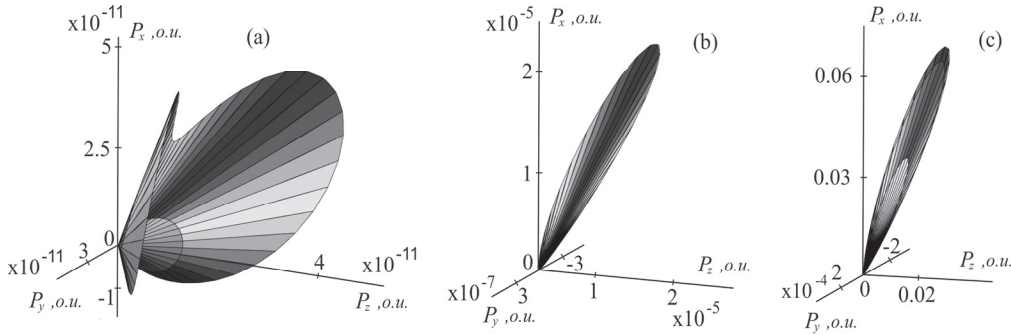


Рис.3. Угловые распределения мощности излучения с $\lambda = 0.3$ mm, генерированного в нелинейном кристалле LiNbO₃ при $\psi = \psi_0$. Длина кристалла – $z = 5$ mm (a) $r = 0.0167$ mm, (b) $r = 0.05$ mm, (c) $r = 3.34$ mm.

При малых значениях r , когда поперечные размеры области кристалла занимаемой нелинейной поляризацией меньше длины ТГц волны (см. Рис.3а), получается ненаправленное излучение, однако, т.к. волна возбуждающих диполей распространяется со световой скоростью (C/n_ω), то излучение в основном сконцентрировано вблизи черенковского угла. При увеличении апертур лазерных пучков, весь объём занимаемой нелинейной поляризацией постепенно превращается в фазированную антенную решетку, все диполи которого излучают синфазно под углом черенкова. Таким образом, при соответствующем выборе угла ($\psi = \psi_0$) можно увеличить эффективность преобразования относительно случая коллинеарного взаимодействия ($\psi = 0$) на несколько порядков. Кроме того, при $r \gg \lambda$ излучение получается сильно остронаправленное. Так например, при $r = 3.34$ mm, $\lambda = 0.3$ mm, $z = 5$ mm, $\psi = \psi_0 = 0.393^\circ$, раскрыв диаграммы на уровне

3 dB составляет $\Delta\theta \approx 0.458^\circ$ и $\Delta\varphi \approx 0.423^\circ$. Отметим, что остронаправленность излучения позволяет легко вывести всю мощность из нелинейного кристалла с минимальными потерями на внутреннее отражение, при соответствующем срезе выходного торца кристалла.

При генерации ТГц излучения методом оптического выпрямления сверхкоротких лазерных импульсов, отдельные диполи нелинейного кристалла испускают широкополосное излучение. Следовательно, при выборе оптимального угла ψ для определенной ТГц частоты, то другие спектральные компоненты будут генерироваться неэффективно. На Рис.4. представлены кривые эффективности излучения при оптимальном угле для $\lambda = 0.3$ mm, для разных значений r .

Как видно из графиков для увеличения спектральной полосы необходимо уменьшить размеры пучков.

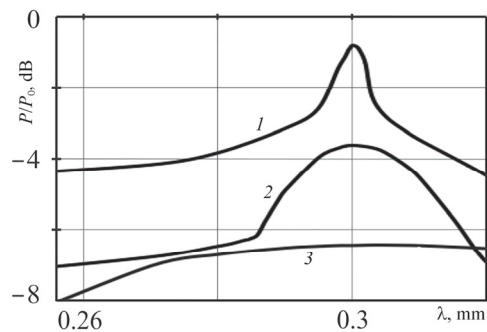


Рис.4. Эффективности излучения при оптимальном угле для $\lambda = 0.3$ mm, (1) $r = 5$ mm, (2) $r = 1$ mm, (3) $r = 0.2$ mm.

4. Заключение

Анализ полученных результатов показывает, что при соответствующем выборе радиусов r возбуждающих пучков, угла ψ между ними, а также размеров и формы нелинейного кристалла можно получить остронаправленное ТГц-излучение с возможностью регулировки диаграммы направленности и спектрального состава. В частности, при необходимости генерации квазимонохроматического ТГц излучения следует по возможности увеличивать радиусы возбуждающих пучков.

При оптимальном выборе параметров лазерных пучков можно увеличить эффективность преобразования на несколько порядков по сравнению с коллинеарным преобразованием.

ЛИТЕРАТУРА

1. J. Federici, L. Moeller. J. Appl. Phys., **107**, 111101 (2010).
2. R. Horodecki et al. Rev. Mod. Phys., **81**, 865 (2009).

3. S. Yoshida, K. Suizu, E. Kato, Y. Nakagomi, Y. Ogawa, K. Kawase. *J. Mol. Spectrosc.*, **256**, 146 (2009).
4. У.А. Абдулин, Г.А. Ляхов, О.В. Руденко, А.С. Чиркин. *ЖЭТФ*, **66**(4), 1295 (1974).
5. K. Kawase, M. Sato, T. Taniuchi, H. Ito. *Int. J. Infrared and Millimeter Waves*, **17**(11), 1839 (1996).
6. Q. Xing, L. Lang, Z. Tian, N. Zhang, S. Li, K. Wang, L. Chai, Q. Wang. *Optics Communications*, **267**, 422 (2006).
7. X. Shi-Xiang, D. Xiao-Ming, Y. Xiao-Hua, L. Jing-Zhen. *Chin. Phys. Lett.*, **25**(12), 4262 (2008).
8. C. Zhang, Yu. Avetisyan, A. Glosser, I. Kawayama, H. Murakami, M. Tonouchi. *Optics Express*, **20**, 5784 (2012).
9. Yu. Avetisyan, M. Tonouchi. *Optics Letters*, **37**, 4155 (2012).
10. C. Zhang, Y. Avetisyan, G. Abgaryan, I. Kawayama, H. Murakami, M. Tonouchi. *Opt. Lett.*, **38**, 953 (2013).
11. Y. Avetisyan, C. Zhang, I. Kawayama, H. Murakami, T. Somekawa, H. Chosrowjan, M. Fujita, M. Tonouchi. *Opt. Express*, **20**, 25752 (2012).
12. C. Zhang, Y. Avetisyan, G. Abgaryan, I. Kawayama, H. Murakami, M. Tonouchi. *Opt. Lett.*, **38**, 953 (2013).
13. Г.К. Абгарян, Ю.О. Аветисян, А.О. Макарян, В.Р. Татевосян. *Известия НАН Армении, Физика*, **51**, 46 (2016).

INVESTIGATION OF THE EFFICIENCY OF TERAHERTZ
RADIATION GENERATION IN A NONLINEAR CRYSTAL
DEPENDING ON THE PARAMETERS OF EXCITING LASER BEAMS

A.H. MAKARYAN, Y.S. SAHAKYAN

The generation of THz radiation in a nonlinear single-domain lithium niobate crystal is considered. The lasing efficiency is investigated as a function of the angle between the directions of propagation of the exciting laser beams at different ratios of the beam radii and the THz radiation wavelength. The angular distribution of the generated radiation is investigated. It is shown that with an appropriate choice of the radii of the exciting beams, the angle between them, as well as the size and shape of the nonlinear crystal, it is possible to obtain highly directional THz radiation with the possibility of adjusting the directional pattern and spectral composition.

ԲՈՎԱՆԴԱԿՈՒԹՅՈՒՆ

Հ.Լ. Գևորգյան, Լ.Ա. Գևորգյան, Ա.Հ. Շամամյան. Պոզիտրոնների ճառագայթման ուժեղացումը և առանձնահատկությունները սեկցիաներով բյուրեղային օնդուլյատորում.....	255
Ա.Ս. Հակոբյան. Ա. Ալիխանյանի անվան ազգային գիտական լաբորատորիայի LUE-75 զծային արագացուցիչի կարգավիճակը և էլեկտրոնային փնջի էներգիայի կայունությունը	269
Հ.Հ. Ասատրյան, Հ.Մ. Ասատրյան. Քվանտային քրոմոդինամիկայի բարձր կարգի ուղղումների հաշվարկներ	279
Լ.Մ. Ծառուկյան. Լազերային ճառագայթի տրոհումը կանոնավոր օպտիկական պատկերների և ռեֆրակտիվ կառուցվածքների ձևավորումը ֆոտոռեֆրակտիվ լիթիումի նիոբատի բյուրեղում	289
Վ.Ա. Հարությունյան, Ա.Վ. Պապոյան. Ջերմաստիճանի հեռավար օպտիկական չափում՝ հարթ-գուգահեռ դիէլեկտրական թիթեղի օգտագործմամբ	300
Վ.Ս. Հակոբյան, Մ.Ռ. Հակոբյան, Ռ.Ս. Հակոբյան. Լուսամակածված հիդրոդինամիկական վերակոդմորոշման ուղիղ ծավալային մեխանիզմ	306
Ա.Ժ. Խաչատրյան, Ժ.Ռ. Փանոսյան, Ժ.Բ. Խաչատրյան. Երկու կոհերենտ կետային աղբյուրների ինտերֆերենցիոն պատկերի փուլային կետերի մասին.....	313
Ա. Բաբաջանյան, Բ. Մինասյան, Ա. Մովսիսյան, Բ. Տրիդման, Կ. Լի. Օկտադեցիլտրի-խլորոսիլանե ինքնահավաք միաշերտով պենտացենի միջերեսի վրա հիմնված բարակ թաղանթային օրգանական տրանզիստորի աշխատանքի բարելավումը	322
Գ.Յ. Խառատյան, Գ.Ս. Գևորգյան, Պ.Ա. Մանթաշյան. Մորսի պոտենցիալով գլանային քվանտային կետում բիէքսիտոնի կապի էներգիայի հաշվարկը	330
Գ.Ս. Գևորգյան, Գ.Յ. Խառատյան, Հ.Խ. Թևոսյան. Մագնիսաաբսորբցիան և ֆոտոլյումինեսցիան Պյոշլ-Թելլերի ձևափոխված պոտենցիալով գլանաձև քվանտային կետում.....	339
Վ.Ա. Հարությունյան, Հ.Ա. Մարգարյան. Միարժեք և երկարժեք խառնուրդային վիճակները կիսահաղորդչային նանոթիթեղում.....	348
Ս.Գ. Պետրոսյան, Ա.Մ. Խաչատրյան. Իմպուլսային-լազերային փոշեցրման եղանակով աճեցված ատոմական հաստության MoS ₂ շերտեր.....	356
Գ.Ե. Այվազյան, Մ.Վ. Կատկով, Մ.Ս. Լեբեդև, Վ.Ռ. Շայապով, Մ. Յ. Աֆոնին, Դ.Ե. Պետուխովա, Ի.Վ. Յուշինա, Է.Ա. Մակսիմովսկի, Ա.Վ. Աղաբեկյան. Ատոմաշերտային նստեցման մեթոդով մետաղական օքսիդների բարակ թաղանթներով պատված սև սիլիցիումի հակաանդրադարձող հատկությունները	364
Գ.Ա. Դաբադյան, Լ.Ա. Մաթևոսյան, Կ.Է. Ավջյան. «Ածխածնի նանոթաղանթը սիլիցիումի վրա» հետերոկառուցվածքի էլեկտրական բնութագիրները և ֆոտոարձագանքը	374
Ն.Հ. Մովսիսյան, Ա.Խ. Մանասեկյան. Ուժեղ տերահերցային լազերային ճառագայթման ազդեցությունը կիսահաղորչային քվանտային օղակի մագնիսացվածության վրա	384
Ն.Բ. Մարգարյան, Ն.Է. Կոկանյան, Է.Պ Կոկանյան. Կոլոիդալ լուծույթում սինթեզված գրաֆենային քվանտային կետերի և ածխածնային նանոխողովակների հատկությունների ուսումնասիրությունը.....	392
Ա.Ա. Հունանյան. Ջրի մոլեկուլի և երկչափ անագի երկօքսիդի փոխազդեցությունը	399
Ի.Գ. Գրիգորյան. Ակուստոգալվանական երևույթը ջրում	405
Վ.Շ. Մելիքյան, Գ.Ա. Աբգարյան, Պ.Ս. Պետրոսյան, Ն.Ա. Ավագյան. Ցածր էներգասպառմամբ զուգահեռ անալոգաթվային ձևափոխիչի նախագծումը	412
Ա.Հ. Մակարյան, Յ.Ս. Մանակյան. Ոչ զծային բյուրեղում տերահերցային ճառագայթման գեներացման արդյունավետության ուսումնասիրումը՝ կախված գրգռող լազերային փնջերի պարամետրերից	419

CONTENTS

H.L. Gevorgyan, L.A. Gevorgian, A.H. Shamamian. Gain and Features of Radiation of Positrons in a Crystalline Undulator with Sections	255
A.S. Hakobyan. Status of Electron Linear Accelerator LUE-75 of the A. Alikhanyan National Science Laboratory and Stability of Electron Beam Energy	269
H.H. Asatryan, H.M. Asatrian. Calculations of Higher Order Quantum Chromodynamics Corrections	279
L.M. Tsarukyan. Laser Beam Break-Up to Regular Optical Patterns and Refractive Structures Formation in a Photorefractive Lithium Niobate Crystal	289
V.A. Harutyunyan, A.V. Papoyan. Remote Optical Temperature Sensing Using a Flat-Parallel Dielectric Wafer	300
V.S. Hakobyan, M.R. Hakobyan, R.S. Hakobyan. Volume Expansion Mechanism of Laser-Induced Hydrodynamic Reorientation.....	306
A.Zh. Khachatryan, Zh.R. Panosyan, Zh.B. Khachatryan. Phase Points of the Interference Picture of the Wave Field of Two Coherent Point Sources	313
A. Babajanyan, B. Minasyan, A. Movsisyan, B. Friedman, K. Lee. Performance of Pentacene Based Organic Thin Film Transistor with an Octadecyltrichlorosilane Self-Assembled Monolayer Interface.....	322
G.Ts. Kharatyan, G.S. Gevorgyan, P.A. Mantashyan. Calculation of the Binding Energy of a Biexciton in a Cylindrical Quantum Dot with a Morse Potential	330
G.S. Gevorgyan, G.Ts. Kharatyan, H.Kh. Tevosyan. Magnetic Absorption and Photoluminescence in a Cylindrical Quantum Dot with a Modified Peschl-Teller Potential.....	339
V.A. Harutyunyan, H.A. Sarkisyan. Monovalent and Diavalent Impurity States in a Semiconductor Nanoplatelets	348
S.G. Petrosyan, A.M. Khachatryan. Atomically thin layers of MoS ₂ grown by the method of pulsed laser deposition	356
G.Y. Ayvazyan, M.V. Katkov, M.S. Lebedev, V.R. Shayapov, M.Yu. Afonin, D.E. Petukhova, I.V. Yushina, E.A. Maksimovskii, A.V. Aghabekyan. Anti-Reflection Properties of Black Silicon Coated with Thin Films of Metal Oxides by Atomic Layer Deposition	364
G. A. Dabaghyan, L.M. Matevosyan, K.E. Avjyan. Electrical Characteristics and Photoresponse of the "Carbon Nanofilm on Silicon" Heterostructure.....	374
N.H. Movsisyan, A.Kh. Manaselyan. The Effect of Intense Terahertz Laser Radiation on Magnetization of Semiconductor Quantum Ring	384
N.B. Margaryan, N.E. Kokanyan, E.P. Kokanyan. Investigation of Properties of Graphene Quantum Dots and Carbon Nanotubes Synthesized in a Colloid Solution.....	392
A.A. Hunanyan. Interaction of Water Molecule with Two-Dimensional Tin Dioxide	399
I.G. Grigoryan. Acoustogalvanic Effect in Water	405
V.S. Melikyan, G.A. Abgaryan, P.S. Petrosyan, N.A. Avagyan. Model of Low Power Analog to Digital Converter	412
A.H. Makaryan, Y.S. Sahakyan. Investigation of the Efficiency of Terahertz Radiation Generation in a Nonlinear Crystal Depending on the Parameters of Exciting Laser Beams	419

СОДЕРЖАНИЕ

А.Л. Геворгян, Л.А. Геворгян, А.Г. Шамамян. Усиление и особенности излучения позитронов в кристаллическом ондуляторе с секциями	255
А.С. Акопян. Статус линейного ускорителя ЛУЭ-75 национальной научной лаборатории им. А. Алиханяна и стабильность энергии электронного пучка.....	269
Г.Г. Асатрян, Г.М. Асатрян. Расчеты поправок квантовой хромодинамики высших порядков	279
Л.М. Царукян. Распад лазерного пучка на регулярные оптические изображения и формирование рефрактивных структур в фоторефрактивном кристалле ниобата лития	289
В.А. Арутюнян, А.В. Папоян. Дистанционное оптическое измерение температуры с использованием плоскопараллельной диэлектрической пластины.....	300
В.С. Акобян, М.Р. Акопян, Р.С. Акопян. Механизм объемного расширения лазерно-индуцированной гидродинамической переориентации.....	306
А.Ж. Хачатрян, Ж.Р. Паносян, Ж.Б. Хачатрян. Фазные точки интерференционной картины волнового поля двух когерентных точечных источников.....	313
А. Бабаджанян, Б. Минасян, А. Мовсисян, Б. Фридман, К. Ли. Эффективность работы органического тонкопленочного транзистора на основе пентацена с самоорганизующимся монослоевым интерфейсом октадецилтрихлорсилана.....	322
Г.Ц. Харатян, Г.С. Геворкян, П.А. Манташян. Расчет энергии связи биэкситона в цилиндрической квантовой точке с потенциалом морса.....	330
Г.С. Геворкян, Г.Ц. Харатян, О.Х. Тевосян. Магнитопоглощение и фотолюминесценция в цилиндрической квантовой точке с модифицированным потенциалом Пёшль–Теллера	339
В.А. Арутюнян, А.А. Саркисян. Одновалентные и двухвалентные примесные состояния в полупроводниковой нанопластинке	348
С.Г. Петросян, А.М. Хачатрян. Атомарно-тонкие слои MoS ₂ , выращенные методом импульсно-лазерного осаждения.....	356
Г.Е. Айвазян, М.В. Катков, М.С. Лебедев, В.Р. Шаяпов, М.Ю. Афонин, Д.Е. Петухова, И.В. Юшина, Е.А. Максимовский, А.В. Агабекян. Антиотражающие свойства черного кремния, покрытого тонкими пленками оксидов металлов методом атомно-слоевого осаждения	364
Г.А. Дабагян, Л.А. Матевосян, К.Э. Авджян. Электрические характеристики и фотоотклик гетероструктуры «углеродная нанопленка на кремнии».....	374
Н.А. Мовсисян, А.Х. Манаселян. Влияние интенсивного терагерцового лазерного излучения на намагниченность полупроводникового квантового кольца.....	384
Н.Б. Маргарян, Н.Э. Коканян, Э.П. Коканян. Исследование свойств графеновых квантовых точек и углеродных нанотрубок синтезированных в коллоидном растворе	392
А.А. Унанян. Взаимодействие молекул воды с двумерным диоксидом олова.....	399
И.Г. Григорьян. Акустогальваническое явление в воде	405
В.Ш. Меликян, Г.А. Абгарян, П.С. Петросян, Н.А. Авакян. Модель аналого-цифрового преобразователя с низким энергопотреблением.....	412
А.О. Макарян, Ю.С. Саакян. Исследование эффективности генерации терагерцового излучения в нелинейном кристалле в зависимости от параметров возбуждающих лазерных пучков	419

Заказ № 1108

Тираж 150. Цена договорная.

Подписано к печати 19.07.2021. Печ. л. 11.

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