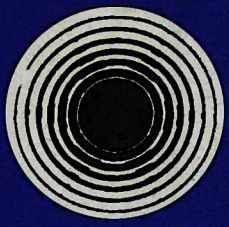
ISSN 0002-3035

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

ՏԵՂԵԿԱԳԻՐ ИЗВЕСТИЯ

ՖԻԶԻԿԱ ФИЗИКА

ՀԱՏՈՐ ТОМ

45

№ 6

ՀՀ ԳԱԱ "ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆ" ՀՐԱՏԱՐԱԿՉՈՒԹՅՈՒՆ
ИЗДАТЕЛЬСТВО "ГИТУТЮН" НАН РА
ԵՐԵՎԱՆ ЕРЕВАН
2010

Журнал издается с 1966 г.
Выходит 6 раз в год
на русском и английском языках

Адрес редакции: Республика Армения, 375019,
Ереван, пр. Маршала Баграмяна, 24-г.

Խմբագրության հասցեն՝ Հայաստանի Հանրապետություն,
375019, Երևան, Մարշալ Բաղրամյան պող., 24-գ:

Editorial address: 24-g. Marshal Bagramyan Av.,
Yerevan, 375019, Republic of Armenia.

ԲՈՎԱՆԴԱԿՈՒԹՅՈՒՆ

CONTENTS

СОДЕРЖАНИЕ

Заказ № 280
Тираж 150. Сдано в набор 20.08.2010.
Подписано к печати 25.08.2010. Печ. л. 5.25.
Бумага офсетная. Цена договорная.
Типография НАН РА.
Ереван, пр. Маршала Баграмяна, 24.

Известия НАН Армении, Физика, т.45, №6, с.391-400 (2010)

УДК 621.373

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА РАСПРОСТРАНЕНИЯ ФЕМТОСЕКУНДНОГО ОПТИЧЕСКОГО СОЛИТОНА В ОДНОМОДОВОМ ВОЛОКНЕ С УЧЕТОМ МНИМОЙ ЧАСТИ РАМАНОВСКОГО ОТКЛИКА СРЕДЫ

Д.Л. ОГАНЕСЯН, А.О. ОГАНЕСЯН, Г.Д. ОГАНЕСЯН, К.А. ОГАНЕСЯН

Ереванский государственный университет, Армения

(Поступила в редакцию 1 июля 2010 г.)

Рассмотрено влияние рамановского инерционного отклика среды на устойчивость фемтосекундного солитона первого порядка. Получено численное решение нелинейного уравнения Шредингера высшего порядка с комплексным рамановским членом, описывающим распространение фемтосекундного оптического солитона в одномодовом волокне. Показано, что при определенных условиях, налагаемых на значения коэффициентов уравнения, существует солитонное решение нелинейного уравнения Шредингера высшего порядка. Эти условия приводят к ограничениям на длину волны, типы волокон, максимум энергии. Результаты численных решений находятся в согласии с экспериментальными данными.

1. Введение

Существование оптических солитонов было предсказано в [1,2], экспериментально продемонстрировано в [3] и практически реализуется в существующих системах связи с 2000 г. [4]. Этот успех стал возможным благодаря передаче информации с помощью солитонов и создания соответствующих технических средств [5,6]. Если потери в волокне компенсировать, то солитонные средства связи могут функционировать со скоростью до 100 Гб/с. С целью компенсации потерь в волокне энергия солитонов должна периодически восстанавливаться до первоначальной величины. Для восстановления значения энергии солитона используются обычно два разных подхода [6]. Они осуществляются с помощью сосредоточенных и распределенных схем регенерации солитонов. В сосредоточенной схеме оптический усилитель усиливает солитон после его распространения на некоторое расстояние. В распределенной схеме используется индуцированное рамановское рассеяние или волокно с эрбиевыми добавками [7]. Оба способа требуют периодической накачки энергии вдоль всей длины волокна. С практической точки зрения изучение особенностей процесса распространения фемтосекундного оптического солитона в одномодовом волокне может быть использовано при проектировании оптических систем связи. Динамика фемтосекундного оптического солитона описывается нелинейным уравнением

Шредингера (НУШ), которое содержит члены, определяющие процессы фазовой модуляции и дисперсию групповой скорости.

В [8] получены решения НУШ в виде точного солитонного пакета. Показано, что в частном случае уравнение сводится к НУШ, которое описывает самофокусировку одномерной волны в нелинейной среде с дисперсией. В [9] получены точные решения НУШ более общего типа. Рассмотренная модель применяется при изучении процесса распространения фемтосекундного импульса в оптическом волокне. В [10] численными методами получено решение, описывающее динамику волнового пакета, описываемого НУШ. Показано, что импульс по мере распространения стремится к одному или нескольким солитонным пакетам при условии, что параметры линейной дисперсии третьего порядка и нелинейной дисперсии имеют одинаковый знак. В [11] изучена динамика солитонных и квазисолитонных решений кубического НУШ. Показано, что существование регулярных солитонов обусловлено балансом между нелинейными членами и линейной дисперсией третьего порядка.

При исследовании процесса распространения оптических солитонов в фемтосекундной временной шкале необходимо учитывать также эффекты более высокого порядка, такие как дисперсия высших порядков, образование ударной волны огибающей и индуцированное рамановское рассеяние, вызывающее сдвиг несущей частоты импульса [12]. Действие дисперсии нелинейности при отсутствии дисперсии групповых скоростей приводит к образованию ударной волны на заднем фронте импульса [13]. Это обусловлено зависимостью групповой скорости от интенсивности: вершина импульса начинает двигаться медленнее, чем его края. Дисперсия групповых скоростей ослабляет процесс укручения фронта волны, но тем не менее из-за дисперсии центр импульса смещается.

Среди нелинейных членов высшего порядка важную роль играет член, ответственный за рамановское рассеяние, которое приводит к смещению центральной длины волны импульса в длинноволновую область [12]. Теоретическое исследование влияния рамановского рассеяния на процесс распространения фемтосекундного импульса проведено в [12,14]. Согласно [14], красное смещение центральной длины волны импульса пропорционально τ_0^{-4}, где τ_0 – длительность импульса. При описании процесса распространения фемтосекундного импульса длительностью меньше 50 фс в НУШ, кроме вышеперечисленных нелинейных членов высшего порядка, необходимо также учитывать мнимую часть рамановского отклика среды [15].

В данной работе исследуется влияние диссипативного рамановского члена на стабильность фемтосекундного солитона первого порядка. Показано, что при некоторых физических условиях, налагаемых на коэффициенты модели, существует аналитическое солитоноподобное решение НУШ высокого порядка с мнимым рамановским членом. Данными физическими условиями определяются выбор диапазона длин волн, тип волокна и параметры импульса. Показано, что если действительная часть рамановского члена равна нулю, то в области длин

волн, где коэффициенты дисперсии второго и третьего порядка отрицательны, существует солитоноподобное решение. Путем сведения нелинейного параболического уравнения к системе обыкновенных дифференциальных уравнений получено численное решение НУШ высшего порядка.

2. Аналитическое решение НУШ с мнимой частью рамановского отклика солитонного типа

Рассмотрим процесс распространения фемтосекундного оптического импульса вдоль оси *z* в одномодовом оптическом волокне. Этот процесс описывается НУШ с учетом нелинейностей высших порядков, которое в обозначениях [6] может быть представлено в виде

$$i\frac{\partial E}{\partial \xi}+\alpha_1\frac{\partial^2 E}{\partial \tau^2}+\alpha_2\left|E\right|^2E=i\alpha_3\frac{\partial^3 E}{\partial \tau^3}+i\alpha_4\frac{\partial}{\partial \tau}\left(\left|E\right|^2E\right)+\left(\alpha_5+i\alpha_6\right)E\frac{\partial}{\partial \tau}\left|E\right|^2, \quad (1)$$

где $E(\xi,\tau)=A(\xi,\tau)/P_0^{1/2}$, $A(\xi,\tau)$ - медленно меняющаяся амплитуда, P_0 - максимум мощности импульса, $\xi=\left(z\left|\beta_2\right|\right)/\tau_0^2$, β_2 - дисперсия групповой скорости, τ_0 - длительность импульса, определяемая на полувысоте $T_{\text{FWHM}}=1.763\tau_0$, $\tau=\left(t-z/v_g\right)/\tau_0$, v_g – групповая скорость, $\alpha_1=-(1/2)\beta_2/\left|\beta_2\right|$, $\alpha_2=N^2=\ =\gamma P_0\tau_0^2/\left|\beta_2\right|$, γ-коэффициент нелинейности, N – порядок солитона, $\alpha_3=\beta_3/\left(6\left|\beta_2\right|\tau_0\right)$, β_3 - дисперсия третьего порядка (ДТП), $\alpha_4=2N^2/(\omega_0\tau_0)$, ω_0 – несущая частота импульса, $\alpha_5=N^2\left(\tau_R/\tau_0\right)$, τ_R - постоянная времени, определяемая наклоном линии рамановского усиления в окрестности несущей частоты ω_0, $\alpha_6=\varepsilon\alpha_5\ \ (\varepsilon\le 1)$. Член α_5 обусловлен частотной зависимостью коэффициента усиления. Коэффициент α_6 обусловлен нелинейной диссипацией, соответствующей рамановскому рассеянию в волокне [6]. В случае $\alpha_6=0$ солитонное решение для уравнения (1) было получено в [16]. Там же приведены результаты исследования динамики поведения импульса, полученные в ходе численного моделирования. Следует отметить, что в работе рассматривается спектральная область, где имеет место аномальная дисперсия ($\beta_2<0$). Для солитона первого порядка N = 1, когда имеет место баланс между нелинейными эффектами высшего порядка (α_4, α_5, и α_6) и ДТП (α_3), решение типа солитонной волны может быть представлено в виде

$$E(\xi,\tau)=E_0\,\text{sech}\left(\tau+\chi\xi\right)\exp\left\{i\left(K\xi-\Omega\tau\right)\right\}, \quad (2)$$

где E_0 – комплексная амплитуда, Ω – несущая частота, χ – групповая скорость, K – постоянная распространения. Подставляя (2) в (1) и приравнивая коэффициенты при независимых членах $\text{sech}\left(\tau+\chi\xi\right)$, $\text{sech}^3\left(\tau+\chi\xi\right)$, $\text{sech}\left(\tau+\chi\xi\right)\times\ \text{th}\left(\tau+\chi\xi\right)$ и $\text{sech}^3\left(\tau+\chi\xi\right)\text{th}\left(\tau+\chi\xi\right)$, получим систему уравнений

$$-K+\alpha_1-\alpha_1\Omega^2-3\alpha_3\Omega+\alpha_3\Omega^3=0, \quad (3)$$

$$\left(\alpha_4\left|E_0\right|^2+6\alpha_3\right)\Omega+\alpha_2\left|E_0\right|^2-2\alpha_1=0, \quad (4)$$

$$\chi-2\alpha_1\Omega-\alpha_3+3\alpha_3\Omega^2=0, \quad (5)$$

$$\left(3\alpha_4 - 2\alpha_6 + 2i\alpha_5\right)\left|E_0\right|^2 + 6\alpha_3 = 0. \qquad (6)$$

Так как коэффициенты α_4, α_5, α_6 и α_3 действительны, то из условия (6) следует, что α_5 должен быть равен нулю. Следовательно, абсолютное значение амплитуды импульса определяется из выражения

$$\left|E_0\right| = \sqrt{\frac{-6\alpha_3}{3\alpha_4 - 2\alpha_6}}. \qquad (7)$$

Отсюда получаем, что коэффициенты α_3, α_4 и α_6 должны удовлетворять условию

$$-\frac{6\alpha_3}{3\alpha_4 - 2\alpha_6} > 0. \qquad (8)$$

На длине волны, соответствующей минимальным потерям (1.5 мкм), $\varepsilon \approx 0.1$ [14], отношение

$$\frac{3\alpha_4}{2\alpha_6} = \frac{3\alpha_4}{2\varepsilon\alpha_5} = \frac{3}{\varepsilon}\frac{1}{\omega_0\tau_R} \approx 8.28 \qquad (9)$$

больше единицы и из (8) следует, что β_3 отрицательно. С другой стороны, так как рассматривается область с аномальной дисперсией, то $\beta_2 < 0$ ($\alpha_1 = -1$).

Сдвиг несущей частоты Ω для солитона, в соответствии с (4) и с учетом (7), может быть представлен в виде

$$\Omega = \frac{3\alpha_2\alpha_3 - 2\alpha_1\alpha_6 + 3\alpha_1\alpha_4}{6\left(\alpha_6\alpha_3 - \alpha_4\alpha_3\right)}. \qquad (10)$$

При заданном значении Ω, согласно (10), групповая скорость χ и постоянная распространения K определяются из (5) и (3), соответственно.

Заметим, что стандартные одномодовые волокна со ступенчатым профилем коэффициента преломления не допускают существования солитоноподобных решений, так как в них β_3 всегда положительно, в то время как β_2 отрицательно [6]. Вместе с тем условие одновременной отрицательности коэффициентов β_3 и β_2 может быть реализовано в специальных одномодовых волокнах с компенсированной дисперсионной характеристикой, функционирующих в спектральном диапазоне 1.3–1.6 мкм. Для данных волокон дисперсионные характеристики определяются в соответствии с выражениями

$$\beta_2(\lambda) = -392.3 + 1140.2\times\lambda - 1013.8\times\lambda^2 + 284.1\times\lambda^3 \ \frac{(\text{пс})^2}{\text{км}}, \qquad (11)$$

$$\beta_3(\lambda) = -5.3052\times10^{-5}\times\lambda^2\left(1140.2 - 2027.6\times\lambda + 852.3\times\lambda^2\right) \ \frac{(\text{пс})^3}{\text{км}}, \qquad (12)$$

где значения коэффициентов были определены экспериментально в работе [17].

3. Сведение НУШ высокого порядка к системе обыкновенных дифференциальных уравнений. Численное решение НУШ высокого порядка

Уравнение в частных производных (1) является уравнением первого порядка по ξ и третьего по τ. Следовательно, для решения (1) необходимо иметь одно начальное условие и два граничных условия. Начальное условие берется из решения (2) с учетом формул (7) и (10). Представим $E(\xi,\tau)$ в виде $E(\xi,\tau)=v(\xi,\tau)+iw(\xi,\tau)$, $v(\xi,\tau)$ и $w(\xi,\tau)$ - реальная и мнимая части электрического поля. Начальное условие выбирается в виде

$$E(\xi=0,\tau)=E_0\,\mathrm{sech}(\tau)\exp\{-i\Omega\tau\}. \tag{13}$$

Функция (13) будет использована для сравнения с численным решением. Что касается граничных условий, то они могут быть опущены, так как переменная τ меняется в бесконечной области $-\infty\le\tau\le\infty$, а изменения решения происходят на конечном интервале по τ, поэтому влиянием граничных условий на решение можно пренебречь. Решение НУШ (1) рассматривается в прямоугольнике $0\le\xi\le L$, $0\le\tau\le T$, ограниченном прямыми $\tau_m=mh$ $(m=0,1,2,\ldots,M)$, где $h=T/M$ и $\xi_n=nk$ $(n=0,1,2,\ldots,N)$, $k=L/N$. Заменив в уравнении (1) частные производные функции E по времени τ на конечные разности [17,18], получим систему обыкновенных дифференциальных уравнений относительно переменной ξ:

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial v(m)}{\partial\xi}=-\alpha_1 w_{\tau\tau}(m)-\alpha_2 v2w2(m)w(m)+\alpha_3 v_{\tau\tau\tau}(m)-\alpha_4 v(m)v2w2_\tau(m)-\\
&-\alpha_4 v2w2(m)v_\tau(m)+\alpha_5 w(m)v2w2_\tau(m),\\
&\frac{\partial w(m)}{\partial\xi}=\alpha_1 v_{\tau\tau}(m)+\alpha_2 v2w2(m)v(m)+\alpha_3 w_{\tau\tau\tau}(m)-\alpha_4 w(m)v2w2_\tau(m)-\\
&-\alpha_4 v2w2(m)w_\tau(m)-\alpha_6 v(m)v2w2_\tau(m),
\end{aligned} \tag{14}$$

где

$$v_\tau(m)=\begin{cases}
(1/12dx)\left[-25v(1)+48v(2)-36v(3)+16v(4)-3v(5)\right]; & m=1,\\
(1/12dx)\left[-3v(1)-10v(2)+18v(3)-6v(4)+v(5)\right]; & m=2,\\
(1/12dx)\left[v(m-2)-8v(m-1)+8v(m+1)-v(m+2)\right]; & m=3,4,...,M-2,\\
(1/12dx)\begin{bmatrix}-v(M-4)+6v(M-3)-18v(M-2)+10v(M-1)\\+3v(M)\end{bmatrix}; & m=M-1,\\
(1/12dx)\begin{bmatrix}3v(M-4)-16v(M-3)+36v(M-2)-48v(M-1)\\+25v(M)\end{bmatrix}; & m=M
\end{cases} \tag{15}$$

есть конечно-разностная аппроксимация четвертого порядка первой производной $\partial v/\partial\tau$;

$$v_{\tau\tau}(m)=\begin{cases}\left(1/12dx^2\right)\left[45v(1)-154v(2)+214v(3)-156v(4)+61v(5)-10v(6)\right]; m=1,\\ \left(1/12dx^2\right)\begin{bmatrix}45v(M)-154v(M-1)+214v(M-2)-156v(M-3)\\ +61v(M-4)-10v(M-5)\end{bmatrix}; m=M,\\ \left(1/12dx^2\right)\left[10v(1)-15v(2)-4v(3)+14v(4)-6v(5)+v(6)\right]; m=2,\\ \left(1/12dx^2\right)\begin{bmatrix}10v(M)-15v(M-1)-4v(M-2)+14v(M-3)\\ -6v(M-4)+v(M-5)\end{bmatrix}; m=M-1,\\ \left(1/12dx^2\right)\begin{bmatrix}-v(m-2)+16v(m-1)-30v(m)\\ +16v(m+1)-v(m+2)\end{bmatrix}; m=3,4,\ldots,M-2\end{cases} \quad (16)$$

есть аппроксимация четвертого порядка второй производной с условиями Дирихле на правом и левом концах границы, а

$$v_{\tau\tau\tau}(m)=\begin{cases}0, \quad m=1,2,3,\\ 0, \quad m=M-2,M-1,M,\\ \left(1/8dx^3\right)\begin{bmatrix}v(m-3)-8v(m-2)+13v(m-1)-13v(m+1)\\ +8v(m+2)-v(m+3)\end{bmatrix}; m=4,5,\ldots,M-3\end{cases} \quad (17)$$

является семиточечной центрированной конечноразностной аппроксимацией третьей производной. В (17) весовые функции считаются с помощью стандартных формул. На концах интервалов по τ $(m=1,2,3,M-2,M-1,M)$ значения производных $v_{\tau\tau\tau}$ полагают равными нулю, так как по предположению эти границы не влияют на решение. Первые, вторые и третьи производные w вычисляются так же, как для v в соответствии с формулами (15)–(17). В (14) $v2w2(m)=v(m)^2+w(m)^2$ является значением огибающей импульса в дискретный момент времени m. В (14) $v2w2_\tau(m)$ есть первая производная огибающей импульса, которая вычисляется по конечно-разностной схеме (15). Система (14) решается методом Рунге-Кутта [19]. Относительная и абсолютная погрешности во время вычислений выбирались равными 10^{-7}.

4. Численные результаты и обсуждение

При моделировании рассматривались одномодовые оптические волокна с компенсированной дисперсионной характеристикой, обладающие слабой дисперсией в спектральном диапазоне 1.3–1.6 мкм с дисперсионными зависимостями (11) и (12). Согласно (11) и (12), в спектральном диапазоне 1.467 мкм < λ < 1.595 мкм β_2 и β_3 отрицательны, а при 1.595 мкм $\beta_2=0$. Для этого типа волокон в упомянутой спектральной области коэффициент нелинейности γ = 3 $\text{В}^{-1}\cdot$ км^{-1}, время рамановского отклика $\tau_R=3$ фс. Центральная длина волны

λ_0 при моделировании выбиралась равной 1.569 мкм, а длительность импульса $\tau_0 = 50$ фс. При длине волны λ_0 значения соответствующих коэффициентов равны $\beta_2 = -1.716$ пс^2/км, $\beta_3 = -7.462$ пс^3/км, $\alpha_1 = 0.5$, $\alpha_3 = -0.0145$. Для заданных значений параметров при пиковой мощности импульса $P_0 = 228.792$ Вт $\alpha_2 = N^2 = 1$ $\left(|E_0| = 1\right)$, $\alpha_4 = 0.033$, $\alpha_5 = 0.06$, $\varepsilon = 0.1$, $\alpha_6 = 0.006$. Зависимость пиковой мощности импульса от длины волны определяется по формуле $P_0 = N^2 |\beta_2(\lambda)| / \gamma\tau_0^2$. Длина дисперсии $L_d(\lambda) = \tau_0^2 / |\beta_2(\lambda)|$ для рассматриваемого значения длительности импульса и дисперсии второго порядка равна 14.57 м. Вычисления проведены при шаге $h = T/M$, равном 0.005, где T – длина безразмерной временной шкалы.

На рис.1 представлена эволюция импульса на десяти дисперсионных расстояниях, когда $\alpha_5 \neq 0$, полученная в ходе численного решения (14). Как видно из рисунка, пик импульса по мере распространения запаздывает и появляется сдвиг по направлению движения. Для импульсов 100 фс или короче спектральная ширина входных импульсов достаточно большая, что приводит к эффективному усилению длинноволновых спектральных компонент импульса за счет коротковолновых компонент, которые в свою очередь действуют как накачка. Таким образом, энергия от коротковолновых компонент непрерывно перекачивается в длинноволновые компоненты. Такое преобразование энергии проявляется как смещение спектра импульса в длинноволновую область и это смещение с расстоянием увеличивается [20]. Запаздывание пика импульса, показанное на рис.1, обусловлено уменьшением групповой скорости, имеющем место в результате смещения пика импульса спектра.

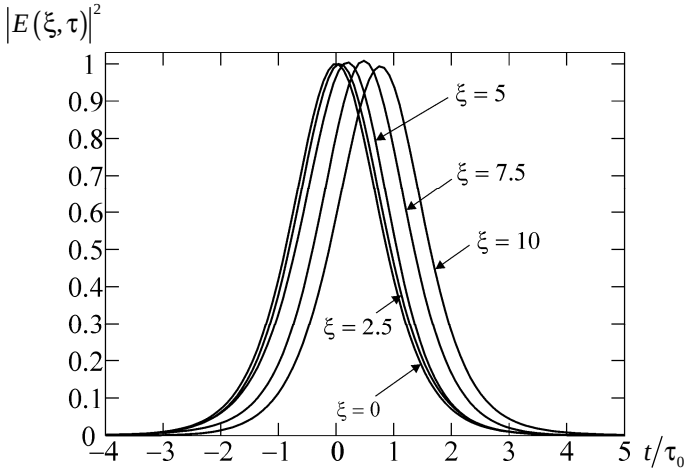


Рис.1. Эволюция временного профиля импульса на расстоянии десяти дисперсионных длин при $\alpha_5 \neq 0$.

На рис.2 представлена зависимость запаздывания пика импульса от расстояния, где показано, что τ_d возрастает как $\xi^2 = \left[\left(z|\beta_2|\right)/\tau_0^2\right]^2$. Так как ξ сопоставимо с τ_0^{-2}, τ_d меняется, как τ_0^{-4}. Так как τ_d прямо пропорционально

длинноволновому смещению, то последнее также пропорционально τ_0^{-4}, что согласуется с теоретической моделью, представленной в [14].

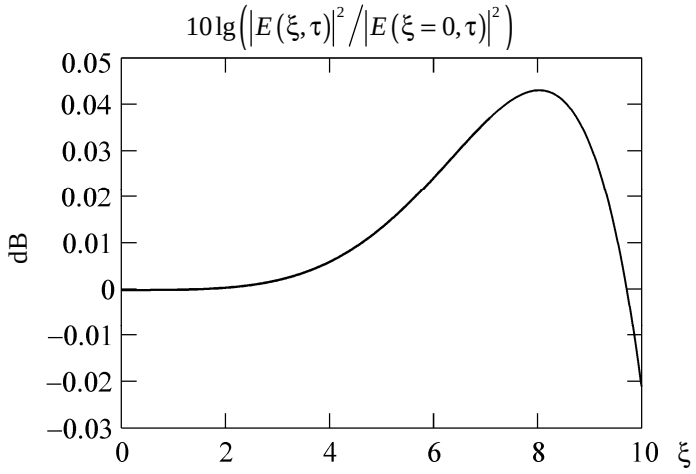


Рис.2. Зависимость задержки максимума импульса от пройденного расстояния: $\tau_d = 0.0275(\xi + 0.5)^2 - 0.006875$.

На рис.3 показана зависимость максимального значения пика импульса в зависимости от расстояния. Как видно из рисунка, до $\xi = 8$ максимальное значение импульса возрастает, потом начинает убывать. Начальное увеличение максимума импульса, как было отмечено выше, определяется увеличением длинноволновой компоненты спектра импульса за счет коротковолновой компоненты того же импульса. После $\xi = 8$ максимум импульса начинает уменьшаться в основном за счет действия дисперсии среды.

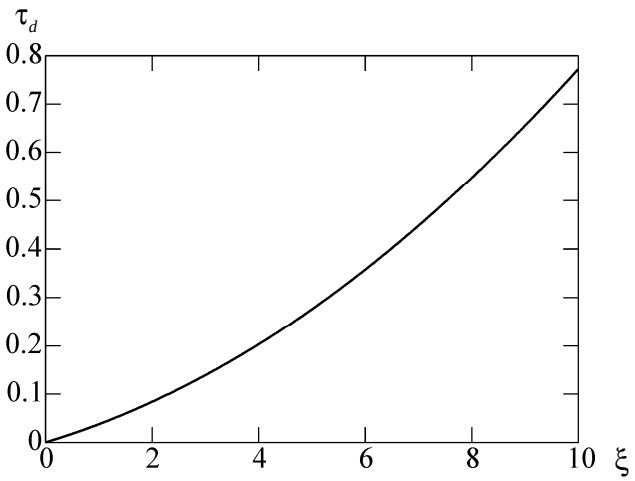


Рис.3. Зависимость максимального значения импульса от пройденного расстояния.

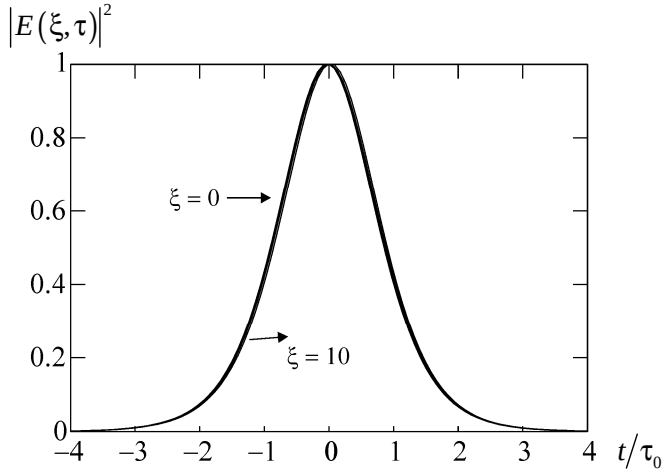


Рис.4. Эволюция временного профиля импульса на расстоянии десяти дисперсионных длин при $\alpha_5 = 0$.

На рис.4 представлена эволюция импульса через десять длин дисперсии при $\alpha_5 = 0$, полученная численным решением уравнения (14). Как видно из рисунка, имеет место распространение солитонной волны. Среднеквадратичное отклонение значения вектора ошибки $\left(\left| E(\xi = 0, \tau) \right|^2 - \left| E(\xi, \tau) \right|^2 \right)$, полученное во время вычислений, когда $\alpha_5 = 0$ равно 1.3759×10^{-3} при $\xi = 2.5$; 2.5492×10^{-3} при $\xi = 5$; 5.2174×10^{-3} при $\xi = 7.5$; 8.1397×10^{-3} при $\xi = 10$.

5. Заключение

НУШ высокого порядка сведено к системе обыкновенных дифференциальных уравнений. Методом Рунге-Кутта получено численное решение системы обыкновенных дифференциальных уравнений. Исследован процесс влияния диссипативного рамановского члена на стабильность фемтосекундного солитона первого порядка. Показано, что при $\alpha_5 = 0$ существует аналитическое солитонное решение НУШ высшего порядка. Получена зависимость запаздывания пика импульса от пройденного расстояния при $\alpha_5 \neq 0$. Показано, что запаздывание пика пропорционально τ_0^{-4}, что согласуется с опубликованными экспериментальными данными. С целью оценки корректности предлагаемого численного метода вычислено среднеквадратичное отклонение значения вектора ошибки, соответствующее разности между аналитическим и численно полученным солитонными решениями.

ЛИТЕРАТУРА

1. **A.Hasegawa, F.Tappert.** Appl. Phys. Lett., **23**, 142 (1973).
2. **A.Hasegawa, F.Tappert.** Appl. Phys. Lett., **23**, 171 (1973).
3. **L.F.Mollenauer, R.H.Stolen, J.P.Gordon.** Phys. Rev. Lett., **45**, 1095 (1980).
4. **P.Andrekson.** LEOS newsletter, **13**, 3 (1999).
5. **A.Hasegawa, K.Kodama.** Solitons in Optical Communications. Oxford University Press, 1995.
6. **G.P.Agrawal.** Nonlinear Fiber Optics. New York, Academic Press, 2001.

7. **A.Hasegawa.** Opt. Lett., **8**, 650 (1983).
8. **R.Hirota.** J. Math. Phys., **14**, 805 (1973).
9. **M.J.Potasek, M.Tabor.** Phys. Letters A, **154**, 449 (1991).
10. **E.M.Gromov, L.V.Piskunova, V.V.Tyutin.** Phys. Letters A, **256**, 153 (1999).
11. **V.I.Karpman, J.J.Rasmussen, A.G.Shagalov.** Phys. Rev. E, **64**, 026614 (2001).
12. **F.M.Mitschke, L.F.Mollenauer.** Opt. Lett., **11**, 659 (1986).
13. **D.L.Hovhannisyan.** Opt. Commun., **196**, 103 (2001).
14. **J.P.Gordon.** Opt. Lett., **11**, 662 (1986).
15. **W.-P.Hong,** Z. Naturforsch., **58a**, 667 (2003).
16. **G.P.Agrawal, C.Headley.** Phys. Rev. A, **46**, 1573 (1992).
17. **F.M.Sears, L.G.Cohen, J.Stone.** J. Lightwave Technol., **LT-2**, 181 (1984).
18. **W.E.Schiesser, G.W.Griffiths.** A Compendium of Partial Differential Equation Models, Method of Lines Analysis with Matlab. Cambridge University Press, 2009.
19. **J.H.Mathews, K.K.Fink.** Numerical Methods Using Matlab. 4th edition, Prentice Hall, 2004.
20. **D.Hovhannisyan, S.Manucharyan**. Microw. Opt. Techn. Let., **47**, 359 (2005).

ՖԵՄՏՈՎԱՅՐԿՅԱՆԱՅԻՆ ՕՊՏԻԿԱԿԱՆ ՍՈԼԻՏՈՆԻ ՄԻԱՄՈԴ ՄԱՆՐԱԹԵԼՈՒՄ ՏԱՐԱԾՄԱՆ ԹՎԱՅԻՆ ՄՈԴԵԼԱՎՈՐՈՒՄԸ, ՄԻՋԱՎԱՅՐԻ ՌԱՄԱՆՅԱՆ ԱՐՁԱԳԱՆՔԻ ԿԵՂԾ ՄԱՍԻ ՀԱՇՎԱՌՄԱՆ ԴԵՊՔՈՒՄ

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

Ուսումնասիրված է միջավայրի ռամանյան իներցիոն արձագանքի ազդեցությունը առաջին կարգի ֆեմտովայրկյանային սոլիտոնի կայունության վրա: Կառուցված է ոչ գծային, բարձր կարգի ռամանյան կոմպլեքս անդամ պարունակող Շրեդինգերի հավասարման (ՈԳՇՀ) թվային լուծում, որը նկարագրում է ֆեմտովայրկյանային օպտիկական սոլիտոնի տարածումը միամոդ մանրաթելում: Ցույց է տրված, որ հավասարման գործակիցների վրա դրված որոշակի պայմանների դեպքում գոյություն ունի բարձր կարգի ՈԳՇՀ-ան սոլիտոնա-յին լուծում: Այդ պայմանները բերում են ալիքի երկարության, մանրաթելի տեսակի և էներ-գիայի մաքսիմումի որոշակի սահմանափակումների: Ստացվաց արդյունքները համապա-տասխանում են փորձնական արդյունքներին:

NUMERICAL MODELING OF FEMTOSECOND OPTICAL SOLITON PROPAGATION IN A SINGLE-MODE FIBER WITH ALLOWANCE FOR THE RAMAN RESPONSE IMAGINARY PART

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

The impact of the dissipative Raman term on the femtosecond first-order soliton stability is studied. The numerical solution of nonlinear high-order Schrodinger equation (NLSE) with the complex Raman term describing the femtosecond optical soliton propagation in single mode fiber is obtained. It is shown that under some conditions on the coefficients of the equation there exists a soliton solution of the high-order NLSE. These conditions lead to the restrictions on the wavelengths, the types of optical fibers, and the peak of power. Numerical simulations closely follow to the published experimental data.

Известия НАН Армении, Физика, т.45, №6, с.401-406 (2010)

УДК 537.311

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ, ГИДРОСТАТИЧЕСКОГО ДАВЛЕНИЯ И ТЕМПЕРАТУРЫ НА ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ В КВАНТОВОЙ ЯМЕ ПЕШЛЯ–ТЕЛЛЕРА

А. ХАКИМИФАРД[1], М.Г. БАРСЕГЯН[1], К.А. ДЮКЕ[2], А.А. КИРАКОСЯН[1]

[1]Ереванский государственный университет, Армения

[2]Институт физики, Университет Антикуа, Мэделин, Колумбия

(Поступила в редакцию 12 марта 2010 г.)

Исследовано влияние электрического поля и гидростатического давления на электронные состояния в полупроводниковой квантовой яме с ограничивающим потенциалом Пешля–Теллера. В рамках вариационного метода вычислена энергия основного состояния как функция электрического поля и гидростатического давления при различных значениях параметров потенциала и температуры. Показано, что увеличение электрического поля приводит к увеличению энергии основного состояния, а увеличение ширины ямы – к усилению влияния поля. Энергия основного состояния уменьшается при увеличении гидростатического давления и увеличивается при повышении температуры.

1. Введение

Полупроводниковые гетероструктуры и приборы на их основе представляют собой одни из важнейших объектов современной физики полупроводниковой электроники [1,2]. Прогресс в области микро- и оптоэлектроники в значительной степени обусловлен использованием низкоразмерных гетероструктур. В настоящее время широко изучаются физические процессы в полупроводниковых гетероструктурах с квантовыми ямами (КЯ), что связано с использованием таких систем в качестве детекторов инфракрасного и дальнего инфракрасного излучения.

Применение электрического поля по направлению роста гетероструктуры приводит к поляризации распределения носителей заряда и к изменению энергии квантовых состояний, что следует учитывать при расчете характеристик современных приборов микро- и оптоэлектроники, поскольку в ряде случаев это может привести к качественно новым результатам [3-10].

Исследование влияния гидростатического давления также имеет важное значение в расчетах оптических характеристик низкоразмерных структур, поскольку применением гидростатического давления можно управлять переходами между различными энергетическими уровнями в них [11,12].

В работах [13,14] в рамках вариационного метода исследована зависимость энергии основного состояния от напряженности электрического поля в полупроводниковой КЯ с бесконечным прямоугольным потенциалом, когда электрическое поле направлено вдоль оси роста гетероструктуры. В работе [15] изучено влияние электрического поля на электронные состояния и спектр межподзонного поглощения в полупроводниковой КЯ с потенциалом Пёшля–Теллера. В рамках вариационного метода исследовано поведение уровней энергии основного и первого возбужденного состояний для различных значений напряженности электрического поля, когда все остальные параметры потенциала фиксированы. В [16] рассмотрено влияние магнитного поля и гидростатического давления на межподзонные оптические переходы в КЯ с потенциалом Пешля–Теллера. Показано, что увеличение гидростатического давления приводит к красному смещению в спектре оптического поглощения.

В данной работе в рамках вариационного метода исследовано влияние электрического поля и гидростатического давления на электронные состояния в полупроводниковой квантовой яме с ограничивающим потенциалом Пешля–Теллера. Рассмотрено также влияние асимметричности потенциала и температуры на энергию основного состояния.

2. Теория

Гамильтониан электрона в рассматриваемой системе имеет вид [17]

$$\hat{H}\left(P,T\right)=-\frac{\hbar^2}{2m\left(P,T\right)}\nabla^2+V\left(z,P,T\right)+eFz\,, \tag{1}$$

где e – модуль заряда электрона, F – напряженность электрического поля, направленного вдоль оси z, $m\left(P,T\right)$ – эффективная масса электрона, зависящая от давления и температуры [18,19]:

$$m\left(P,T\right)=\left[1+\frac{15020}{E_g\left(P,T\right)}+\frac{7510}{E_g\left(P,T\right)+341}\right]^{-1}m_0,\,, \tag{2}$$

где $E_g\left(P,T\right)$ – ширина запрещенной зоны GaAs:

$$E_g\left(P,T\right)=\left(1519+10.7P-\frac{0.5405T^2}{T+204}\right)\text{meV}\,, \tag{3}$$

$V\left(z,P,T\right)$ – ограничивающий потенциал Пешля–Теллера [20]:

$$V\left(z,P,T\right)=\frac{\hbar^2\beta^2}{2m\left(P,T\right)}\left(\frac{\chi\left(\chi-1\right)}{\sin^2[\beta(P)z]}+\frac{\lambda\left(\lambda-1\right)}{\cos^2[\beta(P)z]}\right), \tag{4}$$

λ и χ – параметры потенциала, $\beta\left(P\right)=\pi/2L\left(P\right)$, $L\left(P\right)$ – характеристическая ширина КЯ при заданном давлении. В случае GaAs, согласно [21], имеем

$$L_z(P) = L_z(0)\left(1 - 1.9\times10^{-3}P\right), \tag{5}$$

где P измеряется в килобарах, $L_z(0)$ – характеристическая ширина при $P = 0$. При $\lambda = \chi$ потенциал (4) симметричен относительно прямой $\beta(P)z = \pi/4$, а при $\lambda \neq \chi$ появляется асимметричность, которой можно управлять изменением указанных параметров.

Следуя вариационному принципу, волновую функцию основного состояния запишем в виде [14]

$$f(z,\alpha) = Nf_0(z)\exp(-\alpha z), \tag{6}$$

где α – вариационный параметр, N – постоянная нормировки, $f_0(z)$ – волновая функция электрона в отсутствие электрического поля [20].

Энергия основного состояния дается выражением [21]

$$E = \left\langle f(z,\alpha_{\min})\middle|\hat{H}\middle|f(z,\alpha_{\min})\right\rangle, \tag{7}$$

где $\alpha_{\min}$ – значение вариационного параметра, которому соответствует минимальное значение энергии основного состояния.

3. Обсуждение

Рис.1 иллюстрирует влияние электрического поля на профиль симметричного потенциала Пешля–Теллера при $P = 0$, $T = 4$ K, $L = 100$ Å. Видно, что электрическое поле приводит к добавочной асимметрии потенциала, причем с увеличением напряженности поля положение минимума потенциала поднимается, а эффективная ширина КЯ уменьшается, что приводит к усилению локализации носителя заряда.

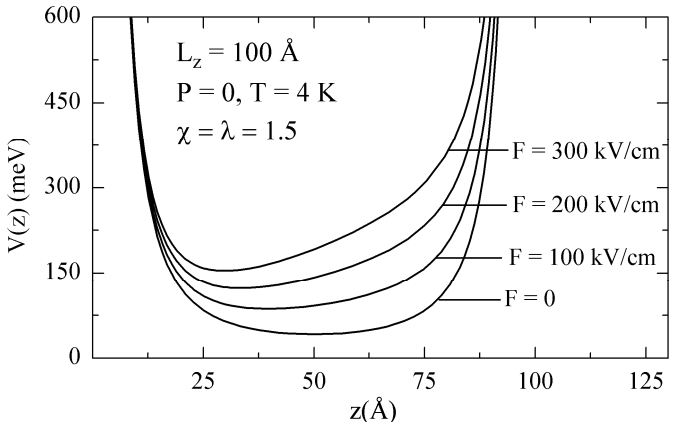


Рис.1. Форма потенциала Пешля–Теллера при различных значениях напряженности электрического поля.

На рис.2 представлены зависимости плотности вероятности распределения электрона в основном состоянии для различных значений

напряженности электрического поля (рис.2а) и параметра λ (рис.2б) при фиксированных значениях χ и *L*. Как видно из рисунка, увеличение электрического поля и параметра λ приводят к смещению максимумов плотности вероятности из центральной части КЯ влево и к их повышению, что обусловлено смещением минимума потенциала влево и, как следствие, усилением локализации электрона.

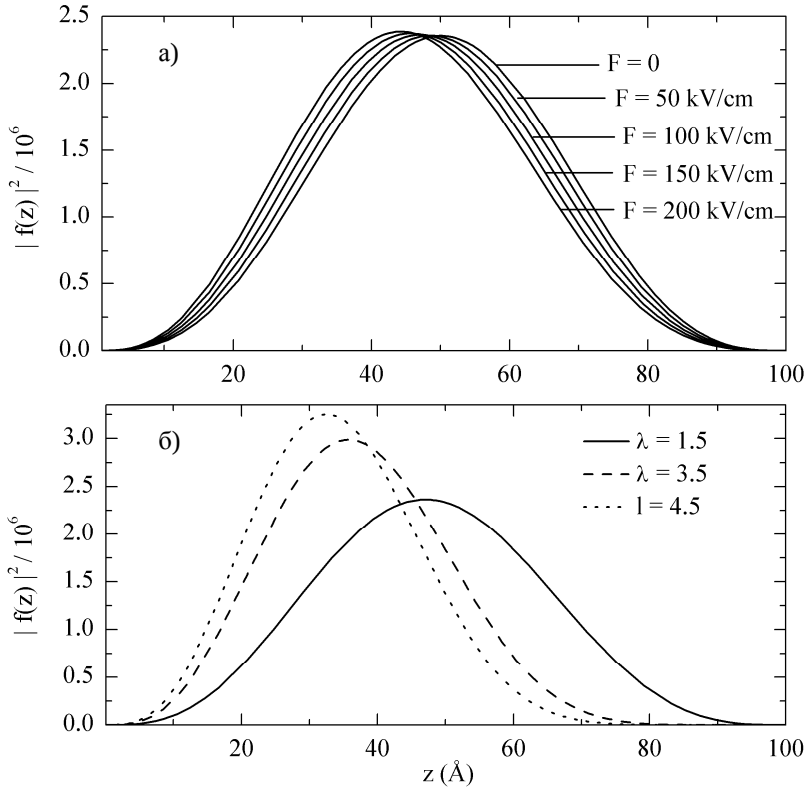


Рис.2. Зависимость плотности вероятности от координаты при различных значениях напряженности электрического поля (а) и параметра λ (б) при $P = 0$, $T = 4$ K.

На рис.3 приведены зависимости энергии основного состояния от напряженности электрического поля для различных значений параметра λ и ширины КЯ. Увеличение напряженности электрического поля приводит к увеличению энергии основного состояния, что обусловлено отмеченным выше усилением локализации с увеличением напряженности электрического поля (рис.1 и рис.2а). Из рис.3 также видно, что влияние электрического поля на энергию основного состояния больше для больших значений ширины КЯ, поскольку увеличение области локализации электрона приводит к ослаблению размерного квантования и усилению влияния электрического поля на электрон.

Увеличение параметра λ также приводит к увеличению энергии из-за сужения области локализации (рис.2б).

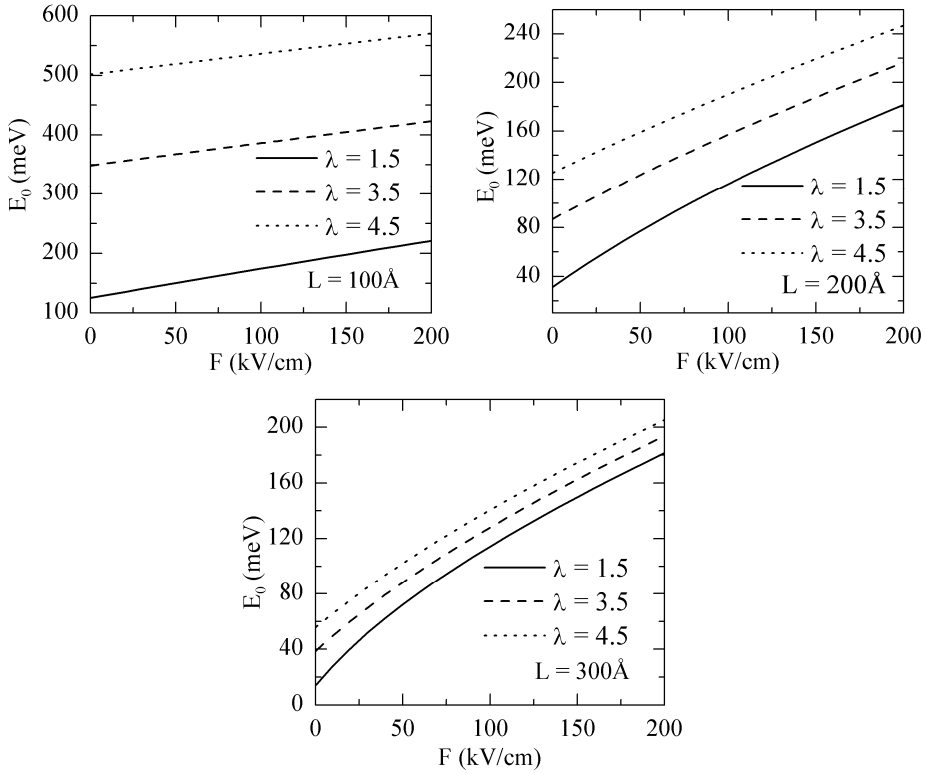


Рис.3. Зависимость энергии основного состояния от напряженности электрического поля при различных значениях параметра λ и ширины КЯ при P = 0, T = 4 K.

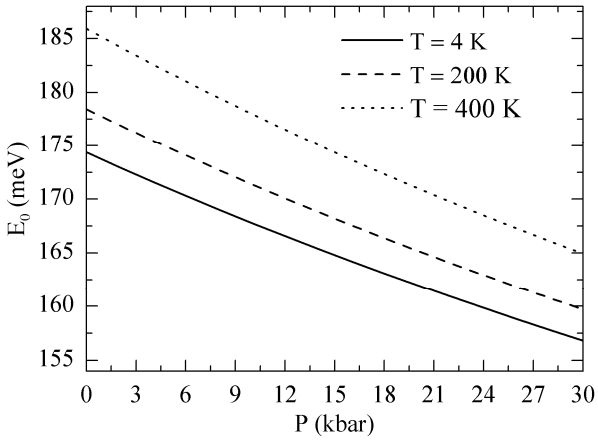


Рис.4. Зависимость энергии основного состояния от гидростатического давления для различных значений температуры при λ = χ = 1.5, L = 100 Å, F = 100 кВ/см.

На рис.4 представлена зависимость энергии основного состояния от гидростатического давления для различных значений температуры. При увеличении гидростатического давления энергия электрона уменьшается, так как дно потенциала смещается вниз, и область локализации электрона увеличивается [16]. Повышение температуры при фиксированных значениях остальных параметров приводит к увеличению энергии основного состояния. Это обусловлено тем, что увеличение температуры приводит к повышению дна потенциала и, как следствие, к уменьшению области локализации электрона [16].

ЛИТЕРАТУРА

1. **Zh.I.Alferow.** Rev. Mod. Phys., **73**, 767 (2001).
2. **В.Н.Драгунов и др.** Основы наноэлектроники. Новосибирск, НГТУ, 2004.
3. **А.Н.Пихтин, О.С.Комков, К.В.Базаров**. ФТП, **40**, 608 (2006).
4. **О.Л.Лазаренкова, А.Н.Пихтин.** ФТП, **32**, 1108 (1998).
5. **K.F.Ilaiwi**, Superlatt. Microstruct., **20**, 173 (1996).
6. **H.Thien Cao**, **D.B.Tran Thoai.** Solid State Commun., **97**, 643 (1996).
7. **V.Narayani, B.Sukumar.** Solid State Commun., **90**, 579 (1994).
8. **C.A.Duque, A.Montes**, **A.L.Morales.** Physica B, **302/303**, 84 (2001).
9. **N.Porras-Montenegro, et al.** J. Appl. Phys., **74**, 7624 (1993).
10. **A.Montes, C.A.Duque**, **N.Porras-Montenegro.** J. Phys.: Cond. Matt., **10**, 5351 (1998).
11. **M.Chandrasekhar, H.R.Chandrasekhar.** High Pressure Res., **9,** 57 (1992).
12. **M.Chandrasekhar, H.R.Chandrasekhar.** Phil. Mag. B, **70,** 369 (1994).
13. **Doyeol Ahn, S.L.Chuang.** Appl. Phys. Lett., **49**, 1450 (1986).
14. **G.Bastard, E.E.Mendez, L.L.Chang, L.Esaki.** Phys. Rev. B, **28,** 3241 (1983).
15. **H.Yildirim, M.Tomak.** Eur. Phys. J. B, **50,** 559 (2006).
16. **Alireza Hakimyfard, M.G.Barseghyan, A.A.Kirakosyan.** Phys. E, **41,** 1596 (2009).
17. **A.L.Morales, A.Montes, S.Y.López, C.A.Duque.** J. Phys.: Cond. Matt., **14**, 987 (2002).
18. **Alireza Hakimyfard, M.G.Barseghyan, C.A.Duque, A.A.Kirakosyan.** Phys. B, **404,** 5159 (2009).
19. **A.M.Elabsy**. J. Phys.: Cond. Matt., **6,** 10025 (1994).
20. **З.Флюгге.** Задачи по квантовой механике, т.1. М., Мир, 1974.
21. **G.Bastard.** Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructure. Les Ulis Cedex France, 1998.

INFLUENCE OF ELECTRIC FIELD, HYDROSTATIC PRESSURE AND TEMPERATURE ON THE ELECTRONIC STATES IN A PÖSCHL–TELLER QUANTUM WELL

A. HAKIMYFARD, M.G. BARSEGHYAN, C.A. DUQUE, A.A. KIRAKOSYAN

Influence of the electric field and hydrostatic pressure on the electronic states in a Pöschl–Teller quantum well is studied. In the framework of variational method the dependences of the ground state energy on the electric field and hydrostatic pressure are calculated for different values of the potential parameters and the temperature. It is shown that the increase in the electric field leads to the increase in the ground state energy, while the increase in the well width leads to the strengthening of the electric field effect. The ground state energy decreases with increasing pressure and increases with increasing temperature.

Известия НАН Армении, Физика, т.45, №6, с.407-416 (2010)

УДК 535.215

ПОЛЕВОЙ ТРАНЗИСТОР НА ОСНОВЕ ПЛЕНОК ZnO:Li

Р.К. ОВСЕПЯН, Н.Р. АГАМАЛЯН, С.И. ПЕТРОСЯН

Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак

(Поступила в редакцию 18 марта 2010 г.)

Получены полевые транзисторы с *n*- и *p*-типами канала на основе оксидных пленок ZnO:Li и фторидной пленки MgF_2 в качестве изолятора затвора. Исследован полевой эффект, а также влияние УФ излучения на полевой эффект в тонких пленках ZnO:Li. Изучены фотоэлектрические характеристики полученных тонкопленочных полевых транзисторов. Предложен механизм фотоэлектрического усиления в полученных тонкопленочных полевых транзисторах.

1. Введение

Пленки ZnO относятся к широкозонным полупроводникам с электронным типом проводимости и обладают множеством интересных свойств. Важным достоинством этих пленок является возможность управления их свойствами, типом и величиной проводимости введением донорной или акцепторной примеси [1-3]. Примесь Ga в пленках ZnO действует как донор, увеличивая проводимость, в то время как акцепторная примесь Li уменьшает проводимость [4] или меняет тип проводимости с электронного на дырочный. Кислородные вакансии в пленках ZnO также действуют как доноры. Исследованию полевого эффекта в тонких пленках ZnO посвящено множество работ [5-10], однако отсутствуют данные по исследованию фотоэлектрических свойств компенсированных полупроводников ZnO:Li, используемых в полевых транзисторах в качестве канала. Тонкопленочные прозрачные полевые транзисторы перспективны для использования в прозрачных дисплеях.

Целью настоящей работы было исследование фотоэлектрических характеристик полевого эффекта в пленках ZnO:Li с дырочной или электронной проводимостью для создания детекторов УФ излучения на основе полевых транзисторов с каналом *n*-типа и прозрачных полевых транзисторов с каналами *n*- или *p*-типа. Предложен механизм фотоэлектрического усиления в этих тонкопленочных полевых транзисторах.

2. Эксперимент

Легированные пленки ZnO для исследования полевого эффекта были получены методом электронно-лучевого напыления в вакууме [3] с использованием сапфировых подложек с ориентацией (001). Мишени для

напыления изготовлялись методом твердофазного синтеза с добавлением в ZnO примеси Li_2O или Ga_2O_3. Все образцы были изготовлены в одинаковых условиях: энергия электронов была ~6 кэВ, температура подложки поддерживалась при 250±1 °C и скорость роста составляла 1.45 нм /с. В качестве изолятора затвора использовались пленки MgF_2, полученные методом термического вакуумного напыления.

Измерения фото- и темновой проводимости осуществлялись на планарной структуре полевого транзистора с различным отношением ширины (W) к длине (L) канала: W / L = 1:1 для фотоэлектрических измерений и W / L = 1:10 для темновых измерений. Измерения фотопроводимости и времени релаксации фотопроводимости проводились модулированным оптическим излучением при постоянном напряжении смещения. В качестве источника УФ излучения использовались излучение светодиода L-7113UV ($h\nu$ = 3.14 эВ), интенсивность которого на поверхности пленки составляла 5.2 мВт/см^2. При измерении спектральной зависимости фотопроводимости использовалось немодулированное монохроматическое излучение в спектральном диапазоне 4.6−2.5 эВ (270−500 нм) от галогенной лампы (100 Вт) и дифракционный монохроматор МДР-4. Регистрация фототока осуществлялась с помощью синхронно-фазового усилителя фирмы «UNIPAN» на частоте модуляции светового излучения 177 Гц. Сбор данных и управление экспериментом осуществлялись с помощью системы DAQ-board фирмы National Instruments. Холловская подвижность измерялась методом Ван-дер-Пау при напряженности магнитного поля 1−2 Т. Кристаллическое качество и ориентация пленок оценивались методом рентгеновской дифракции (XRD) с помощью дифрактометра ДРОН-3 с использованием излучения CuKα (λ = 0.1542 нм).

3. Результаты и их обсуждение

Из данных рентгеноструктурного анализа следует, что полученные пленки ZnO:Li и ZnO:Ga имели преимущественную ориентацию вдоль оси (0002), перпендикулярную плоскости подложки. Пленки MgF_2 имели аморфную структуру.

На рис.1 показана схема создаваемого тонкопленочного полевого транзистора. Для получения транзистора при напылении использовались маски-трафареты. На единой подложке сапфира были изготовлены четыре одинаковых по структуре планарных полевых транзистора с размерами 5×5 мм^2 и 2×2 мм^2. Первоначально пленка ZnO:Li, наносимая в качестве канала полевого транзистора, после напыления отжигались на воздухе, в результате чего ее проводимость уменьшалась (см. табл.1). Увеличение температуры и длительности отжига до 600 °C/30 мин приводило к изменению типа проводимости с электронного на дырочный. Далее наносилась пленка MgF_2, выполняющая роль изолятора-затвора с толщиной 300 нм, диэлектрической проницаемостью ε = 4.8 и удельной проводимостью 1×10^{-11} (Ом см)$^{-1}$. Затем наносились пленки ZnO:Ga, используемые в качестве электродов затвора стока

и истока, с высокой удельной проводимостью 20 (Ом см)$^{-1}$. Сверху наносились электроды из металлического алюминия. Эффективная емкость полученного перехода затвор–сток составляла 60–100 нФ/см^2.

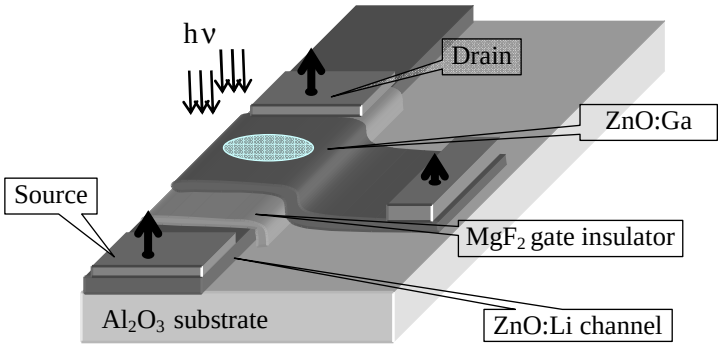


Рис.1. Схема тонкопленочного полевого транзистора, созданного на основе пленок ZnO.

На рис.2 приведена зависимость изменения проводимости $\Delta\sigma_s$ канала полевого транзистора от плотности поверхностного заряда Q при различных режимах отжига на воздухе пленок ZnO:Li. Эффективная полевая подвижность μ_{FE} определялась из отношения $\mu_{FE} = \Delta\sigma_S / Q$. Результаты представлены в табл.1. Измерения показали, что отжиг на воздухе вплоть до 500 °C/10 мин, приводит к уменьшению кислородных вакансий, т.е. донорных центров, вследствие чего уменьшается проводимость и увеличивается полевая и холловская подвижность в пленках ZnO:Li. Дальнейший отжиг пленок ZnO:Li приводит к изменению типа проводимости с электронного на дырочный. Необходимо отметить, что пленки с дырочной проводимостью обладают меньшей полевой подвижностью, чем пленки с электронной проводимостью. В пленках ZnO:Li, подвергнутых отжигу на воздухе и обладающих темновой проводимостью ~10^{-3}–10^{-4} (Ом см)$^{-1}$, транспорт носителей осуществляется прыжковым механизмом [11,12]. Наиболее высокой полевой подвижностью (табл.1) обладали такие же пленки.

Табл.1. Электрические характеристики пленок ZnO:Li, использованных в качестве канала полевого транзистора, при различных режимах отжига.

	Отжиг T, °C τ, мин	Толщина канала d, нм	Проводимость пленки σ_{dark}, (Ом см)$^{-1}$	Полевая подвижность μ_{FE}, см^2/Вс	Холловская подвижность μ, см^2/Вс	Концентрация носителей N, см$^{-3}$	Тип
1	as-dep.	300	1.6×10^{-3}	2.7	14.2	6.9×10^{14}	*n*
2	300/10	330	7.7×10^{-3}	9.8	18.6	2.5×10^{15}	*n*
3	500/10	280	0.02	15	50.8	2.5×10^{15}	*n*
4	500/30	300	1×10^{-3}	0.6	0.7	8.7×10^{15}	*p*

5	600/10	320	0.01	1.2	2.2	3.1×10^{16}	*p*
6	600/30	320	0.06	1.3	2.6	8.7×10^{17}	*p*

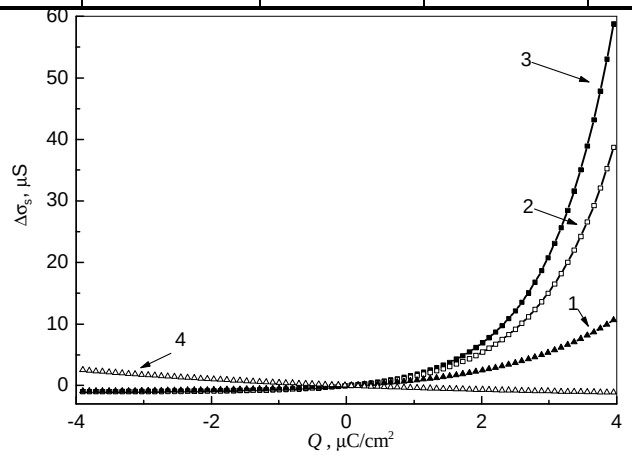


Рис.2. Зависимость изменения проводимости $\Delta\sigma_s$ канала полевого транзистора от плотности поверхностного заряда Q при различных режимах отжига пленок ZnO:Li на воздухе. Кривые 1–3 – *n*-ZnO:Li и кривая 4 – *p*-ZnO:Li. Режимы отжига: 1 – as-dep.; 2 – 300° C /10 мин; 3 – 500° C /10 мин и 4 – 500° C /30 мин.

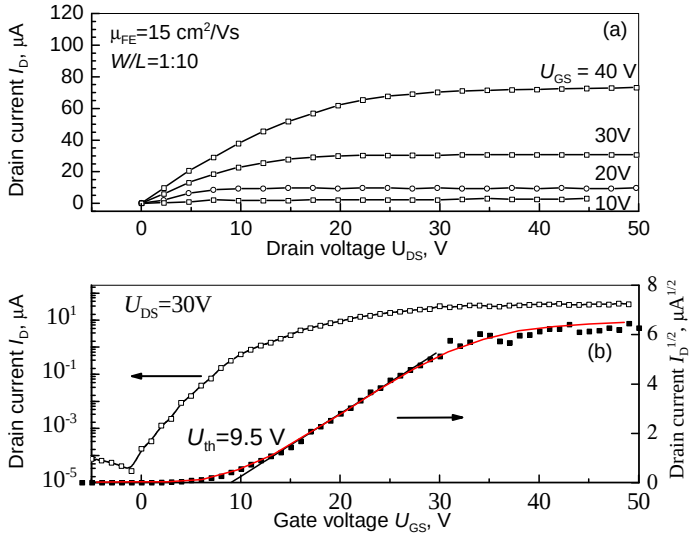


Рис.3. Электрические характеристики тонкоплёночного полевого транзистора: (a) зависимость тока стока I_D от напряжения стока U_{DS} при различных напряжениях затвор–сток; (b) зависимость тока стока I_D и $(I_D)^{1/2}$ от напряжения затвора U_{GS}.

На рис.3 представлены зависимости тока стока I_D от напряжения стока U_{DS} при различных напряжениях затвор–сток и зависимости тока стока I_D от

напряжения затвора U_{GS}. На полевых транзисторах с *n*-типом канала, изготовленных на основе пленок ZnO:Li с максимальной величиной полевой подвижности μ_{FE} = 15 см^2/Вс, были получены наилучшие характеристики: пороговое напряжение U_{th} = 9.5 В, отношение тока стока в закрытом состоянии к открытому более чем 10^7 и сопротивление канала ~1.5×10^8 Ом. Пороговое напряжение U_{th} = 9.5 В определялось из выражения

$$I_D = (1/2)\mu_H C_i (W/L)(U_{GS} - U_{th})^2 \qquad (1)$$

при условии $U_{DS} > U_{GS} - U_{th}$, аппроксимацией зависимости $(I_D)^{1/2}$ прямой линией до ее пересечения с осью абсцисс (рис.3б). Здесь C_i – удельная емкость затвора, обусловленная его изолятором, μ_H – холловская подвижность носителей заряда в пленках ZnO:Li.

Для изучения влияния УФ излучения на свойства полевого транзистора были получены полевые фототранзисторы с каналом *n*-типа, изготовленные на основе пленок ZnO:Li, с отношением ширины канала к длине канала W / L = 1:1 и максимальной величиной полевой подвижности μ_{FE} = 15 см^2/Вс. Толщина канала равнялась h = 3 нм и сопротивление канала составляло ~6×10^{10} Ом. Из зависимости $(I_D)^{1/2}$ от напряжения затвора U_{GS} (при напряжении сток–исток U_{DS} = 100 В), как и в случае обычного полевого транзистора (рис.3б), из экстраполяции начального участка зависимости $(I_D)^{1/2}$ прямой до пересечения с осью абсцисс, была определена величина порогового напряжения фототранзистора U_{th} = 8 В. Полученные полевые фототранзисторы работали вплоть до напряженности электростатического поля изолятора затвора 1.0 МВ/см, диэлектрические утечки затвора при этом составили J_{GL} = 3.0×10^6 А/см^2.

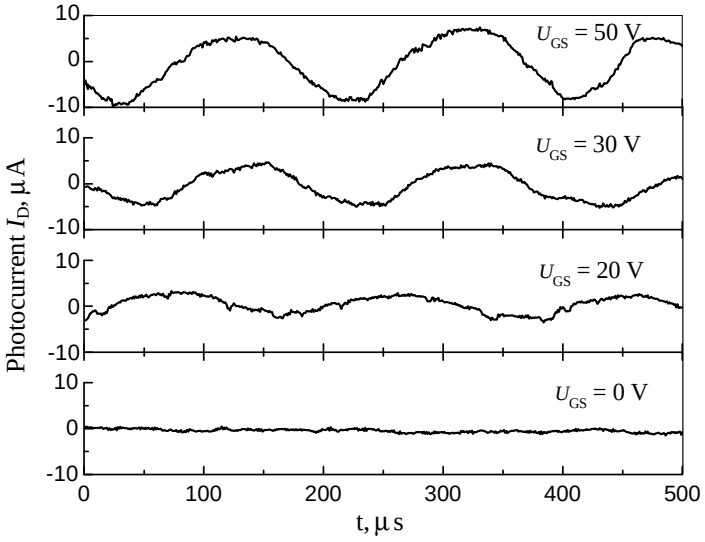


Рис.4. Кинетика фототока I_D для модулированного УФ излучения при различных напряжениях исток – затвор U_{GS} при W/L = 1:1 и U_{DS} = 100 В.

На рис.4 представлена зависимость тока стока от времени для синусоидально модулированного УФ излучения при различных напряжениях исток–затвор U_{GS} при величине напряжения сток–исток U_{DS} = 100 В. Величина фототока I_D зависит от напряжения исток–затвор и с увеличением этого напряжения возрастает.

Коэффициент фотоэлектрического усиления G по постоянному току определялся при воздействии на фотоприемник излучения с плотностью мощности W. Коэффициент фотоэлектрического усиления определялся как отношение количества электронов, протекающих по стоку, к количеству падающих на приемник фотонов, т.е. по формуле [9]

$$G = \left(I_{\mathrm{D}}/e\right)/\left(W/h\nu\right).$$

Фотоэлектрическая составляющая тока стока I_{D} для расчета коэффициента фотоэлектрического усиления определялась из данных, представленных на рис.4. На рис.5а представлена зависимость коэффициента фотоэлектрического усиления от плотности мощности падающего излучения для полевого фототранзистора размерами 5×5 мм^2. На кривых усиления различимы две области: до 2 мВт/см^2, где величина G является практически постоянной, и больше 2 мВт/см^2, где величина G возрастает и достигает величины ~120 при интенсивности 10 мВт/см^2. Зависимость коэффициента фотоэлектрического усиления от напряжения затвора U_{GS} в полулогарифмическом масштабе представлена на рис.5б. Коэффициент фотоэлектрического усиления для полевого фототранзистора возрастает от напряжения затвора и достигает величины ~120 при напряжениях затвора 50 В, что соответствует напряженности поля в области изолятора затвора 200 кВ/см.

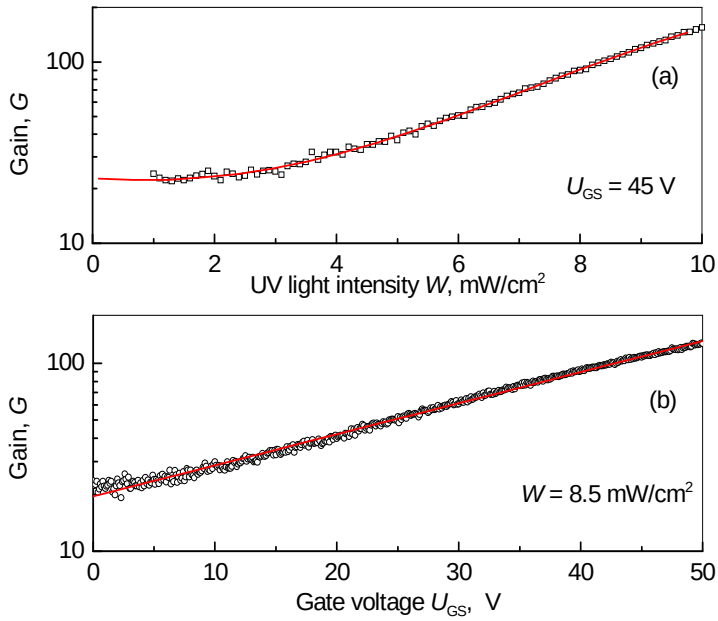


Рис.5. Зависимость коэффициента фотоэлектрического усиления G полевого фототранзистора от плотности мощности W падающего излучения (a) и напряжения затвора U_{GS} (b).

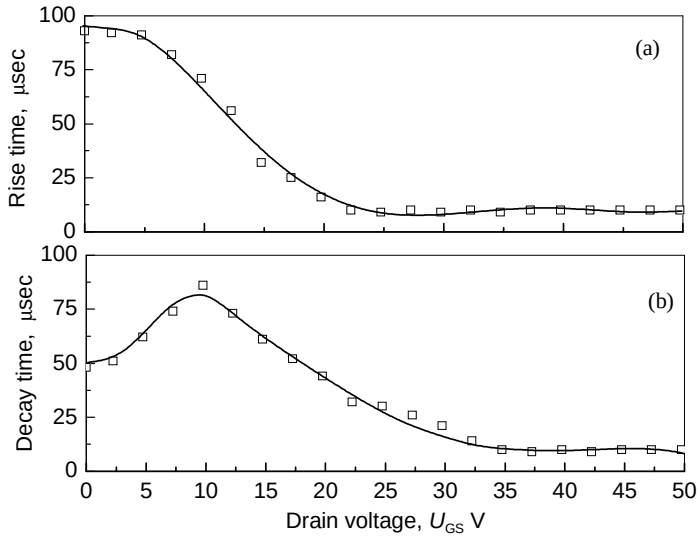


Рис.6. Зависимость времени нарастания τ_{rise} (a) и спада τ_{decay} (b) фотопроводимости от напряжения U_{GS} затвора фототранзистора.

Повышение фотоэлектрического усиления G от напряжения затвора U_{GS} и плотности мощности W (рис.5) можно объяснить различной скоростью дрейфа дырок и электронов, образующихся под воздействием света, в электрическом поле под затвором. В исследуемых пленках ZnO:Li холловская подвижность дырок намного меньше, чем подвижность электронов: $\mu_p / \mu_n = 2.2 / 18.6$ (см. табл.1). Поэтому генерируемые светом электроны быстро выносятся полем, так что в области сильного поля остаются только дырки. Для обеспечения зарядовой компенсации из истока инжектируются электроны, вследствие чего увеличивается ток сток–исток. Усиленный ток течет до тех пор, пока дрейфующие дырки не покинут область сильного поля.

Коэффициент фотоэлектрического усиления пропорционален изменению концентрации фотоэлектронов, т.е. $G \sim \Delta n$. В свою очередь Δn пропорционально времени жизни фотовозбужденных дырок τ_p и обратно пропорционально времени пребывания фотоэлектронов в зоне сильного поля τ_n. Тогда выражение для коэффициента фотоэлектрического усиления приобретает вид $G = \eta_{Ph}(\tau_p / \tau_n)$, где η_{Ph} – эффективный квантовый выход. Время пребывания электрона в области сильного поля обратно пропорционально напряженности электрического поля E на переходе изолятор затвора – канал $\tau_n = d/\mu_n E$, где d – толщина канала. Время жизни фотовозбужденных носителей (электронов или дырок) не зависит от напряженности на переходе изолятор затвора – канал.

Оценим глубину проникновения электрического поля на переходе изолятор затвора – канал в этих транзисторах. В исследуемых структурах в качестве канала использовались компенсированные полупроводники с низкой проводимостью и малой подвижностью носителей заряда. Дебаевскую длину экранирования можно оценить из выражения $L_D = \sqrt{D_n \tau_d}$, где D_n – коэффициент диффузии электронов и τ_d – время максвелловской релаксации, которые в нашем случае равны, соответственно, 0.47 см^2/с и 3.9×10^{-11} с. Тогда величина

L_D = 4.2×10^{-6} см, в то время как средняя толщина канала ~0.3×10^{-4} см. Следовательно, можно говорить о сильном электрическом поле в области перехода изолятор затвора–канал транзистора, а это означает, что наибольший вклад в коэффициент фотоэлектрического усиления дают фотоэлектроны, которые генерируются в этой области.

Включение и выключение УФ излучения приводит к изменению фототока. При этом нарастание тока аппроксимируется зависимостью $I_D^{photo} = A_1\left[1-\exp(-t/\tau_{rise})\right]$ и спад выражением $I_D^{dark} = A_2 \exp(-t/\tau_{decay})$, где A_1 и A_2 – константы. На рис.6 представлены зависимости времени нарастания и спада фотопроводимости от напряжения затвора фототранзистора U_{GS}. Видно, что с повышением напряжения на затворе происходит уменьшение времени нарастания и спада. Это изменение можно объяснить наличием двух временных компонент – медленной и быстрой. Медленная компонента нарастания и спада обусловлена ловушками в объеме полупроводника, а быстрая – поверхностными состояниями. При напряжениях затвора 30–50 В включается механизм, связанный с поверхностными состояниями, что приводит к резкому уменьшению времени нарастания и спада фотопроводимости. Поверхностные состояния играют роль ловушек и центров рекомбинации для фотоэлектронов. Медленная и быстрая компоненты при нарастании и при спаде фотопроводимости наблюдались в пленках ZnO:Li [16,17]. Вначале происходит быстрое изменение фототока ~10^{-4}

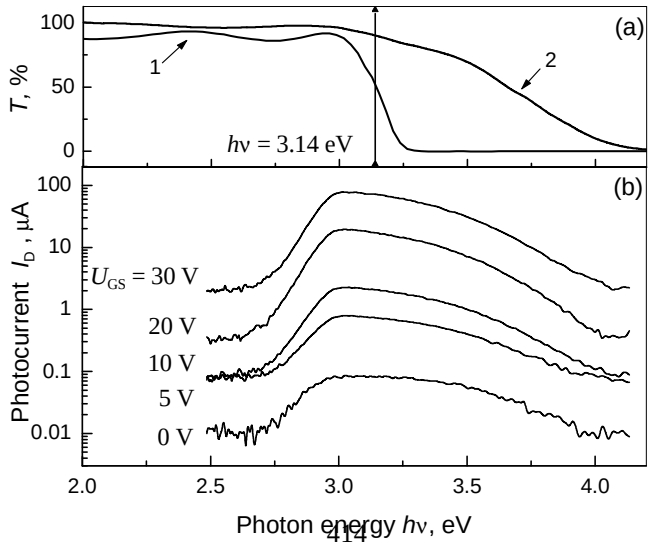


Рис.7. Спектральные зависимости (a) пропускания T пленок ZnO:Li (канал) (кривая 1) и ZnO:Ga (затвор) (кривая 2) и (b) фототока I_D для немодулированного излучения при различных напряжениях исток – затвор U_{GS} при U_{DS} = 200 В. Указанная на рисунке (a) энергия фотона $h\nu$ = 3.14 эВ использована при фотоэлектрических измерениях.

сек, при нарастании или спаде, в дальнейшем кинетика нарастания или спада продолжается с характерным временем 10^{-1}–1 сек.

На рис.7a приведены спектры пропускания T низкопроводящей ZnO:Li и высокопроводящей ZnO:Ga пленок, используемых в качестве, соответственно, канала и затвора полевого транзистора. Необходимо отметить, что эта структура прозрачна в видимой области и пропускание в этой области составляет ~90%. УФ часть излучения практически не поглощается в слое затвора и полностью поглощается в канале, т.е. неравновесные носители заряда создаются только в слое канала полевого транзистора. Сдвиг края поглощения для пленок ZnO:Ga (сдвиг Бурштейна–Мосса) обусловлен увеличением концентрации носителей в зоне проводимости. На рис.7б представлена спектральная зависимость тока стока от энергии фотона, возбуждающего фотопроводимость для модулированного излучения с частотой f = 177 Гц при различных напряжениях исток–затвор U_{GS} (измерения проведены при U_{DS} = 100 В). Величина фототока с увеличением напряжения затвор–исток возрастает, не изменяя формы спектральной зависимости.

4. Заключение

Получены прозрачные полевые транзисторы с каналами n- и p-типа на основе оксидных пленок ZnO:Li. Пленки ZnO:Li с малой проводимостью использовались в качестве канала, высокопроводящие пленки ZnO:Ga использовались в качестве электродов затвора стока и истока, фторидые пленки MgF_2 использовались в качестве изолятора затвора. Полевые транзисторы прозрачны в видимом диапазоне света и не меняют основных характеристик при освещении светом видимого диапазона. Полевые транзисторы могут быть использованы при создании управляющих элементов прозрачной электроники, работающей при дневном освещении. Исследовано влияние УФ излучения на полевой эффект в тонких пленках ZnO:Li. Измерены фотоэлектрические характеристики полевых транзисторов. Полученные полевые фототранзисторы с каналом n-типа обладают высоким коэффициентом фотоэлектрического усиления. Предложен механизм фотоэлектрического усиления в полученных тонкопленочных полевых транзисторах.

Работа выполнена в рамках Государственного тематического финансирования Республики Армения и при финансовой поддержке фонда AN-SEF EN–2177.

ЛИТЕРАТУРА

1. **N.R.Aghamalyan, E.A.Kafadaryan, R.K.Hovsepyan, S.I.Petrosyan.** Semicond. Sci. Technol., **20**, 80 (2005).
2. **T.Yamamoto, H.Katayama-Yoshida.** J. Cryst. Growth, **214/215,** 552 (2000).
3. **T.Yamamoto, H.Katayama-Yoshida.** Mater. Res. Soc. Proc., **623,** 223 (2000).
4. **Н.Р.Агамалян, Р.К.Овсепян.** Изв. НАН Армении, Физика, **43**, 274 (2008).
5. **P.F.Carcia, R.S.McLean, M.H.Reilly, I.Malajovich, K.G.Sharp.** Mater. Res. Soc. Symp. Proc., **H7.2.1,** 769 (2003).
6. **E.Fortunato, T.P.Barquinha, A.Pimentel, A.Gonc, L.Pereira, R.Martins.** Thin Solid Films, **487,** 205 (2005).
7. **B.J.Norris, J.Anderson, J.F.Wager, D.A.Keszler.** J. Phys. D: Appl. Phys., **L105,** 36 (2003).
8. **K.Wang, Y.Vygranenko, A.Nathan.** J. Appl. Phys., **101,** 114508 (2007).
9. **N.R.Aghamalyan, R.K.Hovsepyan, A.R.Poghosyan, V.G.Lazaryan**, Proc. SPIE, **5560**, 235 (2004).
10. **Y.J.Cho, J.H.Shin, S.M.Bobade, Y-B.Kim**. Thin Solid Films, **517,** 1415 (2009).
11. **N.R.Aghamalyan, R.K.Hovsepyan, A.R.Poghosyan, B. von Roedern, E.S.Vardanyan.** Journal of Optoelectronics and Advanced Materials, **9**, 1418 (2007).
12. **Н.Р.Агамалян, Р.К.Овсепян, С.И.Петросян.** Изв. НАН Армении, Физика, **44,** 44 (2009).
13. **E.Monroy, F.Omnes, F.Calle.** Semicond. Sci. Technol., **18**, R33 (2003).
14. **H.S.Bae, M.H.Yoon, J.K.Kim.** App. Phys. Let., **83**, 5313 (2003).
15. **P.Gorm, M.Lehnhardt, T.Riedi, W.Kowalsky**. Appl. Phys. Lett., **91**, 193504 (2007).
16. **N.R.Aghamalyan, E.A.Kafadaryan, R.K.Hovsepyan.** Effect of lithium and gallium impurities on opto-electrical properties of ZnO films. “Trends in Semiconductor Research”. New York, Nova Science Publishers, 2005, pp.81-110.
17. **S.A.Studenikin, N.Golego, M.Cocivera.** J. Appl. Phys., **87**, 2413 (2000).

ZnO:Li ԹԱՂԱՆԹԻՑ ԴԱՇՏԱՅԻՆ ՏՐԱՆԶԻՍՏՈՐ

Ռ.Կ. ՀՈՎՍԵՓՅԱՆ, Ն.Ռ. ԱՂԱՄԱԼՅԱՆ, Ս.Ի. ՊԵՏՐՈՍՅԱՆ

Պատրաստված են n- և p-տիպի ուղղետարով դաշտային տրանզիստորներ ZnO:Li օքսիդային թաղանթի հիմքով՝ օգտագործելով MgF_2 ֆտորիդային թաղանթը որպես փականի մեկուսիչ: Ուսումնասիրված է ZnO:Li-ի բարակ շերտի դաշտային էֆեկտը, ինչպես նաև ուլտրամանուշակագույն ճառագայթման ազդեցությունը այդ էֆեկտի վրա: Հետազոտված են ստացված բարակաշերտ դաշտային տրանզիստորների լուսաէլեկտրական բնութագրերը: Արաջարկված է ստացված թաղանթներում լուսաէլեկտրական ուժեղացման մեխանիզմը:

FIELD-EFFECT TRANSISTOR BASED ON ZnO:Li FILMS

R.K. HOVSEPYAN, N.R. AGHAMALYAN, S.I. PETROSYAN

Field-effect transistors with *n*- and *p*-types of the channel on the base of ZnO:Li oxide films and MgF_2 fluoride film as a gate insulator were obtained. The field effect as well as the UV radiation influence on the field effect in ZnO:Li thin films were investigated. Photoelectric characteristics of the obtained thin film field-effect transistors were studied. The mechanism of photoelectric amplification in the obtained thin-film field transistors is proposed.

Известия НАН Армении, Физика, т.45, №6, с.417-428 (2010)

УДК 621.315

ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ В ВАЛЕНТНОЙ ЗОНЕ ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ КВАНТОВОЙ ТОЧКИ ZnSe

А.В. КАЗАРЯН, А.Х. МАНАСЕЛЯН, А.А. КИРАКОСЯН

Ереванский государственный университет, Армения

(Поступила в редакцию 9 июня 2010 г.)

Исследованы электронные состояния в валентной зоне цилиндрической квантовой точки ZnSe с учетом сложной структуры валентной зоны. Рассчитаны волновые функции и энергетические уровни в зависимости от радиуса квантовой точки. Рассмотрено также влияние магнитного поля, направленного вдоль оси квантовой точки, на энергетические уровни.

1. Введение

Метод эффективной массы, успешно применяемый при определении волновых функций и спектра энергии в полупроводниках с простой зонной структурой [1], был обобщен для полупроводников со сложной структурой валентной зоны Коном и Латтинджером [1–4]. Ими получен матричный вид гамильтониана для зон тяжелых и легких дырок (т.н. гамильтониан Латтинджера в четырехзонном приближении) как без учета, так и с учетом спин–орбитального взаимодействия. В работе [4] рассмотрен более общий случай и приведен обобщенный гамильтониан Латтинджера, в котором учтены зона проводимости Γ_6, зона тяжелых и легких дырок Γ_8 и расщепленная зона Γ_7 (т.н. восьмизонное приближение).

В низкоразмерных полупроводниковых гетероструктурах для определения электронных состояний применяются два разных подхода. При первом подходе [5] вначале определяются волновая функция и энергия валентного электрона для массивной системы, а энергия и волновая функция для низкоразмерной системы определяются затем из граничных условий. В рамках этого подхода волновая функция электрона определяется точно, однако его обобщение для более сложных низкоразмерных структур является довольно сложной задачей [6,7]. В рамках второго подхода [8–11] волновая функция электрона для низкоразмерной полупроводниковой гетероструктуры со сложной структурой валентной зоны разлагается по волновым функциям системы в однозонном приближении, и рассчитывается действие полного гамильтониана (в который, конечно, входит и гамильтониан Латтинджера) на эту функцию. Далее задача сводится к проблеме собственных значений и собственных векторов, которую можно решить численными методами, сохранив конечное число функций в разложении. Этот метод позволяет, хотя и приближенно, вычислить

энергию электрона и его волновую функцию для всех низкоразмерных систем, для которых энергии и волновые функции известны в однозонном приближении.

В данной работе определены энергетические уровни и волновые функции электрона в цилиндрической квантовой точке (КТ) со сложной структурой валентной зоны методом, основанным на разложении искомых волновых функций по волновым функциям однозонного приближения. В расчетах КТ аппроксимируется цилиндрической прямоугольной ямой конечной глубины, заключенной между двумя бесконечными стенками. Рассмотрено также влияние направленного вдоль оси квантовой точки магнитного поля на уровни энергии и волновые функции электрона.

2. Теория

Рассмотрим энергетические уровни валентного электрона в цилиндрической КТ, ограничивающий потенциал которой можно представить в виде

$$V_{\square}(\rho)=\begin{cases}0, \rho \le R\\ -V, R \le \rho \le D,\\ -\infty, \rho > D\end{cases} \quad V_{\perp}(z)=\begin{cases}0, |z| \le L/2\\ -\infty, |z| > L/2,\end{cases} \tag{1}$$

где R, D и L – размеры КТ, соответственно, в плоскости xy и в направлении z.

В полупроводниках со сложной структурой валентной зоны кинетическая энергия валентного электрона определяется с помощью гамильтониана Латтинджера, который для зон тяжелых и легких дырок в цилиндрической аппроксимации имеет вид [1,2,5]

$$\hat{H}_{\Gamma_8}=\begin{array}{c} \\ |3/2\rangle \\ |1/2\rangle \\ |-1/2\rangle \\ |-3/2\rangle \end{array}\begin{array}{c}\begin{array}{cccc}|3/2\rangle & |1/2\rangle & |-1/2\rangle & |-3/2\rangle\end{array}\\ \begin{pmatrix} T/2 & -iL & -M & 0\\ iL^* & T/6+2Q/3 & 0 & -M\\ -M^* & 0 & T/6+2Q/3 & iL\\ 0 & -M^* & -iL^* & T/2\end{pmatrix}\end{array}\frac{\hbar^2}{2m_0}, \tag{2}$$

где m_0 – масса электрона в вакууме,

$$-\frac{T}{2}=(\gamma_1+\gamma_2)\left(k_x^2+k_y^2\right)+(\gamma_1-2\gamma_2)k_z^2, \quad -\left(\frac{T}{6}+\frac{2Q}{3}\right)=(\gamma_1-\gamma_2)\left(k_x^2+k_y^2\right)+(\gamma_1+2\gamma_2)k_z^2,$$

$$-L=-i2\sqrt{3}\gamma_3 k_- k_z, \quad -M=\sqrt{3}\gamma k_-^2, \quad \gamma=\frac{2\gamma_2+3\gamma_3}{5}, \quad \mathbf{k}=-i\nabla, \quad k_\pm=k_x\pm ik_y,$$

γ_1, γ_2, γ_3 – параметры Латтинджера. Для гамильтониана Латтинджера в качестве базисных функций применялись центрозонные ($\mathbf{k}=0$) блоховские функции $|J,J_z\rangle$ валентной зоны Γ_8 ($J=3/2$), представленные в кратком виде $|J_z\rangle$, где J – полный момент валентного электрона, а J_z – его проекция на направление оси z. Эти блоховские функции можно представить в виде [1,5]

$$\left|\frac{3}{2},\frac{3}{2}\right\rangle=-\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|X\rangle+i|Y\rangle\right)|\uparrow\rangle,\quad \left|\frac{3}{2},-\frac{3}{2}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|X\rangle-i|Y\rangle\right)|\downarrow\rangle,$$

$$\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{6}}\left[2|Z\rangle|\uparrow\rangle-\left(|X\rangle+i|Y\rangle\right)|\downarrow\rangle\right],\quad \left|\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{6}}\left[2|Z\rangle|\downarrow\rangle+\left(|X\rangle-i|Y\rangle\right)|\uparrow\rangle\right],$$

где $|X\rangle$, $|Y\rangle$ и $|Z\rangle$ – орбитальные функции с симметрией *x*, *y* и *z*, соответственно. Полный гамильтониан системы можно представить в виде

$$\hat{H}_1=\hat{H}_{\Gamma_8}+V_{\square}(\rho)+V_{\perp}(z), \tag{3}$$

а волновую функцию валентного электрона – в виде [8,9]

$$\psi(\mathbf{r})=\sum_{J_z}|3/2,J_z\rangle F_{J_z}(\mathbf{r}), \tag{4}$$

где $F_{J_z}(\mathbf{r})$ – огибающие волновых функций, определяемые из системы уравнений

$$\sum_{J_z'}\left[H_{J_zJ_z'}(-i\nabla)+V_{\square}(\rho)+V_{\perp}(z)\right]F_{J_z'}(\mathbf{r})=EF_{J_z}(\mathbf{r}). \tag{5}$$

Поскольку ограничивающий потенциал обладает цилиндрической симметрией, удобно перейти от одночастичной задачи к “двухчастичной”, т.е. рассматривать “блоховскую частицу” с собственным моментом $\hat{\mathbf{J}}$ и “огибающую частицу” с собственным моментом $\hat{\mathbf{L}}$. Из-за цилиндрической симметрии системы оператор Гамильтона $\hat{H}_{\Gamma_8}$ коммутирует с оператором *z*-проекции суммарного момента $\hat{F}_z=\hat{J}_z+\hat{L}_z$, поэтому F_z будет интегралом движения с собственным значением

$$F_z=J_z+L_z. \tag{6}$$

Тогда волновую функцию электрона можно представить в виде

$$\psi_{F_z}(\mathbf{r})=\sum_{J_z}|3/2,J_z\rangle F_{J_z}(\rho,z)e^{i\varphi(F_z-J_z)}. \tag{7}$$

Перейдем к расчету энергетических уровней валентного электрона с массой $m=-m_0/(\gamma_1+\gamma_2)$ в цилиндрической КТ в однозонном приближении. Ввиду аксиальной симметрии системы волновую функцию электрона можно представить в виде

$$\phi_{nls}(\mathbf{r})=\Phi_{n,l}(\rho,\varphi)\,f_s(z), \tag{8}$$

где $f_s(z)$ характеризует состояния частицы в одномерной бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме и имеет вид [8,9]

$$f_s(z)=\sqrt{\frac{2}{L}}\begin{cases}\cos\left(s(\pi/L)z\right), & s=2k-1,\\ \sin\left(s(\pi/L)z\right), & s=2k,\ (k=1,2...).\end{cases} \tag{9}$$

В плоскости *xy* частица находится в цилиндрической прямоугольной потенциальной яме (1), и ее волновую функцию можно представить в виде [5]

$$\Phi_{nl}(\rho,\varphi)=C_1 i^l e^{il\varphi}\begin{cases} J_l(\alpha_{nl}\rho), & \rho\le R,\\ C_2\left(K_l(\beta_{nl}\rho)+C_3 I_l(\beta_{nl}\rho)\right), & R<\rho\le D,\\ 0, & \rho>D,\end{cases} \tag{10}$$

где $J_l(z)$, $I_l(z)$ и $K_l(z)$ – соответственно, функции Бесселя первого рода и модифицированные функции Бесселя первого и второго рода [12], C_1, C_2 и C_3 – постоянные, определяемые из требований непрерывности и нормировки волновой функции, а α_{nl} и β_{nl} связаны с энергией электрона E_{nl}, определяемой из граничных условий, с помощью соотношений

$$\alpha_{nl}=\sqrt{\frac{-2m_0E_{nl}}{\hbar^2(\gamma_1+\gamma_2)}},\quad \beta_{nl}=\sqrt{\frac{2m_0(V+E_{nl})}{\hbar^2(\gamma_1+\gamma_2)}}. \tag{11}$$

Для определения энергии электрона в полупроводнике со сложной структурой валентной зоны волновую функцию электрона разложим по базисным функциям (8):

$$\psi_{F_z}(\mathbf{r})=\sum_{J_z,n,s} C(n,s,J_z)\phi_{n,F_z-J_z,s}(\mathbf{r})\big|3/2,J_z\big\rangle. \tag{12}$$

После подстановки выражения (12) в уравнение (5) получим проблему собственных значений и собственных векторов, в которой в качестве собственных векторов фигурируют коэффициенты $C(n,s,J_z)$, а в качестве собственных значений – энергетические уровни электрона. Для определения результатов действия гамильтониана на функцию (12) воспользуемся следующими операторными соотношениями:

$$\begin{aligned} k_{\pm}\left(i^l J_l(\alpha_{nl}\rho)e^{il\varphi}\right)&=\alpha_{nl}\left(i^{l\pm1}J_{l\pm1}(\alpha_{nl}\rho)e^{i(l\pm1)\varphi}\right),\\ k_{\pm}\left(i^l K_l(\beta_{nl}\rho)e^{il\varphi}\right)&=\pm\beta_{nl}\left(i^{l\pm1}K_{l\pm1}(\beta_{nl}\rho)e^{i(l\pm1)\varphi}\right),\\ k_{\pm}\left(i^l I_l(\beta_{nl}\rho)e^{il\varphi}\right)&=\mp\beta_{nl}\left(i^{l\pm1}I_{l\pm1}(\beta_{nl}\rho)e^{i(l\pm1)\varphi}\right). \end{aligned} \tag{13}$$

Перейдем к рассмотрению энергетических уровней валентного электрона в КТ, находящейся в постоянном однородном магнитном поле, направленном вдоль оси *z* КТ: $\mathbf{B}(0,0,B)$. Векторный потенциал магнитного поля удобно представить в виде

$$\mathbf{A}=\frac{1}{2}[\mathbf{B},\mathbf{r}]=\mathbf{A}\left(-\frac{1}{2}yB;\frac{1}{2}xB;0\right). \tag{14}$$

Согласно [3,9–11], в присутствии магнитного поля в гамильтониане Латтинджера следует перейти от оператора $\mathbf{k}=-i\nabla$ к оператору $\mathbf{k}=-i\nabla+e\mathbf{A}/\hbar$, а в полном

гамильтониане – добавить член зеемановского расщепления, имеющий вид [3,9–11]

$$\hat{H}_Z = \begin{array}{c} \\ |3/2\rangle \\ |1/2\rangle \\ |-1/2\rangle \\ |-3/2\rangle \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cccc} |3/2\rangle & |1/2\rangle & |-1/2\rangle & |-3/2\rangle \end{array} \\ \begin{pmatrix} -3\kappa/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\kappa/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \kappa/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3\kappa/2 \end{pmatrix} \end{array} \hbar\omega_B, \tag{15}$$

где κ – четвертый параметр Латтинджера, $\omega_B = eB/m_0$ – циклотронная частота. Полный гамильтониан рассматриваемой системы в магнитном поле имеет следующий вид:

$$\hat{H}_2 = \hat{H}_{\Gamma_8} + V_{\square}(\rho) + V_{\perp}(z) + \hat{H}_Z, \tag{16}$$

а огибающие функции удовлетворяют системе уравнений

$$\sum_{J_z'} \left[H_{J_z J_z'}(-i\nabla) + V_{\square}(\rho) + V_{\perp}(z) + \hat{H}_Z \right] F_{J_z'}(\mathbf{r}) = E F_{J_z}(\mathbf{r}). \tag{17}$$

Магнитное поле не меняет аксиальную симметрию системы, поэтому F_z остается интегралом движения, и полную функцию электрона можно снова представить в виде (7). Переходя к рассмотрению движения валентного электрона в однозонном приближении, можно разделить переменные в волновой функции и представить ее в виде (8). Магнитное поле влияет на движение электрона в плоскости *xy*, поэтому волновая функция электрона в этой плоскости будет иметь вид

$$\Phi_{nl}(\rho,\varphi) = C_1 \exp\left(-\frac{\rho^2}{4a_B^2}\right) \rho^{|l|} e^{il\varphi} \begin{cases} F\left(-\bar{\alpha}_{nl}, |l|+1, \dfrac{\rho^2}{2a_B^2}\right), & \rho \le R, \\ C_2\left(F\left(-\bar{\beta}_{nl}, |l|+1, \dfrac{\rho^2}{2a_B^2}\right) + C_3 U\left(-\bar{\beta}_{nl}, |l|+1, \dfrac{\rho^2}{2a_B^2}\right)\right), & R < \rho \le D, \\ 0, & \rho > D, \end{cases} \tag{18}$$

где $F(\alpha,\beta,z)$ и $U(\alpha,\beta,z)$ – вырожденные гипергеометрические функции первого и второго рода, соответственно [12], $\lambda_B = (\hbar/eB)^{1/2}$ – магнитная длина, а квантовые числа $\bar{\alpha}_{nl}$ и $\bar{\beta}_{nl}$ связаны с энергией электрона с помощью соотношений

$$\bar{\alpha}_{nl} = \frac{-E_{nl}}{(\gamma_1+\gamma_2)\hbar\omega_B} - \frac{l+|l|+1}{2}, \quad \bar{\beta}_{nl} = -\frac{V+E_{nl}}{(\gamma_1+\gamma_2)\hbar\omega_B} - \frac{l+|l|+1}{2}. \tag{19}$$

После подстановки разложения (12) в систему уравнений (17) и используя операторные соотношения

$$
\begin{aligned}
&k_+\left(t(\rho)\rho^l F\left(-\bar{\alpha}_{nl}, l+1, \frac{\rho^2}{2\lambda_B^2}\right)e^{il\varphi}\right) = i\frac{\bar{\alpha}_{nl}+1+l}{\lambda_B^2(l+1)}\left(t(\rho)\rho^{l+1}F\left(-\bar{\alpha}_{nl}, l+2, \frac{\rho^2}{2\lambda_B^2}\right)e^{i(l+1)\varphi}\right),\ (l\geq 0),\\
&k_-\left(t(\rho)\rho^l F\left(-\bar{\alpha}_{nl}, l+1, \frac{\rho^2}{2\lambda_B^2}\right)e^{il\varphi}\right) = -2il\left(t(\rho)\rho^{l-1}F\left(-\bar{\alpha}_{nl}, l, \frac{\rho^2}{2\lambda_B^2}\right)e^{i(l-1)\varphi}\right),\ (l>0),\\
&k_+\left(t(\rho)\rho^{-l} F\left(-\bar{\alpha}_{nl}, -l+1, \frac{\rho^2}{2\lambda_B^2}\right)e^{il\varphi}\right) = 2il\left(t(\rho)\rho^{-l-1}F\left(-\bar{\alpha}_{nl}-1, -l, \frac{\rho^2}{2\lambda_B^2}\right)e^{i(l+1)\varphi}\right),\ (l<0),\\
&k_-\left(t(\rho)\rho^{-l} F\left(-\bar{\alpha}_{nl}, -l+1, \frac{\rho^2}{2\lambda_B^2}\right)e^{il\varphi}\right) = \frac{i\bar{\alpha}_{nl}}{\lambda_B^2(1-l)}\left(t(\rho)\rho^{-l+1}F\left(-\bar{\alpha}_{nl}+1, -l+2, \frac{\rho^2}{2\lambda_B^2}\right)e^{i(l-1)\varphi}\right),\ (l\leq 0),\\
&k_+\left(t(\rho)\rho^l U\left(-\bar{\beta}_{nl}, l+1, \frac{\rho^2}{2\lambda_B^2}\right)e^{il\varphi}\right) = \frac{i}{\lambda_B^2}\left(t(\rho)\rho^{l+1}U\left(-\bar{\beta}_{nl}, l+2, \frac{\rho^2}{2\lambda_B^2}\right)e^{i(l+1)\varphi}\right),\ (l\geq 0),\\
&k_-\left(t(\rho)\rho^l U\left(-\bar{\beta}_{nl}, l+1, \frac{\rho^2}{2\lambda_B^2}\right)e^{il\varphi}\right) = -2i\left(l+\bar{\beta}_{nl}\right)\left(t(\rho)\rho^{l-1}U\left(-\bar{\beta}_{nl}, l, \frac{\rho^2}{2\lambda_B^2}\right)e^{i(l-1)\varphi}\right),\ (l>0),\\
&k_+\left(t(\rho)\rho^{-l} U\left(-\bar{\beta}_{nl}, -l+1, \frac{\rho^2}{2\lambda_B^2}\right)e^{il\varphi}\right) = 2i\left(t(\rho)\rho^{-l-1}U\left(-\bar{\beta}_{nl}-1, -l, \frac{\rho^2}{2\lambda_B^2}\right)e^{i(l+1)\varphi}\right),\ (l<0),\\
&k_-\left(t(\rho)\rho^{-l} U\left(-\bar{\beta}_{nl}, -l+1, \frac{\rho^2}{2\lambda_B^2}\right)e^{il\varphi}\right) = \frac{i\bar{\beta}_{nl}}{\lambda_B^2}\left(t(\rho)\rho^{-l+1}U\left(-\bar{\beta}_{nl}+1, -l+2, \frac{\rho^2}{2\lambda_B^2}\right)e^{i(l-1)\varphi}\right),\ (l\leq 0),
\end{aligned}
\tag{20}
$$

(где для краткости записи использовано обозначение $t(\rho)=\exp\left(-\rho^2/4\lambda_B^2\right)$), опять придем к проблеме собственных значений и собственных векторов.

3. Обсуждение результатов

Численные расчеты проведены для цилиндрической КТ из ZnSe. Использованы следующие значения параметров: $\gamma_1=4.32$, $\gamma_2=0.66$, $\gamma_3=1.13$, $\kappa=-0.54$ [13], $V=200$ мэВ, $D=1000$ Å, $L=50$ Å и 100 Å, $m_\perp^{hh}\approx -0.20m_0$, $m_z^{hh}\approx -0.33m_0$, $m_\perp^{lh}\approx -0.27m_0$, $m_z^{lh}\approx -0.18m_0$.

В разложении (12) n и s могут принимать бесконечное число значений, поэтому для нахождения собственных значений энергии мы имеем дело с бесконечной системой уравнений. Согласно расчетам, энергия электрона сходится довольно быстро, поэтому мы ограничились пятью членами в разложениях по n и s, тем самым сводя проблему определения собственных значений и собственных векторов к решению системы из $4\times5\times5=100$ уравнений.

Заметим также, что вследствие аксиальной симметрии КТ собственные векторы либо четны, либо нечетны (на приводимых ниже графиках энергии четных состояний даны сплошными, а энергии нечетных состояний – пунктирными кривыми).

На рис.1a–d представлены зависимости энергетических уровней электрона от радиуса КТ для состояний с $F_z=3/2$ для двух значений высоты КТ и индукции магнитного поля.

Как видно из рис.1a,b, основной уровень в яме при $L=50$ Å и $B=0$ появляется при радиусе $R_0^{ev}\approx 14.79$ Å, а при $B=30$ Т – $R_0^{ev}\approx 14$ Å. Для возбужденных состояний влияние магнитного поля более ощутимо. Так, для основного состояния относительное уменьшение $\left|\Delta R_0^{ev}/R_0^{ev}\right|\approx 4.9\%$, а для первого

возбужденного состояния $\left|\Delta R_1^{odd} / R_1^{odd}\right| \approx 12.3\%$. Для двух последующих уровней это уменьшение составляет, соответственно, 6.75% и 1.78%.

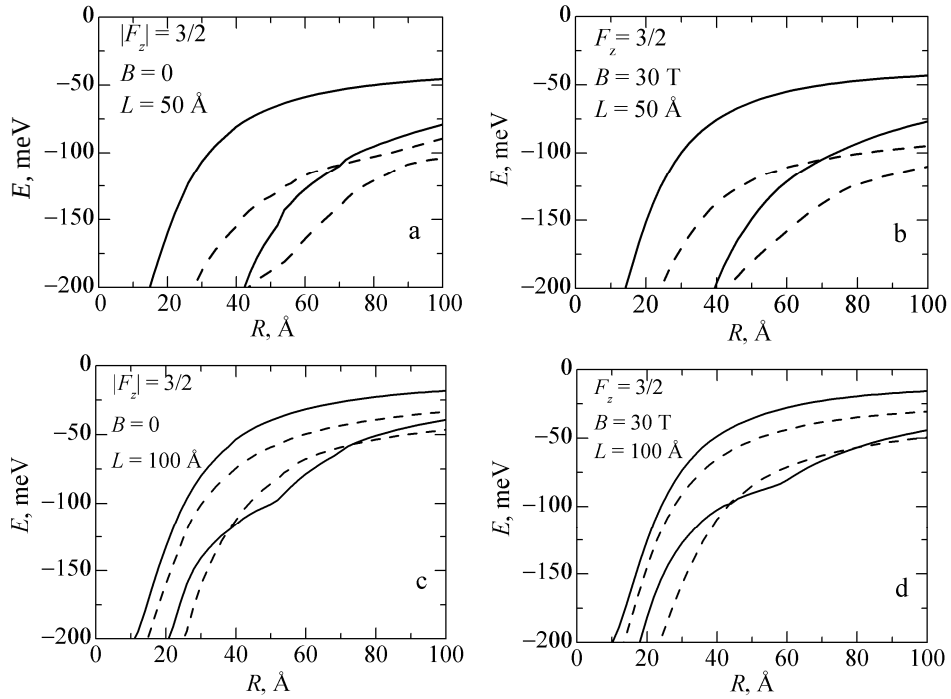


Рис.1. Зависимость энергетических уровней валентного электрона от радиуса КТ для $F_z = 3/2$ при $L = 50$ Å: a) $B = 0$, b) $B = 30$ T и при $L = 100$ Å: c) $B = 0$, d) $B = 30$ T.

Для КТ с $L = 100$ Å (рис.1c и d) при $B = 0$ $R_0^{ev} \approx 11.07$ Å, а при $B = 30$ T $R_0^{ev} \approx 10.21$ Å. Имеющее место уменьшение поперечного радиуса КТ при увеличении ее высоты качественно можно объяснить следующим образом. Как известно [14], в сферической КТ с радиусом R_0 первый уровень энергии возникает при глубине потенциальной ямы $V \geq V_0 = \pi^2\hbar^2 / 8m^* R_0^2$. Сопоставим теперь цилиндрической КТ некоторую сферическую КТ, радиус которой определим из условия равенства объемов цилиндрической и сферической КТ: $\pi R^2 L = 4\pi R_0^3 / 3$, или, с учетом приведенного выше условия, $R = \left(\pi^6\hbar^6 / 288 m^{*3} V_0^3 L^2\right)^{1/4}$. Как видно, при заданных m^* и V_0 $R \sim L^{-1/2}$. Для количественной оценки введем эффективную массу m^* соотношением $3/m^* = 2/m_\perp^{hh} + 1/m_z^{hh}$, что для ZnSe дает значение $m^* \approx -0.23 m_0$. Тогда, при $B = 0$ для основного состояния в яме $V_0 = -200$ мэВ получаем при $L = 50$ Å $R_0^{ev} \approx 16$ Å, а при $L = 100$ Å $R_0^{ev} \approx 11.35$ Å, что находится в хорошем соответствии с расчетными значениями (соответственно, 14.79 Å и 11.07 Å).

Следует также отметить, что зависимость $R \sim L^{-1/2}$ имеет место и для возбужденных состояний, хотя и с меньшей точностью, чем для основного состояния.

Из рис.1a,b также следует, что с увеличением поперечного радиуса КТ энергетические уровни приближаются к значениям, определяемым размерным квантованием по направлению оси *z*, что обусловлено ослаблением роли поперечного размерного квантования с увеличением радиуса КТ.

На рис.2 приведены графики зависимостей энергетических уровней от радиуса КТ при $F_z = -3/2$ для значений $L = 50$ Å (рис.2a) и $L = 100$ Å (рис.2b), когда индукция магнитного поля $B = 30$ T (при $B = 0$ графики $F_z = -3/2$ и $F_z = 3/2$ совпадают, см. рис.1a,c).

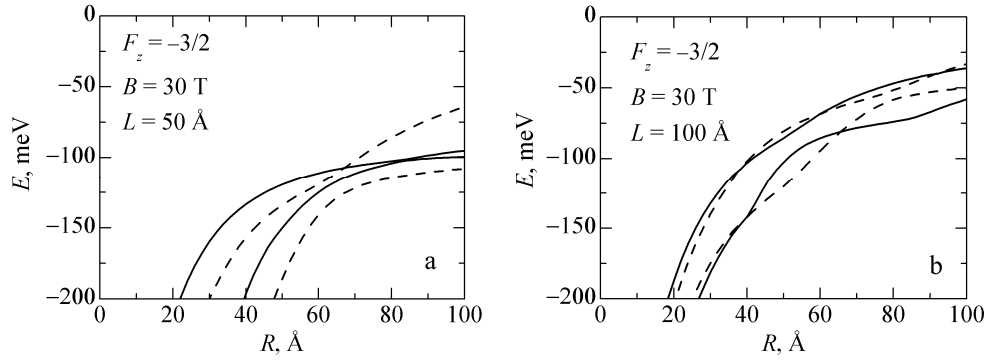


Рис.2. Зависимость энергетических уровней валентного электрона от радиуса КТ для $F_z = -3/2$ при a) $L = 50$ Å, $B = 30$ T, b) $L = 100$ Å, $B = 30$ T.

На рис.3 представлены графики зависимости энергетических уровней от радиуса КТ при $|F_z| = 1/2$ при $L = 50$ Å и $L = 100$ Å.

В отличие от случая $F_z = \pm 3/2$, при $F_z = \pm 1/2$ происходит изменение в чередовании четных и нечетных состояний. Так, например, при $B = 0$ и $L = 50$ Å (рис.3a) состояния с $|F_z| = 1/2$ имеют порядок чередования even–odd–odd–even вплоть до значения $R = 48$ Å, а после значения $R = 55$ Å имеет место порядок чередования odd–even–even–odd. Усиление магнитного поля приводит к понижению основного уровня и перемещению области, где имеет место порядок чередования even–odd–odd–even, в область меньших *R*: $R \le 37$ Å. В области радиусов $R \sim 56 - 75$ Å имеет место порядок: odd–even–even–odd (рис.3b).

Для состояний с $F_z = -1/2$, $L = 50$ Å вплоть до значений $R \le 50$ Å имеет место чередование odd–even–even–odd (рис.3c).

Отмеченные закономерности чередований имеют место и при $L = 100$ Å, отличаясь от случая $L = 50$ Å только точками пересечений четных и нечетных состояний.

На рис.4 представлены графики зависимости энергетических уровней от индукции магнитного поля. Как видно, магнитное поле снимает вырождение, связанное со знаком F_z, поскольку оно взаимодействует с суммарным моментом. Однако, как видно из рис.4, энергетический уровень с положительным моментом выше, чем уровень с отрицательным моментом. Это

явление обратно тому, которое получается в однозонном приближении, и можно объяснить взаимодействием между зонами. Это явление наблюдается также для КТ с параболическим потенциалом в плоскости *xy* [9]. Такая же зависимость энергетических уровней от магнитного поля наблюдалась в работе [15] для больших значений радиусов КТ и нашла свое экспериментальное подтверждение в работе [16].

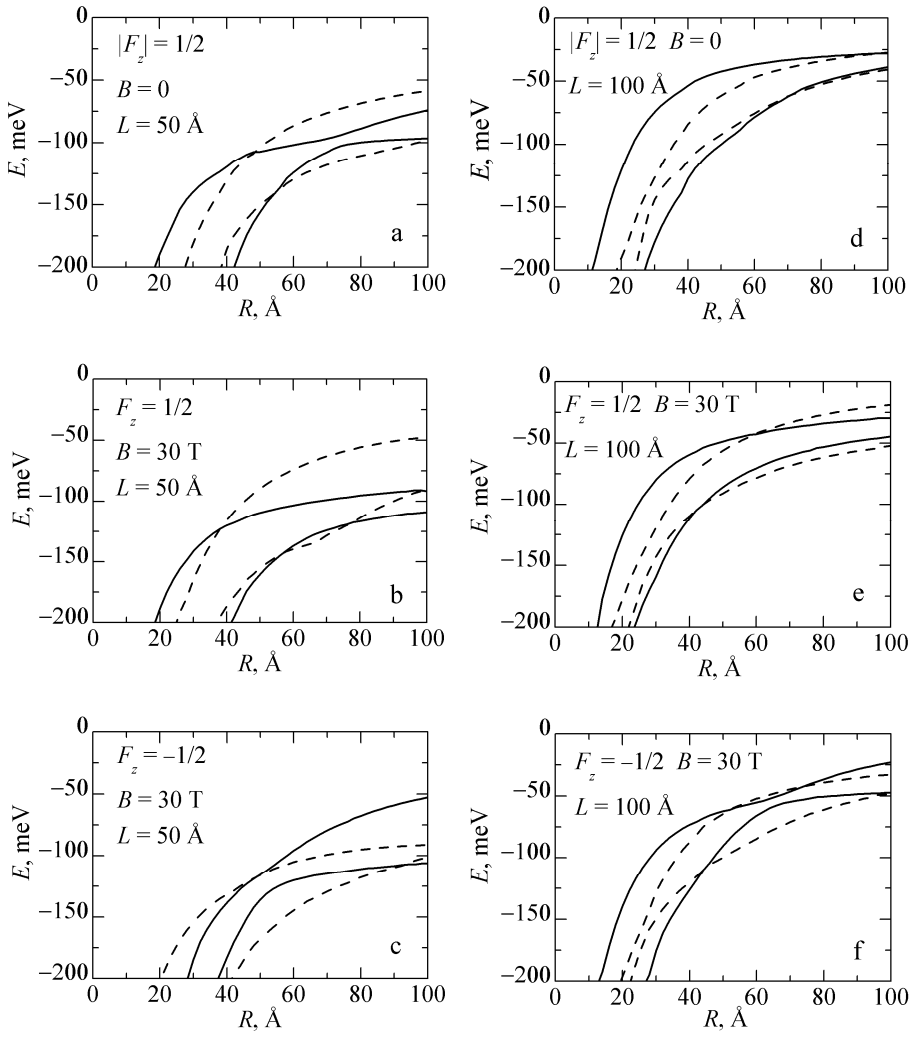


Рис.3. Зависимость энергетических уровней валентного электрона от радиуса КТ для $L = 50$ Å: a) $|F_z| = 1/2$, $B = 0$, b) $F_z = 1/2$, $B = 30$ T, c) $F_z = -1/2$, $B = 30$ T и для $L = 100$ Å: d) $|F_z| = 1/2$, $B = 0$, e) $F_z = 1/2$, $B = 30$ T, f) $F_z = -1/2$, $B = 30$ T.

Чтобы объяснить все явления, наблюдающиеся на рисунках, надо понять роль каждого члена в гамильтониане Латтинджера и его влияние на энергию электрона. В работе [5] показано, что полную волновую функцию электрона в

валентной зоне можно представить как суперпозицию волновых функций легких и тяжелых дырок, и поэтому энергетические уровни электрона в валентной зоне не могут быть классифицированы как уровни только легких (lh) и тяжелых (hh) дырок, основываясь только на значениях их суммарного момента. Однако, как показано в работах [8–11], в граничных случаях ограничивающих потенциалов и магнитного поля можно предсказать, какой член будет доминировать в полной волновой функции и тем самым определить, какому типу дырок соответствует тот или иной энергетический уровень. Таким образом, относительную роль каждого члена в гамильтониане Латтинджера можно оценить в различных областях значений поперечных размеров КТ и индукции магнитного поля. В первой области, где квантование в направлении z намного сильнее, чем поперечное квантование, роль недиагональных элементов в гамильтониане Латтинджера незначительна, и все энергетические уровни стремятся к энергетическим уровням квантовой ямы по z-направлениям.

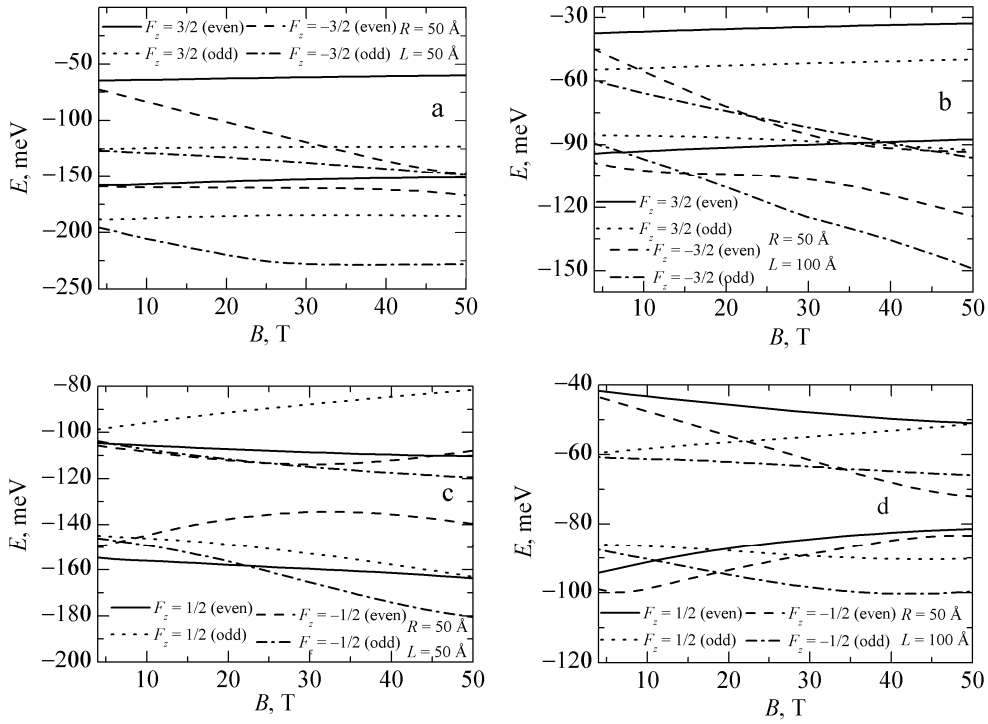


Рис.4. Зависимость энергетических уровней валентного электрона от индукции магнитного поля ($R = 50$ Å) для $F_z = \pm 3/2$: a) $L = 50$ Å, b) $L = 100$ Å и для $F_z = \pm 1/2$: c) $L = 50$ Å, d) $L = 100$ Å.

Во второй области, где преобладает ограничивающий потенциал в плоскости xy, взаимодействие между зонами значительно, и основная часть в энергии обусловлена тем членом в огибающей волновой функции, который обладает наименьшим абсолютным значением орбитального момента $|l|$. И наконец, в третьей области, где магнитная длина намного меньше размеров

ограничивающих потенциалов, энергетические уровни стремятся к уровням валентного электрона в магнитном поле. И как было показано в работе [9], для валентного электрона в магнитном поле для каждого $l \geq 0$ есть один энергетический уровень, для которого сложная структура валентной зоны не играет роли, и энергия этого уровня определяется в однозонном приближении.

Если сравнить энергетические уровни валентного электрона в квантовой нити [5] и в квантовой точке, определенные на рис.1–3, то можно увидеть, что в квантовой нити основное состояние соответствует суммарному моменту $|F_z| = 1/2$, а для квантовой точки – состоянию $|F_z| = 3/2$. Это можно объяснить следующим образом. По рассуждениям, представленным выше, квантовая нить соответствует квантовой точке во второй области, следовательно, для четных состояний с $|F_z| = 1/2$ основная часть энергии обусловлена легкодырочным состоянием, а для состояний с $|F_z| = 3/2$ – тяжелодырочным состоянием. Но, как видно из гамильтониана Латтинджера, в плоскости *xy* легкодырочным состояниям соответствует большая масса, чем тяжелодырочным, а в *z*-направлении – наоборот. Поэтому во второй области основному состоянию соответствует $|F_z| = 1/2$, и когда размер образца по направлению z начинает уменьшаться, уровни с суммарным моментом $|F_z| = 1/2$ и $|F_z| = 3/2$ реагируют на это в обратном порядке, и начиная с некоторого значения радиуса КТ основным состоянием становится уровень с суммарным моментом $|F_z| = 3/2$.

Как видно из рис.1, возбужденные состояния с разными четностями пересекаются друг с другом. Когда радиус ограничивающего потенциала в плоскости *xy* намного больше, чем размер образца по направлению z, все энергетические уровни, связанные с первой подзоной, стремятся к основному состоянию тяжелой дырки в квантовой яме. Но поскольку для нечетного состояния этому состоянию соответствует огибающая функция с большим орбитальным моментом, чем у четного состояния, то четное состояние будет выше по энергии. Во второй области, когда радиус ограничивающего потенциала в плоскости *xy* намного меньше, чем размер образца по направлению *z*, энергия нечетного состояния должна быть обусловлена волновой функцией с наименьшим орбитальным моментом, поэтому для этого уровня роль взаимодействия между зонами должна быть намного больше, чем для четного состояния. Но как следует из вариационного принципа [8,9], учет взаимодействия между зонами приводит к снижению энергии по абсолютной величине, и этим объясняется явление пересечения, наблюдающееся на рис.1. Этим же методом можно объяснить тот факт, что на рис.4 основной уровень соответствует суммарному моменту $|F_z| = 3/2$, а не $|F_z| = -3/2$, что имеет место в однозонном приближении. В первой области, где ограничивающий потенциал по направлению *z* преобладает, оба уровня стремятся к потолку подзоны тяжелой дырки. И поскольку огибающие функции в плоскости *xy*, связанные с этим членом огибающей функции по направлению *z*, для обоих случаев соответствуют орбитальному моменту $l = 0$, то в этой области порядок уровней обусловлен зеемановским членом и соответствует порядку, имеющему место в однозонном

приближении. Когда ограничивающий потенциал в плоскости *xy* становится сравнимым с потенциалом в направлении *z*, то, как видно из рис.4, роль взаимодействия преобладает для уровня, соответствующего суммарному моменту $|F_z| = 3/2$, что, как было отмечено, приводит к уменьшению энергии по абсолютной величине по сравнению с уровнями, соответствующими суммарному моменту $|F_z| = -3/2$.

ЛИТЕРАТУРА

1. **W.W.Chow, S.W.Koch.** Semiconductor-Laser Fundamentals. Berlin, Springer, 1999.
2. **J.M.Luttinger, W.Kohn.** Phys. Rev., **97**, 869 (1955).
3. **J.M.Luttinger.** Phys. Rev., **102**, 1030 (1956).
4. **A.L.Efros, M.Rosen.** Phys. Rev. B, **58**, 7120 (1998).
5. **P.C.Sercel, K.J.Vahala.** Phys. Rev. B, **42**, 3690 (1990).
6. **М.М.Агасян, А.А.Киракосян.** Изв. НАН Армении, Физика, **35**, 179 (2000).
7. **P.Janiszewski, M.Suffczynski.** J. Phys.: Condens. Matter, **11,** 6217 (1999).
8. **F.B.Pedersen, Yia-Chung Chang.** Phys. Rev. B, **53**, 1507 (1996).
9. **F.B.Pedersen, Yia-Chung Chang.** Phys. Rev. B, **55**, 4580 (1997).
10. **D.A.Broido, A.Cros, U.Rössler.** Phys. Rev. B, **45**, 11395 (1992).
11. **T.Darnhofer, D.A.Broido, U.Rössler.** Phys. Rev. B, **50**, 15412 (1994).
12. Справочник по специальным функциям. Под ред. **М.Абрамовица, И.Стиган**. М., Наука, 1979.
13. **A.K.Bhattacharjee, J.Pérez-Conde.** Phys. Rev. B, **68**, 045303 (2003).
14. **Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц.** Квантовая механика. М., Наука, 1989.
15. **J.I.Climente**, **J.Planelles**, **M.Pi**, **F.Malet.** Phys. Rev. B, **72**, 233305 (2005).
16. **J.H.Blokland**, **F.J.P.Wijnen**, **P.C.M.Christianen**, **U.Zeitler**, **J.C.Maan**, **P.Kailuweit**, **D.Reuter**, **A.D.Wieck.** Phys. Rev. B, **75**, 233305 (2007).

ԷԼԵԿՏՐՈՆԱՅԻՆ ՎԻՃԱԿՆԵՐԸ ZnSe ԳԼԱՆԱՅԻՆ ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ԿԵՏԻ ՎԱԼԵՆՏԱԿԱՆ ԳՈՏՈՒՄ

Ա.Վ. ՂԱԶԱՐՅԱՆ, Ա.Խ. ՄԱՆԱՍԵԼՅԱՆ, Ա.Ա. ԿԻՐԱԿՈՍՅԱՆ

Հետազոտված են էլեկտրոնային վիճակները ZnSe գլանային քվանտային կետի վալենտական գոտում նրա բարդ կառուցվածքի հաշվառմամբ: Հաշվարկված են ալիքային ֆունկցիաները և էներգիական մակարդակները՝ կախված քվանտային կետի շառավղից: Դիտարկված է նաև քվանտային կետի առանցքով ուղղված մագնիսական դաշտի ազդեցությունը էներգիական մակարդակների վրա:

ELECTRONIC STATES IN THE VALENCE BAND OF A CYLINDRICAL ZnSe QUANTUM DOT

A.V. GHAZARYAN, A.Kh. MANASELYAN, A.A. KIRAKOSYAN

The valence band electronic states in a cylindrical ZnSe quantum dot are investigated by taking into account the valence band mixing. Dependences of the wave functions and energy levels on the quantum dot radius are obtained. Influence of a magnetic field parallel to the quantum dot axis on the energy levels is also considered.

Известия НАН Армении, Физика, т.45, №6, с.429-439 (2010)

УДК 532.738

УЛУЧШЕНИЕ ВРЕМЕНИ ВКЛЮЧЕНИЯ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ФАЗОВОГО МОДУЛЯТОРА С ПОМОЩЬЮ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО УПРАВЛЯЮЩЕГО НАПРЯЖЕНИЯ

В.К. АБРАМЯН, Н.Г. АКОПЯН, В.М. АРУТЮНЯН,
А.Л. МАРГАРЯН, Д.Л. ОГАНЕСЯН

Ереванский государственный университет, Армения

(Поступила в редакцию 16 июля 2010 г.)

Теоретически и экспериментально исследован процесс управления временем включения фазового модулятора на основе нематического жидкого кристалла (НЖК) с помощью дополнительного управляющего напряжения. Создана теоретическая модель процесса переориентации молекул НЖК в скрещенных электрических полях (традиционное поперечное поле и дополнительное продольное поле). Рассмотрена динамика переориентации молекулы НЖК в зависимости от соотношения амплитуд управляющих напряжений. Показана возможность сокращения времени включения при управлении фазовым модулятором на основе НЖК с помощью двух управляющих напряжений.

1. Введение

Электрооптические свойства нематических жидких кристаллов (НЖК) хорошо изучены и отражены в многочисленных публикациях и монографиях [1-4]. Сегодня НЖК нашли широкое применение в области отображения информации. Основой такого использования служит явление переориентации директора НЖК под действием поперечного электрического поля – электрооптический эффект Фредерикса [1]. Одной из основной характеристик приборов на основе жидких кристаллов (ЖК) является быстродействие, определяемое временами включения и выключения ЖК ячейки. Время включения определяется как время изменения электрооптического отклика от уровня 0.1 до уровня 0.9 его максимального значения, а время выключения – это время изменения электрооптического отклика от максимального значения до уровня 0.1 от максимума. Характерные времена электрооптического включения для НЖК обычно находятся в миллисекундном диапазоне [5]. Существуют определенные способы улучшения времен переключения НЖК ячеек. В основном они заключаются в повышении амплитуды управляющего напряжения или уменьшении толщины слоя ЖК [6]. В последнее время, кроме известных способов, используют физические принципы, связанные с введением

в жидкий кристалл фоточувствительных компонентов, например, красителей [7], что способствует увеличению поглощения сложной композитной системы. Как следствие, в данных структурах наблюдается фоторефрактивный эффект, что приводит к эффективной модуляции излучения, проходящего через жидкий кристалл, сенсибилизированный красителем.

Ранее нами рассмотрено влияние дополнительного продольного поля, приложенного вдоль одной из подложек НЖК ячейки, на модуляционные характеристики ЖК фазового модулятора [8,9]. В частности, показано, что путем изменения амплитуды дополнительного электрического поля можно осуществить плавное управление электрооптически наведенной фазовой задержкой проходящего через НЖК излучения. Там же приведена зависимость фазовой задержки от амплитуды управляющего напряжения.

Целью настоящей работы было изучение возможности управления временем включения НЖК ячейки с помощью дополнительного продольного электрического поля. В работе приводятся результаты теоретического исследования зависимости времени включения НЖК от амплитуды продольного электрического поля. Рассмотрена динамика переориентации молекулы НЖК в зависимости от соотношения амплитуд поперечного и продольного полей. Путем теоретического исследования и численных расчетов получена зависимость времени включения НЖК ячейки от амплитуды продольного электрического поля при фиксированной амплитуде поперечного поля. Приводятся результаты эксперимента по управлению временем включения ЖК фазового модулятора с помощью дополнительного управляющего напряжения.

2. Моделирование процесса переориентации директора нематического жидкого кристалла в скрещенных электрических полях

В данном разделе приводятся результаты численного эксперимента по исследованию возможности управления временем включения фазового модулятора на основе НЖК ячейки с помощью дополнительного продольного электрического поля. Теоретически данная проблема сводится к рассмотрению процесса переориентации молекул НЖК в скрещенных электрических полях (традиционное поперечное поле и дополнительное продольное поле). Рассмотрим динамику переориентации директора НЖК в скрещенных электрических полях при следующих упрощающих предположениях. Ориентация НЖК ячейки – планарная, длинные оси молекул направлены вдоль оси *y* (рис.1).

Поперечное электрическое поле приложено вдоль оси *z*, а продольное электрическое поле – вдоль оси *y* (вдоль проводящей подложки НЖК ячейки). В качестве подложек рассматривается стекло с прозрачным проводящим покрытием. Рассмотрим случай, когда имеется жесткая связь молекул НЖК с поверхностями подложек ячейки и отсутствуют потоки жидкости, приводящие к переориентации директора.

Геометрия взаимодействия в декартовой системе координат $\mathbf{r} = (x, y, z)$ показана на рис.1. Введем следующие обозначения: $\mathbf{E} = \mathbf{E}(t, r)$ – вещественный вектор электрического поля в кристалле, $\mathbf{n} = \mathbf{n}(t, r)$ – единичный вектор (директор), θ и φ – соответственно, полярный и азимутальный углы, связанные с **n** соотношением

$$\mathbf{n} = \left(n_x, n_y, n_z\right) = \left(\sin(\theta)\cos(\varphi), \sin(\theta)\sin(\varphi), \cos\theta\right). \quad (1)$$

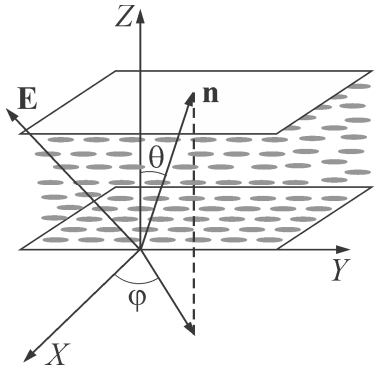


Рис.1. Геометрия взаимодействия директора НЖК с взаимно перпендикулярно направленными электрическими полями.

Для дальнейшего изложения введем дополнительные единичные векторы **m** и **p**, ортогональные к **n**:

$$\mathbf{m} = (mx, my, mz) = \frac{\partial \mathbf{n}}{\partial \theta} = \left(\cos(\theta)\cos(\varphi), \cos(\theta)\sin(\varphi), -\sin\theta\right), \quad (2)$$

$$\mathbf{p} = (px, py, pz) = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial \mathbf{n}}{\partial \varphi} = \left(-\sin\varphi, \cos\varphi, 0\right), \quad (3)$$

$$(\mathbf{nm}) = 0, \quad (\mathbf{np}) = 0, \quad (\mathbf{mp}) = 0. \quad (4)$$

Плотность свободной энергии F для НЖК можно представить в виде

$$F = \frac{1}{2}\left[K_1\left(\mathrm{div}(\mathbf{n})\right)^2 + K_2\left(\mathbf{n}\,\mathrm{rot}(\mathbf{n})\right)^2 + K_3\left(\mathbf{n}\times\mathrm{rot}(\mathbf{n})\right)^2\right] - \frac{\varepsilon_a}{8\pi}(\mathbf{nE})^2. \quad (5)$$

В функционале (5) K_1, K_2 и K_3 – упругие константы Франка, $\varepsilon_a = \varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp}$, $\varepsilon_{\parallel}$ и $\varepsilon_{\perp}$ – параметры тензора диэлектрической проницаемости, которые определяются следующим образом:

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{\perp}\delta_{ij} + \varepsilon_a n_i n_j, \quad i, j = x, y, z, \quad (6)$$

где δ_{ij} – символ Кронекера.

Предполагается, что в рассматриваемой области изменения частот электрического поля E значения материальных параметров K_i, $\varepsilon_{\parallel}$ и $\varepsilon_{\perp}$

являются постоянными. Для одномерного случая, когда все искомые величины зависят только от одной координаты z и от времени t, выражение (5) принимает следующий вид:

$$F = \frac{1}{2}\left[f\left(\frac{\partial\theta}{\partial z}\right)^2 + g\left(\frac{\partial\varphi}{\partial z}\right)^2 - \frac{\varepsilon_a}{4\pi}(\mathbf{nE})^2 \right],$$

$$f = f(\theta) = K_1 \sin^2(\theta) + K_3 \cos^2(\theta), \quad g = g(\theta) = \sin^2(\theta)\left(K_2 \sin^2(\theta) + K_3 \cos^2(\theta)\right). \quad (7)$$

Вариация функционала (7) с учетом релаксационных членов дает систему двух нелинейных уравнений для θ и φ вида

$$\begin{aligned} \gamma_b \frac{\partial\theta}{\partial t} &= f\frac{\partial^2\theta}{\partial z^2} + \frac{1}{2}\left[f_\theta\left(\frac{\partial\theta}{\partial z}\right)^2 + g_\theta\left(\frac{\partial\varphi}{\partial z}\right)^2 \right] + \frac{\varepsilon_a}{4\pi}(\mathbf{nE})(\mathbf{mE}), \\ \gamma_r \sin^2(\theta)\frac{\partial\varphi}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial z}\left(g\frac{\partial\varphi}{\partial z}\right) + \frac{\varepsilon_a}{4\pi}\sin(\theta)(\mathbf{nE})(\mathbf{mE}), \end{aligned} \quad (8)$$

где $f_\theta = \partial f/\partial\theta$, $g_\theta = \partial g/\partial\theta$, γ_b – коэффициент объемной вязкости НЖК, γ_r – коэффициент вращательной вязкости НЖК. При выводе (8) не учитывались флексоэлектрические добавки и пренебрегалось возможностью возникновения гидродинамических потоков. Уравнения (8) необходимо дополнить граничными условиями в точках $z = 0, L$ (L – толщина кристалла). Согласно [4], эти условия выбирались в виде

$$\begin{aligned} \left[K\frac{\partial\theta}{\partial z} \pm a_\theta\theta \right]_{z=0,L} &= b_\theta, \\ \left[K\frac{\partial\theta}{\partial z} \pm a_\varphi\varphi \right]_{z=0,L} &= b_\varphi, \end{aligned} \quad (9)$$

где знаки $\pm$ относятся, соответственно, к $z = 0$ и $z = L$, K – усредненная константа Франка. Параметры a_θ, a_φ, b_θ, b_φ в общем случае зависят от плотности поверхностной энергии связи директора с ограничивающими плоскостями, флексоэлектрических коэффициентов и электрических полей.

Для получения замкнутой системы к уравнениям (8) необходимо добавить уравнения Максвелла, определяющие связь электрических полей с ориентацией n. Пренебрегая проводимостью среды, для радиочастотного диапазона внутри образца запишем

$$\mathrm{div}(\tilde{\varepsilon}\mathbf{E}) = 0, \quad \mathrm{rot}\mathbf{E} = 0. \quad (10)$$

Здесь $\tilde{\varepsilon}$ – тензор диэлектрической проницаемости (6). В одномерном случае уравнения (10) с учетом (6) принимают вид

$$\frac{\partial}{\partial z}\left[\varepsilon_\perp E_z + \varepsilon_a n_z (\mathbf{nE}) \right] = 0, \quad \frac{\partial E_x}{\partial z} = \frac{\partial E_y}{\partial z} = 0. \quad (11)$$

Электрические поля внутри кристалла определяются однозначно через значения задаваемых полей путем интегрирования уравнений (11). При добавлении соответствующих начальных условий на углы ориентации $\theta(0,z) = \theta_0(z)$, $\varphi(0,z) = \varphi_0(z)$, система уравнений (8) с граничными условиями (9) и решением, следующим из (11), становится замкнутой для описания взаимодействия НЖК с произвольно направленным переменным электрическим полем в одномерном случае.

Для случая, когда переменное электрическое поле лежит в плоскости *yz*, $\mathbf{E}(t) = (0, E_y(t), E_z(t))$, имеем

$$
\begin{aligned}
&(\mathbf{nE}(t)) = \left(0, n_y E_y(t), n_z E_z(t)\right) = E_y(t)\sin(\theta)\sin(\varphi) + E_z(t)\cos\theta,\\
&(\mathbf{mE}(t)) = \left(0, m_y E_y(t), m_z E_z(t)\right) = E_y(t)\cos(\theta)\sin(\varphi) - E_z(t)\sin\theta,\\
&(\mathbf{pE}(t)) = E_y(t)\cos\varphi,\\
&(\mathbf{nE}(t))(\mathbf{mE}(t)) = \frac{1}{2}\sin(2\theta)\left[E_y^2(t)\sin^2\varphi - E_z^2(t)\right] + E_y(t)E_z(t)\cos(2\theta)\sin\varphi,\\
&(\mathbf{nE}(t))(\mathbf{pE}(t)) = \frac{1}{2}E_y^2(t)\sin(\theta)\sin(2\varphi) + E_z(t)E_y(t)\cos(\theta)\cos\varphi.
\end{aligned}
\tag{12}
$$

В рассматриваемой модели к НЖК ячейке одновременно прикладываются поперечное $E_z(t)$ и продольное $E_y(t)$ электрические поля. С учетом (12) система (8), состоящая из двух нелинейных уравнений, записанных для θ и φ, принимает следующий вид:

$$
\begin{aligned}
&\gamma_b \frac{\partial\theta}{\partial t} = \left[K_1\sin^2(\theta) + K_3\cos^2(\theta)\right]\frac{\partial^2\theta}{\partial z^2} + \frac{1}{2}(K_1 - K_3)\left(\frac{\partial\theta}{\partial z}\right)^2 +\\
&+\left[K_2\sin^2(\theta)\sin(2\theta) + \frac{1}{4}K_3\sin(4\theta)\right]\left(\frac{\partial\varphi}{\partial z}\right)^2 + \frac{\varepsilon_a}{8\pi}E_y^2(t)\sin^2(\varphi)\sin(2\theta) +\\
&+\frac{\varepsilon_a}{4\pi}E_y(t)E_z(t)\sin(\varphi)\cos(2\theta) - \frac{\varepsilon_a}{8\pi}E_z^2(t)\sin(2\theta),\\
&\gamma_r\sin^2(2\theta)\frac{\partial\varphi}{\partial t} = \left[2K_2\sin^2(\theta)\sin(2\theta) + \frac{1}{2}K_3\sin(4\theta)\right]\frac{\partial\theta}{\partial z}\frac{\partial\varphi}{\partial z} +\\
&+\left[K_2\sin^4(\theta) + \frac{1}{4}K_3\sin^2(2\theta)\right]\frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2} +\\
&+\frac{\varepsilon_a}{4\pi}\sin(\theta)\left[\frac{1}{2}E_y^2(t)\sin(\theta)\sin(2\varphi) + E_z(t)E_y(t)\cos(\theta)\cos(\varphi)\right].
\end{aligned}
\tag{13}
$$

Система уравнений (11) в рассматриваемом случае принимает следующий вид:

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial z}\left[E_z(t)\left(\varepsilon_\perp + \varepsilon_a\cos^2(\theta)\right) + \frac{1}{2}\varepsilon_a E_y(t)\sin(2\theta)\sin(\varphi)\right] = 0,\\
&\partial E_y(t)/\partial z = 0.
\end{aligned}
\tag{14}
$$

Для обеспечения корректности численного решения системы уравнений (13) методом конечных разностей начальные условия на границах выбраны с учетом незначительного отклонения длинной оси молекулы от направления оси *y*:

$$\theta(0,z)=\theta_0(z)=\pi/2,\quad \varphi(0,z)=\varphi_0(z)=\pi/2-\pi/100. \tag{15}$$

Рассматривается случай, когда компоненты переменного электрического поля $E_z(t)$ и $E_y(t)$ представляют периодическую последовательность прямоугольных импульсов с частотой следования 1 кГц и с разными значениями амплитуды.

Решить системы уравнений (13), (14) аналитически не представляется возможным. В данной работе приводятся результаты численного решения данных уравнений при начальных условиях (15), полученные методом конечных разностей. Численный эксперимент проведен для ячейки, заполненной НЖК типа 6CHBT с толщиной $L=5.1$ мкм и со следующими значениями параметров: $\varepsilon_{\parallel}=12.0$, $\varepsilon_{\perp}=4.0$, $K_{11}=8.57$ пН, $K_{22}=3.70$ пН, $K_{33}=9.51$ пН, $\gamma_b=13.3$ мПа· см, $\gamma_r=83.0$ мПа· см, $V_{th}=1.63$ В.

Интенсивность света, прошедшего через НЖК ячейку, помещенную между скрещенными поляризатором и анализатором, когда угол между осью поляризатора и начальной ориентацией молекул на границе составляет 45°, определяется в соответствии с [1] следующим образом

$$I=I_0\sin^2(G/2). \tag{16}$$

Здесь I_0 – интенсивность падающего света с учетом пропускания поляроидов, G – разность фаз между обыкновенной и необыкновенной волной, обусловленная величиной двулучепреломления, которая для монохроматического света с длиной волны λ имеет вид

$$G=\frac{2\pi}{\lambda}\int_{-L/2}^{L/2}\left[n_{eff}\left(\theta(z')\right)-n_{\perp}\right]dz, \tag{17}$$

где n_{eff} – эффективное значение коэффициента преломления НЖК, которое выражается через угол $\theta(z)$ следующим образом:

$$n_{eff}=\frac{n_{\perp}n_{\parallel}}{\sqrt{n_{\perp}^2\cos^2\theta(z)+n_{\parallel}^2\sin^2\theta(z)}}. \tag{18}$$

На рис.2 приведена временная зависимость интенсивности прошедшего света (16) при амплитудах скрещенных полей $V_y=12.5$ В, $V_z=1.25$ В; и $V_y=15.5$ В, $V_z=1.25$ В, соответственно. На вставке (а) показан временной профиль напряжений V_y и V_z, а на вставке (б) показан передний фронт временного профиля интенсивности света, прошедшего через систему «поляризатор–НЖК ячейка–анализатор» при фиксированном значении амплитуды $V_z=1.25$ В и при двух разных значениях амплитуды V_y, равных 12.5 В и 15.5 В. При этом, как видно из рисунка, при увеличении амплитуды V_y

от 12.5 В до 15.5 В время включения (время изменения электрооптического отклика НЖК ячейки от уровня 0.1 до уровня 0.9 его максимального значения) уменьшается от 1.612 мс до 0.849 мс.

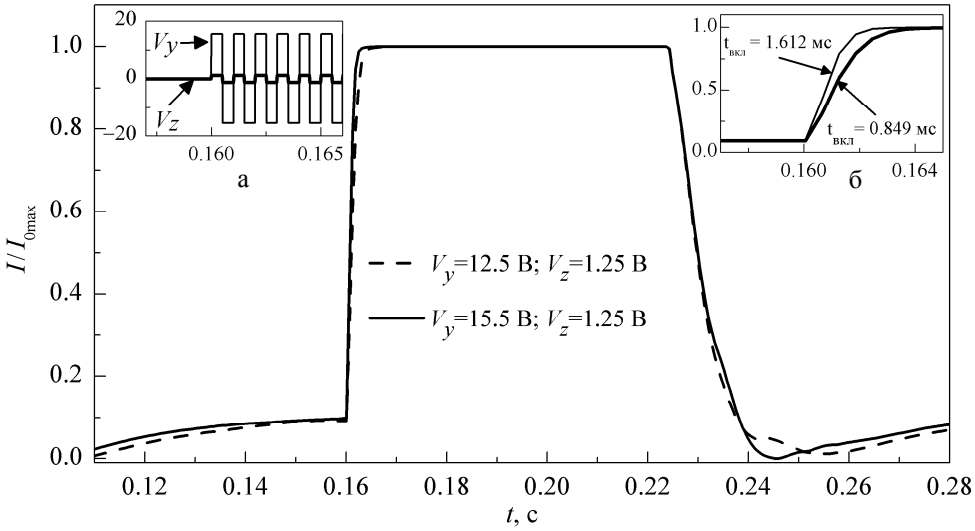


Рис.2. Временная зависимость интенсивности света, прошедшего через ячейку, при переориентации директора НЖК в скрещенных электрических полях.

На рис.3 показана зависимость времени включения НЖК ячейки от амплитуды V_y при фиксированном значении $V_z = 1.25$ В, полученная в результате численного интегрирования уравнений (13) и (14).

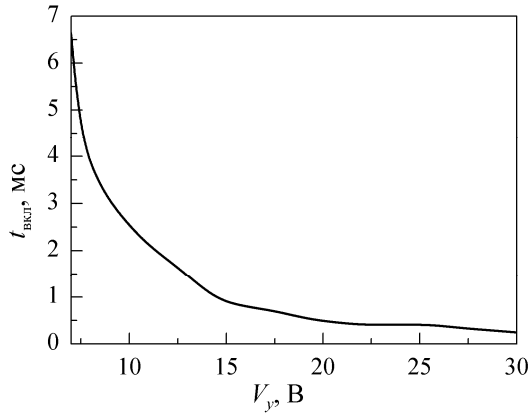


Рис.3. Зависимость времени включения НЖК ячейки от амплитуды V_y при фиксированном значении $V_z = 1.25$ В.

Из рисунка видно, что путем увеличения амплитуды переменного продольного электрического поля можно уменьшить время включения НЖК. В частности, при фиксированном $V_z = 1.25$ В и изменении V_y от 12.5 В до 15.5 В

время включения уменьшается примерно в 1.9 раз. Аналогичные вопросы рассмотрены в работе [10], где показано, что присутствие продольного электрического поля равносильно уменьшению толщины слоя ЖК, чем и обусловлено сокращение времени включения при увеличении напряжения продольного электрического поля.

Из зависимости, приведенной на рис.3, можно определить, что при $V_z = 1.25$ В и $V_y = 15.5$ В время включения равно 849 мкс. Согласно нижеприведенным результатам экспериментального исследования жидкокристаллического модулятора света, при тех же значениях управляющих напряжений и той же толщине НЖК типа 6CHBT время включения составляет 700 мкс. Расхождение между экспериментом и теорией составляет ~ 17.5%. Таким образом, результаты численного моделирования находятся в хорошем согласии с результатами эксперимента.

3. Экспериментальное исследование процесса управления временем включения фазового модулятора на основе нематического жидкого кристалла с помощью двух управляющих напряжений

Для проведения эксперимента была изготовлена планарно-ориентированная ячейка, заполненная НЖК марки 6CHBT (Польша) толщиной 5.1 мкм. В качестве подложек использованы оптические стекла марки ВК7, покрытые прозрачным проводящим покрытием с удельным сопротивлением 4.5 Ом·см. Ориентирование молекул ЖК на подложках осуществлено с помощью фотоориентируемого полимера марки ROLIC ROP-103/2CP (ROLIC, Швейцария).

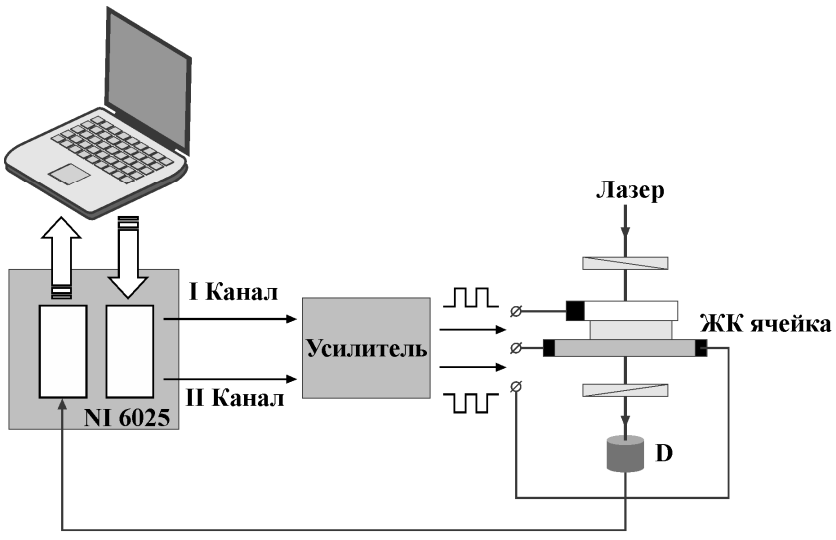


Рис.4. Оптическая схема экспериментальной установки.

Эксперимент проводился на установке, схема которой приведена на рис.4. Излучение He-Ne лазера мощностью 1 мВт на длине волны 0.63 мкм направлялось на образец, установленный между скрещенными поляризаторами перпендикулярно направлению распространения лазерного пучка таким образом, чтобы направление директора ЖК составляло бы 45° с направлением поляризации падающего луча. На выходе системы «поляризатор–НЖК ячейка–анализатор» пучок регистрировался фотодетектором. В качестве фотодетектора использовался фотоприемник марки Newport 818-SL. Электрический сигнал с выхода фотоприемника подавался через карту NI DAQ 6025 на компьютер. Регистрировалось значение интенсивности света, прошедшего через ЖК фазовый модулятор.

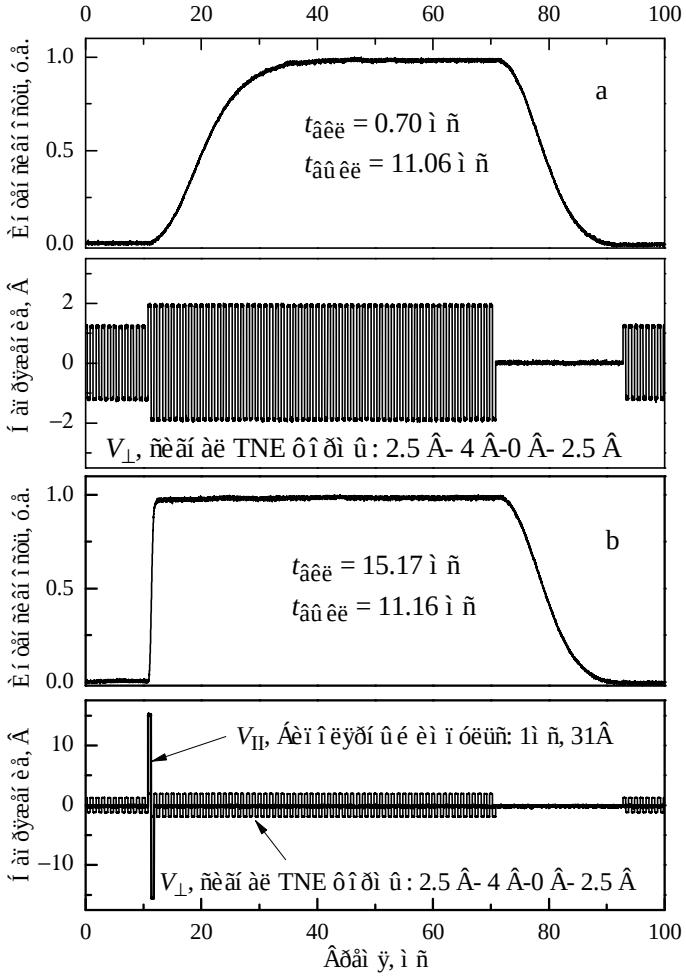


Рис.5. Временные зависимости интенсивности света, прошедшего через НЖК ячейку при управлении с помощью одного (а) и двух (б) полей.

Управление ЖК фазовым модулятором производилось с помощью разработанного нами аппаратного и программного обеспечения, позволяющего генерировать двуполярные электрические импульсы с частотой следования 1 кГц. Сформированные с помощью программы импульсы через карту NI DAQ 6025 подавались на усилитель и затем на ЖК фазовый модулятор. С выхода усилителя через первый канал подавалось поперечное электрическое поле – сигнал TNE (Transient Nematic Effect) формы, а через второй – управляющее продольное поле.

На рис.5а приведена временная зависимость интенсивности прошедшего света при управлении с помощью традиционного поперечного поля – управляющий сигнал TNE формы: $V_z = V_\perp = 1.25$ В ($0 < t \le 16$ мс), $V_z = V_\perp = 2$ В ($16 < t \le 72$ мс), $V_z = V_\perp = 0$ В ($72 < t \le 92$ мс), $V_z = V_\perp = 1.25$ В ($92 < t$). Там же показан временной профиль управляющего напряжения. Согласно рисунку, время включения в отсутствие дополнительного управляющего напряжения составляет 15.17 мс, а время выключения – 11.16 мс.

Временная зависимость интенсивности прошедшего света при управлении с помощью двух управляющих напряжений показана на рис.5б. Значения амплитуд управляющих напряжений составляют: $V_z = V_\perp = 1.25$ В ($0 < t \le 16$ мс), $V_z = V_\perp = 2$ В ($16 < t \le 72$ мс), $V_z = V_\perp = 0$ В ($72 < t \le 92$ мс), $V_z = V_\perp = 1.25$ В ($92 < t$) и $V_y = V_\square = 15.5$ В ($16 < t \le 17$ мс), соответственно. Там же приведены временные профили управляющих напряжений. Как видно из рисунка, время включения при работе в данном режиме составляет 700 мкс, а время выключения – 11.06 мс.

Таким образом, при управлении с помощью двух напряжений время включения ЖК фазового модулятора уменьшается примерно в 20 раз, а полное время переключения – в 2.5 раза.

4. Выводы

В результате теоретического исследования и эксперимента показана возможность значительного сокращения времени включения при управлении фазовым модулятором на основе нематического жидкого кристалла с помощью дополнительного электрического поля.

С использованием теоретической модели процесса переориентации молекул НЖК в скрещенных электрических полях (традиционное поперечное поле и дополнительное продольное поле) получена зависимость времени включения ЖК фазового модулятора от амплитуды продольного электрического поля при фиксированной амплитуде поперечного поля. Показано, что динамика переориентации молекулы НЖК зависит от соотношения амплитуд поперечного и продольного полей. Экспериментальное исследование показало, что применение дополнительного управляющего напряжения позволяет сократить время включения ЖК фазового модулятора примерно в 20 раз. Расчетная зависимость времени включения от амплитуды

дополнительного управляющего напряжения находится в хорошем согласии с результатами эксперимента.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Л.М.Блинов.** Электро- и магнитооптика жидких кристаллов. М., Наука, 1978.
2. **Iam-Choon Khoo.** Liquid crystals. New York, Wiley, 1995.
3. **В.В.Беляев**. Вязкость нематических жидких кристаллов. М., Физматлит, 2002.
4. **С.А.Пикин.** Структурные превращения в жидких кристаллах. М., Наука, 1981.
5. **Г.А.Береснев, В.А.Цветков.** Микроэлектроника, **11**, 181 (1982).
6. **N.V.Kamanina, N.A.Vasilenko.** Opt. Quantum Electron., **29**, 1 (1997).
7. **A.Miniewic, J.Parka, S.Bartkiewic, A.Januszko.** Pure Appl. Opt., **7**, 179 (1998).
8. **V.K.Abrahamyan, N.H.Hakobyan, V.M.Aroutiounian, N.V.Kamanina, H.L.Margaryan, D.L.Hovhannisyan, D.K.Pokhsraryan.** J. Contemp. Phys. (Armenian Ac. Sci.), **44**, 283 (2009).
9. **H.L.Margaryan, V.M.Aroutiounian, N.H.Hakobyan, D.L.Hovhannisyan, V.K.Abrahamyan.** Mol. Cryst. Liq. Cryst., **525**, 78 (2010).
10. **Р.С.Акопян, Б.Я.Зельдович.** ЖЭТФ, **83**, 2137 (1982).

ՀԵՂՈՒԿ ԲՅՈՒՐԵՂԱՅԻՆ ՓՈՒԼԱՅԻՆ ՄՈԴՈՒԼՅԱՏՈՐԻ ՄԻԱՑՄԱՆ ԺԱՄԱՆԱԿԻ ԲԱՐԵԼԱՎՈՒՄԸ ԼՐԱՑՈՒՑԻՉ ԿԱՌԱՎԱՐՈՂ ԼԱՐՄԱՆ ՄԻՋՈՑՈՎ

Վ.Կ. ԱԲՐԱՀԱՄՅԱՆ, Ն.Հ. ՀԱԿՈԲՅԱՆ, Վ.Մ. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ,
Հ.Լ. ՄԱՐԳԱՐՅԱՆ, Դ.Լ. ՀՈՎՀԱՆՆԻՍՅԱՆ

Կատարված է նեմատիկ հեղուկ բյուրեղի (ՆՀԲ) հիման վրա պատրաստված փուլային մոդուլյատորի միացման ժամանակի լրացուցիչ լարման օգնությամբ կառավարման պրոցեսի տեսական և փորձնական հետազոտությունը: Ստեղծված է ՆՀԲ-ի մոլեկուլների խաչված էլեկտրական դաշտերում (ավանդական լայնական և լրացուցիչ երկայնական) վերակողմնորոշման պրոցեսի տեսական մոդելը: Դիտարկված է ՆՀԲ-ի մոլեկուլի վերակողմնորոշման դինամիկան՝ կախված կառավարող լարումների ամպլիտուդների հարաբերությունից: Ցույց է տրված միացման ժամանակի կրճատման հնարավորությունը, երբ ՆՀԲ-ի հիման վրա պատրաստված փուլային մոդուլյատորի կառավարումը կատարվում է երկու լարումների միջոցով:

IMPROVEMENT OF TURN-ON TIME OF A LIQUID-CRYSTAL PHASE RETARDER BY USING AN ADDITIONAL CONTROL VOLTAGE

V.K. ABRAHAMYAN, N.H. HAKOBYAN, V.M. AROUTIOUNIAN,
H.L. MARGARYAN, D.L. HOVHANNISYAN

The process of turn-on time control of a phase retarder based on nematic liquid crystal (NLC) by using an additional control voltage has been investigated theoretically and experimentally. A theoretical model of reorientation process of NLC molecules in the crossed electric fields (a traditional transverse field and an additional longitudinal field) is proposed. Dynamics of reorientation of NLC molecule is depending on the ratio of amplitudes of control voltages is considered. The opportunity of reduction of turn-on time of the NLC-based phase retarder is shown when driving is realized by using two control voltages.

Известия НАН Армении, Физика, т.45, №6, с.440-446 (2010)

УДК 621.382

ОСОБЕННОСТИ ДИСПЕРСИИ ПОДВИЖНОСТИ ЭЛЕКТРОНОВ В ГОМЕОПОЛЯРНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

С.В. МЕЛКОНЯН, А.В. СУРМАЛЯН

Ереванский государственный университет, Армения

(Поступила в редакцию 25 марта 2010 г.)

Исследованы статистические особенности флуктуации подвижности носителей тока (электронов) в невырожденных полупроводниках. Получено аналитическое выражение для дисперсии подвижности электронов, обусловленное случайными изменениями заселенности энергетических уровней зоны проводимости. В рамках развитой теории рассмотрена температурная зависимость дисперсии подвижности электронов проводимости в гомеополярных полупроводниках.

1. Введение

В теории низкочастотных флуктуаций электрического тока в металлах, полупроводниках и полупроводниковых приборах в качестве источника 1/*f*-шума обсуждаются две основные модели: флуктуация концентрации ($\tilde{n}$-модель) и флуктуация подвижности ($\tilde{\mu}$-модель) носителей тока [1-4]. Гипотетическая идея флуктуации подвижности, как возможный источник низкочастотных токовых шумов в проводниках, впервые была высказана в работах Хуга [5]. При этом не был выдвинут определенный физический механизм. В дальнейшем, в работах [6-8] были выявлены микроскопические механизмы флуктуации подвижности. Было установлено [6-8], что флуктуация подвижности, например, электронов в общем случае является результатом флуктуации времени релаксации $\tilde{\tau}_k$ квазиимпульса электронов ($\tilde{\tau}_k$-источник) и заселенности $\tilde{n}_k$ энергетических уровней зоны проводимости полупроводника ($\tilde{n}_k$-источник). Как известно, источники флуктуации подвижности весьма разнообразны [8]. Для того чтобы оценить вклады отдельных источников, необходимо их рассмотреть и проанализировать раздельно: для каждого источника исследовать как статистические особенности (дисперсия, амплитудное распределение и т.д.), так и выявить частотные, токовые и другие зависимости спектральной плотности флуктуации подвижности, и сравнить полученные результаты с аналогичными свойствами 1/*f*-шума.

Целью настоящей работы было вычислить и исследовать основные свойства дисперсии подвижности носителей тока, исходя из развитого в работах [6,7] физического механизма флуктуации подвижности. Для определенности

рассматривается система электронов проводимости однородного и невырожденного полупроводника.

2. Дисперсия подвижности

Здесь, как и в работах [6-8], для упрощения задачи обсуждаются только временные флуктуации, предполагая, что флуктуирующие величины не зависят от пространственных координат. В работе [6], рассматривая флуктуации подвижности электронов, обусловленные случайными изменениями заселенности энергетических уровней зоны проводимости ($\tilde{n}_k$-источник), флуктуация проводимости $\tilde{\sigma}_n$ *n*-полупроводника была представлена в виде суммы двух некоррелированных составляюших, пропорциональных флуктуациям концентрации $\tilde{n}$ и подвижности $\tilde{\mu}_n$ электронов, соответственно:

$$\tilde{\sigma}_n = e\tilde{n}\bar{\mu}_n + e\bar{n}\tilde{\mu}_n. \qquad (1)$$

Здесь и далее символами "~" и "¯" обозначены флуктуационная и среднестатистическая составляющие соответствующих величин,

$$\tilde{\mu}_n \equiv \sum_k (\bar{\mu}_k - \bar{\mu}_n)\tilde{n}_k / \bar{n}V, \qquad (2)$$

$\tilde{n}_k = -kd\tilde{f}_k^0 / 3dk$, f_k^0 – равновесная функция распределения Больцмана, n – концентрация электронов проводимости, $\mu_n = \sum_{\mathbf{k}} n_k \mu_k / nV$, $\mu_k = e\tau_k / m_n$ – "локальная" подвижность электрона с квазиволновым вектором **k**, $\tau_k \cong \tau_{0,r}\left(k/k_T\right)^{-r}$, $\tau_{0,r}$ – коэффициент, зависящий от механизма рассеяния, температуры и параметров полупроводника, показатель r характеризует механизм рассеяния электронов [9], $k_T^2 = 2m_n k_B T / \hbar^2$ – квазиволновой вектор термических электронов, T – температура, V – объем полупроводника, k_B – постоянная Больцмана, m_n – эффективная масса электрона, e – элементарный заряд.

Переходя в уравнении (2) от суммирования к интегрированию, получим

$$\tilde{\mu}_n = -\frac{1}{12\pi^3 \bar{n}} \int d\mathbf{k} \frac{d\tilde{f}_k^0}{dk} k\left(\bar{\mu}_k - \bar{\mu}_n\right). \qquad (3)$$

Здесь интегрирование проводится в пределах первой зоны Бриллюэна (BZ).

Используя процедуру интегрирования по частям, в случае, когда эффективная масса электрона является постоянной величиной ($m_n(\varepsilon) = \text{const}$, ε – энергия электрона), уравнение (3) можно представить в виде

$$\tilde{\mu}_n = -\frac{1}{12\pi^3 \bar{n}} \int_{\text{BZ}} d\mathbf{k} \frac{d\tilde{f}_k^0}{dk} k\left(\bar{\mu}_k - \bar{\mu}_n\right), \qquad (4)$$

где

$$\bar{\tau}_k^* \equiv \bar{\tau}_k + \left(k/3\right) d\bar{\tau}_k / dk, \qquad (5)$$

$\bar{\mu}_n = e\left\langle \bar{\tau}_k^* \right\rangle / m_n$, $\langle \ldots \rangle$ – символ усреднения по квантовым состояниям зоны проводимости [9] (см. ниже, уравнение (11)). Следовательно, $\tilde{n}_k$ (составляющая дисперсии подвижности $\sigma_\mu^2 = \tilde{\mu}_n^2$) можно представить в следующем виде:

$$\sigma_\mu^2 = \frac{e^2}{\left(4\pi^3 \bar{n} m_n\right)^2} \iint\limits_{\mathrm{BZ}} d\mathbf{k} d\mathbf{k}_1 \left(\bar{\tau}_k^* - \left\langle \bar{\tau}_k^* \right\rangle\right)\left(\bar{\tau}_{k_1}^* - \left\langle \bar{\tau}_{k_1}^* \right\rangle\right) \overline{\tilde{f}_k^0 \tilde{f}_{k_1}^0}. \qquad (6)$$

Как известно [10,11], если концентрация электронов флуктуирует ($\tilde{n} \neq 0$, как это имеет место, например, при случайных генерационно-рекомбинационных переходах), то

$$\overline{\tilde{f}_k^0 \tilde{f}_{k_1}^0} = \frac{4\pi^3 \bar{f}_k^0}{V} \delta(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}_1). \qquad (7)$$

Если концентрация электронов является постоянной (нефлуктуирующей) величиной ($\tilde{n} = 0$, как это имеет место при случайных внутризонных рассеяниях), то в этом случае получаем [11]

$$\overline{\tilde{f}_k^0 \tilde{f}_{k_1}^0} = \frac{4\pi^3 \bar{f}_k^0}{V} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1) - \frac{\bar{f}_k^0 \bar{f}_{k_1}^0}{\bar{n} V}. \qquad (8)$$

Поочередно подставляя уравнения (7) и (8) в уравнение (6) и проведя соответствующие интегрирования, можно определить дисперсию σ_μ^2. Расчеты показали, что как при случайных внутризонных рассеяниях, так и при случайных генерационно-рекомбинационных переходах для дисперсии σ_μ^2 получается одно и то же выражение. Такая особенность дисперсии σ_μ^2 является результатом того, что в невырожденных полупроводниках подвижность $\bar{\mu}_n$ не зависит от концентрации электронов, и вполне естественно, что дисперсия подвижности не зависит от того, флуктуирует концентрация электронов или нет. Для $\tilde{n}_k$ -составляющей дисперсии подвижности получается следующее выражение:

$$\sigma_\mu^2 = \frac{(\bar{\mu}_n)^2}{\bar{N}} \rho_n, \qquad (9)$$

где $N = nV$ – количество электронов проводимости в полупроводниковом *n*-образце,

$$\rho_n = \left\langle \bar{\tau}_k^{*2} \right\rangle \Big/ \left\langle \bar{\tau}_k^* \right\rangle^2 - 1, \qquad (10)$$

$$\left\langle (\ldots) \right\rangle = \int\limits_{\mathrm{BZ}} dk (\ldots) \bar{f}_k^0 \Big/ \int\limits_{\mathrm{BZ}} dk \bar{f}_k^0. \qquad (11)$$

В простом случае, когда действует только один механизм рассеяния с $\bar{\tau}_k \cong \tau_{0,r} \left(k/k_T\right)^{-r}$ из уравнения (10), при параболическом законе дисперсии электронов $\varepsilon = \hbar^2 k^2 / 2m_n$, получается следующее простое выражение:

$$\rho_n = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{G\left(3/2 - r\right)}{G^2\left((3-r)/2\right)} - 1. \qquad (12)$$

Здесь $G(\cdots)$ – гамма-функция.

Основные свойства дисперсии σ_μ^2 отражены в уравнении (9). Величина σ_μ^2 по обратно пропорциональному закону зависит от числа электронов в образце, $\sigma_\mu^2 \sim 1/\bar{N}$. Из (9) и (12) видно, что $\sigma_\mu^2 = 0$ при $r = 0$, т.е. случайное рассеяние с индексом $r = 0$ не является источником $\tilde{n}_k$ -флуктуации

подвижности. Однако, следует отметить, что эта ситуация полностью меняется при смешанном рассеянии, когда наряду с процессом $r = 0$ действует процесс рассеяния с $r \neq 0$. Процессом с $r = 0$ является, в частности, рассеяние на нейтральных центрах. При рассеянии на акустических фононах $r = 1$, и т.д. [9,12].

Отметим, что для полупроводника с непараболическим законом дисперсии ($m_n(\varepsilon) \neq \text{const}$), уравнение (10) можно обобщить, представив его в виде

$$\rho_n = \frac{\left\langle \bar{\mu}_k^{*2} \right\rangle}{\left\langle \bar{\mu}_k^{*} \right\rangle^2} - 1,$$

где $\bar{\mu}_k^* \equiv \bar{\mu}_k + k\, d\bar{\mu}_k / 3dk$, $\left\langle \bar{\mu}_k^* \right\rangle = \bar{\mu}_n$.

3. Температурная зависимость дисперсии подвижности электронов в Si и Ge

Флуктуации подвижности непосредственно связаны со случайным характером процессов рассеяния. Простая теория рассеяния для монокристаллических гомеополярных полупроводников (Si, Ge) приводит к закону $\bar{\mu}_n \sim T^{-3/2}$, характерному для рассеяния электронов на акустических фононах [9,12]. Однако закон $T^{-3/2}$, как правило, не наблюдается на эксперименте. Так, в *n*-Si в температурной области 100 К < T < 400 К наблюдается зависимость $\bar{\mu}_n \sim T^{-2.5}$, а в *n*-Ge в области 77 К < T < 300 К наблюдается зависимость $\bar{\mu}_n \sim T^{-1.7}$ [9,12,13]. Такие отступления от теории в общем случае объясняются различными причинами [9,12]: дополнительным рассеянием на оптических колебаниях решетки, междолинными рассеяниями, непараболичностью зон и т.д. В *n*-Ge и *n*-Si основную роль играют междолинные рассеяния [9,12]. Различают два типа междолинных рассеяний: *g*-рассеяние, происходящее между данной долиной и эквивалентной долиной на противоположной стороне той же оси; и *f*-рассеяние, когда электрон переходит из данной долины в одну из остальных эквивалентных долин. По вопросу об отношении интенсивностей *f*- и *g*-рассеяний не существует единого мнения [14]. Энергии междолинных *f*- и *g*-фононов $\hbar\omega_i = k_B\theta_i$ для *n*-Si и *n*-Ge приведены в работе [13].

При совместном действии внутридолинного рассеяния на акустическом деформационном потенциале (с временем релаксации $\tau_{k,ac}$) и междолинного рассеяния (с временем релаксации $\tau_{k,i}$) эффективное время релаксации квазиимпульса электрона $\bar{\tau}_k$ можно представить в виде [9, 12]

$$\bar{\tau}_k^{-1} = \bar{\tau}_{k,ac}^{-1} + \bar{\tau}_{k,i}^{-1}, \qquad (13)$$

где

$$1/\overline{\tau}_{k,ac} = w_1 \frac{k_B T \varepsilon^{1/2}}{(k_B\theta_i)^{3/2}}, \quad 1/\overline{\tau}_{k,i} = w_2 \left(\sqrt{\frac{\varepsilon}{k_B\theta_i} + 1} + e^{\frac{\theta_i}{T}} \operatorname{Re} \sqrt{\frac{\varepsilon}{k_B\theta_i} - 1} \right) \Bigg/ \left(e^{\frac{\theta_i}{T}} - 1 \right), \qquad (14)$$

$w_1 = 2^{1/2} \varepsilon_{ac}^2 (k_B\theta_i m_n)^{3/2} / \pi\hbar^4 c_l$, w_2 – некоторая постоянная (константа связи), подлежащая определению из эксперимента (например, из акустоэлектрического эффекта [12]), ε_{ac} – константа акустического потенциала деформации зоны проводимости, c_l – продольная упругая постоянная.

Следует отметить, что при междолинных рассеяниях температурная зависимость подвижности $\overline{\mu}_n$ достаточно хорошо описывается моделью Херинга [15]. Расчеты, проведенные на основе метода Херинга, показывают, что для кремния зависимость $\overline{\mu}_n \sim T^{-2.5}$ получается при $w_2/w_1 \approx 3$ [12]. Для германия зависимость $\overline{\mu}_n \sim T^{-1.7}$ получается при $w_2/w_1 \approx 0.5$.

Имея в виду вышеизложенное, рассмотрим дисперсию подвижности электронов при смешанном рассеянии, описываемом уравнением (13). Подставляя (13) в (5), а полученное выражение в уравнение (10), параметр ρ_n при параболическом законе дисперсии электронов можно представить в следующем интегральном виде:

$$\rho_n = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \int_0^\infty dx x^{1/2} e^{-x} b^2(x) / a^4(x) \Bigg/ \left[\int_0^\infty dx e^{-x} x^{3/2} / a(x) \right]^2 - 1, \qquad (15)$$

где $x = \varepsilon / k_B T$,

$$a(x) = (T/\theta_i)^{3/2} \left(e^{\theta_i/T} - 1 \right) \sqrt{x} + \frac{w_2}{w_1} \left(\sqrt{xT/\theta_i + 1} + e^{\theta_i/T} \operatorname{Re} \sqrt{xT/\theta_i - 1} \right),$$

$$b(x) = (T/\theta_i)^{3/2} \left(e^{\theta_i/T} - 1 \right) \sqrt{x} +$$

$$+ \frac{w_2}{w_1} \left\{ (xT/\theta_i + 3/2) / \sqrt{xT/\theta_i + 1} + e^{\theta_i/T} \operatorname{Re} \left[(xT/\theta_i - 3/2) / \sqrt{xT/\theta_i - 1} \right] \right\}.$$

Как видно из этого выражения, параметр ρ_n нетривиальным образом зависит от T, θ_i и w_2/w_1. Для выявления температурной зависимости $\rho_n(T)$ проведены соответствующие численные расчеты для Si и Ge. Для кремния вычисления проведены при $m_n/m_0 = 0.32$, $\varepsilon_{ac} = 9$ эВ [13], $w_2/w_1 = 3$ и энергии междолинных X-X фононов [13] $\theta_i = 865$ К (TO *f*-фонон, $\hbar\omega_i = 59.1$ мэВ), $\theta_i = 550$ К (LA *f*-фонон, $\hbar\omega_i = 47.4$ мэВ), $\theta_i = 294$ К (TA *f*-фонон, $\hbar\omega_i = 25.4$ мэВ). Для германия вычисления проведены при $m_n/m_0 = 0.22$, $\varepsilon_{ac} = 11$ эВ [13], $w_2/w_1 = 0.5$ и энергии междолинных L-L фононов [13] $\theta_i = 320$ К (LA, LO фонон, $\hbar\omega_i = 27.6$ мэВ), $\theta_i = 119$ К (TA фонон, $\hbar\omega_i = 10.3$ мэВ). Из уравнения (14) видно, что функция $\overline{\tau}_k(\varepsilon)$ имеет излом при $\varepsilon = k_B\theta_i$. Поэтому, при численных расчетах учитывалось квантовое расширение $\Delta\varepsilon$ дискретного уровня $\varepsilon = k_B\theta_i$, обусловленное соотношением неопределенности $\Delta\varepsilon = \hbar/\tau_k(\varepsilon = k_B\theta_i)$. Результаты расчетов для Si и Ge представлены на рис.1 и 2, соответственно. Как видно, кривые имеют одинаковую форму. При уменьшении θ_i максимум кривой

$\rho_n(T)$ смещается в сторону низких температур. В области очень низких и очень высоких температур кривые насыщаются, а параметр ρ_n становится температурно-независимой величиной. Так, в случае кремния кривая $\theta_i = 865$ К насыщается в области T < 50 К, а кривые $\theta_i = 550$ К и $\theta_i = 294$ К насыщаются при
T < 40 К и T < 20 К, соответственно. В случае германия кривая $\theta_i = 320$ К насыщается при T < 40 К, а кривая $\theta_i = 119$ К при T < 10 К. При этом, независимо от численного значения θ_i параметр $\rho_n(T) \to 0.57$ при $T \to 0$.

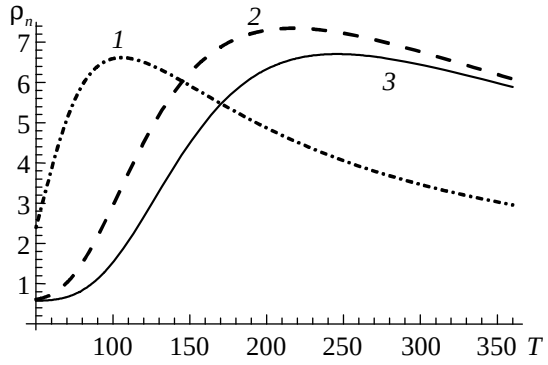


Рис.1. Температурная зависимость ρ_n для Si при $\theta_i = 294$ K (1), $\theta_i = 550$ K (2), $\theta_i = 685$ K (3).

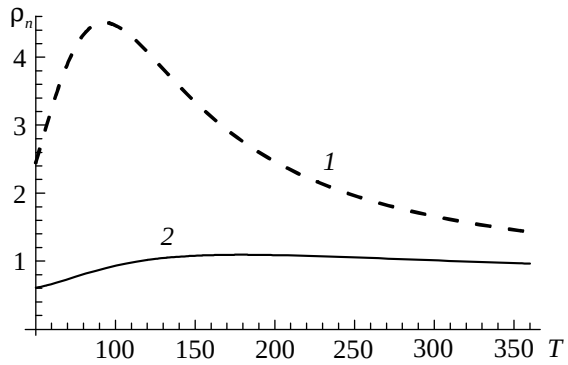


Рис. 2. Температурная зависимость ρ_n для Ge при $\theta_i = 119$ K (1) и $\theta_i = 320$ K (2).

4. Заключение

Таким образом, получено аналитическое выражение (9), которое описывает основные особенности дисперсии $\tilde{n}_k$-составляющей флуктуации подвижности электронов σ_μ^2 в невырожденных полупроводниках. Для теории низкочастотных шумов в проводниках интересным является то, что дисперсия подвижности σ_μ^2 зависит от числа носителей тока по обратно пропорциональному закону. Как известно [1-4], аналогичное свойство имеет

спектральная плотность 1/*f*-шума. Общее выражение (9) выявляет связь дисперсии подвижности с процессами рассеяния электронов. Его можно применить как для собственных (или слабо легированных), так и примесных полупроводников, когда становятся существенными процессы рассеяния с участием примесей или различного рода несовершенств кристаллической решетки. В гомеополярных полупроводниках, в частности, в слабо легированных *n*-Si и *n*-Ge важную роль играют междолинные рассеяния с участием фононов. В данном случае параметр ρ_n, а следовательно, и σ_μ^2, зависят от энергии междолинных фононов $\hbar\omega_i$.

Следует отметить, что уравнение (9) расширяет возможности теории при интерпретации экспериментальных данных по 1/*f*-шуму в рамках модели флуктуации подвижности. Как показывает анализ, в зависимости от численных значений параметров полупроводника, которыми характеризуются процессы рассеяния, уравнение (9) может привести к различным (степенным, осцилляционным и экспоненциальным) температурным зависимостям.

ЛИТЕРАТУРА

1. **F.N.Hooge, T.G.M.Kleinpenning, L.K.J.Vandamme**. Rep. Progr. Phys., **44,** 479 (1981).
2. **L.K.J.Vandamme**. IEEE Trans. Electron. Devices, ED **36,** 987 (1989).
3. **F.N.Hooge**. IEEE Trans. Electron. Devices, ED **41,** 1926 (1994).
4. **G.P.Zhigalskii**. Proc. of SPIE's Conf. "Fluctuations and Noise in Materials", Laspalmas, Grain Canaria, Spain, **5469,** 296 (2004).
5. **F.N.Hooge**. Phys. Lett., **29A,** 139 (1969); Physica, **42,** 331 (1969).
6. **S.V.Melkonyan**. Physica B, **405,** 379 (2010).
7. **S.V.Melkonyan, V.M.Aroutiounian, F.V.Gasparyan, H.V.Asriyan**. Physica B, **382,** 65 (2006).
8. **S.V.Melkonyan, F.V.Gasparyan, H.V.Asriyan**. Proc. of SPIE's Conf. "Noise and Fluctuations in Circuits, Devices, and Materials", Florence, Italy, **6600,** 66001K (2007).
9. **A.Anselm**. Introduction to Semiconductor Theory. Englewood Cliffs, USA, Prentice Hall 1982.
10. **L.D.Landau, E.M.Lifshitz**. Statistical Physics, v.5; Physical Kinetics, v.10 (Theoretical Physics Course). Oxford, 1980.
11. **H.S.Min.** J. Appl. Phys., **51,** 1637 (1980).
12. **K.Zeeger**. Semiconductor Physics. Wien, New York, Springer-Verlag, 1973.
13. **A.Dargys, J.Kundrotas**. Handbook on Physical Properties of Ge, Si, GaAs and InP. Vilnius, Science and Encyclopedia Publishers, 1994.
14. **V.I.Denis, Yu.K.Pozhela**. Hot Electrons. Vilnius, Mintis, 1971.
15. **C.Herring**. Bell Syst. Techn. Journ., **34,** 237 (1955).

FEATURES OF THE ELECTRON'S MOBILITY VARIANCE IN HOMEOPOLAR SEMICONDUCTORS

S.V. MELKONYAN, A.V. SURMALYAN

The statistical peculiarities of the current carriers' (electrons) mobility fluctuation in nondegenerated semiconductors are considered. An analytical expression is obtained for the conduction electrons' mobility variance, conditioned by random changes of the conduction band's energy levels occupancy. Within the framework of the developed theory the temperature dependences of the electron's mobility variance in homeopolar semiconductors are discussed.

Известия НАН Армении, Физика, т.45, №6, с.447-455 (2010)

УДК 621.3

ГАЗОВЫЙ СЕНСОР НА ОСНОВЕ НАНОРАЗМЕРНОЙ ПЛЕНКИ In_2O_3:Ga_2O_3

М.С. АЛЕКСАНЯН, В.М. АРАКЕЛЯН, В.М. АРУТЮНЯН,
А.З. АДАМЯН, Г.Э. ШАХНАЗАРЯН

Ереванский государственный университет, Армения

(Поступила в редакцию 21 июня 2010 г.)

Наноразмерные пленки In_2O_3:Ga_2O_3 (96:4 вес.%) были осаждены на ситалловую подложку методом высокочастотного магнетронного распыления. Поверхность изготовленных пленок исследована с помощью сканирующего электронного микроскопа, определены размеры зерен, измерена толщина пленок. Для создания газочувствительной структуры на поверхность пленки In_2O_3:Ga_2O_3 методом ионноплазменного распыления были осаждены тонкий каталитический палладиевый слой и золотые гребенчатые омические контакты. Исследована чувствительность сенсоров на основе ситалл/In_2O_3:Ga_2O_3(96:4 вес.%)/Pd структуры к разной концентрации смеси газов пропан и бутан, а также к метану при температурах рабочего тела от 200 до 350°C.

1. Введение

В последние годы, как в быту, так и в промышленности, интенсивнее стала использоваться смесь газов пропан и бутан. Эта смесь газов используется также в качестве горючего для автотранспорта. Утечка этой взрывоопасной смеси может стать причиной несчастных случаев. Поэтому своевременное обнаружение наличия этой газовой смеси в окружающей атмосфере, а также точное определение ее концентрации стало сегодня актуальной задачей [1-6].

Металлоксидные полупроводники (SnO_2, ZnO, TiO_2, In_2O_3, WO_3 и др.) широко используются для изготовления сенсоров, чувствительных к различным газам, таким как H_2, CO, NO_x, CH_4, C_3H_8, C_4H_{10} и т.д. Выбранные нами для исследования пленки на основе оксида индия (In_2O_3) довольно длительное время исследовались в качестве прозрачных электродов для солнечных элементов, а также как материал для дисплеев с плоским экраном. Примерно 10–15 лет назад начались исследования газочувствительных свойств пленок In_2O_3 [7-10]. Изготовленные на основе этого оксида газовые сенсоры, несмотря на слабую чувствительность и плохую избирательность, характеризуются достаточно низкой потребляемой мощностью, малыми временами отклика и восстановления, проявляют стабильность параметров в процессе длительной эксплуатации. Кроме того, выбор In_2O_3 связан с тем, что структуры на основе этого оксида хорошо интегрируются с интегральными схемами [11].

Известно, что чувствительность газовых сенсоров на основе широко ис-

пользуемой окиси SnO_2 возрастает при уменьшении размеров зерен чувствительной пленки. Однако, характеристики сенсоров на основе In_2O_3 очень слабо меняются при уменьшении размеров зерен пленки под действием восстанавливающего газа. Предполагается что это обусловлено высокой степенью поверхностной нестехиометрии, приводящей к тому, что сопротивление In_2O_3 пленки не управляется межзеренными барьерами [12]. Наиболее действенными способами повышения чувствительности газовых сенсоров на основе In_2O_3 являются, вероятно, легирование оксида индия (например, переходными металлами) или создание на его основе многокомпонентных составов.

В данной работе сообщается об изготовлении газовых сенсоров на основе трехкомпонентной наноразмерной пленки In_2O_3:Ga_2O_3(96:4 вес.%) и исследовании их чувствительности к смеси газов пропан и бутан, а также к метану.

2. Экспериментальная часть

Для изготовления сенсора на основе полупроводникового состава In_2O_3:Ga_2O_3 методом твердофазной реакции была синтезирована керамическая мишень. Для этого взвешивалась смесь из порошков оксидов индия и галлия (In_2O_3, Ga_2O_3) в соотношении 96:4 вес.%. После тщательного перемешивания смесь из исходных порошков подвергалась предварительной термообработке на воздухе при температуре 800°С в течение трех часов. Затем смесь протиралась в агатовой ступке. Полученная гомогенная масса прессовалась под давлением 200 Н/см^2 в таблетку диаметром 50 мм и толщиной 4 мм. Таблетка спекалась в программно-управляемой печи на воздухе при температуре 1350°С в течение 10 часов. Чтобы избежать трещин и механических повреждений проводились медленный подъем (со скоростью 30°С/час) и спуск (от 1350°С до 1000°С снижение осуществлялось со скоростью 50°С/час и далее до комнатной – со скоростью 100°С/час) температуры. Синтезированный брикет подвергался механической обработке для устранения поверхностных дефектов. Таким образом была изготовлена плоскопараллельная мишень диаметром 40 мм и толщиной 2 мм. Мишень очищалась в кипящем толуоле, в спирте, затем окончательно промывалась дистиллированной, деионизированной водой и высушивалась.

Синтезированная нами металлоксидная полупроводниковая мишень In_2O_3:Ga_2O_3 (96:4 вес.%) была использована для получения наноразмерных пленок методом высокочастотного магнетронного распыления. Пленки осаждались на ситалловую подложку. Мощность высокочастотного генератора равнялась 30 и 60 Вт, длительность процесса распыления была 15 и 25 минут.

Исследование поверхности полученной пленки In_2O_3:Ga_2O_3 было проведено с помощью сканирующего электронного микроскопа (SEM) 5130 MM Vega (TESCAN). Толщина пленок была измерена с помощью профилометра Ambios XP-1 Stylus.

Были изготовлены и исследованы две группы газовых сенсоров. В первой группе на поверхность пленки In_2O_3:Ga_2O_3 методом ионноплазменного распыления осаждались золотые гребенчатые омические контакты. Для

улучшения адгезии контактов проводилась дополнительная термообработка изготовленной структуры на воздухе (350°C, 4 часа). Во второй группе для создания газового сенсора на поверхность пленки In_2O_3:Ga_2O_3 методом ионноплазменного распыления осаждались тонкий палладиевый слой (менее 6 нм) и далее золотые гребенчатые омические контакты. Толщина палладиевого слоя при данной мощности контролировалась длительностью процесса ионноплазменного распыления. Полученные структуры подвергались термической обработке на воздухе при температуре 350°C в течение 4 часов. В результате отжига каталитический слой палладия преобразуется в островки.

Исследовалась чувствительность изготовленных сенсоров к смеси газов пропан и бутан, а также к метану. Измерения проводились при разных концентрациях воздействующих газов при температурах рабочего тела сенсора от 200 до 350°C. Содержание газа в камере и длительность подачи газа контролировались с помощью компьютера.

Было исследовано изменение сопротивления изготовленных структур при воздействии газа и рассчитан относительный отклик (чувствительность), то есть отношение $R_{\text{воздух}}/R_{\text{газ}}$, где $R_{\text{воздух}}$ – сопротивление структуры в воздухе и $R_{\text{газ}}$ – сопротивление структуры в присутствии газа в воздухе. Результаты измерений регистрировались на компьютере в виде таблиц и графиков.

3. Результаты и обсуждение

Поверхность изготовленных пленок In_2O_3:Ga_2O_3 (96:4 вес.%) исследовалась с помощью сканирующего электронного микроскопа. Типичное СЭМ-изображение поверхности полученных пленок представлено на рис.1. СЭМ анализ показал, что изготовлены достаточно однородные пленки. Размеры зерен составляют ~10-15 нм. Увеличение длительности процесса магнетронного распыления не приводит к изменению фактуры поверхности и размеров зерен.

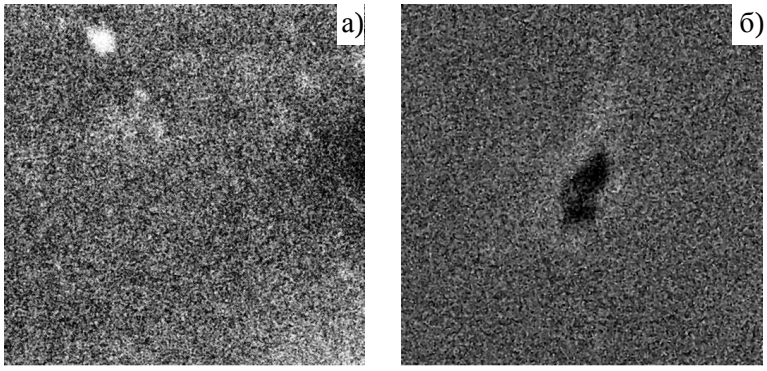


Рис.1. СЭМ изображение поверхности пленок In_2O_3:Ga_2O_3 (96:4 вес.%), полученных при мощности 60 Вт. Длительность процесса магнетронного распыления составляла 15 (а) и 25 (б) мин. Толщина изготовленных пленок ~125 (а) и 180 (б) нм.

Исследовалось влияние воздействия смеси газов пропан и бутан на сопротивление структуры ситалл/In_2O_3:Ga_2O_3 (96:4 вес.%). Измерения проводились при концентрации газа 5000 ppm. Рабочее тело нагревалось до температуры 200–350°C. Типичные результаты этих исследований приведены на рис.2. Структура проявляет слабую чувствительность к смеси газов пропан и бутан при 250°C, которая с повышением температуры немного увеличивается.

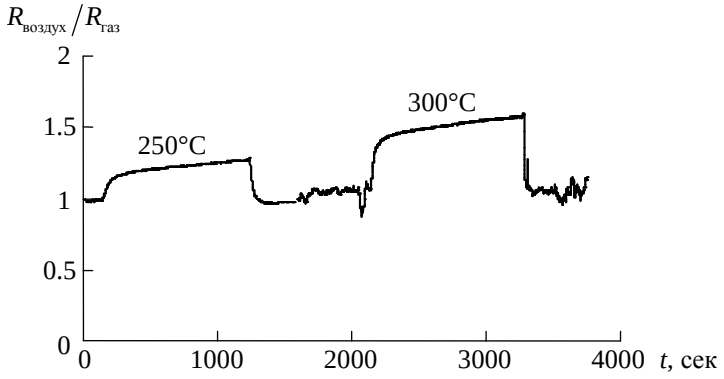


Рис.2. Относительный отклик газового сенсора на основе структуры ситалл / In_2O_3:Ga_2O_3 (96:4 вес.%) при воздействии смеси газов пропан и бутан при различных температурах. Пленка In_2O_3:Ga_2O_3 получена при мощности 30 Вт в течение 25 мин.

Известно, что чувствительность металлоксидных газовых сенсоров обусловлена реакциями, протекающими на поверхности полупроводника. Адсорбированный на этой поверхности из воздуха молекулярный кислород частично преобразуется в ионы O_2^-, O^- или O^{2-}, в результате чего происходит обеднение поверхностного слоя полупроводника. При попадании на эту поверхность молекул исследуемого газа (в частности, углеводорода) могут иметь место одна или несколько нижеследующих реакций взаимодействия водорода и углерода с поверхностными кислородными центрами [13]:

$$\begin{aligned}
&C_4H_{10} + 13O^- \rightarrow 4CO_2 + 5H_2O + 13e^-,\\
&C_4H_{10} + 13/2O_2^- \rightarrow 4CO_2 + 5H_2O + 13/2e^-,\\
&C_4H_{10} + 13O^{2-} \rightarrow 4CO_2 + 5H_2O + 26e^-,\\
&C_3H_8 + 10O^- \rightarrow 3CO_2 + 4H_2O + 10e^-,\\
&C_3H_8 + 5O_2^- \rightarrow 3CO_2 + 4H_2O + 5e^-,\\
&C_3H_8 + 10O^{2-} \rightarrow 3CO_2 + 4H_2O + 20e^-.
\end{aligned} \qquad (1)$$

Возникшие в результате этих реакций свободные электроны инжектируются в зону проводимости полупроводника, уменьшая тем самым его сопротивление. Это изменение сопротивления полупроводника регистрируется как отклик структуры на внешнее воздействие газа. Можно ожидать,

следовательно, что увеличение плотности ионов кислорода на поверхности полупроводника должно привести к существенному увеличению чувствительности сенсора.

Увеличить число поверхностных ионов кислорода можно, например, путем создания на поверхности полупроводника островков металла-катализатора, имеющего большую работу выхода электрона, чем работа выхода электрона из полупроводника. Рассмотрим, например, контакт полупроводник In_2O_3:Ga_2O_3 – металл Pd. Работа выхода электрона для In_2O_3:Ga_2O_3 и Pd равна 5 и 5.6 эВ, соответственно [14]. Контактная разность потенциалов, определяемая как разность работ выхода, будет равна $V_k = 0.6$ В. Для создания такой разности потенциалов из полупроводника на поверхность металла должны перейти электроны, поверхностная плотность которых определяется по формуле

$$n = \varepsilon\varepsilon_0 E_k / e, \qquad (2)$$

где E_k – напряженность электрического поля в зазоре между металлом и полупроводником, ε_0 – электрическая постоянная вакуума, ε – диэлектрическая постоянная вакуума, e – заряд электрона. Если толщина зазора между металлом и полупроводником порядка $d \sim 10^{-9}$ м, то

$$E_k = V_k / d \approx 6\times10^8 \text{ В/м}. \qquad (3)$$

Тогда для поверхностной плотности электронов, согласно (2), получим

$$n \approx 3.3\times10^{16} \text{ м}^{-2}. \qquad (4)$$

Если предположить, что при температуре 250°С (температура нагрева рабочего тела сенсора) концентрация свободных электронов в полупроводнике $n_0 \approx 10^{21}$ м$^{-3}$, то концентрация поверхностных электронов будет равна

$$n_s = (n_0)^{2/3} \approx 10^{14} \text{ м}^{-2}. \qquad (5)$$

Плотность свободных электронов на поверхности исследуемого нами полупроводника n_s значительно меньше необходимого значения n. Поэтому на поверхность полупроводника выйдут все свободные электроны из приповерхностного слоя толщиной

$$d_n = (n - n_s)/n_0 \approx 3.3\times10^{-5} \text{ м}. \qquad (6)$$

Толщина изготовленных нами пленок In_2O_3:Ga_2O_3 ~10^{-7} м. Если создать на поверхности такой пленки (площадью ~ 5×5 мм^2) зерна каталитического металла Pd с плотностью ~2.5×10^{13} м$^{-2}$, то практически вся полупроводниковая пленка будет обеднена носителями. При этом поверхностная плотность избыточных электронов на поверхности пленки будет ~10^{14} м$^{-2}$.

Таким образом, металл-катализатор способствует выходу электронов из объема на поверхность полупроводника и тем самым приводит, с одной стороны, к формированию практически полностью обедненного слоя в полупроводнике и, с другой стороны, к более эффективному превращению адсорбированных на

поверхности полупроводниковой пленки нейтральных атомов кислорода в ионы. Это, в свою очередь, должно привести к более эффективному прохождению реакций (1), увеличению числа инжектируемых в зону проводимости электронов, и, следовательно, к значительно большему изменению сопротивления полупроводника, что в конечном итоге означает повышение чувствительности сенсора.

Исследования показали, что осаждение палладиевого слоя на поверхности пленки In_2O_3:Ga_2O_3, действительно, приводит к значительному повышению чувствительности изготовленных нами структур. Результаты исследований влияния воздействия смеси газов пропан и бутан на сопротивление структуры ситалл / In_2O_3:Ga_2O_3 (96:4 вес.%) / Pd представлены на рис.3. Максимальная чувствительность (S~10) к смеси газов пропан и бутан наблюдалась при 250°C. К сожалению, существуют определенные технологические трудности, связанные с формированием на поверхности полупроводниковой пленки островков металла-катализатора. Некоторое уменьшение сопротивления изготовленной структуры после осаждения палладиевого слоя говорит о том, что, вероятно, наряду с каталитическими островками, частицы металла формируют также токовые каналы, частично шунтирующие обедненный слой полупроводника. Протекающие через эти каналы паразитные токи при измерении сопротивления структуры под воздействием газа приводят к уменьшению относительного отклика сенсора. Значительного увеличения чувствительности сенсора можно ожидать, если удастся создать палладиевые островки, поддерживая плотность зерен каталитического металла в пределах рассчитанного значения 2.5×10^{13} м$^{-2}$.

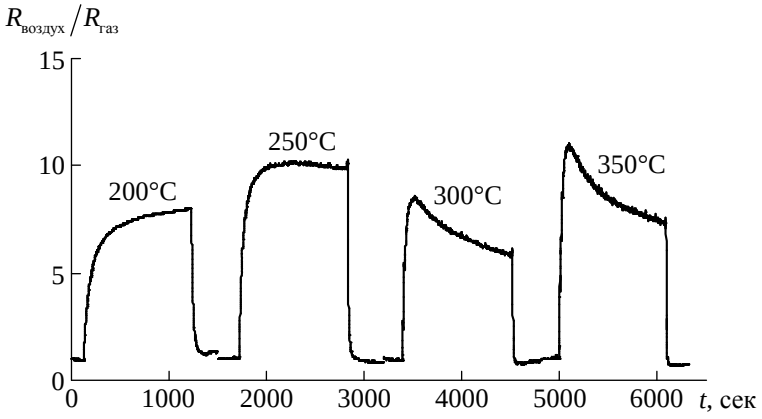


Рис.3. Относительный отклик газового сенсора на основе структуры ситалл / In_2O_3:Ga_2O_3 (96:4 вес.%) / Pd при воздействии смеси газов пропан и бутан (концентрация 5000 ppm) при различных температурах нагрева рабочего тела. Пленка In_2O_3:Ga_2O_3 получена при мощности 30 Вт в течение 25 мин.

На рис.4 приведены результаты исследований изменения сопротивления изготовленного сенсора под действием разных концентраций смеси газов пропан

и бутан. Измерения проводились при 250°C. Как уже отмечалось, при этой температуре рабочего тела чувствительность сенсора к смеси газов пропан и бутан наибольшая. Как видно из приведенных результатов, изготовленный на основе структуры ситалл / In_2O_3:Ga_2O_3 (96:4 вес.%) / Pd сенсор проявляет достаточно высокую чувствительность к смеси газов пропан и бутан уже при концентрации 1000 ppm. Если учесть, что нижний порог концентрации, при котором есть реальная угроза взрыва, составляет 18000 и 21000 ppm для бутана и пропана, соответственно, а сигнальный уровень газового сенсора составляет менее 10% нижнего концентрационного порога [5], то полученный нами результат является достаточно хорошим. Исследуемый сенсор обладает достаточным быстродействием: время отклика составляет ~1 минуты, немногим больше время восстановления.

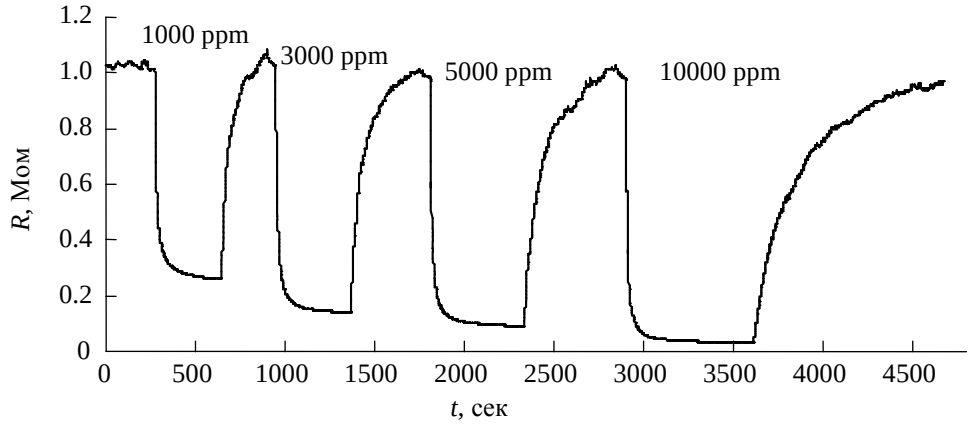


Рис.4. Изменение сопротивления структуры ситалл / In_2O_3:Ga_2O_3 (96:4 вес.%) / Pd под действием разных концентраций смеси газов пропан и бутан при температуре 250°C. Пленка In_2O_3:Ga_2O_3 получена при мощности 60 Вт в течение 15 мин.

На рис.5 приведены результаты измерения зависимости чувствительности сенсора на основе структуры ситалл / In_2O_3:Ga_2O_3 (96:4 вес.%) / Pd от концентрации смеси газов пропан и бутан при температуре 250°C. Как видно, повышение концентрации газа сопровождается довольно резким увеличением чувствительности, что позволяет использовать изготовленный нами сенсор не только для обнаружения наличия смеси газов пропан и бутан в окружающем воздухе, но и для определения ее концентрации.

Изготовленный нами сенсор на основе структуры ситалл / In_2O_3:Ga_2O_3 (96:4 вес.%) / Pd проявил некоторую чувствительность и к метану. Исследования изменения сопротивления сенсора под действием метана были проведены при разных температурах нагрева (от 200 до 350°C) рабочего тела. Заметная чувствительность к метану появляется при его концентрации 1% при температуре рабочего тела 350°C. На рис.6 представлены результаты измерения чувствительности сенсора к разным концентрациям метана.

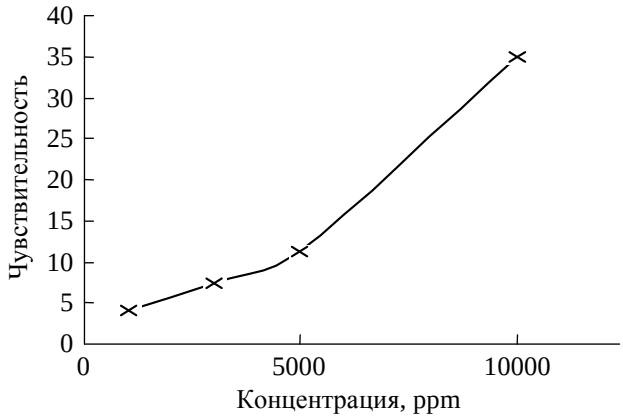


Рис.5. Зависимости чувствительности сенсора на основе структуры ситалл / In_2O_3:Ga_2O_3 (96:4 вес.%) / Pd от концентрации смеси газов пропан и бутан при температуре 250°C. Пленка In_2O_3:Ga_2O_3 получена при мощности 60 Вт в течение 15 мин.

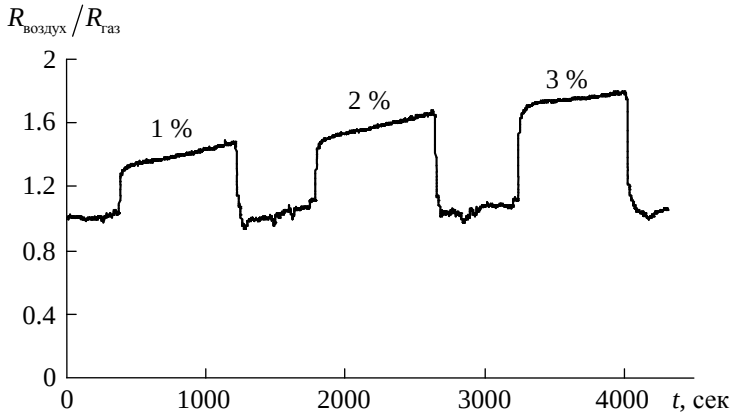


Рис.6. Относительный отклик газового сенсора на основе структуры ситалл/ In_2O_3:Ga_2O_3 (96:4 вес.%) / Pd при воздействии разных концентраций метана. Температура нагрева рабочего тела 350°C. Пленка In_2O_3:Ga_2O_3 получена при мощности 60 Вт в течение 15 мин.

Изготовленный нами сенсор по чувствительности к смеси газов пропан и бутан не уступает имеющимся в настоящее время сенсорам (см., например, [6,13]), а по таким параметрам, как температура рабочего тела, быстродействие, избирательность, превосходит их.

4. Заключение

Нами была синтезирована керамическая полупроводниковая мишень In_2O_3:Ga_2O_3 (96:4 вес.%), которая использовалась для получения на ситалловой подложке наноразмерных пленок методом высокочастотного магнетронного

распыления. Исследование поверхности полученной пленки In_2O_3:Ga_2O_3, проведенное с помощью сканирующего электронного микроскопа, показало, что получены однородные пленки с размерами зерен ~10–15 нм. Изготовленный на основе структуры ситалл / In_2O_3:Ga_2O_3 (96:4 вес.%) / Pd газовый сенсор проявляет достаточную чувствительность к смеси газов пропан и бутан уже при концентрации смеси 1000 ppm при температуре рабочего тела 250°C. Сенсор характеризуется достаточным быстродействием: времена отклика и восстановления сенсора ~1 минуты. Сильная зависимость чувствительности изготовленного сенсора от концентрации смеси газов пропан и бутан позволяет использовать его для определения концентрации смеси в окружающем воздухе. Сенсор проявляет также заметную чувствительность к метану при температуре рабочего тела 350°C.

ЛИТЕРАТУРА

1. **D.Haridas, K.Sreenivas, V.Gupta**. Sens. Actuat. B, **133**, 270 (2008).
2. **A.Srivastava, K.Jain, et al.** Mater. Chem. Phys., **97**, 85 (2006).
3. **P.P.Sahay, R.K.Nath.** Sens. Actuat. B, **133**, 222 (2008).
4. **D.S.Dhawale, D.P.Dubal.** Sens. Actuat. B, **145**, 205 (2010).
5. **M.H.Madhusudhana Reddy, A.N. Chandorkar.** Thin Solid Films, **349**, 260 (1999).
6. **D.Mishra, A.Srivastava, et al.** Appl. Surf. Sci., **255**, 2947 (2008).
7. **G.Korotcenkov, V.Brinzari.** Appl. Surf. Sci., **227**, 122 (2004).
8. **G.Korotcenkov, M.Ivanov, et al.** Thin Solid Films, **515**, 3987 (2007).
9. **G.Korotcenkov, V.Brinzari, et al.** Sens. Actuat. B, **128**, 51 (2007).
10. **G.Korotcenkov, I.Boris, et al.** Sens. Actuat. B, **103**, 13 (2004).
11. **G.Korotcenkov.** Mater. Sci. Eng. B, **139**, 1 (2007).
12. **G.Korotcenkov.** Mater. Sci. Eng. R, **61**, 1 (2008).
13. **J.K.Srivastava, P.Pandey, et al.** Solid State Sci., **11**, 1602 (2009).
14. **V.N.Singh, B.R.Mehta, et al.** Sens. Actuat. B, **125**, 482 (2007).

GAS SENSOR BASED ON NANOSIZE In_2O_3:Ga_2O_3 FILM

M.S. ALEKSANYAN, V.M. ARAKELYAN, V.M. AROUTIOUNIAN,
A.Z. ADAMYAN, G.E. SHAHNAZARYAN

In_2O_3:Ga_2O_3 (96:4 wt.%) nanosize films were deposited on glass-ceramic substrates by high-frequency magnetron sputtering. The surfaces of prepared films were investigated by scanning electron microscopy, the sizes of grains were determined, and the thicknesses of films were measured. The gas sensing structures was completed through ion-beam sputtering deposition of very thin palladium catalytic layer and gold interdigitated ohmic contacts on the prepared In_2O_3:Ga_2O_3 films. The response of the glass-ceramic / In_2O_3:Ga_2O_3(96:4 wt.%) / Pd structure to different concentrations of the propane-butane mixture and also to methane at temperatures of a working body from 200 to 350°C was investigated.

Известия НАН Армении, Физика, т.45, №6, с.456-462 (2010)

УДК 541.64

ДВУХМАСШТАБНАЯ ОБОБЩЕННАЯ МОДЕЛЬ ПОЛИПЕПТИДНОЙ ЦЕПИ В КОМБИНИРОВАННОМ РАСТВОРИТЕЛЕ

Ш.А. ТОНОЯН

Ереванский государственный университет, Армения

(Поступила в редакцию 16 мая 2010 г.)

Построен гамильтониан двухмасштабной обобщенной модели полипептидной цепи для случая комбинированного растворителя. Показано, что статсумма для модели с растворителем с точностью до несущественного множителя равна статсумме без растворителя с переопределением приведенных энергий взаимодействия за счет конкурентного и числа конформаций за счет неконкурентного взаимодействий растворителей с биополимером. Рассмотрено поведение корреляционной длины при изменении вкладов различных типов взаимодействия.

1. Введение

Как известно, биополимеры in vivo функционируют в водном окружении. Именно поэтому все экспериментальные исследования переходов спираль–клубок в биополимерах, как правило, проводятся в водных растворах. Молекула воды, способная к образованию водородных связей, может конкурировать за образование водородных связей с повторяющимися единицами биополимеров. Как и всякая молекула, вода способна взаимодействовать с отдельными частями повторяющихся единиц биополимера непосредственным образом, вне зависимости от образования водсородных связей. Первое взаимодействие мы будем называть конкурентным, а второе – неконкурентным. Конкурентное взаимодействие видоизменяет энергетическую картину образования водородных связей. Неконкурентное же взаимодействие способно, изменяя картину внутримолекулярных взаимодействий, воздействовать на энтропийную подвижность цепи через изменение статвесов отдельных конформаций [1]. В наших предыдущих публикациях мы рассматривали базовую Обобщенную Модель Полипептидной Цепи (ОМПЦ), где учтены конкурентное и неконкурентное взаимодействия биополимер–растворитель как раздельно, так и совместно [2,3]. Получен ряд интересных результатов, свидетельствующих о богатстве модели переходами, включающими в себя как плавление, так и выстраивание. Было рассчитано и проанализировано поведение различных характеристик перехода, термодинамических параметров системы, а также связывание молекул растворителя биополимером в процессе переходов. Как

известно, в процессе образования спиральной структуры участвуют взаимодействия различных масштабов – например, образование водородных связей и стекинг в ДНК или взаимодействие боковых групп в белках.

Нами уже исследовалась ОМПЦ с двумя масштабами взаимодействия [2-6]. Гамильтониан данной модели имеет следующий вид:

$$-\beta H_0 = J_1 \sum_{i=1}^{N} \delta_i^{(\Delta_1)} + J_2 \sum_{j=1}^{N} \delta_i^{(\Delta_2)}, \qquad (1)$$

где первый член – гамильтониан базовой модели, описывающий Δ_1-частичные взаимодействия между конформациями биополимеров, а второй член – также гамильтониан базовой модели, но описывающий Δ_2-частичные взаимодействия [2-6]. Введем параметр α как долю энергии Δ_2-масштабного взаимодействия на фоне общей энергии: $\alpha = J_2/(J_1 + J_2) = J_2/J$. С учетом параметра α гамильтониан системы можно переписать следующим образом:

$$-\beta H_0 = \sum J\left[(1-\alpha)\delta_i^{(\Delta_1)} + \alpha\delta_i^{(\Delta_2)}\right]. \qquad (2)$$

Для данной модели исследованы два случая: 1) $\alpha < 1$. Влияние мелкомасштабных взаимодействий (Δ_2) на переход спираль–клубок, определяемый крупномасштабными (Δ_1) взаимодействиями; 2) $\alpha > 1$. Влияние крупномасштабных (Δ_1) ограничений (энергия J_1 отрицательна) на переход спираль–клубок, описываемый мелкомасштабными (Δ_2) взаимодействиями. Для обоих случаев были исследованы поведение корреляционной длины, степени спиральности, числа стыков между спиральными и клубкообразными участками, а также средней длины спирального участка [7]. Однако, эти результаты были получены без учета влияния растворителя. Целью настоящей работы является теоретическое изучение влияния комбинированного растворителя на переход спираль–клубок в рамках двухмасштабной ОМПЦ.

2. Гамильтониан и преобразование параметров для двухмасштабной ОМПЦ в растворителе, взаимодействующем конкурентным и неконкурентным образом

Рассмотрим влияние растворителя на систему с гамильтонианом (1), учитывая два типа взаимодействия биополимер–растворитель – конкурентное и неконкурентное [8]. Гамильтониан такой модели будет иметь вид

$$\begin{aligned} -\beta H = {} & \left(m_1 J_1 + 2m_1 I\right)\sum_{i=1}^{N}\delta_i^{(\Delta_1)} + \left(m_2 J_2 + 2m_2 I\right)\sum_{i=1}^{N}\delta_i^{(\Delta_2)} + \\ & + I_1 \sum_{i=1}^{N}\left(1-\delta_i^{(\Delta_1)}\right)\sum_{k=1}^{2m_1}\delta\left(\mu_{1ik},1\right) + I_2\sum_{i=1}^{N}\left(1-\delta_i^{(\Delta_2)}\right)\sum_{k=1}^{2m_2}\delta\left(\mu_{2ik},1\right) + \\ & + I_h \sum_{i=1}^{N}\delta_i^{(1)}\sum_{s=1}^{m}\delta\left(\mu_{his},1\right) + I_c\sum_{i=1}^{N}\left(1-\delta_i^{(1)}\right)\sum_{s=1}^{m}\delta\left(\mu_{cis},1\right). \end{aligned} \qquad (3)$$

Здесь первые два члена – гамильтониан базовой ОМПЦ с двумя масштабами взаимодействия (1). Следующие два члена определяют конкурентное вза-

имодействие с растворителем масштаба Δ_1 и Δ_2. Последние два члена определяют неконкурентное взаимодействие с повторяющимися единицами в спиральной и клубкообразной конформациях для каждой из цепей. Переменные $\mu_{i1}=1,2,...q$ и $\mu_{i2}=1,2,...q$ описывают ориентацию молекулы растворителя при конкурентном взаимодействии. Переменная $\mu_{hi}=1,2,...q_h$ описывает ориентацию молекулы растворителя вблизи повторяющейся единицы в спиральной, а $\mu_{ci}=1,2,...q_c$ – в клубкообразной конформациях, m_1 – число внутримолекулярных водородных связей, $2m_1$ – число мест посадки для молекул воды, конкурирующих за образование водородных связей, $2m_2$ – число мест посадки молекул воды, конкурирующих за взаимодействие второго масштаба, m – общее число молекул растворителя, находящихся на скелете цепи, J_1 – энергия внутримолекулярной водородной связи, J_2 – энергия взаимодействия второго масштаба на одно место посадки для молекул воды, I – энергия связи одной молекулы воды с кластером, I_1 – энергия межмолекулярной водородной связи, I_2 – энергия межмолекулярного взаимодействия второго масштаба, I_h – энергия неконкурентного взаимодействия воды со скелетом цепи в спиральной, а I_c – в клубкообразной конформации. Статистическая сумма для данной модели будет выглядеть следующим образом:

$$Z=\sum_{\{\gamma_i\}}\sum_{\{\mu_{1ik}\}}\sum_{\{\mu_{2ik}\}}\sum_{\{\mu_{his}\}}\sum_{\{\mu_{cis}\}}\prod_{i=1}^{N}\exp(-\beta H_i), \tag{4}$$

где суммирование производится по всем наборам конформаций γ_i повторяющихся единиц цепи и по всем четырем наборам параметров ориентаций μ молекул растворителя. Поскольку все параметры ориентации молекул растворителя μ зависят только от одного индекса – номера повторяющейся единицы, то суммирование по ним можно проводить независимым образом. Следуя ранее полученным результатам для базовой модели в конкурентном и неконкурентном растворителе [8,9], для статистической суммы получим

$$Z=\left(e^{I_1}+q-1\right)^{2m_1N}\left(e^{I_2}+q-1\right)^{2m_2N}\left(e^{I_h}+q-1\right)^{mN}Z_0\left(e^{\tilde{J}_1},e^{\tilde{J}_2},\tilde{Q}\right). \tag{5}$$

Здесь введены следующие обозначения:

$$\tilde{W}_1=\exp\left(\tilde{J}_1\right)=e^{m_1J_1+2m_1I}\Big/\left(\left(e^{I_1}-1\right)\Big/q+1\right)^{2m_1}, \tag{6}$$

$$\tilde{W}_2=\exp\left(\tilde{J}_2\right)=e^{m_2J_2+2m_2I}\Big/\left(\left(e^{I_2}-1\right)\Big/q+1\right)^{2m_2}, \tag{7}$$

$$\tilde{Q}=1+(Q-1)\left(\left[\left(e^{I_c}-1\right)\Big/q_c+1\right]\Big/\left[\left(e^{I_h}-1\right)\Big/q_h+1\right]\right)^{m}, \tag{8}$$

где $Z\left(\tilde{J}_1,\tilde{J}_2,\tilde{Q},\Delta\right)$ – статсумма двухмасштабной ОМПЦ с переопределенными энергетическими параметрами $\tilde{J}_1$ и $\tilde{J}_2$ и конформационным параметром $\tilde{Q}$.

Таким образом, статсумма для ОМПЦ с двумя масштабами взаимодействия в комбинированном растворителе сводится к статсумме без

растворителя с более сложным, чем базовая модель, температурным поведением энергий взаимодействия $\tilde{J}_1$ и $\tilde{J}_2$ за счет конкурентного взаимодействия, а число конформаций $\tilde{Q}$ за счет неконкурентного растворителя приобретает, в отличие от базовой ОМПЦ, температурную зависимость.

Трансфер-матрица для данной модели будет иметь следующий вид [10]:

$$\hat{M} = \begin{pmatrix} \tilde{W}_1\tilde{W}_2 & \tilde{W}_2 & 0 & \ldots & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \tilde{W}_2 & \ldots & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & \tilde{W}_2 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 1 & \ldots & 0 & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 & \ldots & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 & \ldots & 0 & \tilde{Q}-1 \\ 1 & 1 & 1 & \ldots & 1 & 1 & \ldots & 1 & \tilde{Q}-1 \end{pmatrix}. \qquad (9)$$

Для качественного анализа влияния комбинированного взаимодействия растворителя на переход спираль–клубок в двухмасштабной ОМПЦ введем приведенную температуру следующим образом: $1/t = (m_1 J_1 + 2m_1 I + m_2 J_2 + 2m_2 I)/2(m_1 + m_2)$. Введем также параметр $\alpha = (m_2 J_2 + 2m_2 I)/(m_1 J_1 + 2m_1 I + m_2 J_2 + 2m_2 I)$, который показывает долю энергии взаимодействий второго масштаба в общей энергии первого и второго масштабов. В таком случае уравнения (6)–(8) перепишутся в следующем виде:

$$\tilde{W}_1 = \frac{e^{2(m_1+m_2)(1-\alpha)/t}}{\left[\left(e^{\beta_1/t}-1\right)/q+1\right]^{2m_1}}, \qquad (10)$$

$$\tilde{W}_2 = \frac{e^{2(m_1+m_2)\alpha/t}}{\left[\left(e^{\beta_2/t}-1\right)/q+1\right]^{2m_2}}, \qquad (11)$$

$$\tilde{Q} = 1 + (Q-1)\left(\frac{\left(e^{\gamma_c/t}-1\right)/q_c+1}{\left(e^{\gamma_h/t}-1\right)/q_h+1}\right)^m, \qquad (12)$$

где $\beta_1 = I_1 t$, $\beta_2 = I_2 t$ показывают, соответственно, доли энергий конкурентных взаимодействий первого и второго масштабов, а $\gamma_h = I_h t$ и $\gamma_c = I_c t$ – доли энергий неконкурентных взаимодействий со спиральной и клубкообразной конформациями, соответственно [11-13]. Таким образом, параметр α влияет на перераспределение энергий первого и второго масштабов, а параметры β и γ не влияют на энергии конкурентного и неконкурентного взаимодействий с растворителем.

3. Результаты и обсуждение

Результаты будем анализировать на языке корреляционной длины, которая показывает масштаб затухания корреляций вдоль цепи. Корреляционная длина ξ определяется отношением собственных чисел трансфер-матрицы $\hat{M}$, λ_1 и λ_2 – первые два максимальных собственных числа [2-6]:

$$\xi = \ln^{-1} \frac{\lambda_1}{\lambda_2}. \qquad (13)$$

Ясно, что для этого отношения предмножители не существенны. Таким образом, корреляционная длина, так же как и степень спиральности, не зависит от предмножителей для выражения в статистической сумме (5). Тем не менее, температурное поведение для ξ будет отличаться от базовой модели.

Рассмотрим систему типа polyAT. Поскольку число водородных связей между одной парой оснований равно двум, то $m_1 = 2$. Примем $2m_2 = 10$, а $m = 5$ [14,15], $\Delta_1 = 14$, $\Delta_2 = 2$, $Q = 6$, $q = 10$.

На рис.1–3 представлены графики зависимости корреляционной длины от приведенной температуры при изменении одного из трех параметров. В качестве кривой сравнения мы взяли кривую при значениях исходных параметров ($\alpha = 0.5$, $\beta_1 = 0.8$, $\beta_2 = 0.08$, $\gamma_c = 0.08$, $\gamma_h = 0.02$), близких к их реальным значениям. Стрелкой на графиках указано направление роста параметра.

На рис.1 приведена температурная зависимость корреляционной длины для разных значений параметра α. Видно, что с увеличением этого параметра кооперативность системы понижается и система дестабилизуруется.

На рис.2 и 3 показаны температурные зависимости корреляционной длины для разных значений параметров β_1 и β_2. Видно, что увеличение параметра β_1 приводит к уменьшению кооперативности системы и к ее дестабилизации. Увеличение параметра β_2 также приводит к дестабилизации системы, однако кооперативность при этом увеличивается.

Также были посчитаны температурные зависимости корреляционной длины для разных значений параметров γ_c и γ_h. Показано, что с увеличением параметра γ_c кооперативность системы несколько увеличивается и система незначительно дестабилизируется. С увеличением параметра γ_h кооперативность системы также слегка понижается, а система при этом незначительно стабилизируется.

Как видно из рис.1–3, лишь изменение параметра α приводит к ощутимым изменениям в системе. На изменения остальных параметров система реагирует намного слабее. Параметр α описывает относительный вклад стекинг-взаимодействия по сравнению с энергией внутримолекулярных взаимодействий. Таким образом, именно стекинг-взаимодействие, а не взаимодействия между макромолекулой и растворителем существенным образом влияет на кооперативность системы в области перехода спираль–клубок. При этом стекинг-взаимодействие понижает кооперативность перехода.

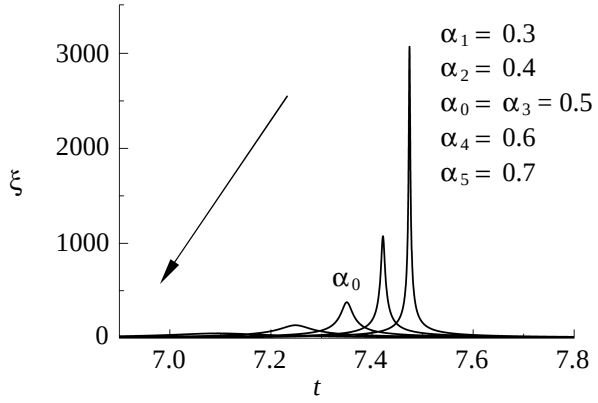


Рис.1. Температурная зависимость корреляционной длины при изменении доли энергии внутримолекулярного взаимодействия второго масштаба ($\alpha \in [0.3; 0.7]$).

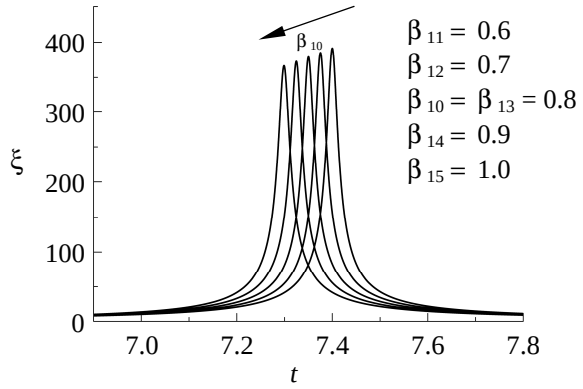


Рис.2. Температурная зависимость корреляционной длины при изменении энергии конкурентного взаимодействия первого масштаба ($\beta_1 \in [0.6; 1]$).

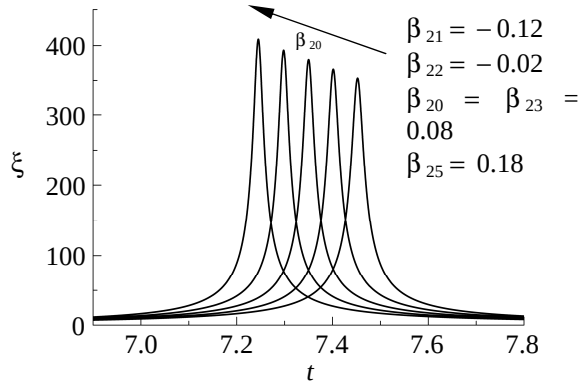


Рис.3. Температурная зависимость корреляционной длины при изменении доли энергии конкурентного взаимодействия второго масштаба ($\beta_2 \in [-0.12; 0.28]$).

В заключение автор выражает благодарность А.В. Царукяну за помощь в работе, Е.Ш. Мамасахлисову за ценные обсуждения и В.Ф. Морозову за помощь в постановке задачи.

ЛИТЕРАТУРА

1. **H.Qian, J.A.Schellman.** J. Phys. Chem., **96,** 3987 (1992).
2. **A.V.Badasyan, Sh.A.Tonoyan, A.V.Tsarukyan, E.Sh.Mamasakhlisov, A.S.Benight, V.F.Morozov**. J. Chem. Phys., **128**, 195101 (2008).
3. **Н.С.Ананикян, Ш.А.Айрян, В.Ф.Морозов**. Биофизика, **31**, 394 (1986).
4. **Ш.А.Тоноян, Т.Ю.Бурякина, А.В.Царукян, Е.Ш.Мамасахлисов, В.Ф.Морозов**. Изв. НАН Армении, Физика, **42**, 466 (2007).
5. **V.F.Morozov, A.V.Badasyan, A.V.Grigoryan, M.A.Sahakyan, E.Sh.Mamasakhlisov**. Biopolymers, **75**, 434 (2004).
6. **Sh.A.Hairyan, E.Sh.Mamasakhlisov, V.F.Morozov**. Biopolymers, **35**, 75 (1995).
7. **А.В.Царукян, Т.Ю.Бурякина, Ш.А.Тоноян, В.Ф.Морозов**. Тезисы конференции “Современные проблемы молекулярной биофизики”, С.-Петербург, 2006, с.44.
8. **Sh.A.Hairyan, N.S.Ananikyan, E.Sh.Mamasahlisov**. Biopolymers, **30**, 357 (1990).
9. **А.В.Бадасян, А.В.Григорян, Е.Ш.Мамасахлисов, А.В.Царукян, В.Ф.Морозов**. Изв. НАН Армении, Физика, **40**, 1458 (2005).
10. **N.Ananikian, L.Ananikian, R.Artuso, K.Sargsyan**. Physica A, **387**, 5433 (2008).
11. **G.R.Desiraju, T.Steiner**. The Weak Hydrogen Bond. Oxford, University Press, 1999.
12. **Z.Shi, C.A.Olson, A.J.Bell Jr., N.R.Kallenbach**. Biophys. Chem., **101-102**, 267 (2002).
13. **N.Ananikian, L.Ananikian, R.Artuso**. Phys. Lett. A, **360**, 615 (2007).
14. **В.Зенгер**. Принципы структурной организации нуклеиновых кислот. М., Мир. 1987.
15. **Ч.Кантор, П.Шиммел.** Биофизическая химия. М., Мир. 1984.

ԵՐԿՄԱՍՇՏԱԲԱՅԻՆ ՊՈԼԻՊԵՊՏԻԴԱՅԻՆ ՇՂԹԱՅԻ ԸՆԴՀԱՆՐԱՑՎԱԾ ՄՈԴԵԼԸ ՀԱՄԱԿՑՎԱԾ ԼՈՒԾԻՉՈՒՄ

Շ.Ա. ՏՈՆՈՅԱՆ

Կառուցված է համակցված լուծիչի առկայությամբ երկմասշտաբանի պոլիպեպտիդային շղթայի ընդհանրացված մոդելի համիլտոնիանը: Ցույց է տրված, որ լուծիչում մոդելի վիճակագրական գումարը ոչ այնքան էական արտադրիչի ճշտությամբ համընկնում է առանց լուծիչի վիճակագրական գումարի հետ: Այդ դեպքում վերասահմանվում են փոխազդեցության էներգիան՝ մրցակից, և կոնֆորմացիաների թիվը՝ ոչ մրցակից փոխազդեցությունների հաշվին: Դիտարկված է կորելյացիոն երկարության վարքը տարատեսակ փոխազդեցությունների ներդրումների փոփոխության ժամանակ:

TWO-SCALE GENERALIZED MODEL OF POLYPEPTIDE CHAIN IN COMBINED SOLVENT

SH.A. TONOYAN

The Hamiltonian of two-scale Generalized Model of Polypeptide Chain in combined solvent is constructed. It is shown that the partition function of the model with solvent up to an unimportant factor is equal to the partition function without solvent. Behavior of the correlation length for the changes of different interaction impacts is considered.

Известия НАН Армении, Физика, т.45, №6, с.463-469 (2010)

УДК 535.13

СВЕРХФОКУСИРОВКА ПОВЕРХНОСТНОГО ПЛАЗМОН-ПОЛЯРИТОНА В СУЖАЮЩЕМСЯ ВОГНУТОМ ЗАЗОРЕ

С.И. БОЖЕВОЛЬНЫЙ[1], Х.В. НЕРКАРАРЯН[2], С.Б. ОВСЕПЯН[2]

[1]Институт сенсоров, сигналов и электроники,
Университет Южной Дании, Оденсе, Дания

[2]Ереванский государственный университет, Армения

(Поступила в редакцию 21 июля 2010 г.)

Показано, что в вогнутом зазоре между плоской и циллиндрически выпуклой металлическими поверхностями поверхностный плазмон-поляритон может локализоваться в нанометрических размерах, в условиях адиабатического сужения минимальной ширины зазора и радиуса кривизны выпуклости. Волноводные каналы этого типа, благодаря небольшим потерям, могут служить в качестве элементной базы для создания быстродействующих оптических цепей нанометрических размеров.

1. Введение

В последнее время проблема увеличения быстродействия обработки и передачи информации оказалась в центре внимания многих исследователей. Ограниченность во времени функциональных возможностей известных методов электроники стала причиной активного исследования электронных свойств полупроводниковых наноструктур, где процессы протекают значительно быстрее. Кроме того, развитие оптических методов обработки и передачи информации открывает переспективу существенного увеличения быстродействия. Ясно, что наибольшего результата можно достичь сочетанием этих направлений, то есть использованием оптических процессов в наноструктурах. Возникшая на этом пути основная преграда – это дифракционный предел, который не позволяет локализовать световое излучение в размерах, меньших его длины волны. Однако последние достижения наноплазмоники указывают на то, что это препятствие можно преодолеть [1-13]. Целью этого бурно развивающегося направления является изучение локализованных и распространяющихся поверхностных плазмон-поляритонов (ППП), что имеет важное прикладное значение для создания нанометрических волноводных каналов и сенсоров.

Волноводное распространение ППП исследовалось в целом ряде таких структур, как плоские металлические пластины, нанопроволоки, цепочки

наночастиц и т.д. [14-20]. Наиболее переспективными оказались ППП волноводные структуры, созданные в виде V-образных каналов на поверхности металла
[17-19]. Недавно в работе [21] предлагалось в качестве ППП волноводного канала использовать нанометрический зазор между параллельными цилиндрами. Как показывают оценки, такие ППП волноводы вполне конкурентоспособны и нуждаются в дополнительных исследованиях.

2. Теория

В настоящей работе изучаются возможности распространения и предельной поперечной локализации ППП в зазоре между плоской и цилиндрически выпуклой металлическими поверхностями. На рис.1 представлен характерный вид исследуемой структуры металл–зазор–металл. Обозначим через ε_m и ε_d, соответственно, диэлектрические проницаемости металла и диэлектрика заполняющего зазор. Рассматриваем случай, когда ширина зазора w зависит от координаты y следующим образом:

$$w(y) = w_0 \mathrm{ch}^2(\alpha y), \tag{1}$$

где w_0 – минимальная ширина зазора, а α определяет скорость его возрастания.

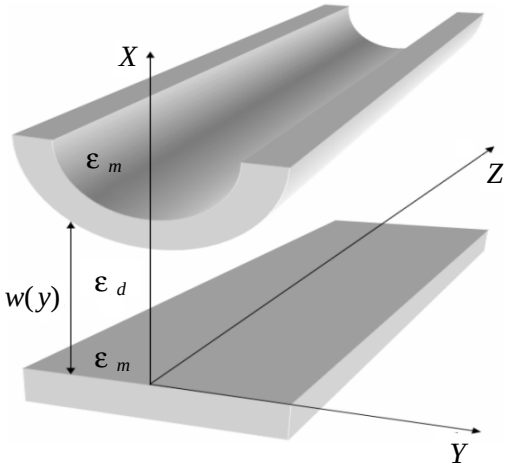


Рис.1. Характерный вид плазмонной волноводной структуры металл–зазор–металл.

Пусть волна распространяется в направлении z. В рамках адиабатического приближения x-компоненту напряженности электрического поля волны можно представить в виде [21]

$$E_x = AX\left(x, w(y)\right)Y(y)e^{i(\beta z - \omega t)}. \tag{2}$$

Здесь A – константа, а X определяется из решения волнового уравнения в случае постоянного значения ширины зазора:

$$X\left(x,w(y)\right)=\begin{cases}\dfrac{\varepsilon_d}{\varepsilon_m}\operatorname{ch}\dfrac{\chi_d w}{2}e^{\chi_m(x-w)}, & x>w(y),\\ \operatorname{ch}\chi_d\left(1+w/2\right), & 0<x<w(y),\\ \dfrac{\varepsilon_d}{\varepsilon_m}\operatorname{ch}\dfrac{\chi_d w}{2}e^{-\chi_m x}, & x<0,\end{cases} \tag{3}$$

где выполняется дисперсионное соотношение

$$\operatorname{th}\left(\chi_d w/2\right)=-\left(\varepsilon_d/\varepsilon_m\right)\left(\chi_m/\chi_d\right),\ \ \chi_{m,d}=\sqrt{q^2(y)-\varepsilon_{m,d}\,\omega^2/c^2}. \tag{4}$$

В предельном случае $\chi_d w(y)/2<<1$ и $\left|\varepsilon_m\right|>>\varepsilon_d$ имеем

$$q^2(y)=q_0^2+2rq_0/w(y), \tag{5}$$

где $q_0=\sqrt{\varepsilon_d}\left(\omega/c\right),\ \ r=\sqrt{\varepsilon_d/\left|\varepsilon_m\right|}$.

Тогда для $Y(y)$ получаем следующее уравнение:

$$\partial^2 Y/\partial y^2-\left(\beta^2-q^2(y)\right)Y=0. \tag{6}$$

Процедура решения уравнения (6) аналогична известной квантовомеханической задаче [22] и мы приведем лишь окончательное выражение:

$$Y(\xi)=\left(1-\xi^2\right)^{\varepsilon/2}F\left(\varepsilon-s,\varepsilon+s+1,\varepsilon+1,(1-\xi)/2\right). \tag{7}$$

Здесь F – гипергеометрическая функция,

$$\varepsilon=\sqrt{\beta^2-q^2}/\alpha,\quad s=(1/2)\left(-1+\sqrt{1+8q_0r/w_0\alpha^2}\right),\quad \xi=\operatorname{th}(ay). \tag{8}$$

Для того чтобы $Y(\infty)\to 0$, необходимо выполнение условия $\varepsilon-s=-n$, где $n=0;1;2;\ldots$. Тогда

$$\beta_n=\sqrt{q_0^2+\alpha^2(s-n)^2}. \tag{9}$$

Для основной моды $n=0$, когда $F=1$, соотношение (9) существенно упрощается при $8rq_0/a^2w_0>>1$:

$$\beta_0=q_0\sqrt{1+2r/q_0w_0}. \tag{10}$$

В волноводном режиме распространения связь между мощностью волны и константой A можно найти из соотношения

$$P_0=\frac{\varepsilon_d\omega}{4\pi\beta}\int_0^\infty dy\int_0^{w(y)}dxA^2\left(1-\xi^2\right)^{\varepsilon}=\frac{\varepsilon_d\omega w_0}{4\pi\beta}A^2\int_0^\infty dyI(y), \tag{11}$$

где $I(y)$ определяет распределение плотности мощности в волноводной моде:

$$I(y) = \left[\mathrm{ch}\left(\alpha y\right)\right]^{-2(\varepsilon-1)}. \qquad (12)$$

На рис.2 представлено это распределение для основной волноводной моды.

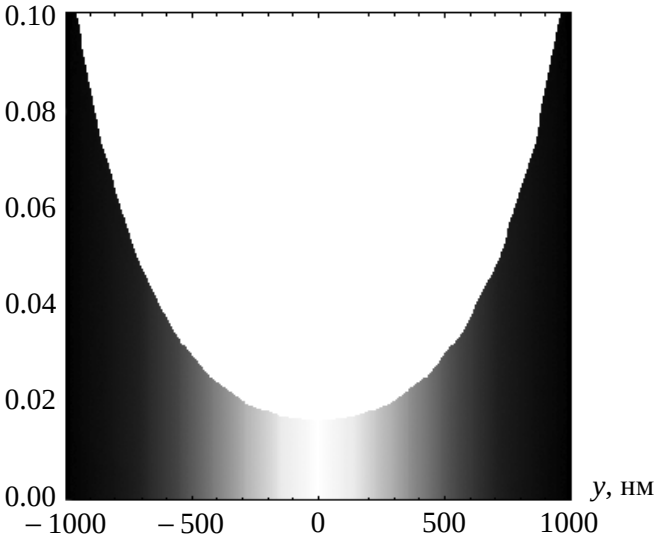


Рис.2. Распределение плотности мощности в основной волноводной моде, при следующих значениях параметров: $\sqrt{\varepsilon_d/\varepsilon_m} = 2/11.5$, $w_0 = 20$ нм, $\alpha = 1.64\times10^{-3}$ нм$^{-1}$.

Рассмотрим теперь возможность предельной локализации волны в ходе ее распространения по волноводной структуре. Из приведенного анализа следует, что локализации способствует сужение минимальной ширины зазора w_0 и уменьшение радиуса кривизны выпуклости, то есть увеличение α. Следовательно, волну можно сфокусировать в ходе ее распространения, надлежащим образом меняя значения w_0 и α. Чтобы оставаться в рамках адиабатического приближения, полагаем, что функции $w_0(z)$ и $a(z)$ существенно меняют свое значение на расстояниях, значительно превосходящих длину волны. Из (8), (9) и (12) следует, что максимальной локализации можно добиться при условии

$$a^2(z)\, w_0(z) = \mathrm{const}. \qquad (13)$$

В данном случае в пределах адиабатического приближения *x*-компоненту напряженности электрического поля волны можно представить в виде

$$E_x = A(z)\, X(x, w(y,z))\, Y(y,z) \exp(i\int \beta(z')dz' - \omega t). \qquad (14)$$

При этом все остальные формулы (2)–(12) остаются в силе, с условием, что фигурирующие в них параметры w_0 и α являются функциями координаты z.
По мере сужения минимальной ширины диэлектрического слоя $w_0(z)$ становится существенной роль потерь. Тогда учет комплексности диэлектрической проницаемости металла $\varepsilon_m = \varepsilon_m' + i\varepsilon_m''$ необходим. В результате этого волновое число принимает комплексные значения:

$$\beta_n = \beta_n'(z) + i\beta_n''(z). \qquad (15)$$

В рамках сделанных приближений $\beta_0'(z)$ определяется из (10), а для $\beta_0''(z)$ получим

$$\beta'' = \varepsilon_m'' r / 2\left|\varepsilon_m'\right| w_0(z)\sqrt{1 + 2r/q_0 w_0(z)}. \qquad (16)$$

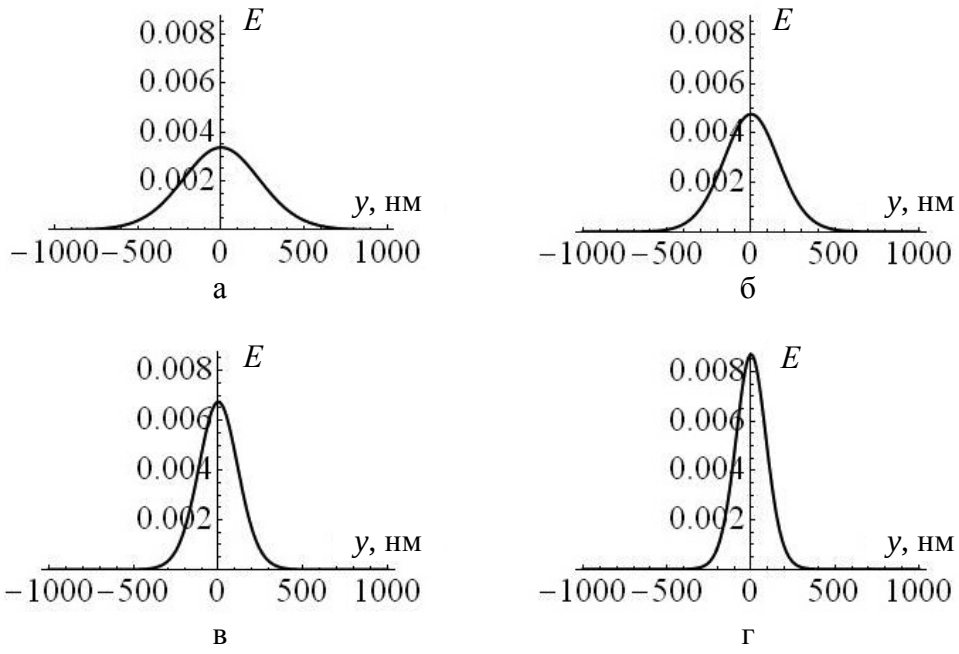


Рис.3. Зависимость плотности распределения мощности излучения (в относительных единицах) от координаты y, при уменьшающихся значениях минимальной ширины зазора и радиуса кривизны цилиндрической выпуклости в условиях $\sqrt{\varepsilon_d/\varepsilon_m} = 2/11.5$: а) $w_0 = 20$ нм, $\alpha = 1.64\times10^{-3}$ нм$^{-1}$, б) $w_0 = 10$ нм, $\alpha = 2.32\times10^{-3}$ нм$^{-1}$, в) $w_0 = 5$ нм, $\alpha = 3.28\times10^{-3}$ нм$^{-1}$, д) $w_0 = 3$ нм, $\alpha = 4.23\times10^{-3}$ нм$^{-1}$.

Пусть сужение минимальной ширины происходит по линейному закону $w_0(z) = w_{00} - \mu z$ ($z < w_{00}/\mu$). Тогда мощность волны в основной волноводной моде в ходе ее распространения по z убывает как

$$P(z) = P_0 \, f(z)/f(0), \tag{17}$$

где

$$f(z) = \left[\left(w_{00} - \mu z \right) \left(1 + \sqrt{1 + 2r/q_0 (w_{00} - \mu z)} \right)^2 \right]^{\frac{r}{\mu} \frac{\varepsilon_m^*}{|\varepsilon_m^*|}}. \tag{18}$$

Хотя согласно (17) полная мощность излучения падает, однако в условиях сверхфокусировки ППП ее плотность существенно возрастает. На рис.3 представлена плотность распределения мощности излучения в зависимости от координаты *y*, при уменьшающихся значениях минимальной ширины зазора и радиуса кривизны циллиндрической выпуклости ($a^2(z) w_0(z) = \text{const}$). Как показывают оценки, в важном для телекоммуникации случае $\lambda = 1550$ нм в исследуемой волноводной структуре волновые поля можно локализовать в размерах, на порядок меньших длины волны (λ). Заметим, что этот результат сопоставим с аналогичным результатом, полученным в структуре сужающихся *V*-образных волноводных каналов [23].

3. Заключение

Таким образом, в зазоре между плоской и цилиндрической выпуклой поверхностями, ППП в ходе его распространения, преодолев дифракционный предел, локализуется в нанометровых размерах. Этот процесс происходит в условиях сужения минимальной ширины зазора и радиуса кривизны цилиндрической выпуклости, в рамках применимости адиабатического приближения. Оценки показывают, что в предложенной структуре энергетические потери излучения невелики и ее можно использовать в качестве волновода нанометровых размеров.

ЛИТЕРАТУРА

1. Plasmonic Nanoguides and Circuits, ed. **S.I.Bozhevolnyi**. Pan Stanford, 2008.
2. **D.K.Gramotnev, S.I.Bozhevolnyi.** Nature photonics, **4**, 83 (2010).
3. **M.A.Noginov, G.Zhu, A.M.Belgrave, et al.** Nature, **460**, 1100 (2009).
4. **K.V.Nerkararyan.** Phys. Lett. A, **237**, 103 (1997).
5. **M.I.Stockman.** Phys. Rev. Lett., **93**, 137404 (2004).
6. **D.K.Gramotnev.** J. Appl. Phys., **98**, 104302 (2005).
7. **K.Vernon, D.K.Gramotnev, D.F.P.Pile.** J. Appl. Phys., **101**, 104312 (2007).
8. **E.Moreno, S.G.Rodrigo, S.I.Bozhevolnyi, L.Martín-Moreno, F.J.García-Vidal.** Phys. Rev. Lett., **100**, 023901 (2008).
9. **C.Ropers, C.C.Neacsu, T.Elsaesser, M.Albrecht, M.B.Raschke, C.Lienau.** Nano Lett., **7**, 2784 (2007).
10. **E.Verhagen, M.Spasenovic, A.Polman, L.Kuipers.** Phys. Rev. Lett., **102,** 203904 (2009).
11. **H.Choi, D.F.P.Pile, S.Nam, G.Bartal, X.Zhang.** Opt. Express, **17**, 7519 (2009).
12. **V.S.Volkov, S.I.Bozhevolnyi, S.G.Rodrigo, L.Martín-Moreno, F.J.García-Vidal, E.Devaux, T.W.Ebbesen.** Nano Lett., **9**, 1278 (2009).
13. **F.DeAngelis, G.Das, P.Candeloro, M.Patrini, et al.** Nat. Nanotechnol., **5**, 67 (2010).
14. **P.Berini.** Phys. Rev. B, **61**, 10484 (2000).

15. **T.Nikolajsen, K.Leosson, I.Salakhutdinov, S.I.Bozhevolnyi.** Appl. Phys. Lett. **82**, 668 (2003).
16. **S.I.Bozhevolnyi, J.Erland, K.Leosson, et al.** Phys. Rev. Lett., **86**, 3008 (2001).
17. **S.A.Maier, P.G.Kik, H.A.Atwater, et al.** Nat. Mat., **2**, 229 (2003).
18. **S.I.Bozhevolnyi, V.S.Volkov, et al.** Phys. Rev. Lett., **95**, 046802 (2005).
19. **S.I.Bozhevolnyi, V.S.Volkov, E.Devaux, et al.** Nature, **440**, 508 (2006).
20. **V.S.Volkov, S.I.Bozhevolnyi, E.Devaux, et al.** Nano Lett., **7**, 880 (2007).
21. **S.I.Bozhevolnyi, Kh.V.Nerkararyan.** Optics Express, **17**, 10327 (2009).
22. **Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц.** Квантовая механика, нерелятивистская теория. М., Наука,1974.
23. **S.I.Bozhevolnyi, K.V.Nerkararyan.** Optics Letters, **35**, 541 (2010).

ՄԱԿԵՐԵՎՈՒԹԱՅԻՆ ՊԼԱԶՄՈՆ-ՊՈԼՅԱՐԻՏՈՆԻ ԳԵՐՖՈԿՈՒՍԱՑՈՒՄԸ ՆԵՂԱՑՈՂ ԳՈԳԱՎՈՐ ՃԵՂՔՈՒՄ

Ս.Ի. ԲՈԺԵՎՈԼՆԻ, Խ.Վ. ՆԵՐԿԱՐԱՐՅԱՆ, Ս.Բ. ՀՈՎՍԵՓՅԱՆ

Ցույց է տրված, որ հարթ և գլանաձև ուռուցիկ մետաղական մակերևույթների միջև ձևավորված գոգավոր դիէլեկտրական ճեղքում մակերևութային պլազմոն-պոլյարիտոնը կարող է տեղայնացվել նանոմետրային չափերում, ճեղքի մինիմալ լայնության և ուռուցիկության կորացման շառավղի ադիաբատային սեղման պայմաններում: Փոքր կորուստների պատճառով, այս տիպի ալիքատարային ուղիները կարող են ծառայել որպես տարրական հիմք նանոմետրային չափերի արագագործ օպտիկական շղթաների ստեղծման համար:

ULTRAFOCUSING OF SURFACE PLASMON-POLARITON IN A NARROWING CONCAVE GAP

S.I. BOZHEVOLNYI, Kh.V. NERKARARYAN, S.B. HOVSEPYAN

In a concave gap between the flat and cylindrically convex metallic surfaces, surface plasmon-polariton may be localized in nanoscale, in conditions of adiabatic narrowing of the gap minimum width and convex curvature radius. Waveguide channels of that type may serve as an elementary basis for creation of high-speed optical circuits in nanoscale, due to their small losses.

К СВЕДЕНИЮ АВТОРОВ

В журнале печатаются оригинальные статьи и краткие сообщения авторов по всем разделам современной физики на русском и армянском языках. Редакция просит авторов при направлении статей придерживаться следующих правил.

1. Статьи, поступающие в редакцию, должны иметь направление от учреждения, в котором выполнена работа, а также акт экспертизы. Название учреждения приводится перед текстом статьи после фамилий авторов.

2. Объем каждой статьи не должен превышать 15 страниц, включая рисунки. Работы необходимо представлять в двух экземплярах, отпечатанных на принтере через 2 интервала. При наборе статьи следует использовать редактор MS Word.

3. Тексту каждой статьи предшествует индекс УДК, проставленный в левом верхнем углу. Непосредственно перед текстом статьи или краткого сообщения после заглавия помещается аннотация. К работам, представленным на русском языке, должны быть приложены резюме на армянском и английском языках.

4. Следует ограничиваться минимальным количеством рисунков и фотографий. Их размеры не должны превышать 10×15 см. Они должны быть представлены в двух экземплярах, на обороте рисунков необходимо указать фамилии авторов, название статьи и номер рисунка. Подписи к рисункам должны быть собраны на отдельном листе.

5. В тексте статьи и на рисунках латинские символы следует приводить курсивом, а греческие – прямо. Векторы обозначаются жирным шрифтом, без стрелок. В индексах символов необходимо использовать английские обозначения.

6. Цитируемая литература должна даваться общим списком в конце статьи. В тексте ссылка приводится цифрой в прямых скобках в порядке упоминания в статье. В списке литературы необходимо указать: для книг – инициалы и фамилию автора, название книги, место издания, издательство, год издания; для периодических изданий – инициалы и фамилию автора, название журнала, том, номер выпуска, первую страницу и год издания.

7. Статья должна быть подписана всеми авторами. Необходимо также приложить точный адрес, фамилию, имя, отчество автора и адрес учреждения, где выполнена работа.

8. В случае возвращения автору его рукописи для доработки датой поступления считается день получения редакцией окончательного варианта статьи.

9. Редакция посылает автору одну корректуру. Корректура с подписью автора и датой ее подписания должна быть выслана в редакцию в течение суток с момента ее получения.

10. Автор передает редакции журнала "Известия НАН Армении, Физика" исключительное право на воспроизведение, распространение статьи в периодической печати, а также на ее перевод на английский язык для переиздания в журнале "Journal of Contemporary Physics (Armenian Academy of Sciences)".

Статьи, в которых не соблюдены указанные правила, к рассмотрению приниматься не будут.

Адрес редакции "Известий НАН Армении, Физика": Республика Армения, 0019, Ереван, пр. Маршала Баграмяна, 24-г. Тел. 56-80-67.