ФИЗИКА-ЭРОРЧИ-РНУЗІСЯ



ИЗВЕСТИЯ НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК АРМЕНИИ

49, № 5, 2014

ՏԵՂԵԿՍՉԻՐ ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱՋԳՍՅԻՆ ԱԿԱԴԵՄԻԱՅԻ

> PROCEEDINGS OF NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF ARMENIA

зълъчияъг известия БРДРЧИ ФИЗИКА

LUSUL TOW

49

№ 5

22 чии "чъблъювлъу" глизиличэлъювлъу издательство "гитутюн" нан ра ъгъчиу Ереван 2014

© Национальная Академия наук Армении Известия НАН Армении, Физика Журнал издается с 1966 г. Выходит 6 раз в год на русском и английском языках

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

В. М. Арутюнян, главный редактор
Э. Г. Шароян, зам. главного редактора
А. А. Ахумян
Э. М. Казарян
А. О. Меликян
А. Р. Мкртчян
Д. Г. Саркисян
А. М. Сирунян
Ю. С. Чилингарян
А. А. Мирзаханяя, ответственный секретарь

ԽՄԲԱԳՐԱԿԱՆ ԿՈԼԵԳԻԱ

Վ. Մ. Հարությունյան, գլխավոր խմբագիր Է. Գ. Շառոյան, գլխավոր խմբագրի տեղակալ Ա. Ա. Հախումյան Է. Մ. Ղազարյան Ա. Հ. Մելիքյան Ա. Ռ. Մկրտչյան Դ. Հ. Սարգսյան Ա. Մ. Սիրունյան Յու. Ս. Չիլինգարյան Ա. Ա. Միրզախանյան, պատասխանատու քարտուղար

EDITORIAL BOARD

V. M. Aroutiounian, editor-in-chief E. G. Sharoyan, associate editor A. A. Hakhumyan E. M. Kazaryan A. O. Melikyan A. R. Mkrtchyan D. H. Sarkisyan A. M. Sirunyan Yu. S. Chilingaryan A. A. Mirzakhanyan, executive secretary

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

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

Editorial address: 24-g, Marshal Baghramyan Ave., Yerevan, 0019, Republic of Armenia. УДК 538.56

ЧЕРЕНКОВСКОЕ-ПЕРЕХОДНОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ В ГАММА-ОБЛАСТИ ЧАСТОТ

М.А. АГИНЯН¹, К.А. ИСПИРЯН^{1*}, М.К. ИСПИРЯН¹, Г.А. САРГСЯН²

¹Национальная научная лаборатория им. А.И. Алиханяна, Ереван, Армения ²Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

*e-mail: karo@mail.yerphi.am

(Поступила в редакцию 10 октября 2013 г.)

Вычислены спектральное и угловое распределения, а также полное число черенковского-переходного излучения образованного заряженной частицей в гамма (ЧПИГ/GCTR) области частот (0.8–10) МэВ, используя результаты недавнего открытия, что в упомянутой области частот показатель преломления некоторых веществ $n(\omega) > 1$, что авторами объясняется Дельбрюковским рассеянием на кулоновском поле ядер. Используя результаты проведенных численных расчетов, предложена экспериментальная установка для наблюдения и изучения ЧПИГ, образованного электронами с энергиями, намного большими, чем пороговая энергия ЧПИГ (~ 10 ГэВ). Обсуждаются некоторые применения ЧПИГ, в частности, для поиска новых материалов с $n(\omega) > 1$ в гамма-области частот.

1. Введение

Хорошо известно [1,2], что черенковское излучение (ЧИ) образуется, если заряженная частица с энергией *E* (или релятивистским фактором $\gamma = E/mc^2 = [1/(1 - \beta^2)]^{1/2}$, $\beta = V/c$) выше, чем определенное пороговое значение $E > E_{thr} (\gamma > \gamma_{thr})$, проходит вещество-радиатор с показателем преломления $n(\omega) = \sqrt{\varepsilon(\omega)} > 1$ в определенной области частот ω (ε – диэлектрическая проницаемость). Принято представлять комплексные значения величин $\varepsilon(\omega)$ и $n(\omega)$ в виде: $\varepsilon(\omega) = n^2(\omega) = \varepsilon'(\omega) + i\varepsilon''(\omega) = 1 + \chi'(\omega) + i\chi''(\omega)$ и $n(\omega) = 1 + \delta(\omega) + i\Delta(\omega)$, где χ' и $\chi'' - действительная и мнимая части воспримчивости. Величины <math>\chi'(\omega)$ и $\delta(\omega)$ связаны с преломлением, тогда как $\chi''(\omega)$ и $\Delta(\omega)$ описывают поглощение фотонов с длиной поглощения $L_{abs} = 1/\mu(\omega) = c/(\chi''(\omega)\omega)$, где μ – линейный коэффициент поглощения.

Менее известно, что теоретически и экспериментально (см. [2,3]) показано, что ЧИ образуется также в узких мягких рентгеновских областях энергий фотонов, $\hbar \omega < 1$ кэВ, и называется рентгеновским черенковским излучением, РЧИ. Используя значения мнимой части атомного рентгеновского фактора рассеяния, табулированные в [4], а также дисперсионные соотношения Крамерса– Кронига, в работе [5] показано, что в узкой рентгеновской области около К-, L-, М-краев показатель преломления некоторых веществ может быть больше, чем 1. Используя теорию Тамма–Франка ЧИ и теорию Франка–Гинзбурга–Гарибяна переходного излучения (ПИ), образованного на границе двух веществ, авторы [5] вычислили угловое и спектральное распределения, а также другие характеристики РЧИ. Было бы правильнее назвать РЧИ как рентгеновское черенковское-переходное излучение, РЧПИ, так как важнейшие результаты получены с помощью формул теории рентгеновского переходного излучения (РПИ). Эти предсказания [5] были экспериментально подтверждены в [6] с помощью электронов с энергией 1.2 ГэВ и позднее в работах [7-10], используя электроны с энергиями 5–10 МэВ. Заметим, что возможное существование ЧИ в рентгеновской и гамма областях теоретически рассматривалось ранее в некоторых работах [2,11], не показывая, что на самом деле в рентгеновской и гамма областях диэлектрическая постоянная некоторых веществ может быть больше 1.

В 2012 г., изучая рассеяние гамма квантов с энергиями (0.8–2) МэВ, в работе [12] было показано, что показатель преломления кремния слегка больше 1 с $\delta \sim 10^{-10}$ – 10^{-9} . Авторы [12] объяснили это наблюдение с помощью нелинейного процесса квантовой электродинамики, а именно, рассеяния Дельбрюка, которое, как рассеяние фотона на фотоне, происходит через виртуальное образование электрон-позитронных пар. В работе [12] приведены также теоретические вычисления положительных значении δ до 10 МэВ и показано, что для тяжелых веществ, например, для золота $\delta \sim 10^{-5}$. Согласно [12], эти факты могут найти широкое применение, в частности, в оптике гамма-пучков для фокусирования пучков гамма-лучей.

В настоящей работе, используя теорию ЧИ Тамма–Франка, показано, что на основе результатов [12] можно ожидать существование ЧПИГ в области энергий фотонов ~ (1–10) МэВ. Далее, после создания более правильной теории ЧПИГ с помощью теории РПИ Гарибяна и получения точных характеристик ЧПИГ обсуждена возможность его экспериментального изучения и применений. Предварительные результаты были кратко представлены в [13], используя теорию РПИ и только экспериментальные скудные данные [12] для ~ (0.8–2) МэВ.

2. Оценка характеристик ЧПИГ с помощью теории ЧИ Тамма-Франка

Зависимость интерполированных значений $\chi' = 2\delta$ от $\hbar\omega$ для Si, используя данные работы [12], показаны на кривой *1* рис.1. Кривая 2 показывает зависимость $\chi'' = \mu c/\omega$ от $\hbar\omega$, используя значения μ из известных таблиц, имеющих точность порядка (5–10)%.

Как в [2,3,5-10], в первом приближении, используя теорию ЧИ Тамма– Франка, оценим некоторые характеристики ЧПИГ, образованного в прозрачной среде. Как и для РЧИ, подставляя $n = 1 + \chi'/2$ в выражения для угла ЧИ, соs $\theta = 1/\beta$, и для спектрального распределения (для единичной длины радиатора, UL) $dN / d(\hbar\omega) \Big|_{UL} = (\alpha / (\hbar c)) \sin^2 \theta$, в приближении малых углов и $\gamma >> 1$ легко найти следующие формулы для угла, пороговой энергии (thr) и спектрального



Рис.1. Зависимость реальной χ' и мнимой χ'' частей (кривые 1 и 2, соответственно) восприимчивости Si от $\hbar\omega$.

распределения фотонов ЧПИГ:

$$\theta_{GCTR} \approx \sqrt{\chi' - \gamma^{-2}},\tag{1}$$

$$\gamma_{GCTRthr} \approx 1/\sqrt{\chi'},$$
 (2)

$$dN_{GCTR} / d\hbar\omega \Big|_{UL} \approx (\alpha / \hbar c)(\chi - \gamma^{-2}).$$
(3)

Заметим, что в (1)-(3) предполагается, что радиатор прозрачный с $\chi'' = \mu = 0$. Используя метод, описанный в [14], и имея выход из непоглощающего радиатора единичной длины, можно найти выход из поглощающего радиатора с толщиной L_{rad} :

$$dN_{GCTR} / d\hbar\omega \approx (\alpha / \hbar c)(\chi' - \gamma^{-2})L_{abs}[1 - \exp(L_{rad} / L_{abs})].$$
(4)

Из формулы (4) для $L_{\rm rad} >> L_{\rm abs}$, что имеет место для мягких рентгеновских фотонов РЧИ с $L_{\rm abs} \leq 0.1$ см, получим

$$\left|\frac{dN_{GCTR}}{d\hbar\omega}\right|_{L_{rad} >> L_{abs}} \approx \frac{\alpha}{\hbar\omega} \frac{\chi' - \gamma^{-2}}{\chi''},$$
(5)

а при условии $L_{\rm rad} \ll L_{\rm abs}$, которое может иметь место для жестких фотонов ЧПИГ с $L_{\rm abs} \ge 0.5$ см, получим

$$\left. \frac{dN_{GCTR}}{d\hbar\omega} \right|_{L_{rad} \ll L_{abs}} \approx (\alpha / \hbar c)(\chi' - \gamma^{-2})L_{rad}, \qquad (6)$$

Как и ожидалось, выражение (5) не зависит, а (6) зависит от L_{rad} .

Результаты (1)-(6) можно также получить, используя работу [15], в которой выражения для спектрального и углового распределений, а также для других характеристик ЧИ, образованного заряженной частицей, движущейся в поглощающей среде с $\varepsilon''(\omega) = \chi''(\omega) \neq 0$, получены с использованием метода, описанного в [16] и основанного на вычислении потерь энергии как работы электрического поля частицы.

Хотя формулы (1)-(6) не адекватны для корректного описания ЧПИГ, однако они позволяют проделать некоторые грубые оценки и выводы по ЧПИГ. Предположим, что ЧПИГ образуется электронами с энергией E = 20 ГэВ в радиаторе из Si с толщиной $L_{rad} = 0.1X_0^{Si} \approx 1 \text{ cm} << L_{abs} = 1/\mu$ ($X_0^{Si} = 9.36$ см – радиационная длина Si). Тогда, используя значения $\chi' = 2 \times 10^{-9}$ (см. рис.1) при $\hbar \omega \approx 1$ МэВ и формулы (1) и (2), получаем $\gamma_{GCTRthr} \approx 1/\sqrt{\chi'} \approx 2.2 \times 10^4$, т.е. $E_{thr} \approx 11.4$ ГэВ и $\theta_{GCTR} \approx \sqrt{\chi' - \gamma^{-2}} \approx 36.7$ µ рад, т.е. порядка $\theta_{rel} \approx 1/\gamma = 26$ µ рад.

Теперь, с помощью (6) оценим число фотонов ЧПИГ. Используя значения χ' (см. рис.1) и интегрируя (6) от $\hbar\omega_1 = 800$ кэВ до $\hbar\omega_{12} = 10000$ кэВ, получим $N_{GCTR} \approx \alpha L_{rad} / (\hbar c) \int (\chi' - \gamma^{-2}) d(\hbar\omega) \approx 1.4$.

Как будет показано далее, эти значения порога, угла и полного числа фотонов ЧПИГ довольно близки к реальным значениям.

3. Теория ЧПИГ на основе теории ПИ Гинзбурга-Франка-Гарибяна

Теперь, следуя [2,3,5-10], рассмотрим ЧПИГ, используя теорию ПИ Гинзбурга–Франка–Гарибяна, применимость которой более оправдана, чем использование теории Тамма–Франка, потому что в действительности детектируются фотоны, образованные в тонком радиаторе в вакууме или воздухе, на некотором расстоянии от радиатора. Первые намеки на то, что формулы ПИ описывают также ЧИ, были опубликованы в 60-ые годы (см., например, [17]). По-видимому, первые численные расчеты ПИ релятивистских электронов в области энергий фотонов вплоть до несколько десятков эВ, используя хорошо известную формулу Гинзбурга–Франка–Гарибяна и измеренные значения действительной и мнимой частей ε , были проведены в работе [18]. В частности, в ней было показано, что около М-края Ge при $\hbar \omega \approx 30$ эВ, когда ε становится больше 1, выход ПИ претерпевает осцилляции дисперсионного типа и увеличение интенсивности излучения. Связь ЧИ и ПИ обсуждалось в работе [19], где и были впервые получены формулы ЧИ из выражений для ПИ.

Рассмотрим прохождение электронов через пластину в вакууме. Кроме основного фона тормозных фотонов, согласно вышесказанному, будет образовываться ЧПИГ в областях частот, где $\varepsilon > 1$, если энергия электронов превосходит пороговую. Вместо использования формулы ПИ вперед в общей форме, как это сделано в [18], мы будем развивать теорию ЧПИГ, используя результаты теории РПИ, образованного в пластине ультра-релятивистской частицей. Вводя комплексное χ в формулу (2.21) работы [20] или в формулу (3.27) работы [2] для спектрально-углового распределения РПИ, можно получить следующую формулу для спектрально-углового распределения ЧПИГ:

$$\frac{d^{2}N_{GCTR}}{d\hbar\omega d\theta} = \frac{2\alpha\theta^{3}}{\pi\hbar\omega} \frac{(\chi'^{2} + \chi''^{2})}{(\theta^{2} + \gamma^{-2})^{2}[(\theta^{2} + \gamma^{-2} - \chi')^{2} + \chi''^{2}]} \times \\ \times \left\{ \left[1 - \exp\left(-\frac{L_{rad}}{2L_{abs}}\right) \right]^{2} + 4\exp\left(-\frac{L_{rad}}{2L_{abs}}\right) \sin^{2}\frac{\hbar\omega L_{rad}(\theta^{2} + \gamma^{-2} - \chi')}{4\hbar c} \right\}.$$
(7)

В дальнейшем будет использована формула (7), которая будет проинтегрирована 1) по θ для получения спектрального распределения ЧПИГ, 2) по $\hbar\omega$ для получения углового распределения ЧПИГ и 3) по θ и по $\hbar\omega$ для получения полного числа фотонов ЧПИГ.

Проведя аналитическое интегрирование (7) по θ , можно получить сложное и длинное выражение для спектрального распределения ЧПИГ, которое неразумно привести в этой работе. Поэтому нижеприведенные результаты получены более простыми численными интегрированиями (7), учитывая что аналитическое интегрирование по $\hbar\omega$ невозможно.

4. Численные результаты и обсуждение

Нижеприведенные численные результаты, если не оговорено, получены для энергии электронов E = 20 ГэВ и для толщины кремниевых (Si) радиаторов с $L_{rad} = 0.1 X_0^{Si} \approx 1$ см. Такая толщина выбрана для обеспечения слабой деградации энергии электрона.

4.1. Спектральное распределение ЧПИГ

Спектральное распределение числа фотонов ЧПИГ, полученное после интегрирования по углам, показано на рис.2 (кривая 1). Кривая 2 на рис.2 показывает спектральное распределение тормозного излучения, образованного в радиаторе Si с толщиной 1 см с учетом продольного эффекта плотности или эффекта Тер-Микаеляна (см. [21]).

Как видно на рис.2, в с согласии с теорией эффект Тер-Микаеляна имеет место при энергиях фотонов меньше, чем $\hbar \omega_p \gamma \approx 1200$ кэВ. Отметим, что нет необходимости учитывать эффект Ландау-Померанчука-Мигдала, поскольку эффект имеет место при намного больших энергиях электронов [21]. Как следует из рис.2, интенсивность ЧПИГ превосходит интенсивность фонового тормозного излучения в широком интервале приблизительно от 800 кэВ вплоть до 5800 кэВ.

Полное число фотонов ЧПИГ, полученное численным интегрированием кривой *1* на рис.2 по ћ ω в интервале энергий фотонов от 800 кэВ до 6000 кэВ, равно $N_{GCTR} = 1.34$, в согласии с вышеприведенными грубыми оценками, полученными с помощью теории Тамма–Франка, тогда как полное число фоновых фотонов тормозного излучения, полученное численным интегрированием кривой 2 на рис.2 по $\hbar\omega$ в той же области, равно $N_{BR} = 1.3$.



Рис.2. Спектральное распределение ЧПИГ (кривая 1) и тормозного излучения (кривая 2).

4.2. Угловое распределение ЧПИГ

Так как из-за сложной зависимости $\chi'(\hbar\omega)$ не удается провести аналитическое интегрированое (7) по $\hbar\omega$, на рис.3 представляем угловое распределение ЧПИГ, используя результаты численного интегрирования (7) по $\hbar\omega$, в области от 800 кэВ до 10000 кэВ. Из рис.3 следует, что ЧПИГ испускается в основном в интервале углов от 20 µрад до 60 µрад в согласии с вышеприведенными оценками, полученными с помощью теории Тамма-Франка. Численное интегрирование кривой рис.3 по углам снова дает $N_{GCTR} = 1.3$.

4.3. Зависимость ЧПИГ от энергии электронов

Зависимость числа фотонов ЧПИГ и тормозного излучения от энергии *Е* электрона, вычисленная для тех же параметров, что и для рис.2 и 3, и получаемая численным интегрированием (7) и формулы Тер-Микаеляна для тормозного излучения с учетом эффекта поляризации среды [21] в интервале энергий фото-



Рис.3. Угловое распределение ЧПИГ.

нов $\hbar \omega = 800-10000$ kэB, показана на рис.4 (кривые 1 и 2, соответственно). Поскольку энергетическая зависимость ЧПИГ, показанная на рис.4, резко увеличивается, или имеет "порог" при определенной энергии, а именно при $E \approx 10$ ГэB, то можно использовать ЧПИГ точно так, как РПИ [14], для измерения энергии или идентификации частиц.



Рис.4. Зависимость числа ЧПИГ (кривая *1*) и тормозных (кривая *2*) фотонов от энергии электронов.

Как было показано впервые в [22] (см. также [21]), в детекторах переходного излучения число образованных (без поглощения) фотонов РПИ из стопки пластин равно $N_{XTR} \sim 11$ и превосходит тормозной фон только в относительно узкой области $\Delta(\hbar\omega) \approx 2-30$ кэВ. Хотя при учете поглощения N_{XTR} сильно падает, тем не менее резкая зависимость N_{XTR} от энергии частицы позволяет конструировать детекторы РПИ, которые нашли широкое применение в физике высоких энергии [20,21]. В случае ЧПИГ число фотонов, выходящих из радиатора с или без учета поглощения, превосходит число тормозных фотонов в намного широком интервале $\hbar\omega = 800-6600$ кэВ.

4.4. Зависимость ЧПИГ от толщины радиатора

Выше нами было выбрано значение $L_{rad} = 1 \text{ см} = 0.1X_0$, чтобы энергия, точнее скорость электрона существенно не уменьшилась в радиаторе. Чтобы выяснить, как меняется выход ЧПИГ вокруг этой толщины, на рис.5 приведена зависимость числа фотонов ЧПИГ от толщины радиатора. Как видно из рис.5, как и для РПИ, выход ЧПИГ с увеличением L_{rad} при малых L_{rad} увеличивается почти пропорционально квадрату толщины, а в области $L_{rad} \approx 1-10$ см эта зависимость становится почти линейной. Однако, в эксперименте нельзя взять $L_{rad} > 1$ см, чтобы избежать потерь энергии электронов. Поэтому, для обеспечения большого выхода ЧПИГ разумно взять радиатор с толщиной (2–10)% X_0 .

Как показывают вычисления, проведенные для разных параметров с помощью различных интерполяций данных [12] с учетом экспериментальных и теоретических ошибок, точность всех вышеприведенных результатов лучше, чем 20%.



Рис.5. Зависимость числа фотонов ЧПИГ от толщины радиатора.

5. Возможная экспериментальная установка и обсуждение

Как следует из полученных результатов, можно детектировать фотоны ЧПИГ, имея электроны с энергиями выше, чем "пороговая", ~10 ГэВ, с помощью установки, схематически показанной на рис.6, которая аналогична установке, использованной в SLAC [23,24] для изучения эффектов Ландау– Померанчука–Мигдала и Тер-Микаеляна.



Рис.6. Предлагаемая экспериментальная установка.

Первичные и вторичные электроны детектируются с помощью сцинтилляционных счетчика Sc1, имеющего маленькую щель в центре, и Sc2. Они проходят через радиатор Si толщиной ~ 0.2–1 см и после отклонения магнитом M детектируются многопроволочным пропорциональным счетчиком MPC и калориметром BGO, которые измеряют также энергию электрона после излучения. Почти все фотоны ЧПИГ и тормозного излучения, образованные одним электроном в Si, регистрируются в направлении вперед с помощью спектрометра NaI(Te) или BGO, измеряющего спектральное распределение ЧПИГ.

Если вместо одной пластины взять многослойный радиатор, состоящий из M пластин, каждый с толщиной L_1 и с расстоянием L_2 между пластинами в

вакууме или в воздухе, и использовать соответствующие формулы из [20] или [25] для РПИ, можно как для РЧИ в соответствующей среде [26], исследовать свойства ЧПИГ, образованное в периодическом радиаторе, которое будет аналогом так называемого параметрического Черенковского излучения, впервые рассмотренного в [27].

6. Заключение

Таким образом, теоретически изучен новый тип излучения, ЧПИГ, который может найти следующие применения: 1) учитывая трудности, связанные с экспериментами в гамма-области (см. [12]), ЧПИГ может служить как более легкий метод для нахождения новых материалов с n > 1 в гамма-области; 2) так как пороговая энергия ЧПИГ, $\gamma_{thr} > 10^4$, больше, чем пороговая энергия детекторов РПИ, ЧПИГ, как и РПИ, может служить для идентификации частиц при больших энергиях. И наконец, 3) так как число фотонов ЧПИГ, образованных на один электрон, не на много меньше единицы, можно использовать механизм ЧПИГ для получения интенсивных пучков гамма-квантов с энергиями 1–10 МэВ, которые найдут применения в гамма-оптике и ядерной физике, в частности, для изучения гигантских резонансов.

ЛИТЕРАТУРА

- 1. В.П.Зрелов. Излучение Вавилова-Черенкова и его применение в физике высоких энергий. М., Атомиздат, 1968.
- 2. В.А.Базылев, Н.К.Жеваго. Излучение быстрых частиц в веществе и во внешних полях. М., Наука, 1987.
- K.A.Ispirian. X-Ray Cherenkov Radiation, in Proc. of NATO ARW Advanced photon Sources and Applications, nor Hamberd, Armenia, 29 August–3 Sep. 2004, NATO Sc. Ser. II, Math. Phys. Chem. 2005, vol. 199, p. 217.
- B.L.Henke, E.M.Gullikson, J.C.Davis. At. Data and Nucl. Data Tables, 54 181 (1993); http://www.cxro.lbl.gov/optical_constants.
- 5. В.А.Базылев и др. Письма в ЖЭТФ, 24, 406 (1976).
- 6. В.А.Базылев и др. Письма в ЖЭТФ, **34**, 103 (1981); ЖЭТФ, **81**, 1664 (1981).
- 7. W.Knulst, O.J.Luiten, M.J.van der Wiel, J.Verhoeven. Appl. Phys. Lett., 79, 2999 (2001).
- W.Knulst, M.J.van der Wiel, O.J.Luiten, J.Verhoeven. Appl. Phys. Lett., 83, 4050 (2003).
- 9. W.Knulst, M.J.van der Wiel, O.J.Luiten, J.Verhoeven. Proc. of SPIE, 5196, 393 (2004).
- 10. W.Knults. Dissertation, Eindhoven University of Technology, 2004.
- 11. В.Г.Барышевский, Нго Дан Нюан. Ядерная физика, 20, 1219 (1974).
- D.Habs, M.M.Gunther, M.Jentschel, W.Urban. Phys. Rev. Lett., 108, 184802 (2012);
 D.Habs, M.M.Gunther, M.Jentschel, P.G.Thirolf. ArXiv:1201.4466, 2012.
- 13. M.A.Aginian, K.A.Ispirian, M.Ispiryan. ArXiv:1302.5208, 2013.
- 14. А.И.Алиханян, Ф.Р.Арутюнян, К.А.Испирян, М.Л.Тер-Микаелян. ЖЭТФ, 41, 2002 (1961).
- 15. V.M.Grichine. Nucl. Instr. and Meth. A, 482, 629 (2002).

- 16. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Электродинамика сплошных сред, М., Наука, 1982.
- 17. Г.М.Гарибян, И.И.Гольдман. ДАН Арм.ССР, **31**, 219 (1960).
- 18. К.А.Испирян, С.Т.Казанджян. Физика твердого тела, 15, 1551 (1973).
- 19. Р.Багиян. Изв. Вузов, Радиофизика, 40, 1126 (1997).
- 20. Г.М.Гарибян, Ян Ши. Рентгеновское переходное излучение, Ереван, АН Арм. ССР, 1983.
- М.Л.Тер-Микаелян. Влияние среды на электромагнитные процессы при высоких энергиях. Ереван, АН Арм. ССР, 1969; High Energy Electromagnetic Processes in Condensed Media, New York, Wiley Interscience, 1972.
- 22. К.А.Испирян. Диссертация. Ереванский государственный университет, 1965.
- 23. P.L.Anthony, R.Becker-Szendy, P.E Bosted, et al. Phys. Rev. Lett. 75, 1949, (1995).
- 24. S.Klein. Rev. Mod. Phys., 71, 1501 (1999).
- 25. X.Artru, G.B.Yodh, G.Menesier. Phys. Rev. D, 12, 1289 (1975).
- M.A.Aginian, L.A.Gevorgian, K.A.Ispirian, I.A.Kerobyan. Proc. of NATO ARW, Advanced Photon Sources and Applications, Nor Hamberd, Armenia, 29 August-3 Sept., 2004, NATO Sc. Ser. II, Math. Phys. Chem. 2005, vol. 199, p. 205.
- 27. Я.Б.Файнберг, Н.А.Хижняк. ЖЭТФ, 32, 883 (1957).

ՉԵՐԵՆԿՈՎՅԱՆ-ԱՆՑՈՒՄԱՅԻՆ ՃԱՌԱԳԱՑԹՈՒՄ ՀԱՃԱԽԱԿԱՆՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԳԱՄՄԱ-ՏԻՐՈՒՅԹՈՒՄ

Մ.Ա. ԱՂԻՆՅԱՆ, Կ.Ա. ԻՍՊԻՐՅԱՆ, Մ.Կ. ԻՍՊԻՐՅԱՆ, Գ.Ա. ՍԱՐԳՍՅԱՆ

Հաշվված է իցքավորված մասնիկների առաջացրած Չերենկովյան-անցումային գամմամառագայթման (ՉԱԳՃ) սպեկտրալ և անկյունային բաշխումները, ինչպես նաև լրիվ ֆոտոնների թիվը (0.8–10) ՄէՎ տիրույթում, օգտագործելով վերջերս կատարված այն հայտնագործման արդյունքները, համաձայն որոնց որոշ նյութերի բեկման ցուցիչը մեծ է 1-ից, $n(\omega) > 1$, վերոհիշյալ տիրույթում, միջուկի Կուլոնյան դաշտում Դելբրուկյան ցրման պատձառով։ Օգտագործելով ստացված թվային հաշվումները, առաջարկված է փորձարարական մի սարք՝ դիտելու և ուսումնասիրելու համար շեմային էներգիայից մի քիչ ավելի էներգիայով էլեկտրոնների առաջացրած ՉԱԳՃ-ը։ Քննարկված են ՉԱԳՃ-ի որոշ կիռարություններ, մասնավորապես, վերևում նշված փորձերից շատ ավելի հեշտ մեթոդով նոր նյութեր հայտնաբերելու համար, որոնց $n(\omega) > 1$ գամմա-տիրույթում։

CHERENKOV-TRANSITION RADIATION IN GAMMA FREQUENCY REGION

M.A. AGINIAN, K.A. ISPIRIAN, M.K. ISPIRYAN, G.A. SARGSYAN

The spectral and angular distributions as well as the total number of photons of gammaray Cherenkov-transition radiation (GCTR) produced by charged particles in the photon energy region (0.8–2) MeV are calculated using the results of the recent discovery that in the abovementioned region the refraction index of some materials is greater than 1, $n(\omega) > 1$, due to Delbruck scattering on Coulomb field of nuclei. Using the results of the carried out numerical calculations, it is proposed an experimental arrangement for observation and experimental study of GCTR produced by electrons with energy slightly higher than the threshold energy of GCTR. Some applications of GCTR, in particular, the search of new materials with $n(\omega) > 1$ in gamma region with the help of this method, are discussed. УДК 532.624

О СТАБИЛЬНОСТИ ОДНОРОДНОЙ ОРИЕНТАЦИИ В ПЛОСКОПАРАЛЛЕЛЬНОЙ ЯЧЕЙКЕ ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА, ОБОГАЩЕННОГО НАНОЧАСТИЦАМИ

М.Р. АКОПЯН^{*}, А.А. КАНДЕВОСЯН, Р.С. АКОПЯН, Ю.С. ЧИЛИНГАРЯН

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

*e-mail: hamara404@gmail.com

(Поступила в редакцию 23 января 2014 г.)

Рассмотрены задачи о стабильности однородных ориентаций молекул нематического жидкого кристалла (НЖК) с добавленным в него небольшим количеством холестерического ЖК. Изучены ячейки ЖК с гомеотропной и твисториентациями молекул на границах. Задачи решены с помощью теоремы Нетер для ЖК. Инвариантность вида свободной энергии относительно трансляции по теореме Нетер приводит к сохранению "потока импульса", а относительно группы вращения – к сохранению "потока момента количества движения". Эти законы сохранения применены для нахождения порогов стабильности однородных ориентаций молекул указанной смеси, а также влияния наночастиц на пороги.

1. Введение

Гомеотропная ориентация директора нематического жидкого кристалла (НЖК), когда молекулы перпендикулярны стенкам плоскопараллельной ячейки, может стать неустойчивой при некоторых критических значениях воздействия внешних статических электрических, магнитных и световых полей, дестабилизирующих ориентацию директора. Как было впервые показано теоретически и экспериментально в работах [1-3], гомеотропная ориентация директора НЖК является неустойчивой относительно внедрения в НЖК небольшого количества молекул холестерического жидкого кристалла (ХЖК). Оказалось, что при некотором критическом значении концентрации ХЖК происходит бесполевой переход Фредерикса от устойчивого однородного гомеотропного распределения директора к устойчивому закрученному распределению.

Другой возможной однородной ориентацией является твист-ячейка НЖК, когда во всем объеме имеем планарную (молекулы параллельны плоскостям), но закрученную структуру. Такая структура устойчива, если угол кручения меньше 90°. Однако, такая ориентация тоже становится неустойчивой в присутствии молекул ХЖК.

В работе [4] из вариационного принципа получены уравнения равновесия деформированного состояния ЖК. С помощью теоремы Нетер получены законы сохранения для "потока импульса" и "потока момента количества движения". Полученные законы сохранения применены для нахождения аналитических решений ряда задач о равновесии ЖК с существенно неплоским распределением директора.

В настоящей работе с помощью законов сохранения для ЖК рассмотрены задачи об устойчивости однородных гомеотропной и твист-ориентаций молекул НЖК с добавленным в него небольшим количеством ХЖК. Аналитически найдены пороги устойчивости и влияние наночастиц на них.

Для рассмотрения условия устойчивости стационарного решения существуют, по крайней мере, два возможных подхода. Первый из них – это когда пишем нестационарное уравнение, находим временную зависимость решении и требуем, чтобы коэффициент временного изменения был равен нулю. Второй подход – когда пишем уравнение для возмущения от стационарного решения и находим условие, при котором оно не имеет ненулевого решения. В настоящей работе мы воспользуемся вторым подходом.

2. Основные уравнения

Инвариантность вида свободной энергии ЖК относительно трансляции по теореме Нетер приводит к сохранению "потока импульса", а относительно группы вращений – к сохранению "потока момента импульса" [4]:

$$\frac{\partial p_{ka}}{\partial x_{k}} = 0, \quad p_{ka} = -F\delta_{ka} + \frac{\partial n_{a}}{\partial x_{a}} \frac{\partial F}{\partial (\partial n_{a} / \partial x_{k})}, \quad M_{ka} = L_{ka} + S_{ka},$$

$$L_{ka} = -Fe_{kma}x_{m} + \frac{\partial F}{\partial (\partial n_{a} / \partial x_{k})} \frac{\partial n_{a}}{\partial x_{j}}e_{jma}x_{m}, \quad S_{ka} = -\frac{\partial F}{\partial (\partial n_{j} / \partial x_{k})}e_{jma}x_{m}. \quad (1)???$$

Здесь δ_{ik} – символ Кронекера, e_{ijk} – полностью антисимметричный единичный тензор, **n** – единичный вектор в направлении преимущественной ориентации молекул ЖК (директор), *F* – плотность свободной энергии:

$$F = F_d + F_{int} \,. \tag{2}$$

Здесь *F*_d – плотность свободной энергии Франка ЖК:

$$F_{d} = \frac{1}{2}K_{1}\left(\operatorname{div}\mathbf{n}\right)^{2} + \frac{1}{2}K_{2}\left(\operatorname{\mathbf{ncurl}}\mathbf{n}\right)^{2} + \frac{1}{2}K_{3}\left(\mathbf{n}\times\operatorname{curl}\mathbf{n}\right)^{2},\qquad(3)$$

где K_i – упругие константы Франка. При малых концентрациях наночастиц ρ_n , диспергированных в ЖК, сделаем следующие дополнительные обозначения: $\varphi_n = \rho_n V_n$ есть объемная доля наночастиц, $\mathbf{P} = \mathbf{p}/V_n$ – электрический дипольный момент единицы объема и $V_n = 4\pi R^3/3$ объем наночастиц. Тогда свободная энергия взаимодействия наночастиц с ЖК в единице объема будет иметь вид [5]

$$F_{\rm int} = -\frac{2\pi\varepsilon_a \varphi_n \left(\mathbf{nP}\right)^2}{45\varepsilon_{\parallel}^2} - \frac{2\pi\varepsilon_a \varphi_n P^2}{15\varepsilon_{\perp}^2},\tag{4}$$

где $\varepsilon_a = \varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp}$ есть анизотропия диэлектрической восприимчивости, а ε_{\parallel} и ε_{\perp} – величины статической диэлектрической проницаемости, измеренные вдоль и поперек оси нематика, соответственно.



Рис.1. Представление директора смеси НЖК и ХЖК с помощью полярных углов.

Применим эти результаты к задаче о равновесии ЖК в ячейке, ограниченной плоскостями z = 0 и z = L. При этом мы ограничимся случаем, когда деформированное состояние ЖК однородно относительно трансляций в плоскости *x*, *y*, т.е. **n** = **n**(*z*). В дальнейшем нам понадобится также представление вектора с помощью полярных углов (см. рис.1):

$$\mathbf{n} = \mathbf{e}_{x} \cos \varphi \sin \theta + \mathbf{e}_{y} \sin \varphi \sin \theta + \mathbf{e}_{z} \cos \theta.$$
 (5)

Тогда из законов сохранения (1) нетривиальную информацию дают лишь две величины:

$$2p + K_2 q^2 = \left(1 - n_z^2\right)^{-1} \left\{ \frac{\left[m + K_2 q \left(1 - n_z^2\right)\right]^2}{K_2 + K_{32} n_z^2} + \left(K_1 + K_{31} n_z^2\right) \left(\frac{dn_z}{dz}\right)^2 \right\} +$$
(6a)

$$+\frac{4\pi\varepsilon_{a}\varphi_{n}\left(\mathbf{nP}\right)^{2}}{45\varepsilon_{\perp}^{2}}+\frac{4\pi\varepsilon_{a}\varphi_{n}P^{2}}{15\varepsilon_{\perp}^{2}},$$

$$m=\left(1-n_{z}^{2}\right)\left(K_{2}+K_{32}n_{z}^{2}\right)\frac{d\varphi}{dz}-K_{2}q\left(1-n_{z}^{2}\right),$$
(6b)

или в интегральном виде

$$z = \int_{n_{z}(z=0)}^{n_{z}(z)} G(x) dx, \quad \varphi(z) = \varphi(0) + \int_{n_{z}(z=0)}^{n_{z}(z)} \frac{m + K_{2}q(1-x^{2})}{(1-x^{2})(K_{2}+K_{32}x^{2})} G(x) dx, \quad (7a)$$

$$G(x) = \left[\left(K_{1} + K_{31} x^{2} \right) \left(K_{2} + K_{32} x^{2} \right) \right] \times \\ \times \left\{ \left(2p + K_{2} q^{2} - \frac{4\pi\varepsilon_{a} \varphi_{n} (nP)^{2}}{45\varepsilon_{\perp}^{2}} - \frac{4\pi\varepsilon_{a} \varphi_{n} P^{2}}{15\varepsilon_{\perp}^{2}} \right) \times \\ \times \left(1 - x^{2} \right) \left(K_{2} + K_{32} x^{2} \right) - \left[m + K_{2} q \left(1 - x^{2} \right) \right]^{2} \right\}^{-1/2}.$$
(7b)

Здесь q – "волновое число" закрутки свободного холестерического ЖК, $q = 2\pi/h$, h – шаг свободной холестерической спирали, $K_{31} = K_3 - K_1$, $K_{32} = K_3 - K_2$. Входящие в (7а) параметры m и p подлежат определению из граничных условий при z = L (условия на границе z = 0 уже выполнены).

3. Ячейка с закрученным нематиком с хиральной добавкой

Рассмотрим для НЖК с хиральной добавкой задачу, в которой директор закреплен на границах под некоторыми углами: $n_z = \cos\theta$, $\theta_0 = \theta(z = 0)$, $\varphi_0 = \varphi(z = 0)$ и $\theta_L = \theta(z = L)$, $\varphi_L = \varphi(z = L)$. Уравнения (ба) принимают следующий вид:

$$2p + K_{2}q^{2} = \begin{cases} \left[\frac{m + K_{2}q\sin^{2}\theta(z)\right]^{2}}{K_{2} + K_{32}\cos^{2}\theta(z)} + \left(K_{1} + K_{31}\cos^{2}\theta(z)\right)\left(\frac{d\theta}{dz}\right)^{2}\sin^{2}\theta(z) \\ \frac{d\phi}{dz} = \frac{m + K_{2}q\sin^{2}\theta(z)}{\left[K_{2} + K_{32}\cos^{2}\theta(z)\right]\sin^{2}\theta(z)}. \tag{8b}$$

Как было показано в [4], если $\theta_0 = \theta_L$, то решение имеет вид $\theta(z) = \theta_0$, $\varphi(z) = \varphi_0 + (\varphi_L - \varphi_0)z/L$. Разумеется, это решение справедливо при произвольных K_1, K_2, K_3 . При $\theta_0 = \pi/2$ это обычная твист-ячейка, даже когда $\varphi_L - \varphi_0 > \pi/2$ (см. рис.2). Рассмотрим стабильность такого решения относительно выхода директора из плоскости (*x*, *y*). С этой целью рассмотрим возмущение $\pi/2 - \theta(z) = \delta << 1$. Тогда, оставляя в уравнениях (8а) только члены до квадратичных по δ включительно, получим

$$2p - \frac{m^2}{K_2} - 2mq = K_1 \left(\frac{d\delta}{dz}\right)^2 + \left[2p - K_3q^2 - \frac{K_3 - K_2}{K_2^2}m^2 - 2mq\frac{K_3}{K_2}\right]\delta^2, \quad (9a)$$



Рис.2. Твист-ячейка жидкого кристалла.

$$\frac{d\varphi}{dz} = \frac{m}{K_2} + q - \left[\frac{m}{K_2^2} \left(K_3 - 2K_2\right) + \frac{K_3 - K_2}{K_2}q\right]\delta^2.$$
(9b)

Эти уравнения следует решить совместно с граничными условиями $\delta(z = 0, L) = 0$ и $\varphi_0 = \varphi(z = 0)$ и $\varphi_L = \varphi(z = L)$. В нулевом приближении из уравнения (9b) получаем

$$\varphi(z) = \left(\frac{m}{K_2} + q\right) z + \varphi_0.$$
⁽¹⁰⁾

Следовательно,

$$\left(\frac{m}{K_2} + q\right)L = \varphi_L - \varphi_0.$$
⁽¹¹⁾

Для того чтобы твист-распределение было стабильно, необходимо, чтобы уравнение (9а) не имело ненулевого решения, для чего достаточно выполнения условия

$$K_3q^2 + \frac{K_3 - K_2}{K_2^2}m^2 + 2mq\frac{K_3}{K_2} \le 2p \le \frac{m^2}{K_2} + 2mq$$

которое выполняется только, если

$$K_{3}q^{2} + \frac{K_{3} - K_{2}}{K_{2}^{2}}m^{2} + 2mq\frac{K_{3}}{K_{2}} \le \frac{m^{2}}{K_{2}} + 2mq .$$
(12)

С учетом (11) получаем

$$\left(qL\right)_{\rm cr} = \frac{2K_2 - K_3}{2K_2} \Delta \varphi \,. \tag{13}$$

Таким образом, исходная твист-ориентация будет устойчивой при толщинах ячейки (или концентрации ХЖК), определяемой условием (13). При малых толщинах ($L < L_{cr}$) имеем устойчивую твист (даже супертвист, если $\Delta \phi > \pi/2$) ориентацию директора, а при больших толщинах ($L > L_{cr}$) молекулы частично выходят из плоскости исходной ориентации.

4. Холестерик с гомеотропными ориентациями на границах

Задача о холестерике с гомеотропым закреплением директора на стенках, т.е. с граничными условиями

$$\mathbf{n}(z=0) = \mathbf{n}(z=L) = \mathbf{e}_z, \qquad (14)$$

была изучена в [1-7]. Здесь же мы найдем условие устойчивости гомеотропной ориентации с помощью законов сохранения для ЖК (см. рис.3). На языке θ условия (14) означают, что $\theta(z = 0, L) = 0$. Из второго уравнения (6) следует, что величина передаваемого момента *m* тождественно равна нулю, если хотя бы на одной границе $\theta = 0$. Тогда система уравнений (6) принимает следующий вид



Рис.3. Ячейки НЖК + ХЖК с гомеотропными ориентациями молекул на границах: (а) при $qL \ll 1$; (b) при $qL \gg 1$.

$$2p + K_2 q^2 = \frac{K_2^2 q^2 \sin^2 \theta(z)}{K_2 + K_{32} \cos^2 \theta(z)} + \left(K_1 + K_{31} \cos^2 \theta(z)\right) \left(\frac{d\theta}{dz}\right)^2, \quad (15a)$$

$$\frac{d\varphi}{dz} = \frac{K_2 q}{K_2 + K_{32} \cos^2 \theta(z)}.$$
(15b)

Тогда в уравнении (15а) однородное гомеотропное решение есть $\theta = 0$. Рассмотрим устойчивость этого решения. Возмущение от стационарного решения есть $\delta = \theta \ll 1$. Здесь также, оставляя в уравнениях (15) только члены до квадратичных по δ включительно, получим

$$K_{3}\left(\frac{d\delta}{dz}\right)^{2} + \frac{K_{2}^{2}}{K_{3}}q^{2}\delta^{2} - \left(2p + K_{2}q^{2}\right) = 0,$$

$$\frac{d\phi}{dz} = \frac{K_{2}q}{K_{3}}\left(1 + \frac{K_{32}}{K_{3}}\delta^{2}\right).$$
 (16)

Из первого уравнения и из граничных условий имеем

$$\delta = \theta = \pm a \sin \frac{K_2 qz}{K_3}, \quad a^2 = \frac{\left(2p + K_2 q^2\right)K_3}{K_2^2 q^2}, \quad \left(qL\right)_{\kappa p} = \frac{\pi K_3}{K_2}.$$
 (17)

Таким образом, при граничных условиях (14) всегда существует решение вида $\mathbf{n} = \mathbf{e}_z$. Однако при выполнении условия $qL > (qL)_{cr}$ это решение оказывается неустойчивым, а новое устойчивое решение дается выражением (17). В [3] проявление такой неустойчивости было названо бесполевым переходом Фредерикса.

5. Влияние наночастиц

Теперь обсудим те изменения в условиях устойчивости гомеотропной и твист- ориентаций, которые возникают при наличии ферроэлектрических удлиненных наночастиц (например, $Sn_2P_2S_6$) с размерами порядка 10×100 нм. Из выше приведенных вычислений очевидно, что члены в уравнениях (6), ответственные за наночастицы, приводят просто к изменению значения "потока импульса" *р*. Они не приводят к какому-либо видоизменению в дальнейших формулах.

Тем самым, присутствие наночастиц не приводит к изменению пороговых значений для устойчивости гомеотропной и твист-ориентаций. Это обстоятельство связано с тем, что взаимодействие молекул наночастиц и ЖК состоит лишь в том, что их диполь-дипольное взаимодействие приводит к улучшению ориентационных упорядоченностей наночастиц и ЖК. Это способствует увеличению скалярного параметра порядка ЖК и, тем самым, возрастанию температуры фазового перехода ЖК–изотропная жидкость [8]. С этим связано также снижение порогов электрического [5] и магнитного [9] переходов Фредерикса. Однако, поскольку в наших задачах упорядоченность ЖК принимаем максимальной, то присутствие наночастиц не приводит к изменению пороговых значений для устойчивости однородных ориентаций директора.

6. Заключение

Таким образом, использование теоремы Нетер для получения законов сохранения помогает не только лучше понять качественную картину равновесной конфигурации деформации жидкого кристалла, но и легко получить условия устойчивости равновесного распределения ориентации директора в целом ряде задач. Наиболее существенная польза возникает при применении теоремы Нетер к задачам, где директор не лежит в какой-то одной плоскости.

Работа выполнена при финансовой поддержке ГКН МОН РА в рамках научного проекта № SCS 13-1C061.

ЛИТЕРАТУРА

- M. Brehm, H. Finkelmann, H. Stegemeyer. Bericht Bunsengens Phys. Chem. Bel., 78, 883 (1974).
- 2. F. Fisher, Z.Narurforsch. 31a, 41 (1976)
- 3. Б.Я. Зельдович, Н.В. Табирян. ЖЭТФ, 83, 998 (1982).
- 4. **Р.С. Акопян, Б.Я. Зельдович.** ЖЭТФ, **83**, 2137 (1982).
- 5. А.А. Кандевосян, Р.С. Акопян. Изв. НАН Армении, Физика, 47, 47 (2012).
- 6. **Б.Я. Зельдович, Н.В. Табирян.** Письма в ЖЭТФ, **34**, 428 (1981).
- 7. Р.С. Акопян, Р.Б. Алавердян, В.В. Саакян, Ю.С. Чилингарян. Кристаллография, 30, 746 (1985).
- 8. O. Buluy, D. Burseva, M.R. Hakobyan, J.W. Goodby, M. Kolosov, Yu. Reznikov, R.S. Hakobyan, K. Slyusarenko, M. Prodanov, V. Vashchenko. Mol. Cryst. Liq. Cryst., 560, 149 (2012).
- 9. М.Р. Акопян, Р.С. Акопян. Изв. НАН Армении, Физика, 46, 180 (2011).

ՆԱՆՈՄԱՄՆԻԿՆԵՐՈՎ ՀԱՐՍՏԱՑՎԱԾ ՀԵՂՈԻԿ ԲՅՈՒՐԵՂԱՅԻՆ ՀԱՐԹ-ԶՈԻԳԱՀԵՌ ԲՋՋՈՒՄ ՀԱՄԱՍԵՌ ԿՈՂՄՆՈՐՈՇՄԱՆ ԿԱՅՈՒՆՈՒԹՅԱՆ ՄԱՍԻՆ

Մ.Ռ. ՀԱԿՈԲՅԱՆ, Ա.Ա. ՂԱՆԴԵՎՈՍՅԱՆ, Ռ.Ս. ՀԱԿՈԲՅԱՆ, Յու.Ս. ՉԻԼԻՆԳԱՐՅԱՆ

Դիտարկված են խնդիրներ՝ քիչ քանակությամբ խոլեստերիկ հեղուկ բյուրեղով (ԽՀԲ) խառնված նեմատիկ ՀԲ-ի մոլեկուլների համասեռ կողմնորոշման կայունության մասին։ Ուսումնասիրված են ՀԲ բջջիջներ՝ սահմանների վրա մոլեկուլների հոմեոտրոպ ու թվիստ կողմնորոշումներով։ Խնդիրները լուծվել են հեղուկ բյուրեղների համար Նյոթերի թեորեմի միջոցով։ Համաձայն այդ թեորեմի, ազատ էներգիայի ինվարիանտությունը տեղափոխության նկատմամբ հանգեցնում է իմպուլսի հոսքի պահպանմանը, իսկ պտտման խմբի նկատմամբ՝ շարժման քանակի մոմենտի հոսքի պահպանմանը։ Այս պահպանման օրենքները կիրառվել են նշված խառնուրդների մոլեկուլների համասեռ կողմնորոշումների կայունության շեմերը որոշելու, ինչպես հան նանոմասնիկների ազդեցությունը գնահատելու համար։

ON THE STABILITY OF HOMOGENOUS ORIENTATION IN THE PLANE-PARALLEL CELL OF A LIQUID CRYSTAL DOPED WITH NANOPARTICLES

M.R. HAKOBYAN, A.A. GHANDEVOSYAN, R.S. HAKOBYAN, Yu.S. CHILINGARYAN

The problems of molecules homogenous orientations stability of nematic liquid crystal (NLC) doped with small amount of cholesteric LC are considered. The LC cell with homeotropic orientation on the wall and the cell with a twist-oriented molecules on the boundaries are studied. The problems are solved using the Noether theorem for LC. The invariance of the form of free energy to translation according to the Noether theorem leads to conservation of the momentum flux, and invariance with respect to the rotation group leads to conservation of the angular-momentum flux. These conservation laws are used to get thresholds of molecules homogenous orientation stability of mentioned mixture and the influence of nanoparticles on this thresholds.

УДК 535.3

ВЛИЯНИЕ ФАЗОВОГО СДВИГА МЕЖДУ ОРТОГОНАЛЬНЫМИ КОМПОНЕНТАМИ ЦИРКУЛЯРНО-ПОЛЯРИЗОВАННОГО СВЕТА В ВИХРЕВОЙ ФАЗОВОЙ ПЛАСТИНЕ НА СТРУКТУРУ ДИФРАГИРОВАННОГО ПУЧКА

А.Е. МАРТИРОСЯН^{*}

Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак, Армения

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

(Поступила в редакцию 16 декабря 2013 г.)

Рассмотрено влияние фазового сдвига между ортогональными компонентами циркулярно-поляризованного света на структуру дифрагированного пучка, образованного вихревой фазовой пластиной на основе среды двулучепреломления. Показано, что при отклонении от идеального фазового сдвига π , структура дифрагированного на фазовой пластине пучка состоит из суперпозиции двух составляющих: вихревого пучка с глубокой ямой и сохранившего свои начальные характеристики падающего пучка. Представлены данные расчетов влияния фазового сдвига на дифракцию в вихревой фазовой пластине для пучков Гаусса и Эйри, которые указывают на чувствительный характер зависимости параметров вихревого пучка даже при малых отклонениях от идеального фазового сдвига. Проанализированы характеристики вихревой фазовой пластины, необходимые для формирования строго вихревого пучка.

1. Введение

Вихревая фазовая пластина (ВФП) на основе среды двулучепреломления (ДП) – это оптический элемент, позволяющий изменять фазу падающего на него циркулярно-поляризованного излучения в зависимости от угловой полярной координаты и получать вихревые пучки различных мод. В качестве среды двулучепреломления для вихревых фазовых пластин в настоящее время применяются жидкие кристаллы и жидкокристаллические полимеры [1-3]. Вихревые пучки используються для оптического захвата и манипуляций микрочастицами [4,5] и атомами [6,7]. Эти пучки также могут быть использованы для обнаружения планет вне солнечной системы. Для отображения такой планеты основной проблемой является подавление света звезды, вокруг которой она вращается. Дело в том, что яркость звезды в миллионы раз больше яркости соответствующей планеты, и это обстоятельство препятствует ее обнаружению. Для подавления яркости изображения звезды в последние годы были предложены коронографы на основе вихревой фазовой пластины [8]. В работе [9], с помощью использования оптических вихрей, исследовалось разделение двух независимых световых пучков в области дифракционного предела. Основываясь на численных вычислениях, был получен критерий коронографа для второй геликоидальной моды [10]. Вихревые пучки используются также в микроскопии так называемого вынужденного ослабления излучения (stimulated emission depletion – STED) [11]. Применение STED позволяет преодолевать дифракционный предел в флуоресцентной микроскопии и получать изображения с разрешением 25 нм [12]. Кроме того, в работе [13] предложено использовать вихревые пучки для литографии с высоким разрешением, которое может достигать 1/13 от длины волны используемого лазерного излучения. Следует констатировать, что практически в каждом из вышеперечисленных применений важным условием является обеспечение низкой интенсивности света в приосевых областях вихревого пучка, т.е. в области ямы. Следовательно, обнаружение и исследование причин, приводящих к ухудшению параметров вихревого пучка, является важной практической задачей.

2. Прохождение циркулярно-поляризованного света через ВФП ДП

Рассмотрим прохождение циркулярно-поляризованного света через ВФП ДП с угловой ориентацией микроструктур среды $\alpha = k\varphi$, где k – целое или поуцелое число (порядок полярного вектора), φ – полярный угол. На рис.1 для примера представлен случай, когда k = 1, что соответствует геликоидальной моде m = 2 (т.к. геликоидальная мода равна удвоенному значению порядка полярного вектора фазовой пластины). Подчеркнем однако, что дальнейшие рассуждения действительны также для любого k. Проследим за поведением светового луча с круговой поляризацией с компонентами амплитуды E_{x0} и E_{y0}



Рис.1. Прохождение циркулярно-поляризованного светового луча с компонентами поляризации амплитуды E_{x0} и E_{y0} по осям x и y, падающего на произвольную точку D с координатой полярного угла φ на поверхности ВФП ДП с осью в O_1 , с k = 1 (m = 2) и с ориентацией микроструктур среды α (на рисунке показана только четвертая часть поверхности фазовой пластины круговой формы).

по осям x и y, падающим на произвольную точку D поверхности фазовой пластины с ориентацией микроструктур среды α . Если амплитуда волны вращается против часовой стрелки, то x- и y-компоненты, соответственно, осциллируют на входной поверхности фазовой пластины во времени t' как -sin($2\pi ct'/\lambda$) и $\cos(2\pi ct'/\lambda)$, где c – скорость света, а λ – длина волны падающего пучка.

Элементарный расчет показывает, что *x*-компонента амплитуды падающего луча E_{x0} на выходе фазовой пластины расщепляется на *x*- и *y*-компоненты, которые осциллируют во времени следующим образом:

$$E_{x1} = -\sin^2 \alpha \sin(\beta + \frac{\gamma}{2}) + \cos^2 \alpha \sin(\beta - \frac{\gamma}{2}), \qquad (1)$$

$$E_{y1} = -\sin\alpha\cos\alpha\sin(\beta + \frac{\gamma}{2}) - \sin\alpha\cos\alpha\sin(\beta - \frac{\gamma}{2}), \qquad (2)$$

Здесь $\beta = 2\pi ct/\lambda$ – временное изменение фазы луча на выходной поверхности пластины. Принимая во внимание, что строго вихревые пучки образуются при фазовом сдвиге π между ортогональными компонентами поляризации светового луча на выходе ВФП ДП, в уравнениях (1),(2) γ характеризует фазовое отклонение от идеального фазового сдвига для формирования строго вихревых пучков.

В то же время у-компонента амплитуды падающего луча E_{y0} на выходе фазовой пластины расщепляется на следующие *x*- и у-компоненты:

$$E_{x2} = \sin\alpha\cos\alpha\cos(\beta + \frac{\gamma}{2}) + \sin\alpha\cos\alpha\cos(\beta - \frac{\gamma}{2}), \qquad (3)$$

$$E_{y2} = \cos^2 \alpha \cos(\beta + \frac{\gamma}{2}) - \sin^2 \alpha \cos(\beta - \frac{\gamma}{2}).$$
(4)

Из уравнений (1)-(4), после элементарных преобразований, можно получить *x*- и *y*-компоненты поляризации прошедшего через фазовую пластину луча на ее выходной поверхности:

$$E_{x} = E_{x1} + E_{x2} = \cos\frac{\gamma}{2}\sin(2\alpha + \beta) - \sin\frac{\gamma}{2}\cos\beta, \qquad (5)$$

$$E_{y} = E_{y1} + E_{y2} = \cos\frac{\gamma}{2}\cos(2\alpha + \beta) - \sin\frac{\gamma}{2}\sin\beta.$$
(6)

Таким образом, на выходной поверхности фазовой пластины каждая из *x*- и *y*-компонент поляризации луча состоит из двух членов, которые характеризуют два совершенно различных состояния света. При $\gamma = 0$ (или кратном 2π) «работают» только члены, зависящие от ориентации микроструктур среды α . Если же $\gamma = \pi, \pm 3\pi, \pm 5\pi$ (и т.д.), то наоборот: «работают» только члены, не зависящие от α . В результате, в случае идеального фазового сдвига π (т.е. $\gamma = 0$) в ВФП ДП между ортогональными компонентами амплитуды световой луч с круговой поляризацией меняет начальное направление вращения поляризации: с начальным вращением поляризации против часовой стрелки на вращение по часовой стрелке и наоборот. Кроме того, в случае идеального фазового сдвига ($\gamma = 0$) фаза светового луча с круговой поляризацией является строго геликоидальной. А если $\gamma = \pi$, то световой луч вообще не содержит геликоидальной составляющей.

При отклонении фазового сдвига от π или от нуля, относительная интенсивность световой волны E^2 на выходе фазовой пластины в произвольной точке *D* изменяется во времени следующим образом:

$$E^{2} = E_{x}^{2} + E_{y}^{2} = 1 - \sin\gamma\sin(2\alpha + 2\beta).$$
(7)

На рис.2 представлено изменение интенсивности световой волны на выходе ВФП ДП при $\alpha = 0$. Жирная сплошная линия соответствует случаям, когда интенсивность постоянна, что происходит при $\gamma = 0$ или $\gamma = \pi$. Как было уже сказано, в первом случае образуется строго геликоидальный пучок, а во втором – падающий пучок полностью сохраняет свои начальные характеристики. Тонкая сплошная кривая соответствует случаю, когда $\gamma = \pi/8$, а штриховая – $\gamma = \pi/2$. Следует подчеркнуть, что с изменением α интенсивность световой волны на выходе ВФП ДП сохраняет форму распределения во времени и просто смещается по оси β влево или вправо.



Рис.2. Временное изменение интенсивности световой волны на выходе ВФП ДП при идеальном фазовом сдвиге π (т.е. при $\gamma = 0$) или при отсутствии фазового сдвига $\gamma = \pi$ (жирная сплошная линия), при $\gamma = \pi/8$ (тонкая сплошная кривая) и при $\gamma = \pi/2$ (штриховая кривая).

3. Пространственное распределение дифракции гауссового пучка на ВФП ДП при различных значениях фазового сдвига

Аналитические соотношения для параксиальной дифракции Френеля и Фраунгофера на фазовой пластине для произвольного *m* при использовании падающего гауссового пучка были получены в [14]. Для исследования характеристик дифрагированных на оптических элементах световых пучков была разработана программа для вычисления интеграла Френеля в случае дифракции света на аксиконах [15,16], которая в настоящей работе была изменена и применена для изучения дифракции пучков на ВФП ДП:

$$A_{x,y}(R,\lambda,z,h,k,\gamma) = \frac{iA_0}{\lambda z} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{0}^{\infty} r \exp(-\frac{r^2}{R^2}) E_{x,y}(k,\phi,\gamma) \exp(-\frac{2i\pi z'}{\lambda}) d\phi dr.$$
(8)

Здесь A_0 – амплитуда падающего на ВФП ДП гауссового пучка на оси, λ и R – длина волны и радиус пучка, r и φ – радиальная и угловая координаты произвольной точки D на фазовой пластине (рис.3), z – расстояние между пластиной и плоскостью наблюдения, h – радиальная координата точки наблюдения P, z' – расстояние между произвольной точкой D на фазовой пластине и точкой наблюдения P, $A_{x,y}(R, \lambda, z, h, k, \gamma) – x$ - и у-компоненты амплитуды дифрагированного пучка на расстоянии z от пластины и на радиальном рестоянии h от центра плоскости наблюдения, $E_{x,y}(k, \varphi, \gamma) - x$ - и у-компоненты поляризации светового луча на выходной плоскости ВФП ДП, которые определяются из уравнений (5),(6).



Рис.3. Схема дифракции падающего светового пучка на ВФП ДП. r и φ – радиальная и угловая координаты произвольной точки D на фазовой пластине с осью в O_1 , z – расстояние между пластиной и плоскостью наблюдения, h – радиальная координата точки наблюдения P относительно оси распространения дифрагированного пучка O_2 , z' – расстояние между произвольной точкой D на фазовой пластине и точкой наблюдения P.

С помощью тригонометрических функций мы можем вычислить расстояние *z*':

$$z' = \sqrt{z^2 + r^2 + h^2 - 2rh\cos\phi} \,. \tag{9}$$

Для более удобного представления уравнения (8) можно использовать следующие нормализованные величины: $W = R/\lambda$, H = h/R, Z = z/R, w = r/R. С вводом этих соотношений в уравнение (8), *x*- и *y*-компоненты амплитуды дифрагированного пучка утрачивают зависимость от четырех величин с размерностью длины (R, λ , z и h) и, вместо этого, приобретают зависимость лишь от трех безразмерных переменных W, Z и H, что позволяет значительно унифицировать различные возможные случаи распределения $A_{x,y}$:

$$A_{x,y}(W,Z,H,k,\gamma) =$$

$$= iA_0W \int_{-\pi}^{\pi} \int_{0}^{\infty} \frac{w}{Z} \exp(-w^2) E_{x,y}(k,\phi,\gamma) \exp[-2i\pi W \sqrt{Z^2 + w^2 + H^2 - 2wH\cos\phi}] d\phi dw.$$
(10)

На рис.4 показаны распределения относительной интенсивности гауссового пучка, дифрагированного на ВФП ДП с полярным вектором k = 5 (m = 10) при W = 800, Z = 1000 как в случае идеального фазового сдвига $\gamma = 0$ (сплошная кривая), так и при отсутствии фазового сдвига $\gamma = \pi$ (пунктирная кривая). В случае идеального фазового сдвига ($\gamma = 0$) образуется строго геликоидальный пучок с глубокой ямой. А при отсутствии фазового сдвига ($\gamma = \pi$), как и следовало ожидать, падающий гауссовый пучок полностью сохраняет свои характеристики – без образования геликоидального пучка.



Рис.4. Распределение относительной интенсивности гауссового пучка, дифрагированного на ВФП ДП с полярным вектором k = 5 (m = 10) при W = 800, Z = 1000 для идеального фазового сдвига $\gamma = 0$ (сплошная кривая) и при отсутствии фазового сдвига $\gamma = \pi$ (штриховая кривая, шкала интенсивности уменьшена на порядок).

Распределения относительной интенсивности гауссового пучка, дифрагированного на ВФП ДП с k = 5 (m = 10) при W = 800, Z = 1000 в случаях наложения геликоидального и гауссового пучков, когда γ не равно нулю или целому π , показаны на рис.5: при $\gamma = \pi/16$ (пунктирная кривая) и $\gamma = \pi/32$ (сплошная кривая). Сравнение экспериментальных данных [2] с расчетной кривой распределения интенсивности вихревого пучка по радиальной координате указыват на то, что на практике удается достигать значений для γ лишь порядка $\pi/32$.

Как уже было сказано, для различных прикладных целей весьма важно исследовать характеристики области ямы геликоидального пучка. В качестве параметра глубины ямы можно использовать фактор контрастности F_{max}/F_H , где F_H является интенсивностью дифрагированного пучка в яме в заданной точке H, а F_{max} представляет собой максимальную интенсивность распределения ди-



Рис.5. Распределение относительной интенсивности гауссового пучка, дифрагированного на ВФП ДП с k = 5 (m = 10) при W = 800, Z = 1000 в случаях, когда $\gamma = \pi/16$ (штриховая кривая) и $\gamma = \pi/32$ (сплошная кривая).

фракции. На рис.6 представлено распределение фактора контрастности от величины γ при H = 0.5 (пунктирная кривая) и H = 0.8 (сплошная кривая). Данные соответствуют случаю, когда используется ВФП ДП с k = 5 (m = 10) при W = 800, Z = 1000. Очевидно, что фактор контрастности очень чувствителен к малейшим изменениям фазового сдвига между ортогональными компонентами циркулярно-поляризованного света в ВФП ДП. Следовательно, исходя из полученных результатов можно констатировать, что для сохранения фактора контрастности геликоидального пучка хотя бы на уровне $10^4 \div 10^5$ отклонение от идеального фазового сдвига не должно превышать $\gamma = 0.001\pi$.



Рис.6. Зависимость фактора контрастности F_{max}/F_H от γ для H = 0.5 (пунктирная кривая) и H = 0.8 (сплошная кривая). Данные соответствуют случаю, когда используется гауссовый пучок, который проходит через ВФП ДП с k = 5 (m = 10) при W = 800, Z = 1000.

4. Пространственное распределение дифракции пучка Эйри на ВФП ДП при различных значениях фазового сдвига

В случае исследования звезды телескопом с круговой апертурой, с угловым разрешением хуже, чем угловой диаметр наблюдения звезды, отображается диск Эйри, который состоит из центрального яркого круга, окруженного гораздо менее яркими кольцами. Интенсивность света в диске Эйри *I_r* в зависимости от радиальной нормированной координаты *w* распределяется как [17]

$$I_r = I_0 \left[\frac{2J_1(bw)}{bw} \right]^2, \tag{11}$$

где I_0 – интенсивность света в центре изображения, $J_1(bw)$ – функция Бесселя первого рода и первого порядка, b – постоянная, которая характеризует масштаб шкалы нормированной радиальной координаты. Для сравнения результатов с данными, полученными в предыдущем разделе, определим радиус пучка Эйри как расстояние от его центра до точки, где амплитуда излучения падает в e раз (что имеет место и в случае распределения гауссового пучка). Расчеты показывают, что это осуществляется при b = 2.584.

Распределения относительной интенсивности дифрагированного на ВФП ДП с k = 5 (m = 10) пучка Эйри при W = 800, Z = 1000 в случаях идеального фазового сдвига $\gamma = 0$ (сплошная кривая) и при отсутствии фазового сдвига $\gamma = \pi$ (пунктирная кривая) представлены на рис.7. В отличие от дифракции гауссового пучка на ВФП ДП, распределение дифракции пучка Эйри приобретает модуляцию в области ямы вихревого пучка, связанную с особенностью распределения пучка Эйри, т.е. с наличием колец с нулевой интенсивностью. На рис.8 показано распределение фактора контрастности от величины γ при H = 0.5



Рис.7. Распределение относительной интенсивности пучка Эйри, дифрагированного на ВФП ДП с k = 5 (m = 10) при W = 800, Z = 1000 для идеального фазового сдвига $\gamma = 0$ (сплошная кривая) и при отсутствии фазового сдвига $\gamma = \pi$ (штриховая кривая, шкала интенсивности уменьшена на порядок).



Рис.8. Зависимость фактора контрастности $F_{max}F_H$ от γ для H = 0.5 (пунктирная кривая) и H = 0.8 (сплошная линия). Данные соответствуют случаю, когда используется пучок Эйри, который проходит через ВФП ДП с k = 5 (m = 10) при W = 800, Z = 1000.

(пунктирная кривая) и H = 0.8 (сплошная линия) при использовании фазовой пластины с k = 5 (m = 10) при W = 800, Z = 1000. Уменьшение этого фактора при H = 0.8 даже при идеальном фазовом сдвиге связана с модуляцией интенсивности вихревого пучка и образованием локального максимума интенсивности в области $H = 0.8 \div 1$ (см. рис.7).

5. Заключение

В настоящей работе показано, что для получения строго геликоидального пучка и увеличения фактора контрастности следует обеспечить близкий к идеальному фазовый сдвиг π (т.е. $\gamma \rightarrow 0$) между ортогональными компонентами циркулярно-поляризованного света. Если разность коэффициентов преломления в ВФП ДП между обыкновенным и необыкновенным лучами составляет Δn , то максимально допустимое отклонение Δs толщины двулучепреломляюшей среды определяется из формулы $2\pi\Delta n\Delta s/\lambda = \gamma$, где γ в данном случае характеризует необходимую точность фазового сдвига для соответствующей цели. Отсюда следует, что Δs обратно пропорционален значению Δn : $\Delta s = \lambda \gamma/2\pi\Delta n$. Например, если $\gamma = 0.001\pi$, $\lambda = 1$ мкм, то при $\Delta n = 0.01$ получаем $\Delta s = \pm 50$ нм, а при Δn = 0.1 допустимая погрешность для Δs составляет ± 5 нм. Следовательно, чтобы обеспечить формирование строго геликоидальных пучков, следует выбрать среду для ВФП ДП с небольшим значением Δn , что приведет к увеличению толщины фазовой пластины.

Остановимся также на вопросе определения фактора контрастности. Дело в том, что в этом контексте, в некоторых приложениях (например, в коронографии) следует ориентироваться на осевое значение интенсивности падающего пучка ($I_0 \sim A_0^2$) вместо F_{max} . Следует иметь в виду, что величина «осевого» фактора контрастности, определяемого с точки зрения «опустошения» световой энергии падающего излучения в приосевых областях с помощью вихревых фазовых пластин – I_0/F_H , может значительно превосходить значение F_{max}/F_H . Например, как следует из рис. 4 и 7, «осевой» фактор контрастности превосходит величину F_{max}/F_H в 20 и 12 раз, соответственно.

ЛИТЕРАТУРА

- 1. L. Marrucci, C. Manzo, D. Paparo. Phys. Rev. Lett., 96, 163905 (2006).
- N.V. Tabiryan, S.R. Nersisyan, H. Xianyu. Fabricating Vector Vortex Waveplates for Coronagraphy, Aerospace Conference, IEEE, 1 (2012).
- 3. S.R. Nersisyan, N.V. Tabiryan, D. Mawet, E.Serabyn. Opt. Express, 21, 8205 (2013).
- 4. K.T. Gahagan, G.A. Swartzlander. JOSA B, 16, 533 (1999).
- 5. D.G. Grier. Nature, 424, 810 (2003).
- 6. T. Kuga, Y. Torii, N. Shiokawa, et al. Phys. Rev. Lett., 78, 4713 (1997).
- 7. D.P. Rhodes, D.M. Gherardi, J. Livesey, et al. Journal of Modern Optics, 53, 547 (2006).
- 8. G. Foo, D.M. Palacios, G.A. Swartzlander. Opt. Lett., 30, 3308 (2005).
- 9. F. Tamburini, G. Anzolin, G. Umbriaco, et al. Phys. Rev. Lett., 97, 163903 (2006).
- 10. E. Mari, F. Tamburini, G.A. Swartzlander, et al. Opt. Express, 20, 2445 (2012).
- 11. P. Dedecker, J. Hofkens, J. Hotta. Materials Today, 11, 12 (2008).
- 12. B. Harke, J. Keller, C.K. Ullal, et al. Opt. Express, 16, 4154 (2008).
- 13. R. Menon, H. I. Smith. JOSA A, 23, 2290 (2006).
- 14. В.В. Котляр, А.А. Ковалев, Д. Коджек, и др. Компьютерная оптика, 30, 30 (2006).
- 15. A.E. Martirosyan, C. Altucci, C. DeLisio, et al. JOSA A, 21, 770 (2004).
- 16. **А.Е. Мартиросян.** Изв. НАН Армении, Физика, **43**, 182 (2008).
- 17. J.E. Greivenkamp. Field Guide to Geometrical Optics, SPIE press book, FG01, 88 (2004).

INFLUENCE OF RETARDATION BETWEEN ORTHOGONAL COMPONENTS OF CIRCULARLY POLARIZED LIGHT IN A VORTEX PHASE PLATE ON THE STRUCTURE OF DIFFRACTION PATTERN

A.E. MARTIROSYAN

The influence of retardation between orthogonal components of circularly polarized light on diffraction pattern generated by the vortex phase plate with a birefringence medium is considered. It is shown that if the ideal retardation π is broken, the pattern diffracted from the phase plate is described by superposition of two components: the vortex beam with the deep hole and the incident beam which preserves its initial characteristics. The computation results characterizing the influence of retardation on the Gaussian and Airy beams transformation in the vortex phase plate is presented. These results point out that vortex beam characteristics are very sensitive to retardation shift from its ideal value. We analyze and present the characteristics of the vortex phase plate that are required for the true vortex pattern generation. УДК 539.2

АМПЛИТУДЫ МНОГОКАНАЛЬНОГО РАССЕЯНИЯ НА БАРЬЕРЕ, ИМЕЮЩЕМ ПОСТОЯННУЮ ВЫСОТУ В НАПРАВЛЕНИИ РАССЕЯНИЯ

Д.М. СЕДРАКЯН, Л.Р. СЕДРАКЯН*

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

*e-mail: lyovsed@yahoo.com

(Поступила в редакцию 29 января 2014 г.)

Метод погружения применен для решения задачи *N*-канального рассеяния. В частности, рассмотрено рассеяние частицы на многомерном барьере, который постоянен в направлении рассеяния и произволен в поперечном направлении. Для этого случая определены амплитуды рассеяния частицы t_m и r_m (m = 1, 2, ..., N). С помощью полученных формул сделан переход к случаю тонкого рассеивающего потенциала. Для этого случая получены аналитические выражения для амплитуд прохождения t_m и отражения r_m . Предполагается, что рассеивающая частица падает на потенциал с продольным волновым вектором \mathbf{k}_l , соответствующим каналу с индексом l.

1. Введение

В последнее время в связи с возрастающими возможностями нанотехнологий по созданию низкоразмерных структур стало возможным создание структур с произвольными, наперед заданными структурными особенностями. Интенсивное исследование физических свойств одномерных и квазиодномерных низкоразмерных структур началось примерно с середины 70-ых годов, когда стало возможным осуществление так называемых сверхрешеток – периодических систем, образованных чередованием двух или нескольких структурных элементов. Современные технологические возможности позволяют получить системы, обладающие более сложной структурой. Это так называемые низкоразмерные апериодические образования, для которых периодичность расположения структурных элементов, приготовленных из одного материала, нарушена. В настоящее время идет интенсивное исследование физических свойств низкоразмерных систем со сложной структурой. Теоретическое исследование низкоразмерных структур и волн, распространяющихся в них, является сложной математической задачей. К настоящему времени развит целый ряд точных и приближенных методов для описания волн в одномерных и квазиодномерных средах. Перечислим наиболее известные из них: теория возмущений, метод трансфер-матриц, метод погружения, метод фазовых функций и метод функции Грина [1-5].

Можно утверждать, что до сих пор общих и точных теоретических под-

ходов для рассмотрения задач данного класса в двух- и трехмерных постановках еще не существует. Даже в рамках приближенных методов получение окончательного результата требует выполнения большого количества численных расчетов. Для подобных задач в работе [6] был разработан новый метод, который фактически является обобщением метода погружения. Этот метод построен на предложенном в работах [7-9] рассмотрении квазиодномерного рассеяния волн на двухмерных и трехмерных потенциалах. В работе [10] с помощью этого метода было исследовано многоканальное квазиодномерное рассеяние квантовой частицы на произвольном двумерном потенциале.

В общем случае можно рассматривать рассеяние квантовой частицы, падающей на потенциал вида $V(x, y, z) = V_1(z)V_2(x, y)$, где функции V_1 и V_2 произвольны. Ограниченность движения в направлении, поперечном к направлению рассеяния z, обеспечивается заданием бесконечного потенциала на плоскости кругового цилиндра в случае трехмерной задачи с потенциалом $V_2 = V_2(x, y)$ и на плоскостях y = 0 и y = c в случае двумерной задачи с потенциалом $V_2 = V_2(y)$. Ограничение движения в поперечной к рассеянию плоскости приводит к появлению дискретных энергетических уровней, число которых в общем случае бесконечно. Однако в зависимости от начальной продольной и поперечной энергии частицы энергетические уровни выше некоторого уровня не могут возбудиться из-за конечности начальной энергии частицы. В конце отметим, что в работе [10] предполагалось, что поперечное движение частицы, падающей на двумерный потенциал, соответствует наинизшему энергетическому уровню, и в зависимости от продольного импульса частицы возбуждается только N наинизших энергетических состояний поперечного движения.

В настоящей работе исследуется многоканальное рассеяние квантовой частицы, когда при падении на потенциал она находится на произвольном энергетическом уровне, описывающемся индексом *l*. В зависимости от начальной энергии частицы может возбуждаться конечное число уровней выше начального уровня и все нижележащие энергетические уровни. Важно, что число возбужденных энергетических уровней (или каналов рассеяния) конечно. В данной работе мы рассматриваем задачу рассеяния частицы на барьере, высота которого постоянна в направлении рассеяния и произвольна в перпендикулярном направлении. Результатом исследования будет получение амплитуд прохождения $t_1, t_2, ..., t_N$ и отражения $r_1, r_2, ..., r_N$ многоканального рассеяния.

2. Метод определения амплитуд рассеяния

Рассмотрим, в частности, многоканальное рассеяние квантовой частицы на потенциале $V(x, y, z) = V_1(z)V_2(x, y)$, где

$$V_1(z) = \begin{cases} K, & a \le z \le b, \\ 0, & a > z > b. \end{cases}$$
(1)

Здесь К – постоянная, а V₂(x, y) – произвольная функция, удовлетворяющая

условиям $V_2 = \infty$ на поверхности кругового цилиндра в случае трехмерной задачи и $V_2(0) = V_2(c) = \infty$ в случае двумерной задачи. Согласно работе [10], для получения амплитуд многоканального рассеяния необходимо решить следующую систему линейных дифференциальных уравнений относительно функций $L_1(z), L_2(z), \dots, L_N(z)$:

$$\frac{d^2 L_m(z)}{dz^2} + q_m^2 L_m(z) - \sum_{i \neq m}^N V_{mi} L_i(z) = 0, \quad m = 1, 2, \dots, N,$$
(2)

где

$$q_{m}^{2} = k_{m}^{2} - V_{mm}, \quad k_{m}^{2} = \chi^{2} - \chi_{m},$$

$$V_{mi} = K \int \Phi_{m}^{*} V_{2}(x, y) \Phi_{i} dx dy.$$
(3)

Здесь индексы *m* описывают дискретные состояния поперечного движения рассеивающейся частицы, а $\Phi_m(x, y)$ есть собственные функции этих состояний. В частности, при рассмотрении трехмерной задачи индекс *m* соответствует индексам *l* и *n*, и собственная функция $\Phi_m = \Phi_{n,l}(\rho) \cos l\varphi$, где

$$\Phi_{n,l}(\rho) = \frac{I_l(\chi_{nl}\rho)}{a\sqrt{\pi}I_{l+1}(\chi_{nl}a)}.$$
(4)

Здесь $I_l(\chi_{nl}\rho)$ – цилиндрические функции Бесселя, а величины χ_{nl} определяются из условий $I_l(\chi_{nl}a) = 0$, где a – радиус сечения цилиндра. Матрица $V_{mi}(z)$ в этом случае имеет вид

$$V_{nl}^{n'l'} = K \int_{0}^{a} \rho d\rho \Phi_{nl}(\rho) \Phi_{n'l'}(\rho) \int_{0}^{2\pi} d\varphi V_2(\rho,\varphi) \cos l\varphi \cos l'\varphi,$$
(5)

где индекс m, как отмечено выше, соответствует паре индексов n, l, а индекс i – паре индексов n', l'.

При рассмотрении двумерной задачи индексу *m* соответствуют собственные функции

$$\Phi_m = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi}{my}\right), \quad m = 1, 2, \dots, N,$$
(6)

И

$$V_{mi} = K \int_{0}^{c} \Phi_{m}^{*}(y) V_{2}(y) \Phi_{i}(y) dx dy.$$

Система уравнений (2) интегрируется до точки z = b со следующими граничными условиями в точке a [10]:

$$L_{l}(a) = -e^{-ik_{l}a}, \qquad \frac{dL_{l}(z)}{dz}\Big|_{z=a} = ik_{l}e^{-ik_{l}a},$$

$$L_{m}(a) = \frac{dL_{l}(z)}{dz}\Big|_{z=a} = 0 \quad \text{при} \quad m \neq l \quad \text{и} \quad m = 1, 2, \dots, N.$$
(7)

Обозначим значения функций $L_1(z), L_2(z), ..., L_N(z)$ в точке z = b через L_1 ,

 $L_2, ..., L_N$. Амплитуды рассеяния определяются величинами $D_1, D_2, ..., D_N$ и $\tilde{D}_1, \tilde{D}_2, ..., \tilde{D}_N$, которые связаны с значениями функций $L_m(z)$ и их первых про-изводных в точке z = b следующими соотношениями [10]:

$$\tilde{D}_{m} = \frac{1}{2} (L_{m} + M_{m}) e^{-ik_{m}b}, \quad m = 1, 2..., N,$$

$$D_{m} = \frac{1}{2} (M_{m} - L_{m}) e^{ik_{m}b}, \quad m = 1, 2..., N,$$
(8)

где

$$M_m = \frac{1}{ik_m} \frac{dL_m(z)}{dz} \bigg|_{z=b}.$$

Согласно работе [11], амплитуды рассеяния t_m и r_m выражаются через D_m и \tilde{D}_m следующими формулами:

$$t_{l} = \frac{D_{l}^{*}}{|D|^{2}}, \qquad r_{l} = \frac{(D_{l}\tilde{D}_{l})^{*}}{|D_{l}||D|},$$

$$t_{m} = \frac{D_{m}^{*}}{|D|^{2}}, \qquad r_{m} = \frac{\tilde{D}_{m}^{*}}{|D|}, \qquad m = 1, 2, ..., N,$$
(9)

где

$$|D|^{2} = |D_{l}|^{2} + \sum_{m \neq l} \frac{k_{m}}{k_{l}} |D_{m}|^{2}.$$

Если ввести перенормированные амплитуды прохождения T_m и отражения R_m по формулам

$$T_m = \sqrt{\frac{k_m}{k_l}} t_m \quad \text{i} \quad R_m = \sqrt{\frac{k_m}{k_l}} r_m, \tag{10}$$

то, как увидим ниже, полная вероятность прохождения $|T|^2 = \sum_m |T_m|^2$ и отражения $|R|^2 = \sum_m |R_m|^2$ связаны друг с другом естественным соотношением $|T|^2 + |R|^2 = 1$. В конце отметим, что величина |D|, входящая в определения t_m и r_m , связана с вероятностью прохождения барьера простой формулой |D| = 1/|T|.

Таким образом, интегрируя систему дифференциальных уравнений (2) и определяя величины L_m и M_m , можно определить амплитуды многоканального рассеяния t_m и r_m .

3. Решения системы уравнений для функции L_m(z)

Решение системы уравнений (2) будем искать в следующем виде:

$$L_{m}(z) = \sum_{i=1}^{N} A_{mi}^{l} \exp(i\chi_{i}(z-a)),$$
(11)
где χ_i – еще не определенные постоянные, а индекс *l* на коэффициентах A_{mi}^l показывает, что частица при встрече с рассеивающим потенциалом находится на энергетическом уровне, описывающемся индексом *l*. Коэффициенты A_{mi}^l определяются из алгебраических уравнений, которые получаются при подстановке решения (11) в систему уравнений (2). Если ввести обозначения

$$\tilde{V}_{mm} = \chi_i^2 - q_m^2 = \chi_i^2 - k_m^2 + V_{mm}$$

то система полученных алгебраических уравнений примет вид

$$\tilde{V}_{11}A_{1i}^{l} + V_{12}A_{2i}^{l} + \dots + V_{1N}A_{Ni}^{l} = 0,$$
.....
$$V_{l1}A_{1i}^{l} + \dots + \tilde{V}_{ll}A_{li}^{l} + \dots + V_{lN}A_{Ni}^{l} = 0,$$
....
$$V_{N1}A_{1i}^{l} + V_{N2}A_{2i}^{l} + \dots + \tilde{V}_{NN}A_{Ni}^{l} = 0.$$
(12)

Система уравнений (12) имеет отличные от нуля решения для тех χ_i , которые являются решениями уравнения

$$D_{1} = \begin{vmatrix} \tilde{V}_{11}, V_{12}, \dots V_{1N} \\ \dots \\ V_{l1}, \dots \tilde{V}_{ll}, \dots V_{lN} \\ \dots \\ V_{N1}, V_{N2}, \dots \tilde{V}_{NN} \end{vmatrix} = 0,$$
(13)

где D_1 есть детерминант системы уравнений (12). Обозначим многообразие решений χ_i через $\pm Q_i$, где Q_i – положительная величина и равняется 2*N*. Здесь мы предполагаем, что полученные корни уравнения (13) отличаются друг от друга. Если корни повторяются, то решение строится другим образом.

Если выполняется условие (13), то из системы уравнений (12) можно определить только величины

$$C_{mi}^{l} = \frac{A_{mi}^{l}}{A_{li}^{l}} \,. \tag{14}$$

Система уравнений, определяющая C_{mi}^l , имеет вид

$$\tilde{V}_{11}C_{1i}^{l} + \ldots + V_{1N}C_{Ni}^{l} = -V_{1l},$$
.....
$$V_{N1}C_{1i}^{l} + \ldots + \tilde{V}_{NN}C_{Ni}^{l} = -V_{Nl}.$$
(15)

Решение системы уравнений (15) имеет вид

$$C_{mi}^{l} = \frac{D_2(m)}{D_2},$$
 (16)

где детерминанты *D*₂ есть

$$D_{2} = \begin{vmatrix} \tilde{V}_{11} \dots V_{1N} \\ \dots \\ V_{N1} \dots \tilde{V}_{NN} \end{vmatrix},$$
(17)

а $D_2(m)$ – это детерминант D_2 , только вместо столбца из коэффициентов C'_{mi} взят столбец, состоящий из правой части системы уравнений (15).

Запишем решение (11) в следующем виде:

$$L_{l}(z) = \sum_{i=1}^{N} \{A_{li}^{l} \exp(iQ_{i}(z-a)) + B_{li}^{l} \exp(-iQ_{i}(z-a))\},$$

$$L_{m}(z) = \sum_{i=1}^{N} C_{mi}^{l} \{A_{li}^{l} \exp(iQ_{i}(z-a)) + B_{li}^{l} \exp(-iQ_{i}(z-a))\}.$$
(18)

Здесь мы раздельно написали члены с положительным и отрицательным корнями: $\chi_i = \pm Q_i$, и для первого случая использовали коэффициенты A_{mi}^l , а для второго случая ввели коэффициенты B_{mi}^l . Нам нужны также выражения для производных функций $L_m(z)$. Подставляя (18) и их производные в граничные условия решения (7), получим

$$\sum_{i=1}^{N} F_{li}^{+} = -\exp(-ik_{l}a), \qquad \sum_{i=1}^{N} C_{mi}^{l} F_{li}^{+} = 0, \qquad m \neq l \qquad m = 1, 2, ..., N,$$

$$\sum_{i=1}^{N} F_{li}^{-} = -\exp(-ik_{l}a), \qquad \sum_{i=1}^{N} C_{mi}^{l} F_{li}^{-} = 0, \qquad m \neq l \qquad m = 1, 2, ..., N,$$
(19)

где

$$F_{li}^{+} = A_{li}^{l} + B_{li}^{l}, \quad F_{li}^{-} = -\frac{Q_{i}}{k_{l}} \Big(A_{li}^{l} - B_{li}^{l} \Big).$$
(20)

Величины F_{li}^+ и F_{li}^- связаны очевидным соотношением

$$F_{li}^{+} = A_{li}^{l} + B_{li}^{l} = -\frac{Q_{i}}{k_{l}} \left(A_{li}^{l} - B_{li}^{l} \right) = F_{li}^{-}.$$
 (21)

Следовательно, для дальнейших вычислений достаточно найти только величину F_{li}^+ . Эта величина находится из решения системы уравнений (19) и имеет вид:

$$F_{li}^{+} = \frac{\left(-1\right)^{l} d_{i} \exp(-ik_{l}a)}{D_{3}},$$
(22)

где $D_3 = -\sum_{i=1}^{N} (-1)^i d_i$ и d_i есть детерминант, который состоит из матричных элементов C_{Ni}^l без *i*-того столбца. Далее, решая систему уравнений (20), окончательно получим

$$A_{li}^{l} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{k_{l}}{Q_{i}} \right) F_{li}^{+}, \qquad B_{li}^{l} = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{k_{l}}{Q_{i}} \right) F_{li}^{+}.$$
(23)

Подставляя (23) в решение (18), для функций $L_m(z)$ и $M_m(z)$ получим следующие выражения:

$$L_{m}(z) = \sum_{i=1}^{N} C_{mi}^{l} F_{li}^{+} \left[\cos(Q_{i}(z-a)) - \frac{ik_{l}}{Q_{i}} \sin(Q_{i}(z-a)) \right],$$

$$M_{m}(z) = \frac{-k_{l}}{k_{m}} \sum_{i=1}^{N} C_{mi}^{l} F_{li}^{+} \left[\cos(Q_{i}(z-a)) - \frac{iQ_{i}}{k_{l}} \sin(Q_{i}(z-a)) \right].$$
(24)

Искомые величины D_m и \tilde{D}_m (m=1,2,...,N) определяются подстановкой (24) в формулы (8). Для этого сначала определяются значения функций $L_m(z)$ и $M_m(z)$ в точке z = b, далее их подставляют в формулы (8). Сделав несложные преобразования, окончательно получим

$$D_{m}(b) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} C_{mi}^{l} \phi_{li}^{+} \left[-\left(1 + \frac{k_{l}}{k_{m}}\right) \cos Q_{i} d + i \left(\frac{Q_{i}}{k_{m}} + \frac{k_{l}}{Q_{i}}\right) \sin Q_{i} d \right] \times \\ \times \exp(i \left(k_{l} + k_{m}\right) \frac{d}{2}) \exp(-i \left(k_{l} - k_{m}\right) z_{0}),$$

$$\tilde{D}_{m}(b) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} C_{mi}^{l} \phi_{li}^{+} \left[\left(1 - \frac{k_{l}}{k_{m}}\right) \cos Q_{i} d + i \left(\frac{Q_{i}}{k_{m}} - \frac{k_{l}}{Q_{i}}\right) \sin Q_{i} d \right] \times \\ \times \exp(i \left(k_{l} - k_{m}\right) \frac{d}{2}) \exp(-i \left(k_{l} + k_{m}\right) z_{0}),$$
(25)

где

$$\phi_{li}^{+} = F_{li}^{+} \exp(ik_{l}a),$$

$$b = z_{0} + d/2, \quad a = z_{0} - d/2.$$

Здесь z_0 – координата центра потенциала и d – ширина барьера.

4. Определение амплитуд рассеяния для тонкого рассеивающего потенциала

Выражения для амплитуд рассеяния в случае произвольной толщины d рассеивающего потенциала громоздки, поэтому мы здесь получим их выражения для случая тонких рассеивающих потенциалов. Для этого в формулах, определяющих D_m и \tilde{D}_m , перейдем к малым d так, чтобы принять $\cos(Q_i d) \approx 1$ и $\sin(Q_i d) \approx Q_i d$. Для случая m = l окончательно получим

$$D_{l} = 1 + \frac{iu_{ll}}{2k_{l}}, \quad \tilde{D}_{l} = \frac{iu_{ll}}{2k_{l}} \exp(-2ik_{l}z_{0}), \quad (26)$$

где

$$u_{ll} = \sum_{i=1}^{N} x_i^2 \Phi_{li}^+ \,. \tag{27}$$

Для случая $m \neq l$ получим

$$D_{m} = \frac{iu_{lm}}{2k_{m}} \exp\left(-i(k_{l} - k_{m})z_{0}\right), \quad \tilde{D}_{m} = \frac{iu_{lm}}{2k_{m}} \exp\left(-i(k_{l} + k_{m})z_{0}\right), \quad (28)$$

где

$$u_{lm} = \sum_{i=1}^{N} C_{mi}^{l} x_{i}^{2} \Phi_{li}^{+}.$$
 (29)

Заметим, что определение (29) при m = l переходит в (27), так как $C_{li}^{l} = 1$. Здесь мы также ввели обозначение $x_{i}^{2} = Q_{i}^{2}d \ll 1$ и x_{i}^{2} определяется из уравнения

$$D_{1} = \begin{vmatrix} \tilde{v}_{11}, v_{12}, \dots , v_{1N} \\ \dots \\ v_{N1}, v_{N2}, \dots , \tilde{v}_{NN} \end{vmatrix} = 0,$$

которое есть уравнение (13), где V_{ik} умножено на d и величины $V_{ik}d$ обозначены через v_{ik} .

Перейдем к определению связи между матричными элементами u_{lm} и v_{lm} . Для этого в формулу (29) подставим значение величины

$$\phi_{li}^{+} = \frac{(-1)^{i}}{D_{3}} \begin{vmatrix} 1....1...1 \\ C_{21}^{l}...0...C_{2N}^{l} \\ \\ C_{N1}^{l}...0...C_{NN}^{L} \end{vmatrix}.$$
(30)

Просуммировав полученное выражение, окончательно имеем

$$u_{lm} = -\frac{1}{D_3} \begin{vmatrix} C_{m1}^l x_1^2 \dots C_{mN}^l x_N^2 \\ C_{21}^l \dots C_{2N}^l \\ \dots \\ C_{N1}^l \dots C_{NN}^l \end{vmatrix}.$$
(31)

Чтобы найти v_{ml} , умножим систему уравнений (15), определяющую C_{ml}^{l} , на d и, заменяя $V_{ml}d$ на v_{ml} , для *m*-ого из полученных уравнений получим следующее выражение:

$$v_{ml} + v_{m2}C_{2i}^{l} + \ldots + V_{mm}C_{mi}^{l} + \ldots + v_{mN}C_{Ni}^{l} = -x_{i}^{2}C_{mi}^{l}.$$
 (32)

Меняя индекс *i* от единицы до *N*, вместо (32) получим систему уравнений, определяющих *v_{ml}*. Решив эту систему уравнений, получим:

$$v_{ml} = \frac{\begin{vmatrix} x_1^2 C_{m1}^l, C_{21}^l, \dots C_{N1}^l \\ \dots \\ x_N^2 C_{mN}^l, C_{2N}^l, \dots C_{NN}^l \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 1, C_{21}^l, \dots C_{N1}^l \\ \dots \\ 1, C_{2N}^l, \dots C_{NN}^l \end{vmatrix}}.$$
(33)

Если в выражении (33) вращать детерминанты в числителе и знаменателе, то получим, что знаменатель формулы (33) есть D_3 , а числитель совпадает с детерминантом, входящим в формулу (31). Из этого следует, что $u_{ml} = v_{ml}$, если $m \neq$

l. Можно также доказать, что $u_{ll} = v_{ll}$.

Итак, формулы (26) и (28) можно переписать в следующем виде:

$$D_{l} = 1 + \frac{iv_{ll}}{2k_{l}}, \qquad \tilde{D}_{l} = \frac{iv_{ll}}{2k_{l}} \exp(-2ik_{l}z_{0}),$$

$$D_{m} = \frac{iv_{lm}}{2k_{m}} \exp(-i(k_{l} - k_{m})z_{0}), \qquad \tilde{D}_{m} = \frac{iv_{lm}}{2k_{m}} \exp(-i(k_{l} + k_{m})z_{0}), \qquad m \neq l.$$
(34)

Полученные выражения для D_m и \tilde{D}_m далее можно использовать для определения амплитуд многоканального рассеяния. Причем, при получении выражений для амплитуд рассеяния необходимо учесть, что толщина потенциала d в направлении рассеяния настолько мала, что имеет место $v_{lm}^2 \ll 4k_m^2$ для всех l и m.

Следует отметить важное свойство амплитуд рассеяния. Как видно из формул (9) и (25), амплитуда прохождения t_l не зависит от координаты середины потенциала z_0 , тогда как амплитуда отражения r_l имеет фазовый множитель $\exp(2ik_lz_0)$. Что касается рассеяния по каналу m, то амплитуды прохождения t_m и отражения r_m имеют фазовые множители $\exp(i(k_l - k_m)z_0)$ и $\exp(i(k_l + k_m)z_0)$, соответственно. Отсюда следует, что фазовый множитель произведения $t_m r_m$ равняется $\exp(2ik_lz_0)$ и не зависит от канала рассеяния. Это свойство Nканального рассеяния нами было использовано при решении задачи локализации электрона на квазипериодической системе потенциалов [12]. Это свойство для случая l = 1 впервые было получено в работе [10].

5. Обсуждение результатов

Используя выражения (25) для функций D_m и \tilde{D}_m , из формул (9) можно получить амплитуды рассеяния и коэффициенты прохождения и отражения для многоканального рассеяния для потенциала (1). Полученные выражения амплитуд рассеяния для потенциала (1) с произвольной толщиной d слишком громоздки, поэтому здесь мы приведем их выражения только для тонких рассеивающих потенциалов. В этом приближении величины D_m и \tilde{D}_m определены формулами (28), надо также учесть, что $v_{lm}^2 \ll 4k_m^2$ для всех l и m. Подставив выражения D_m и \tilde{D}_m в формулы (9), для амплитуд рассеяния получим

$$T_{l} = t_{l} = \frac{1 - \frac{iv_{ll}}{2k_{l}}}{\Gamma + \Gamma'}, \qquad R_{l} = r_{l} = -\frac{\frac{iv_{ll}}{2k_{l}}\left(1 - \frac{iv_{ll}}{2k_{l}}\right)\exp(2ik_{l}z_{0})}{\left(1 + \frac{iv_{ll}^{2}}{4k_{l}^{2}}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\Gamma + \Gamma'\right)^{\frac{1}{2}}}, \qquad (35)$$

а также

$$T_{m} = \sqrt{\frac{k_{m}}{k_{l}}} t_{m} = -\frac{iv_{lm}}{\sqrt{4k_{l}k_{m}}} \frac{\exp(i(k_{l} - k_{m})z_{0})}{(\Gamma + \Gamma')},$$

$$R_{m} = \sqrt{\frac{k_{m}}{k_{l}}} r_{m} = -\frac{iv_{lm}}{\sqrt{4k_{l}k_{m}}} \frac{\exp(i(k_{l} + k_{m})z_{0})}{(\Gamma + \Gamma')^{\frac{1}{2}}},$$
(36)

$$\Gamma = 1 + \frac{v_{ll}^2}{4k_l^2}, \quad \Gamma' = \sum_{m \neq l} \frac{v_{lm}^2}{4k_l k_m}.$$
(37)

2 /

Что касается вероятностей прохождения и отражения по разным каналам, то получаются следующие выражения:

$$|T_l|^2 = |t_l|^2 = \frac{\Gamma}{(\Gamma + \Gamma')^2}, \quad |R_l|^2 = |r_l|^2 = \frac{V_{ll}}{\Gamma + \Gamma'},$$
 (38)

а также

$$|T_m|^2 = \frac{k_m}{k_l} |t_m|^2 = \frac{\frac{v_{lm}^2}{4k_l k_m}}{\left(\Gamma + \Gamma'\right)^2}, \quad |R_m|^2 = \frac{k_m}{k_l} |r_m|^2 = \frac{\frac{v_{lm}^2}{4k_l k_m}}{\Gamma + \Gamma'}.$$
(39)

Используя формулы (38) и (39), легко проверить равенство

$$\left|t_{l}\right|^{2} + \left|r_{l}\right|^{2} + \sum_{m \neq l} \frac{k_{m}}{k_{l}} \left(\left|t_{m}\right|^{2} + \left|r_{m}\right|^{2}\right) = \sum_{m} \left(\left|T_{m}\right|^{2} + \left|R_{m}\right|^{2}\right) = \left|T\right|^{2} + \left|R\right|^{2} = 1,$$
(40)

то есть условие непрерывности потока частиц. Если учесть условие $v_{lm}^2 \ll 4k_m^2$ для всех *l* и *m* формулы (38) и (39) примут более простой вид:

$$\begin{aligned} \left|T_{l}\right|^{2} &= \left|t_{l}\right|^{2} = 1 - \frac{v_{ll}^{2}}{4k_{l}^{2}} - \sum_{m \neq l} \frac{v_{lm}^{2}}{4k_{l}k_{m}}, \\ \left|R_{l}\right|^{2} &= \left|r_{l}\right|^{2} = \frac{v_{ll}^{2}}{4k_{l}^{2}}, \\ \left|T_{m}\right|^{2} &= \left|R_{m}\right|^{2} = \frac{k_{m}}{k_{l}}\left|t_{m}\right|^{2} = \frac{k_{m}}{k_{l}}\left|r_{m}\right|^{2} = \frac{v_{lm}^{2}}{4k_{l}k_{m}}, \qquad m \neq l. \end{aligned}$$

Как видно из выражений (41), рассеяние происходит не только по начальному каналу l, но и возбуждаются каналы $m \neq l$, причем m может быть как больше, так и меньше l. Надо учесть, что при изменении канала рассеяния полная энергия частицы не меняется, и следовательно k_m увеличивается при m < l и уменьшается в обратном случае, т.е. при m > l. Отсюда сразу следует, что рассеяние в основном происходит по каналу l и по каналам m > l. Рассеяние по каналам m < l значительно меньше.

Согласно формулам (41), рассеяние по "начальному каналу" l описывается амплитудами, аналогичными случаю одномерного рассеяния. Однако, вместо потенциалов V в формулах фигурирует потенциал v_{ll} , который уже зависит от волновых функций поперечного движения частицы, соответствующего каналу l. Естественно, кроме этого в формулах для амплитуд рассеяния в знаменателях к обычному Γ добавляются члены, зависящие от v_{lm}^2 , и конечно, от продольного импульса k_m . При увеличении v_{lm}^2 и уменьшении k_m вклад этих членов увеличивается, что приводит к уменьшению амплитуд рассеяния по

где

каналу *l*.

Подробно рассмотрим случай рассеяния по каналам m > l. Как видно из формул (41), рассеяние по каналам $m \neq l$ зависит от "вероятности перехода" с канала l на канал m, т.е. от v_{lm}^2 и от величины продольного импульса k_m этого канала. То, что амплитуды рассеяния по каналу m пропорциональны v_{lm}^2 , естественно, однако их зависимость от продольного импульса k_m своеобразно. Действительно, на каналах, имеющих малые продольные импульсы k_m (m > l), амплитуды рассеяния увеличиваются. Их вероятность может стать больше, чем вероятность отражения по каналу l. Действительно, отношение этих амплитуд

$$\frac{|R_l|^2}{|R_m|^2} = \frac{v_{ll}^2}{v_{lm}^2} \frac{k_m}{k_l}$$

Пропорционально k_m/k_l , и при $d \to 0$ отношение v_{ll}^2/v_{lm}^2 не зависят от d, тогда как k_m/k_l уменьшается при m > l. Следовательно, вероятность рассеяния по каналам с малыми k_m имеет тенденцию увеличения и для некоторых частных потенциалов рассеяния может сравниться с вероятностью прохождения частицы по каналу l, т.е. возможен случай, когда $|R_m|^2 = |T_m|^2$ может стать порядка $|T_l|^2$. На наш взгляд, такой случай может реализоваться при многоканальном рассеянии на δ -образном потенциале. Для такого потенциала $d \to 0$ и высота $V_{lm} \to \infty$, следовательно, $V_{lm}d = v_{lm}$ не является малой величиной и v_{lm}^2 может быть порядка или больше $4k_lk_m$ для всех l и m.

Наша следующая работа будет посвящена рассмотрению многоканального рассеяния на δ-образном потенциале.

ЛИТЕРАТУРА

- 1. Д.М. Седракян, А.Ж. Хачатрян, Э.М. Казарян, Л.Р. Седракян. Изв. НАН Армении, Физика, 44, 167 (2009).
- 2. J.H. Davis. The Physics of Low-Dimensional Semiconductors. Cambridge Univ. Press, 1998.
- 3. И.В. Кляцкин. Метод погружения в теории распространения волн. М., Наука, 1986.
- 4. В.В. Бабиков. Метод фазовых функций в квантовой механике. М., Наука, 1976.
- 5. P. Erdos, R.C. Herdon. Adv. Phys., 31, 65 (1982).
- 6. Д.М. Седракян, Э.М. Казарян, Л.Р. Седракян. Изв. НАН Армении, Физика, 44, 395 (2009).
- 7. D. Boese, M. Lischka, L.E. Reichl. Phys. Rev. B, 62, 16933 (2000).
- 8. S. Souma, A. Suzuki. Phys. Rev. B. 65, 115307 (2002).
- 9. J. Prior, A.M. Somoza, M. Ortuno. Phys. Rev. B. 72, 024206 (2005).
- 10. Д.М. Седракян, Л.Р. Седракян, А.В. Маргарян. Изв. НАН Армении, Физика, 46, 147 (2011).
- 11. Д.М. Седракян, Э.М. Казарян, Л.Р. Седракян. Изв. НАН Армении, Физика, 45, 173 (2010).
- 12. Д.М. Седракян, Л.Р. Седракян. ФТТ, 53, 1628 (2011).

ԲԱԶՄՈՒՂԻ ՑՐՄԱՆ ԱՄՊԼԻՏՈՒԴՆԵՐԻ ՈՐՈՇՈՒՄԸ ՑՐՄԱՆ ՈՒՂՂՈՒԹՅԱՄԲ ՀԱՍՏԱՏՈՒՆ ԲԱՐՁՐՈՒԹՅԱՄԲ ՊՈՏԵՆՑԻԱԼԱՅԻՆ ԱՐԳԵԼՔԻ ՎՐԱ

Դ.Մ. ՍԵԴՐԱԿՅԱՆ, Լ.Ռ. ՍԵԴՐԱԿՅԱՆ

Բազմուղի ցրման խնդրի լուծման համար կիրառված է ընկղման մեթոդը կոնկրետ պոտենցիալի դեպքում։ Մասնավորապես, դիտարկված է մասնիկի ցրումը երկչափ արգելքի վրա, որը հաստատուն է ցրման ուղղությամբ և կամայական լայնական ուղղությամբ։ Այս դեպքի համար որոշված են ցրման t_m և r_m (m = 1, 2, ..., N) ամպլիտուդները։ Ստացված բանաձևերից անցում է կատարվել բարակ պոտենցիալի դեպքին։ Այդ դեպքի համար ստացված են արտահայտություններ անցման t_m և անդրադարձման r_m ամպլիտուդների համար։ Ենթադրվել է, որ ցրվող մասնիկը արգելքին է մոտենում \mathbf{k} երկայնական ալիքային վեկտորով, որը համապատասխանում է ցրման l_m ուղղուն։

AMPLITUDES OF MULTICHANNEL SCATTERING ON THE BARRIER WITH A CONSTANT HEIGHT IN THE SCATTERING DIRECTION

D.M. SEDRAKIAN, L.R. SEDRAKIAN

The immersing method is applied to solve the *N*-channel scattering problem. In particular, we consider the particle scattering on a multidimensional potential barrier, which is constant in the scattering direction and arbitrary in the cross-section direction. For this case the scattering amplitudes t_m and r_m (m = 1, 2, ..., N) are determined. A transition from the obtained formulas to the case of thin potential is performed. For this case transmission amplitudes t_m and reflection amplitudes r_m are obtained. We show that the product of transmission and reflection amplitudes by the channel m does not depend on the scattering channel. It is assumed that the scattering particle falls on the potential with the longitudinal wave vector \mathbf{k}_l corresponding to the channel with the index l.

УДК 621.315

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОНЦЕНТРАЦИЙ ДОНОРОВ И АКЦЕПТОРОВ В МНОГОДОЛИННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

А.И. ВАГАНЯН^{*}, Е.М. БАГИЯН

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

*e-mail: aivahanyan@yahoo.com

(Поступила в редакцию 10 февраля 2014 г.)

Показана возможность определения раздельных концентраций доноров и акцепторов в многодолинных полупроводниках на основе температурной зависимости обшей концентрации носителей заряда. В отличие от однодолинного полупроводника учитывается, что эффективная масса плотности состояний и эффективная энергия ионизации не постоянны и изменяются с температурой.

Известно, что раздельные концентрации доноров и акцепторов однодолинного полупроводника определяются по температурной зависимости концентрации носителей заряда. Суть метода заключается в том, что по положению плато в области температур насыщения определяется эффективная концентрация доноров (или акцепторов – в случае полупроводника *p*-типа):

$$n_s = N_d - N_a \,, \tag{1}$$

где n_s – концентрация насыщения, N_d – концентрация доноров, N_a – концентрация акцепторов. В низкотемпературной области используется выражение [1]

$$\frac{n(n+N_a)}{N_d-N_a-n} = \beta^{-1}N_c \exp\left(-\frac{\varepsilon_d}{kT}\right),$$
(2)

где ε_d — энергия ионизации донорных уровней, N_c — эффективная плотность состояний, n — общая концентрация носителей, β — фактор спинового вырождения.

Энергия ионизации донорных уровней определяется по наклону прямолинейного участка кривой логарифма температурной зависимости концентрации электронов. Тогда, при совместном решении уравнений (1) и (2) определяются N_d и N_a .

При исследовании многодолинных полупроводников необходимо учитывать, что с изменением температуры, вследствие электронных переходов между долинами, изменяются наблюдаемая эффективная масса плотности состояний и наблюдаемая энергия ионизации примесных уровней [2].

Если известны эффективная плотность состояний N_c^* и эффективная энергия ионизации ε_d^* многодолинного полупроводника, то для определения

раздельных концентраций доноров и акцепторов используется формула [1]

$$\frac{n(n+N_a)}{N_d-N_a-n} = \left(\beta^*\right)^{-1} N_c^* \exp\left(-\frac{\varepsilon_d^*}{kT}\right).$$
(3)

Правая часть логарифма выражения (3) не является прямой линией в зависимости от обратной температуры, т.к. N_c^* и ε_d^* изменяются с температурой. В этом случае энергия ионизации примесных уровней определяется по наклону касательной к кривой в выбранной точке температурной зависимости.

В выражении (3) N_c^* и ε_d^* рассчитываются по формулам

$$N_c^* = \sum_i N_{ci} \exp\left(-\frac{\delta E_i}{kT}\right),\tag{4}$$

$$\left(\beta^*\right)^{-1} \exp\left(-\frac{\varepsilon_d^*}{kT}\right) = \sum_i \left(\beta_i\right)^{-1} \exp\left(-\frac{\varepsilon_{di} - \delta E_i}{kT}\right),\tag{5}$$

где ε_{di} – энергия ионизации примесных уровней, связанных с *i*-долиной, δE_i – энергетическое расстояние *i*-долины от нулевого уровня, а фактор спинового вырождения можно принять $\beta_1 = \beta_2 = ... = \beta^* = 2$.

Если же вышеупомянутые параметры N_c^* и ε_d^* многодолинного полупроводника неизвестны, то для определения N_d и N_a достаточно иметь значение эффективной массы плотности состояний в абсолютной долине. Заметим, что для большинства полупроводниковых материалов этот параметр известен довольно точно.

При очень низких температурах, когда практически все электроны находятся в абсолютной долине и выполняется условие $n \ll N_a < N_d$, из формулы

$$\frac{n(n+N_a)}{N_d-N_a-n} = \frac{1}{2}N_{c1}\exp\left(-\frac{\varepsilon_{d1}}{kT}\right)$$
(6)

следует, что

$$n = \frac{N_d - N_a}{2N_a} N_{c1} \exp\left(-\frac{\varepsilon_{d1}}{kT}\right)$$
(7)

или

$$\frac{nAT^{-3/2}}{N_d - N_a} = \frac{M_1 m_1^{3/2}}{N_a} \exp\left(-\frac{\varepsilon_{d1}}{kT}\right),$$
(8)

где $A = \beta^* h^3 / (2(2\pi k)^{3/2})$, M_1 – число эквивалентных минимумов, m_1 – эффективная масса электрона в абсолютной долине, а ε_{d1} – энергия ионизации донорных уровней абсолютной долины.

График зависимости логарифма левой части этого уравнения от обратной температуры представляет прямую линию. По отрезку, отсекаемому этой прямой на оси ординат, можно определить предэкспоненциальный множитель $M_1 m_1^{3/2} / N_a$ [3]. По известным значениям $M_1 m_1^{3/2}$ легко вычислить N_a , следовательно, и N_d , т.к. $N_d - N_a$ определяется по положению плато в области температур насыщения (1).

Отметим, что точность определения раздельных концентраций доноров и акцепторов, а также параметров зонной структуры многодолинного полупроводника во многом зависит от точности определения температурной зависимости концентрации носителей заряда и величины $N_d - N_a$.

ЛИТЕРАТУРА

- 1. J.S.Blakemore. Semiconductor Statistics, New York, Dover, 2002.
- 2. А.И. Ваганян. ФТП, 16, 3 (1982).
- 3. А.И.Ваганян, Е.М.Багиян. Изв. НАН Армении, Физика, 49, 263 (2014).

ንበህበቦህԵቦኮ ԵՎ ԱԿՑԵՊՏՈՐህԵቦኮ ԿՈህՑԵህՏՐԱՑԻԱՆԵՐԻ ՈՐՈՇՈՒՄԸ ԲԱԶՄԱՀՈՎԻՏ ԿԻՍԱՀԱՂՈՐԴԻՉՆԵՐՈՒՄ

Ա.Ը. ՎԱՀԱՆՅԱՆ, Ե.Մ. ԲԱՂԻՅԱՆ

ծույց է տրված բազմահովիտ կիսահաղորդիչներում դոնորների և ակցեպտորների կոնցենտրացիաների որոշման սկզբունքային հնարավորությունը։ Ի տարբերություն միահովիտ կիսահաղորդիչների, հաշվի է առնվել, որ վիձակների խտությունը, արդյունարար զանգվածը և խառնուկային մակարդակների իոնիզացման արդյունարար էներգիան կախված են ջերմաստի-Ճանից։

DETERMINATION OF CONCENTRATIONS OF DONORS AND ACCEPTORS IN MANY-VALLEY SEMICONDUCTORS

A.I. VAHANYAN, Y.M. BAGHIYAN

A possibility of determination of uncooperative concentrations of donors and acceptors in many-valley semiconductors is shown on the basis of temperature dependence of total charge carriers' concentrations. In contradiction to single-valley semiconductor, it is necessary to take into account that effective mass of density of states and effective ionization energy are variable and depend on temperature.

УДК 536.2

ПОЛУЧЕНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ГЕКСААЛЮМИНАТОВ МАГНИЯ

К.Л. ОВАНЕСЯН¹, А.С. КУЗАНЯН^{1*}, Г.Р. БАДАЛЯН¹, А.В. ЕГАНЯН¹, Р.В. САРГСЯН¹, В.С. КУЗАНЯН¹, А.Г. ПЕТРОСЯН¹, В.С. СТАТОПОУЛОС²

¹Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак, Армения ²General Department of Applied Sciences, Technological Educational Institute of Sterea Ellada, GR34400 Psahna Evias, Chalkida, Greece

e-mail: akuzanyan@yahoo.com

(Поступила в редакцию 19 декабря 2013 г.)

Исследованы условия получения методом твердофазных реакций редкоземельных гексаалюминатов RE_{1-x-y}M_xM'_yMgAl₁₁O₁₉ (RE = La, Sm; M, M' = Gd, Yb, Lu, Y, Sc; x, y = 0; 0.15; 0.3). Для ряда составов, синтезированных в процессе моногоступенчатой термообработки в среде Ar/H₂ при 1650–1690°C, достигнута высокая степень однофазности. На рентгенограммах этих образцов наблюдаются интенсивные дифракционные линии (107) и (114), характерные для фазы гексаалюмината. Исследования микроструктуры и элементного состава показали, что дефицит магния на поверхности образцов может достигать ~20%, тогда как состав внутри образцов более однороден и близок к стехиометрическому. По оценкам структурной однородности и величины теплопроводности гексаалюминаты лантана La_{1-x-y}M_xM'_yMgAl₁₁O₁₉ с парными примесями Gd–Yb, Gd–Y, Y–Yb, Y–Lu, Y–Sc (x = y = 0.15) и гексаалюминаты самария Sm_{1-x-y}M_xM'_yMgAl₁₁O₁₉ с парными примесями Gd–Yb, (x = y = 0.15), а также Sm_{0.7}Yb_{0.3}MgAl₁₁O₁₉, могут представить интерес в качестве теплоизоляционных покрытий.

1. Введение

В последнее десятилетие ведется активный поиск новых теплоизоляционных покрытий для использования при температурах выше 1200°С. Интерес к ним возник в связи с необходимостью повышения рабочих температур турбогенераторов и реактивных двигателей. Стабилизированная окись циркония (YSZ), которая в настоящее время широко используется в качестве покрытий в этих агрегатах, не может применяться при температурах выше 1200°С. Этот материал обладает очень хорошими термомеханическими свойствами, в частности, его теплопроводность достигает 1.2-1.8 Втм⁻¹K⁻¹, однако, при температурах 1300– 1400°С его фазовая устойчивость нарушается и начинается постепенный переход из тетрагональной в моноклинную фазу. Среди исследуемых в настоящее время материалов, обладающих при высоких температурах фазовой стабильностью и относительно низкой теплопроводностью, находится большой класс гексаалюминатов LnMAl₁₁O₁₉ (где Ln = La, Pr, Nd, Sm, Eu, Gd, Ca, Sr и M = Mg, Mn÷Zn) [1,2]. Гексаалюминаты LnMAl₁₁O₁₉ принадлежат к гексагональной сингонии (пространственная группа P6₃/mmc) и имеют слабо искаженную структуру магнетоплюмбита. Каждая элементарная ячейка состоит из двух шпинелевых блоков, разделенных зеркальной плоскостью, вследствие чего они кристаллизуются в виде пластинчатых кристаллитов с большой площадью поверхности. Кристаллы гексаалюминатов, активированные редкоземельными примесями, в свое время весьма подробно исследовались в качестве лазерных и сцинтилляционных материалов. Наиболее исследованным в качестве керамического высотемпературного покрытия является гексаалюминат LaMgAl₁₁O₁₉, который обладает высокой температурой плавления (1800°С), высокой фазовой стабильностью [3-6] и достаточно низкой теплопроводностью (1.7–2.2 BTm⁻¹K⁻¹) [7]. Кроме того, покрытия из LaMgAl₁₁O₁₉ выдерживают большое количество термоциклирований [8], не уступая по этому параметру YSZ [9].

Одним из способов, используемых для получения керамических гексаалюминатов, является традиционный метод твердофазных реакций. Преимуществом данного метода при промышленном производстве, по сравнению с жидкостными (золь-гелевый и пиролизный), является отсутствие агрессивных исходных компонент. Несколько ограничивают применение этого метода трудности в получении однофазных образцов.

Условия твердофазного синтеза гексаалюмината LaMgAl₁₁O₁₉ могут изменяться в широких пределах и включают несколько этапов. Обычно стехиометрические количества исходных оксидов перетираются в течение определенного времени, затем подвергаются термообработке при температурах 1600– 1700°C в течение 12–24 часов. Например, в [10] оксиды La₂O₃, MgO и Al₂O₃ перемешивались в агатовой ступке в течение 30 минут и затем кальцинировались при 1600°C в течение 12 часов; в [11] термообработка LaMgAl₁₁O₁₉ проводилась при 1923 К в течение 24 часов, а в [12] при 1873 К в течение 12 часов. Монофазные керамики PrMgAl₁₁O₁₉, SmMgAl₁₁O₁₉, NdMgAl₁₁O₁₉, GdMgAl₁₁O₁₉ и SrAl₁₂O₁₉ со структурой магнетоплюмбита были получены твердофазным синтезом при температурах 1400–1800°C в течение 10–24 часов на воздухе [8,13–19]. В некоторых случая процесс перемешивание–термообработка повторялся несколько раз.

Особенности формирования твердых растворов в системе LaMgAl₁₁O₁₉– LaMgGa₁₁O₁₉–LaMgFe₁₁O₁₉ при термообработке на воздухе при температурах 1000–1580°С исследованы в [20]. Показано, что в подсистеме LaMgAl₁₁O₁₉– LaMgGa₁₁O₁₉ однофазные образцы гексаалюмината образуются при температурах от 1400°С (LaMgGa₁₁O₁₉) до 1500°С (LaMgAl₁₁O₁₉) и сохраняют стабильность до ~1580°С. В двух других подсистемах LaMgAl₁₁O₁₉–LaMgFe₁₁O₁₉ и LaMgFe₁₁O₁₉–LaMgGa₁₁O₁₉ количество фазы магнетоплюмбита обратно пропорционально содержанию железа, а образцы состава LaMgFe₁₁O₁₉ вообще не содержат эту фазу. К существенному уменьшению температуры твердофазного синтеза редкоземельных гексаалюминатов может привести частичное замещение Al₂O₃ на AlF₃ [21], однако это приводит к нежелательному попаданию фтора в окружающую среду. Снижение коэффициента теплопроводности даже на 5–10%, а также разработка методов получения материалов с малым содержанием сторонних фаз рассматриваются как важная задача и могут существенно повысить интерес к редкоземельным гексалюминатам. В [7], на примере соединений пирохлора, была показана возможность снижения коэффициента теплопроводности $La_2Zr_2O_7$ при добавлении Gd_2O_3 и Yb₂O₃. Существенное снижение теплопроводности при введении дополнительно одного или нескольких элементов было достигнуто также для YSZ [22,23]. Целью данной работы являлось исследование возможности замещения лантана двумя другими редкоземельными ионами и влияния этих замещений на теплопроводность гексаалюминатов.

2. Методика эксперимента

В качестве исходных компонентов использовались предварительно прокаленные при 1100°С оксиды La₂O₃ (99.99%), Sm₂O₃ (99.99%), Gd₂O₃ (99.99%), Yb₂O₃ (99.99%), Lu₂O₃ (99.99%), Y₂O₃ (99.99%), Sc₂O₃ (99.95%), MgO (99.95%) и α -Al₂O₃ (99.97%). Исходные компоненты, взятые в стехиометрических количествах, перемешивались в агатовой мельнице и/или вручную в сапфировой ступке и прессовались в таблетки диаметром 8–20 мм. Полученные образцы подвергались многоступенчатой термообработке: сначала на воздухе при температуре 1100°С, затем в среде Ar/H₂ при температурах 1650°С и 1690°С. Время термообработки варьировалось от 6 до 24 часов. Полученные образцы La_{1-x-y}M_xM'_yMgAl₁₁O₁₉ имели белый цвет, бледно-желтый оттенок – образцы Sm_{1-x-y}M_xM'_yMgAl₁₁O₁₉.

Фазовый анализ образцов проводился на рентгеновском дифрактометре ДРФ-2.0 с использованием излучения CuK_{α}. Исходные составы, фазовый состав и измеренные параметры элементарной ячейки полученных образцов приведены в табл.1.

Микроанализ образцов проводился на растровом электронном микроскопе (SEM) VEGATS 5130MM с системой EDS микроанализа INCA Energy 300. Стандартами для микроанализа служили MgO, Al₂O₃, SiO₂, Y, LaB₆, YbF₃, SmF₃. Статистическая ошибка измерения концентраций составляла (в атомных %): Mg – 0.13, Al – 0.35, Y – 0.1, Sm – 0.07, Yb – 0.07, O – 0.65, Si – 0.11.

3. Результаты и обсуждение

3.1. Твердофазный синтез образцов и их характеризация

Методом твердофазных реакций были приготовлены образцы, соответствующие по составу гексаалюминатам лантана и самария (LaMgAl₁₁O₁₉ и SmMgAl₁₁O₁₉), как беспримесные, так и содержащие двойные примеси: Gd–Yb, Gd–Y, Y–Yb, Y–Lu и Y–Sc (табл. 1). Выбор составов определялся тем, что в [2] на образцах редкоземельных магниевых гексаалюминатов, полученных зольгельным методом было показано, что замещение в LaMgAl₁₁O₁₉ ионов La на

Исходный состав	Параметры элементар- ной ячейки гексаалю- мината		Другие фазы				
	a (Å) c (Å)						
LaMgAl ₁₁ O ₁₉	5.589	21.967	α-Al ₂ O ₃ , LaAlO ₃ , MgAl ₂ O ₄ незначительно				
$La_{0.7}Gd_{0.15}Yb_{0.15}MgAl_{11}O_{19} \\$	5.579	21.948	α-Al ₂ O ₃ , LaAlO ₃ и другие не идентифицированные				
$La_{0.7}Gd_{0.15}Y_{0.15}\ MgAl_{11}O_{19}$	5.581	21.959	α-Al ₂ O ₃ и другие не идентифицированные				
$La_{0.7}Y_{0.15}Yb_{0.15}MgAl_{11}O_{19}$	5.580	21.958	α -Al ₂ O ₃ , LaAlO ₃ , MgAl ₂ O ₄				
$La_{0.7}Y_{0.15}Lu_{0.15}\ MgAl_{11}O_{19}$	5.580	21.957	α-Al ₂ O ₃ , MgAl ₂ O ₄ и другие не идентифицированные				
$La_{0.7}Y_{0.15}Sc_{0.15} MgAl_{11}O_{19}$	5.578	21.944	α-Al ₂ O ₃ и другие не идентифицированные				
SmMgAl ₁₁ O ₁₉	5.570	21.836	α -Al ₂ O ₃				
$Sm_{0.7}Yb_{0.3}MgAl_{11}O_{19}$	5.567	21.834	α-Al ₂ O ₃ , MgAl ₂ O ₄ и другие не идентифицированные				
$Sm_{0.7}Gd_{0.15}Yb_{0.15}\ MgAl_{11}O_{19}$	5.568	21.834	α-Al ₂ O ₃ и другие не идентифицированные				
$Sm_{0.7}Gd_{0.15}Y_{0.15}MgAl_{11}O_{19}$	фаза гексаалюмината не обнаружена						
$Sm_{0.7}Y_{0.15}Yb_{0.15}MgAl_{11}O_{19}$	5.569 21.835		α-Al ₂ O ₃ , MgAl ₂ O ₄ и другие не идентифицированные				
$Sm_{0.7}Y_{0.15}Lu_{0.15}MgAl_{11}O_{19}$	фаза гексаалюмината не обнаружена						
$Sm_{0.7}Y_{0.15}Sc_{0.15}MgAl_{11}O_{19}$	фаза гексаалюмината не обнаружена						

Табл.1. Исходный и фазовый состав образцов, параметры элементарной ячейки гексаалюминатов.

ионы Gd либо Sm понижает теплопроводность; кроме того, теплопроводность $Gd_{0.7}Yb_{0.3}MgAl_{11}O_{19}$ ниже, чем у беспримесного $GdMgAl_{11}O_{19}$. Согласно теории теплопроводности диэлектриков [24], перенос тепла происходит в результате рассеяния фононов на неоднородностях кристаллической решетки. Таким образом, введение двойных примесей, разность между ионными радиусами которых достаточно велика, может привести к увеличению поля упругой деформации и, соответственно, к уменьшению теплопроводности материала.

Термообработка образцов на воздухе при температуре 1100°С в течение 1–2 часов не приводит к образованию фазы гексаалюмината ни в одном из исследованных составов. Увеличение времени термообработки образца LaMgAl₁₁O₁₉ до 200 часов также не привело к образованию фазы гексаалюмината.

Результаты рентгеновского анализа образцов после многоступенчатой термообработки в среде Ar/H_2 при температурах 1650°C (6 часов) и 1690°C (7 часов) показали, что большинство синтезированных образцов в качестве основной фазы содержали фазу гексаалюмината, количество которой варьировалось в

зависимости от состава и длительности обжига. На рентгенограммах этих образцов наблюдались четкие дифракционные линии гексаалюмината, с присутствием интенсивных линий (107) и (114), характерных для этой фазы. Следует отметить, что в образцах содержалось некоторое количество сторонних фаз α-Al₂O₃ LaAlO₃, MgAl₂O₄ (табл. 1, рис.1 и 2), количество которых уменьшалось с увеличением длительности термообработки до 24 часов. Сравнение параметров элементарной ячейки LaMgAl₁₁O₁₉ с литературными данными показало, что они несколько меньше параметров, приведенных в [6] для керамических образцов (a = 5.594 Å, c = 22.53 Å) и больше параметров ячейки кристаллов, выращенных методом Чохральского (a = 5.5816 Å, c = 21.918 Å) [25]. Введение редкоземельных примесей с меньшим ионным радиусом вместо лантана приводит к уменьшению параметров элементарной решетки a на ~ 0.01Å и c на ~ 0.02Å. Данный факт свидетельствует о вхождении замещающих ионов в решетку гексаалюмината. Уменьшения параметров решетки не наблюдается в самариевых образцах. Более того, при использованных условиях твердофазного синтеза фаза гексаалюмината не сформировалась в образцах Sm_{1-x-y}M_xM'_yMgAl₁₁O₁₉ с двойными примесями Gd - Y, Y - Lu u Y - Sc.

На рисунке 3 представлены изображения поверхности образцов $La_{0.7}Y_{0.15}Yb_{0.15}MgAl_{11}O_{19}$ и $Sm_{0.7}Y_{0.15}Yb_{0.15}MgAl_{11}O_{19}$. Внешняя поверхность образцов в обоих случаях имеет зернистую структуру. Однако, если в случае гексаалюмината лантана она состоит из хаотично расположенных пластин



Рис.1. Рентгенограммы гексаалюминатов лантана $La_{1-x-y}M_xM'_yMgAl_{11}O_{19}$ после многоступенчатой термообработки при 1650°C и 1690°C: (a) $LaMgAl_{11}O_{19}$, (b) $La_{0.7}Y_{0.15}Yb_{0.15}MgAl_{11}O_{19}$, (c) $La_{0.7}Y_{0.15}Lu_{0.15}MgAl_{11}O_{19}$, (d) $La_{0.7}Y_{0.15}Sc_{0.15}MgAl_{11}O_{19}$.



Рис.2. Рентгенограммы гексаалюминатов самария $Sm_{1-x-y}M_xM'_yMgAl_{11}O_{19}$ после многоступенчатой термообработки при 1650°C и 1690°C: (a) $SmMgAl_{11}O_{19}$, (b) $Sm_{0.7}Yb_{0.3}MgAl_{11}O_{19}$, (c) $Sm_{0.7}Y_{0.15}Yb_{0.15}MgAl_{11}O_{19}$.

произвольной формы, то в случае гексаалюмината самария – это значительно большего размера продолговатые гранулы диаметром ~2 мкм и длиной 4–5 мкм. Поперечные срезы этих образцов имеют слоистую структуру, которая показана на рис.3с на примере La_{0.7}Y_{0.15}Yb_{0.15}MgAl₁₁O₁₉.

На всех фотографиях поверхности образцов можно выделить отличающиеся по контрасту области (темные и светлые), которые, согласно данным микроанализа, существенно отличаются по элементному составу. Отличие гранул по составу наиболее четко прослеживается на микрофотографиях, полученных детектором отраженных электронов (рис.3b). В темных областях наблюдается недостаток иттрия и иттербия с образованием фазы MgAl₂O₄, а в светлых – их избыток при сильном дефиците магния. Дефицит магния на поверхности составляет в среднем ~20%, а в некоторых участках, где наблюдаются гранулы редкоземельных алюминатов и оксидов, а также оксид алюминия, он вообще отсутствует. Компонентный состав на поперечных срезах более однороден и ближе по составу к фазе гексаалюмината. Образец состоит в основном (~80%) из однородной серой области с включениями светлых гранул размерами 0.5÷5 мкм, составляющих не более 5% площади изображения, и темных областей примерно таких же размеров (~15% общей площади). Результаты микроанализа и распределение фаз по поверхности и в поперечном сечении образцов $La_{0.7}Y_{0.15}Yb_{0.15}MgAl_{11}O_{19}$ (№4.2) при перемешивании исходных компонент в агатовой ступке приведены в табл.2. Микроанализ проводился по



Рис.3. Микроструктура поверхности и поперечного среза гексаалюминатов: (а) и (b) морфология поверхности образца $La_{0.7}Y_{0.15}Yb_{0.15}MgAl_{11}O_{19}$, полученная с использованием детекторов вторичных и отраженных электронов, соответственно; (c) морфология поперечного среза образца $La_{0.7}Y_{0.15}Yb_{0.15}MgAl_{11}O_{19}$; (d) морфология поверхности образца $Sm_{0.7}Y_{0.15}Yb_{0.15}MgAl_{11}O_{19}$.

областям размерами 40×40 мкм², а также в областях микронных размеров для уточнения компонентного состава светлых и темных участков. Следует отметить, что в некоторых случаях невозможно локализоваться только на одной исследуемой грануле из-за малости ее размеров, что необходимо учитывать при анализе количественных результатов.

Для улучшения однородности образцов были использованы различные режимы перемешивания исходных компонентов перед термообработкой, как вручную в сапфировой ступке, так и в агатовой мельнице. На основе данных микроанализа были найдены оптимальные условия перемешивания исходных оксидов перед таблетированием. Наилучшие результаты по однородости были достигнуты при перемешивании исходных порошков последовательно в сапфировой ступке и в агатовой мельнице. В табл.2 также приведены подробные результаты микроанализа поперечного сечения образца La_{0.7}Y_{0.15}Yb_{0.15}MgAl₁₁O₁₉ (№4.5), перетертого данным способом, после термообработки сначала на воздухе при 1100° С в течение 5 часов, а затем в среде Ar/H₂ при температуре 1690°C в течение 10 часов. Этот образец практически однороден по всей области и по составу наиболее близок к фазе гексаалюмината.

Область	Элементный состав, ат%						Формульный состав		
анализа	La	Y	Yb	Mg	Al	0			
Образец №4.2									
Поверхность									
Область 1 40×40 мкм ²	2.74	0.50	0.54	2.69	34.06	59.46	$La_{0.88}Y_{0.16}Yb_{0.17}Mg_{0.86}Al_{10.9}O_{19.03}$		
Область 2*	0.75	-	-	8.19	32.7	58.36	MgAl ₂ O ₄ ; Al ₂ O ₃ ; LaAlO ₃		
Область 3**	0.29	4.09	11.83	-	23.80	60.00	$(La_{0.019}Y_{0.27}Yb_{0.79})_3Al_{4.76}O_{12}$		
Область 4	2.55	0.39	0.20	2.47	34.88	59.51	$La_{0.82}Y_{0.13}Yb_{0.06}\ Mg_{0.79}Al_{11.16}O_{19.04}$		
Поперечный срез									
Центр среза	2.74	0.50	0.54	2.69	34.06	59.46	$La_{0.88}Y_{0.16}Yb_{0.17}\ Mg_{0.86}Al_{10.9}O_{19.03}$		
Покраю 1	3.10	0.66	0.51	2.42	33.79	59.52	$La_{0.99}Y_{0.21}Yb_{0.16}\ Mg_{0.77}Al_{10.81}O_{19.05}$		
Покраю 2	3.02	0.78	0.77	2.28	33.62	59.54	$La_{0.97}Y_{0.25}Yb_{0.25}Mg_{0.73}Al_{10.76}O_{19.05}$		
Области 2, 3 и 4 находятся в пределах области 1 и имеют размер в несколько микрон;									
*темная и **светлая области на рис.3b.									
Образец №4.5									
Поперечный срез (Области 40×40 мкм ²)									
1	2.36	0.7	0.60	3.14	33.73	59.47	$La_{0.76}Y_{0.22}Yb_{0.19}MgAl_{10.79}O_{19.03}$		
2	2.11	0.67	0.56	3.74	33.58	59.34	$La_{0.68}Y_{0.21}Yb_{0.18}Mg_{1.2}Al_{10.74}O_{19}$		
3	2.29	0.52	0.53	3.32	33.87	59.47	$La~_{0.73}Y_{0.17}Y_{0.17}Mg_{1.06}Al_{10.84}O_{19.03}$		
4	2.48	0.64	0.52	3.06	33.83	59.46	$La_{0.79}Y_{0.20}Yb_{0.17}Mg_{0.98}Al_{10.83}O_{19.03}$		
5	2.19	0.51	0.59	3.33	33.79	59.59	$La_{0.70}Y_{0.16}Yb_{0.19}Mg_{1.07}Al_{10.81}O_{19.07}$		
6	2.31	0.60	0.57	3.32	33.84	59.36	$La_{0.74}Y_{0.19}Yb_{0.18}Mg_{1.06}Al_{10.83}O_{19}$		
7	2.38	0.60	0.57	3.40	33.69	59.35	$La_{0.76}Y_{0.19}Yb_{0.18}Mg_{1.09}Al_{10.78}O_{18.99}$		
8	2.23	0.53	0.57	3.25	33.57	59.84	$La_{0.71}\overline{Y}_{0.17}Yb_{0.18}Mg_{1.04}Al_{10.74}O_{19.15}$		
Усредненный формульный состав						$La_{0.73}Y_{0.19}Yb_{0.18}Mg_{1.06}Al_{10.8}O_{19.04}$			

Табл.2. Результаты микроанализа поверхности и поперечных срезов образцов $La_{0.7}Y_{0.15}Yb_{0.15}MgAl_{11}O_{19}$, полученных при различных экспериментальных условиях.

3.2. Сравнительная оценка теплопроводности образцов

В работе [26] была установлена зависимость минимального значения величины теплопроводности вещества при высоких температурах от его физических параметров:

$$k_{min} \to 0.87 k_B N_A^{2/3} \rho^{1/6} E^{1/2} M^{-2/3},$$
 (1)

где k_B – постоянная Больцмана, N_A – число Авогадро, M – молекулярная масса, m – число атомов в молекуле, E – модуль Юнга и ρ – плотность.

Для гексаалюминатов лантана и самария число атомов в молекуле m = 32, а величина *E* меняется незначительно. Таким образом, выражение (1) можно записать в виде

$$k_{min} \to A \rho^{1/6} M^{-2/3},$$
 (2)

где $A = 0.87 k_B N_A^{2/3} E^{1/2} m^{2/3}$.

При сравнительной оценке теплопроводности использовались значения рентгеновской плотности, рассчитанные по формуле

$$\rho_{\rm x} = nM/N_A V, \tag{3}$$

где n – число формульных единиц в элементарной ячейке (n = 2 для гексаалюминатов), V – объем элементарной ячейки.

Из уравнения (2) очевидно, что чем меньше $\rho^{1/6}M^{-2/3}$ соединения, тем меньше будет его теплопроводность. Значения этого параметра для гексаалюминатов La_{1-x-y}M_xM'_yMgAl₁₁O₁₉ и Sm_{1-x-y}M_xM'_yMgAl₁₁O₁₉ приведены в табл.3. Из таблицы следует, что гексаалюминаты лантана имеют большую теплопроводность, чем гексаалюминаты самария. И хотя в формуле (1) не учитывается влияние на коэффициент теплопроводности дефектов кристаллической решетки, которые в сложных гексаалюминатах могут иметь значительную плотность, полученные данные подтверждаются экспериментальными результатами [2], в соответствии с которыми теплопроводность LaMgAl₁₁O₁₉ во всем температурном интервале 300–1100°C выше, чем у SmMgAl₁₁O₁₉ ($k \approx 2.72$ BTM⁻¹K⁻¹ и $k \approx 2.33$ BTM⁻¹K⁻¹ при 300 K, соответственно).

Состав	М, г	$V, \text{\AA}^3$	$\rho_{\text{peht}}, \Gamma c m^{-1}$	$\rho^{1/6}M^{2/3}, \times 10^3$
LaMgAl ₁₁ O ₁₉	763.99602	594.25056	4.2698	15.2407
$La_{0.7}Gd_{0.15}Yb_{0.15}MgAl_{11}O_{19}$	771.86787	591.61381	4.3330	15.1738
La _{0.7} Gd _{0.15} Y _{0.15} MgAl ₁₁ O ₁₉	759.24774	592.45441	4.2561	15.2958
La _{0.7} Y _{0.15} Yb _{0.15} MgAl ₁₁ O ₁₉	761.61624	592.09557	4.2719	15.2736
$La_{0.7}Y_{0.15}Lu_{0.15}\ MgAl_{11}O_{19}$	761.90529	592.06860	4.2738	15.2709
La _{0.7} Y _{0.15} Sc _{0.15} MgAl ₁₁ O ₁₉	742.40363	591.29396	4.1699	15.4737
SmMgAl ₁₁ O ₁₉	775.45052	586.81341	4.3887	15.1596
$Sm_{0.7}Yb_{0.3}MgAl_{11}O_{19}$	782.25452	586.01182	4.4333	15.0969
Sm _{0.7} Gd _{0.15} Yb _{0.15} gAl ₁₁ O ₁₉	779.88602	586.22237	4.4183	15.1189
$Sm_{0.7}Y_{0.15}Yb_{0.15}MgAl_{11}O_{19}$	769.63439	586.45982	4.3584	15.2182

Табл.3. Параметры для оценки теплопроводности гексаалюминатов La_{1-x-y} $M_xM'_yMgAl_{11}O_{19}$ и Sm_{1-x-y} $M_xM'_yMgAl_{11}O_{19}$.

Введение двойных примесей в гесаалюминат лантана уменьшает теплопроводность в случае пары Gd–Yb и повышает ее в той или иной степени для всех остальных парных примесей, где есть ионы иттрия. В случае гексаалюминатов самария наблюдается аналогичная картина. Таким образом, гексаалюминаты с двойными примесями могут представлять определенный интерес в качестве теплоизоляционных покрытий только при правильном подборе парных примесей как с точки зрения соотношения ионных радиусов, так и их атомных весов.

4. Заключение

Впервые методом твердофазных реакций получены редкоземельные гексаалюминаты лантана $RE_{1-x-y}M_xM'_yMgAl_{11}O_{19}$ (RE = La, Sm; M, M' = Gd, Yb, Lu, Y, Sc; x, y = 0, 0.15, 0.3). Определены параметры элементарной ячейки и фазовый состав синтезированных образцов. На основе исследования микроструктуры, элементного состава поверхности и поперечных сечений образцов показано, что скорость испарения оксида магния значительно выше, чем у других оксидов, что ведет к нарушению стехиометрии на поверхности образцов. Сравнительная оценка изменения теплопроводности при введении двойных примесей свидетельствует о том, что полученные гексаалюминаты могут представить интерес в качестве теплоизоляционных покрытий. Дальнейшая оптимизация изученных составов и условий их получения методом твердофазных реакций (температура, время, среда синтеза) будет необходима после получения экспериментальных данных по температурной зависимости их теплопроводности.

Авторы благодарны за финансирование работы в рамках гранта №310750 «THEBARCODE - Development of multifunctional Thermal Barrier Coatings and modeling tools for high temperature power generation with improved efficiency» FP7-NMP-2012-SMALL-6.

ЛИТЕРАТУРА

- 1. N.P. Bansal, D. Zhu. Surf. Coat. Technol, 202, 2698 (2008).
- 2. S.R. Choi, N.P. Bansal, D.M. Zhu. Ceram. Eng. Sci. Proc., 26, 11 (2005).
- 3. G.W. Schaefer, R. Gadow. Ceram. Eng. Sci. Proc., 20, 291 (1999).
- 4. C. Friedrich, R. Gadow, T. Schimer. J. Therm. Spray. Technol., 10, 592 (2001).
- 5. C. Friedrich, R. Gadow, M.H. Lischka. Ceram. Eng. Sci. Proc., 22, 375 (2001).
- 6. R. Gadow, M. Lischka. Surf. Coat. Technol., 151, 392 (2002).
- 7. N.P. Bansal, D. Zhu. Mater. Sci. Eng.: A, 459, 192 (2007).
- 8. X.L. Chen, Y.F. Zhang, X.H. Zhong, et al. J. Eur. Ceram. Soc., 30, 1649 (2010).
- 9. X.Q. Cao, Y.F. Zhang, J.F. Zhang, et al. J. Eur. Ceram. Soc., 28, 1979 (2008).
- 10. Y. Zhang, Q. Li, H. Li, Y. Cheng, et al. J. Crystal Growth, 310, 3884 (2008).
- 11. X. Chen, Y. Zhao, W. Huang, H. Maet, et al. J. Europ. Ceram. Soc., 31, 2285 (2011).
- 12. B. Zou, Z.K. Khan, L. Gu, X. Fanet, et al. Corrosion Science, 62, 192 (2012).
- X. Chen, Y.Zhao, L. Gu, B. Zou, Y. Wang, X. Cao. Corrosion Science, 53, 2335 (2011).
- 14. X. Chen, B. Zou, Y. Zhao, Y. Wanget, et al. J. Thermal Spray Technology, 20, 1328 (2011).
- 15. X. Chen, Y. Zhao, X. Fan, Y. Liu, B. Zouet, et al. Surf. Coat. Technol., 205, 3293 (2011).
- 16. X. Chen, L. Gu, B. Zou, Y. Wang, X. Cao. Surf. Coat. Technol., 206, 2265 (2012).
- 17. Z.-G. Liu, J.-H. Ouyang, Y. Zhou, R.-X. Zhu. J. Europ. Ceram. Soc., 30, 1649 (2013).
- 18. H-Z. Liu, Z.-G. Liu, J.-H. Ouyang, Y-M. Wang. Appl. Phys. Lett., 101, 161903 (2012).
- 19. Y. Liu, B. Jiang, Z. Huang, M. Fang. Low thermal-conductivity GdMgAl11019 high temperature-resistant ceramic material and preparation, China Patent, 200910243009.
- W. Schönwelski, F. Haberey, R. Leckebusch, M. Rosenberg, K. Sahl. J. Am. Ceram. Soc., 69, 7 (1986).

- 21. B.-K. Park, S.-S. Lee, J.-K. Kang, S.-H. Byeon. Bull. Korean Chem. Soc., 28, 1467 (2007).
- 22. D.M. Zhu, Y.L. Chen, R.A. Miller. Ceramic Engineering and Science Proceedings, 24, 525 (2003).
- 23. Y. Shen, R.M. Leckie, C.G. Levi, D.R. Clarke. Acta Mater., 58, 4424 (2010).
- 24. C. Kittel. Introduction to Solid State Physics. New York, Wiley, 2005.
- 25. W. Ge, H. Zhang, J. Wang, D. Ran, S. Sun, et al. J. Cryst. Growth, 282, 320 (2005).
- 26. D.R. Clarke. Surf. Coat. Technol., 163-164, 67 (2003).

ረԱՉՎԱԳՅՈՒՏ ՀՈՂԱՅԻՆ ՄԱԳՆԵՉԻՈՒՄԱՅԻՆ ՀԵՔՍԱԱԼՅՈՒՄԻՆԱՏՆԵՐԻ ՊԻՆԴ ԼՈՒԾՈՒՅԹՆԵՐԻ ՍԻՆԹԵՉՈՒՄԸ ԵՎ ՈՒՍՈՒՄՆԱՍԻՐՈՒՄԸ

Կ.Լ. ՀՈՎՀԱՆՆԵՍՅԱՆ, Ա.Ս. ԿՈԻՉԱՆՅԱՆ, Գ.Ռ. ԲԱԴԱԼՅԱՆ, Ա.Վ. ԵԳԱՆՅԱՆ, Ռ.Վ. ՍԱՐԳՍՅԱՆ, Վ.Ս. ԿՈԻՉԱՆՅԱՆ, Ա.Գ. ՊԵՏՐՈՍՅԱՆ, Վ.Ս. ՍՏԱԹՈՊՈՈՒԼՈՍ

Հետազոտվել են հազվագյուտ հողային հեքսաալյումինատների՝ RE_{1-ж-y}M_xM'yMgAl₁₁O₁₉ (RE = La, Sm; M, M'= Gd, Yb, Lu, Y, Sc; x, y = 0; 0.15; 0.3) պինդ փուլային ռեակցիաների մեթոդով, ստացման պայմանները։ Մի շարք կազմությունների համար, որոնք սինթեզվել են Ar/H2 միջավայրում, 1650-1690°C-ում բազմակի ջերմամշակման պրոցեսում, հասանելի է դարձել բարձր աստիճանի միափուլ ստացումը։ Այդ նմուշների ռենտգենագրամմաներում դիտվում են (107) և (114) ինտենսիվ դիֆրակցիոն գծեր, որոնք բնորոշ են հեքսալյումինատի փուլին։ Միկրոկառուցվածքի և էլեմենտային կազմության հետազոտությունները ցույց են տվել, որ նմուշների մակերևույթին մագնիումի պակասորդը կարող է հասնել մինչև 20%, մինչդեռ նմուշների ներսում կազմությունը ավելի համասեռ է և մոտ է ստեխիոմետրիականին։ Ըստ կառուցվածքի համասեռության և ջերմահաղորդականության մեծության գնահատմամբ, լանթանով հեքսալյումինատները՝ La_{1-x-y}M_xM'yMgAl₁₁O₁₉, հետևյալ զույգ խառնուկներով՝ Gd–Yb, Gd–Y, Y–Yb, Y–Lu, Y–Sc (x = y = 0.15), սամարիումով հեքսաալյումինատները՝ Sm_{1-x-y}M_xM'yMgAl₁₁O₁₉, Gd–Yb, Y–Yb (x = y = 0.15) զույգ խառնուկներով, ինչպես նաև Sm₀₋₇Yb₀₋₃MgAl₁₁O₁₉-ը, կարող են հետաքրքրություն ներկայացնել որպես ջերմամեկուսիչ ծածկույթներ։

PREPARATION AND INVESTIGATION OF LANTHANIDE MAGNESIUM HEXAALUMINATE SOLID SOLUTIONS

K.L. OVANESYAN, A.S. KUZANYAN, G.R. BADALYAN, A.V. YEGANYAN, R.V. SARGSYAN, V.S. KUZANYAN, A.G. PETROSYAN, V.S. STATHOPOULOS

Preparation conditions of rare-earth hexaaluminates $RE_{1-x-y}M_xM'_yMgAl_{11}O_{19}$ (RE = La, Sm; M, M' = Gd, Yb, Lu, Y, Sc; x, y = 0, 0.15, 0.3) by solid state reactions were investigated. For a number of compositions high degree single-phase products were obtained applying multi-step heat treatments under Ar/H2 atmosphere at 1650-1690°C. Intense (107) and (114) diffraction lines typical for the hexaaluminate phase are present in X-ray diffraction patterns. Studies of microstructure and of elemental composition have shown that magnesium deficiency on the sample surface may reach some 20%, while composition in the bulk is more homogeneous and close to stoichiometric. Following the estimations of structural homogeneity and thermal conductivity, lanthanum hexaaluminates $La_{1-x-y}M_xM'_yMgAl_{11}O_{19}$ with pair additives Gd–Yb, Gd–Y, Y–Yb, Y–Lu, Y–Sc (x = y = 0.15) and samarium hexaaluminates $Sm_{1-x-y}M_xM'_yMgAl_{11}O_{19}$ with pair additives Gd–Yb, Y–Yb (x = y = 0.15), as well as $Sm_{0.7}Yb_{0.3}MgAl_{11}O_{19}$, may present interest as thermal barrier coatings. УДК 539.2

ИЗМЕНЕНИЕ ЗАРЯДА В АКУСТОПЛАЗМЕ В ТЕЧЕНИЕ ПЕРИОДА МОДУЛЯЦИИ РАЗРЯДНОГО ТОКА

А.С. АБРААМЯН, К.Г. СААКЯН, Р.Ю. ЧИЛИНГАРЯН^{*}

Институт прикладных проблем физики НАН Армении, Ереван, Армения

^{*}e-mail: rychi072@gmail.com

(Поступила в редакцию 5 марта 2014 г.)

Исследованы динамические параметры акустоплазменного разряда, связанные с изменением концентрации носителей заряда во времени. Измерены текущие значения разности токов, измеренных со стороны анода и катода в зависимости от частоты модуляции тока разряда. Измерены вольт-кулонные характеристики акустоплазменного разряда. Наблюдаемый скачок величины заряда при плавном изменении напряжения на разрядной трубке можно рассматривать как фазовый переход в акустоплазме.

1. Введение

При модуляции тока разряда в разрядной трубке генерируются акустические колебания [1] и ее можно рассматривать как акустический резонатор. При этом реализуется режим стоячей волны и резко возрастает амплитуда акустических колебаний. В результате плазмо-акустического взаимодействия при прохождении модулированного тока, содержащего постоянную и переменную компоненты, плазма переходит из невозмущенного состояния в новое возмущенное состояние – акустоплазму, параметры которой существенно отличаются от параметров невозмущенной плазмы [1]. Это становится особенно важным, когда решения задач, описывающих процессы в плазме, могут давать большие скачки при небольших возмущениях управляющих параметров. В этом случае требуются достаточно большая база экспериментальных данных и высокая точность измерений [2].

Обычно в газоразрядной плазме, по аналогии с активным сопротивлением, измеряют разрядный ток только в одной точке последовательной цепи, например, со стороны анода или катода трубки. При измерениях динамических параметров в акустоплазме средние значения тока, измеренные со стороны анода (I_{an}) и катода (I_{cat}), равны, при нарушении этого условия в трубке будет накапливаться заряд. Однако мгновенные значения токов могут отличаться друг от друга, и это связано с изменением заряда в разрядной трубке в течение периода модуляции [3]. Изменение заряда в разрядной трубке означает изменение концентрации электронов, т.е. нарушение квазинейтральности плазмы в течение периода модуляции. Настоящая работа посвящена исследованию этого явления.

2. Методика эксперимента

На рис.1 приведена схема эксперимента. В качестве разрядной трубки (6) использовалась разрядная трубка CO_2 лазера ЛГ-23 с рабочей смесью CO_2 :N₂:He = 1:1:8 при давлении 8 Торр. Вольтметр (3) измеряет высоковольтное напряжение U_1 , которое формируется источником (1) на конденсаторе фильтра (2). Балластное сопротивление (4) является защитным и ограничивает максимальный ток в схеме. Амперметр (5) показывает значение тока со стороны анода (I_{an}) разрядной трубки.



Рис.1. Блок-схема эксперимента.

Амперметр (7) показывает значение тока со стороны катода разрядной трубки (I_{cat}). Вольтметр (8) показывает напряжение на промежутке анод-катод разрядной трубки (U_{tub}). Переменное сопротивление (9), модулирующее ток, который вытекает из катода разрядной трубки, собрано на высоковольтной электронной лампе. Конденсатор фильтра (2), большой емкости обеспечивает замыкание переменной составляющей тока во всем диапазоне частот модуляции сопротивления (9). Параллельно амперметрам (5), (7) и вольтметру (8) подключены устройства, позволяющие получать осциллограммы сигналов, т.е. определять мгновенные значения токов и напряжения. Измерительный комплекс и методы обработки результатов измерений описаны в работе [4].

3. Результаты и обсуждение

На рис.2 приведены результаты измерения мгновенных значений разности токов $\{I_{an} - I_{cat}\}$ в течение периода модуляции. Частота модуляции $f = 0.5 \text{ к}\Gamma$ ц, постоянная компонента разрядного тока, измеренная со стороны анода $\langle I_{an} \rangle = 11 \text{ мA}$, амплитуда переменной компоненты разрядного тока, измеренная со стороны катода $I_{cat} \sim = 9 \text{ мA}$.

По оси абсцисс отложено время (в микросекундах), а по оси ординат – разность токов (в мА). Измеренное среднее за период модуляции значение разности токов меньше 1 мкА, что в пределах ошибки измерения.

Из рис.2 следует, что кривая разности токов анода и катода имеет сложную форму и далека от синусоиды, хотя напряжение на трубке в эксперименте оставалось близким к синусоидальному (при разложении в ряд Фурье мощность



Рис.2. Изменение мгновенного (текущего) значения разности токов $(I_{an} - I_{cat})$ в течение периода модуляции; $f = 0.5 \text{ к}\Gamma \text{ц}$, $\langle I_{an} \rangle = 11 \text{ мA}$, $I_{cat} \sim = 9 \text{ мA}$.

первой гармоники более, чем в 10 раз превосходила мощность суммы остальных 6 гармоник). Изменением тока утечки на стенки внутри разрядной трубки можно пренебречь из-за очень малой емкости конденсатора, образованного стенкой. В работе [5] при исследовании ртутных разрядов переменного тока зондовыми методами получено, что на частотах меньше 1 кГц приращение тока обусловлено изменением концентрации электронов, а на частотах больше 1кГц концентрация электронов в течение периода модуляции не меняется, т.е. изменение тока обусловлено изменением скорости электронов [6]. Таким образом, при работе в области низких частот модуляции до нескольких кГц можно пренебречь влиянием ускорения электронов на изменение разностного тока $I_{an} - I_{cat}$. Тогда мгновенное изменение заряда q в разрядной трубке обусловлено мгновенным значением разностного тока:

$$\Delta q_i = (I_{\text{ani}} - I_{\text{cati}})\Delta t. \tag{1}$$

Экспериментально измеренное среднее значение за период модуляции $<\Delta q > = 0.05$ нКл, т.е. в пределах ошибки измерения оно равно нулю.

Изменение текущего (мгновенного) значения заряда $q(\tau)$ за время τ от начала периода модуляции имеет вид

$$q(\tau) = \sum_{i}^{\tau} (I_{\text{an}i} - I_{\text{cat}i}) \Delta t + C, \qquad (2)$$

где *i* означает измерение в данный момент времени (на интервале $\{0 - \tau\}$). Величина константы интегрирования *C* выбирается из условия, что $\langle q(\tau) \rangle = 0$. Это дополнительное условие снимает неоднозначность решения.

На рис.3 показано экспериментально полученное изменение заряда во времени (в течение 3-х периодов модуляции) для разных частот модуляции. По оси абсцисс отложено время в микросекундах, а по оси ординат – текущее значение заряда в нанокулонах, штриховой линией показано изменение $\sim U_{tub} = U(t) - \langle U \rangle$ переменной компоненты напряжения на разряде в вольтах.

Из рис.За видно, что при частоте модуляции разрядного тока 0.5 кГц форма кривой изменения заряда отличается от синусоиды. Кривая изменения заряда отстает от кривой напряжения по фазе на $\pi/2$. На участке возрастания напряжения в разрядной трубке при уменьшении заряда появляются его осцилляции. Вблизи максимума напряжения происходит почти линейное увеличение заряда в трубке. Соответственно, при уменьшении напряжения уменьшается величина заряда. Отметим, что положительная область определяется относительно средней величины заряда за период модуляции (2). При частоте модуляции 1 кГц (рис.3b) форма кривой изменения заряда мало отличается от синусоиды и находится в противофазе с изменением напряжения.



Рис.3. Изменение заряда внутри разрядной трубки во времени; $\langle I_{an} \rangle = 11 \text{ мA}, I_{cat} = 9 \text{ мA. a}) f = 0.5 \text{ к}\Gamma \text{ц}, \text{ b}) f = 1 \text{ к}\Gamma \text{ц}.$ Штриховая линия – $\sim U_{tub}$, сплошная – q.

Из рис.3 нельзя определить как меняется состояние акустоплазмы в течение периода модуляции. На рис.4а и b для двух частот модуляции разрядного тока представлена зависимость изменения заряда в разрядной трубке с акустоплазмой от мгновенного значения переменной компоненты напряжения на концах разрядной трубки (вольт-кулонная характеристика). По оси абсцисс отложено нормированное значение переменного напряжения на концах разрядной трубки $u = \{U(t) - \langle U \rangle\}/\langle U \rangle$, U(t) – текущее значение напряжения, а по оси ординат – текущее значение величины заряда q(t).



Рис.4. Вольт-кулонные характеристики; а) $f = 0.5 \text{ к}\Gamma \mu$, b) $f = 1 \text{ к}\Gamma \mu$.

Из рис.4 видно, что при частоте 0.5 кГц наблюдается широкая петля гистерезиса, а на частоте 1 кГц площадь петли гистерезиса существенно меньше. В плазме без акустического возмущения с увеличением концентрации электронов, т.е. с увеличением отрицательного заряда, напряжение на разряде падает [6,7]. Из рис.4а видно, что с увеличением напряжения на разрядной трубке отрицательный заряд увеличивается на 600 нКл (от минус 420 до минус 1000), поведение акустоплазмы аномально – растут и заряд, и напряжение. Затем, в районе максимума напряжения на трубке, отрицательный заряд скачком уменьшается на 2000 нКл. Этот скачок связан с фазовым переходом между различными состояниями акустоплазмы [7]. Когда мгновенное напряжение на трубке уменьшается, но превышает среднее значение, заряд практически не меняется, т.е. сохраняется последнее акустоплазменное состояние. Далее напряжение на трубке становится меньше среднего значения и отрицательный заряд снова увеличивается, что соответствует обычному поведению плазмы без акустического возмущения (при увеличении концентрации электронов напряженность поля на разряде падает), т.е., когда напряжение на трубке приближается к среднему значению, происходит фазовый скачок из акустоплазменного состояния в состояние невозмущенной плазмы. Затем, в начальный момент роста напряжения снова происходит фазовый переход из состояния невозмущенной плазмы в состояние акустоплазмы. При частотах модуляции меньше 0.5 кГц такое поведение сохраняется.

При частоте модуляции 1 кГц и выше (см. рис.4b) с увеличением напряжения на разрядной трубке отрицательный заряд увеличивается, а с уменьшением напряжения – уменьшается, т.е. плазма в течение всего периода модуляции находится в акустоплазменном состоянии и фазового перехода между невозмущенной плазмой и акустоплазмой нет.

4. Заключение

Таким образом нами получены следующие основные результаты.

- 1. Для точного определения динамических параметров акустоплазменного разряда необходимо одновременное измерение тока со стороны анода и со стороны катода разрядной трубки.
- В акустоплазме в течение периода модуляции текущее значение заряда, т.е. концентрация электронов в разрядной трубке, постоянно меняется и зависит от частоты модуляции разрядного тока.
- На вольт-кулонных характеристиках получены скачки заряда в течение периода модуляции и фазовый переход из состояния невозмущенной плазмы в состояние акустоплазмы.
- 4. Для частоты 0.5 кГц в течение периода модуляции происходит фазовый переход из состояния невозмущенной плазмы в состояние акустоплазмы. Для частоты 1 кГц и выше фазового перехода не происходит и постоянно сохраняется акустоплазменное состояние.

Авторы благодарят д.ф.-м.н. А.Г. Мкртчяна за постоянную помощь в работе и полезные замечания.

ЛИТЕРАТУРА

- A.R. Mkrtchyan, A.H. Mkrtchyan, A.S. Abrahamyan. Proc. of the Int. conf. Plasma Physics and Plasma Technology, PPPT-7, September 17-21, 2012, Minsk, Belarus, pp. 3-5.
- 2. А.Н. Тихонов, В.Я. Арсенин. Методы решения некорректных задач. М., Наука, 1986.
- 3. Q.G. Sahakyan. Int. conf. on Electron, positron, neutron and X-ray scattering under external influences, 18 22 October 2011, Yerevan Meghri, Armenia. Book of abstracts, pp. 50-51.
- А.Г. Мкртчян, А.С. Абраамян, К.В. Акопян, К.Г. Саакян. Int. Sci. Conf. on Modern Issues of Applied Physics, 30 March 2011, Tbilisi, Georgia. Abstract digest, pp.76-77.
- А.С. Федоренко. Экспериментально-расчетные исследования характеристик положительного столба разряда и совершенствование люминесцентных ламп. Кандидатская диссертация, М., 1980.
- 6. Ю.П. Райзер. Физика газового разряда. М., Наука, 1992.
- A.S. Abrahamyan, R.Yu. Chilingaryan, Q.G. Sahakyan. VII Int. conf. Plasma Physycs and Plasma Technology, PPPT-7, September 17-21, 2012, Minsk, Belarus, Proc., v. 1, pp.197-199.

ԼԻՑՔԻ ՓՈՓՈԽՈՒԹՅՈՒՆԸ ԱԿՈՒՍՏԱՊԼԱԶՄԱՅՈՒՄ ՊԱՐՊՄԱՆ ՀՈՍԱՆՔԻ ՄՈԴՈՒԼԱՑՄԱՆ ՊԱՐԲԵՐՈՒԹՅԱՆ ԸՆԹԱՑՔՈՒՄ

Ա.Ս. ԱԲՐԱՀԱՄՅԱՆ, Ք.Գ. ՍԱՀԱԿՅԱՆ, Ռ.Յու. ՉԻԼԻՆԳԱՐՅԱՆ

Հետազոտված են ակուստապլազմային պարպման դինամիկ պարամետրերը՝ կապված լիցքակիրների կոնցենտրացիայի փոփոխությունից ժամանակի ընթացքում։ Չափված են հոսանքների տարբերությունների ընթացիկ արժեքները, չափված անոդի և կատոդի կողմերից, կախված պարպման հոսանքի հաձախությունից և մոդուլացումից։ Չափված են ակուստապլազմային պարպման վոլտ-կուլոնյան բնութագրերը։ Լարվածության սահուն փոփոխության դեպքում լիցքի մեծության դիտարկվող թոիչքը պարպման խողովակում կարելի է դիտել որպես փուլային անցում ակուստապլազմայում։

VARIATION OF CHARGE IN ACOUSTOPLASMA DURING THE PERIOD OF MODULATION OF THE DISCHARGE CURRENT

A.S. ABRAHAMYAN, Q.G. SAHAKYAN, R.Yu. CHILINGARYAN

Dynamic parameters of acoustoplasmic discharge associated with the change of concentration of charge carriers in time are investigated. Instant values of the difference of the currents are measured by the anode and cathode sides, depending on the frequency and the modulation of the discharge current. The volt-coulomb characteristics of acoustoplasmic discharge are also measured. A jump in the charge with gradually varying the voltage on the discharge tube can be considered as a phase transition in acoustoplasma.

УДК 548.732

ВЛИЯНИЕ ВЗАИМНОЙ ДИФФУЗИИ ГЕТЕРОМАТЕРИАЛОВ НА ДИФРАКЦИЮ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ НА СВЕРХРЕШЕТКЕ С ДЕФЕКТОМ УПАКОВКИ

А.М. МАНУКЯН*

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения ^{*}hasmikm@ysu.am

(Поступила в редакцию 20 сентября 2013 г.)

Проведено теоретическое исследование зависимости интенсивности рентгеновских лучей, отраженных от сверхрешетки с дефектом упаковки между слоями, от степени взаимной диффузии гетероматериалов. Получены выражения для коэффициента отражения рентгеновских лучей в направлении сателлитов в зависимости от скачка фазы волны на дефекте упаковки, глубины его залегания и степени взаимной диффузии гетероматериалов, входящих в состав сверхрешетки.

1. Введение

Модулированные структуры представляют собой кристаллы, в которых существует периодическая функция смещения с периодом искажений, намного превышающим постоянную решетки. В этом случае на электроны, помимо периодического потенциала кристаллической решетки, действует дополнительный потенциал с намного большим периодом. Такие кристаллы принято называть сверхрешетками (СР). Наличие дополнительного потенциала в СР приводит к тому, что кристалл приобретает ряд специфических свойств, отсутствующих у однородного образца. Поскольку длина рентгеновской волны намного меньше периода дополнительного потенциала, то дифракция на нем возможна при малых углах падения. Если же рентгеновские лучи претерпевают брэгговскую дифракцию, то в кристалле возбуждаются модулированные волны с периодом, намного превышающим длину рентгеновской волны, и периодические искажения служат дифракционной решеткой для таких модулированных волн. Следствием этой дифракции является появление сателлитов вокруг основного максимума при дифракции рентгеновских лучей на СР.

Особое значение имеют СР на основе гетеропереходов. Это искусственные СР с заранее заданными параметрами, которые, благодаря ряду уникальных свойств (участки отрицательной дифференциальной проводимости на вольтамперной характеристике, резкая анизотропия внутризонного оптического поглощения и т.д.), имеют широкое применение в микроэлектронике и вычислительной технике [1-3]. Динамическая дифракция рентгеновского излучения применена в [4] для гармонической СР. В работе [5] развита динамическая теория дифракции рентгеновских лучей на одномерной идеальной СР произвольной модели. Полученные результаты применены для СР разных моделей [6].

Гетероэпитаксиальные СР получают поочередным нанесением друг на друга тонких слоев различных полупроводников с близкими межплоскостными расстояниями. При этом возможно привнесение в СР различных дефектов, ухудшающих ее параметры. В связи с этим, очень важно исследование влияния дефектов на дифракционную картину при дифракции рентгеновских лучей на СР. Исследования гетероэпитаксиальных СР различными рентгеновскими методами проведены в работах [7-11]. В работах [7,11] для интерпретации экспериментальных результатов проводился учет непостоянства периода СР и диффузное рассеяние на тепловых фононах и несовершенствах СР. В работах [9,10] исследовано образование квантовых точек и проволок в СР. Влияние взаимной диффузии гетероматериалов бислоя на дифракционную картину при отжиге идеальной СР исследовано в работе [8].

Одним из возможных дефектов при получении гетероэпитаксиальных СР является дефект упаковки между слоями. Настоящая работа посвящена исследованию влияния взаимной диффузии гетероматериалов бислоя на дифракцию рентгеновских лучей на СР с дефектом упаковки.

2. Сверхрешетка с дефектом упаковки

Рассмотрим гетероэпитаксиальную сверхрешетку толщиной Nz_0 (z_0 – период СР, N – число идентичных слоев). Пусть на глубине N_1z_0 в СР содержится дефект упаковки. При этом плоскость дефекта делит кристалл на две СР толщиной N_1z_0 и N_2z_0 , соответственно ($N_1 + N_2 = N$), в промежутке между которыми волны претерпевают скачок фазы $\alpha = 2\pi h u$, где h – вектор дифракции, u – вектор смещения. Пусть на эту СР падает плоская монохроматическая рентгеновская волна единичной амплитуды. Введем следующие обозначения: Φ_h и Φ_0 – соответственно, амплитуды отражения и прохождения СР толщиной N_{z_0} ; r_{hN_i} , $r_{\bar{h}N_i}$ и t_{0N_i} , $t_{\bar{0}N_i}$ – соответственно, амплитуды отражения и прохождения СР толщиной N_{iz_0} (i = 1; 2), при этом черточка соответствует падению волны на обратную сторону отражающих плоскостей. Тогда, согласно [5], амплитуды отражения и прохождения СР имеют следующий вид:

$$\Phi_h = \exp(-i\alpha/2)r_{h_{N_1}}t_{\bar{0}N_2} + \exp(i\alpha/2)t_{0_{N_1}}r_{h_{N_2}}, \qquad (1)$$

$$\Phi_0 = \exp(-i\alpha/2)r_{h_{N_1}}r_{\bar{h}_{N_2}} + \exp(i\alpha/2)t_{0_{N_1}}t_{0_{N_2}}, \qquad (2)$$

Как показано в [5], поскольку в гетероэпитаксиальных СР $z_0 \ll \Lambda$ (Λ – экстинкционная длина), то для получения амплитуд отражения и прохождения СР в направлениях дифракционных максимумов достаточно в соответствующих выражениях для идеального кристалла произвести замену Фурье-компоненты

поляризуемости кристалла χ_h на модифицированную Фурье-компоненту χ_{hm} :

$$\left|\chi_{hm}\right| = M_m \left|\chi_h\right|,\tag{3}$$

где M_m – структурный фактор СР, m – номер дифракционного максимума (сателлита).

В этом случае, подставляя в выражения (1) и (2) формулы амплитуд прохождения и отражения СР, для коэффициента отражения рентгеновских лучей от сверхрешетки с дефектом упаковки получаем следующее выражение:

$$R_{m} = R_{m0} - \left| f \right|^{2} \left(\frac{\sin^{2}(\alpha/2)}{p^{2} + 1} \sin(2A_{1m}) \sin(2A_{2m}) - \frac{4p\sin(\alpha/2)}{(p^{2} + 1)^{2}} \sin(2A_{1m}) \sin(2A_{2m}) (\sqrt{p^{2} + 1}\cos(\alpha/2)\sin(A_{m}) + p\sin(\alpha/2)\sin(A_{1m})\sin(A_{2m})) \right).$$
(4)

Здесь введены следующие обозначения:

$$R_{m0} = |f|^2 \sin^2(A_m) / (p^2 + 1)^2$$
(5)

– коэффициент отражения рентгеновской волны от одномерной идеальной сверхрешетки толщиной *Nz*₀;

$$A_m = \pi N z_0 \beta M_m, \qquad (6)$$

$$A_{\rm lm} = \pi N_1 z_0 \beta M_m, \qquad (7)$$

$$A_{2m} = \pi N_2 z_0 \beta M_m, \qquad (8)$$

$$\beta = kC(\chi_h \chi_{\bar{h}})^{1/2} / (\gamma_0 \gamma_h)^{1/2}, \qquad (9)$$

$$f = (\chi_h / \chi_{\bar{h}})^{1/2},$$
 (10)

 γ_0 и γ_h – соответственно, направляющие косинусы углов падения и отражения; *p* – безразмерный параметр, характеризующий отклонение от направления дифракционного максимума в пределах соответствующего сателлита.

Относительное изменение интенсивности в направлении m-го сателлита (p = 0), обусловленное наличием дефекта упаковки, имеет следующий вид:

$$R_r = \sin^2(\alpha/2)\sin(2A_{\rm im})\sin(2A_{\rm 2m})/\sin^2(A_{\rm m}).$$
(11)

Как видно из выражения (11) с учетом (6)–(10), относительное изменение интенсивности зависит как от скачка фазы на дефекте упаковки и глубины его залегания, так и от конкретной модели СР и номера сателлита. Относительное изменение интенсивности при отсутствии взаимной диффузии гетероматериалов исследовано в работе [12].

3. Взаимная диффузия гетероматериалов

Искусственные сверхрешеточные кристаллы на основе гетеропереходов, как уже указывалось во введении, представляют собой систему чередующихся

слоев разных составов с близкими межплоскостными расстояниями (типа GaAs–AlAs). На раннем этапе после изготовления, когда отсутствует взаимная диффузия полупроводниковых соединений, входящих в состав бислоя, СР могут быть описаны прямоугольной (квадратичной, если слои из разных материалов имеют одинаковую толщину) моделью. Структурный фактор СР при квадратичной модели имеет следующий вид [6]:

$$M_{m} = \begin{cases} (\varepsilon_{0}/\pi) |\sin(\pi\varepsilon_{0}/4)/(m^{2}-\varepsilon_{0}^{2}/4)|, & m = 2n, \\ (\varepsilon_{0}/\pi) |\cos(\pi\varepsilon_{0}/4)/(m^{2}-\varepsilon_{0}^{2}/4)|, & m = 2n+1, \end{cases}$$
(12)

где

$$\varepsilon_0 = 2kz_0 \sin \overline{\Theta}_B tg \overline{\Theta} \Delta d / \overline{d}$$
(13)

– параметр, характеризующий степень несоответствия гетероматериалов, Δd – разность межплоскостных расстояний гетероструктур, черточка обозначает усреднение по периоду сверхрешетки.

Со временем происходит взаимная диффузия гетероматериалов, входящих в состав бислоя СР и квадратичная модель уже не подходит для описания сверхрешетки. Поскольку процесс диффузии происходит медленно, то вначале, когда между слоями гетероматериалов образуются диффузные слои, СР, описывается трапециевидной моделью. Если слои СР достаточно тонкие, то со временем вследствие взаимной диффузии полупроводниковые материалы, из которых состоит СР, будут перекрывать друг друга по всей толщине слоя. Такие СР описываются синусоидальной или треугольной моделью.

Пусть через некоторое время после изготовления сверхрешетки образовался переходной (диффузный) слой толщиной z_d . Толщины идеальных слоев обозначим через z_1 и z_2 . В этом случае СР описывается трапециевидной моделью, структурный фактор которой имеет следующий вид:

$$M_{m} = \left| \frac{\sin(\pi p_{1m} \varepsilon_{1})}{\pi p_{1m} \varepsilon_{0}} + (-1)^{m} \frac{\sin(\pi p_{2m} \varepsilon_{2})}{\pi p_{2m} \varepsilon_{0}} - F_{1m} - (-1)^{m} F_{2m} \right|,$$
(14)

где введены следующие обозначения:

$$p_{1m} = \frac{m - \varepsilon_2 - \varepsilon_d}{\varepsilon_0}, \qquad (15)$$

$$p_{2m} = \frac{m + \varepsilon_1 + \varepsilon_d}{\varepsilon_0}, \qquad (16)$$

$$\varepsilon_{j} = 2kz_{j}\sin\overline{\theta}_{B}\mathrm{tg}\overline{\theta}\Delta d/\overline{d} \quad (j=0;1;2;d), \qquad (17)$$

$$F_{jm} = \frac{\sqrt{\varepsilon_d}}{\varepsilon_0} (\sin(\pi p_{jm} \varepsilon_j) U_{3/2}(2q_{jm}^2, 0) - (-1)^j \cos(\pi p_{jm} \varepsilon_j) U_{1/2}(2q_{jm}, 0)), \quad (18)$$

$$q_{jm} = \sqrt{\pi \varepsilon_d p_{jm}} \quad (j = 1; 2), \qquad (19)$$

$$U_{v}(2x,0) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^{k} x^{v+2k}}{\Gamma(v+2k+1)}$$
(20)

- функция Ломмеля двух переменных.

Подставив в выражения (14)-(20) $z_d = 0$ и учитывая, что в квадратичной модели $z_1 = z_2$, получим формулу (12). С другой стороны, при полной взаимной диффузии полупроводниковых материалов, из которых состоит СР, подставив в (14)-(20) $z_1 = z_2 = 0$, получим структурный фактор треугольной модели.

На рис.1 приведены зависимости коэффициента отражения основного максимума (m = 0) СР с дефектом упаковки в зависимости от безразмерного параметра (p) отклонения от направления дифракционного максимума при $\alpha = \pi$ и глубине залегания дефекта $N_1 z_0 = 0.1 N z_0$.



Рис.1. Зависимость интенсивности основного максимума R_0 от степени взаимной диффузии гетероматериалов: (a) $z_d = 0$; (b) $2z_d = 0.4z_0$; (c) $2z_d = 0.6z_0$; (d) $z_1 = z_2 = 0$.

Первый график (a) соответствует квадратичной модели, когда диффузный слой отсутствует. В дальнейшем образуется диффузный слой, суммарная величина которого в случае (b) составляет 40%, а в случае (c) 60% бислоя. Наконец, график (d) изображает коэффициент отражения при полной взаимной диффузии гетероматериалов.

Как видно из рисунка, с увеличением взаимной диффузии гетероматериалов происходит перераспределение интенсивности основного максимума. При этом величина основного максимума уменьшается, а величина осцилляций увеличивается.

4. Заключение

В работе показано, что при динамической дифракции рентгеновских лучей на сверхрешетке с дефектом упаковки наличие взаимной диффузии полупроводниковых соединений, входящих в состав бислоя, приводит к перераспределению интенсивности отраженной волны. При $\alpha = \pi$ и глубине залегания дефекта $N_1 z_0 = 0.1 N z_0$ образование диффузного слоя приводит к подавлению интенсивности в направлении основного максимума. Чем больше величина диффузного слоя, тем больше его влияние на дифракционную картину.

ЛИТЕРАТУРА

- 1. А.Я.Шик. ФТП, 8, 1841 (1974).
- 2. Л.В.Голубев, Е.И.Леонов. Сверхрешетки. М., Знание, 1977.
- 3. В.Т.Маслюк, П.А.Феннич. Полупроводниковые сверхрешетки. М., Зарубежная электронная техника, 1981.
- 4. Ю.П.Хапачев, Г.Ф.Кузнецов. Кристаллография, 28, 27 (1983).
- 5. D.M.Vardanyan, H.M.Manoukyan, H.M.Petrosyan. Acta Cryst., A41, 212 (1985).
- 6. D.M.Vardanyan, H.M.Manoukyan, H.M.Petrosyan. Acta Cryst., A41, 218 (1985).
- 7. А.М.Афанасьев, А.А.Зайцев, Р.М.Имамов. Кристаллография, 43, 1 (1998).
- 8. C.Engström, J.Birch, et al. J. Vac. Sci. Technol. A, 17, 5 (1999).
- 9. V.Holy, J.Stangl, G.Springholz, et al. J. Phys. D: Appl. Phys., 34, A1 (2001).
- 10. T.Roch, V.Holy, A.Daniel, et al. J. Phys. D: Appl. Phys., 34, A6 (2001).
- 11. А.А.Зайцев, И.А.Субботин, Э.М.Пашаев и др. Пленки-2004, Материалы Международной научной конференции, М., МИРЭ, 2004, с.49.
- 12. А.М.Манукян. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 10, 17 (2007).

ՌԵՆՏԳԵՆՅԱՆ ՃԱՌԱԳԱՅԹՆԵՐԻ ԴԻՖՐԱԿՑԻԱՅԻ ՎՐԱ ՆՅՈՒԹԵՐԻ ՓՈԽԱԴԱՐՁ ԴԻՖՈՒՉԻԱՅԻ ԱՉԴԵՑՈՒԹՅՈՒՆԸ ԴԱՐՍՄԱՆ ԱՐԱՏ ՊԱՐՈՒՆԱԿՈՂ ԳԵՐՑԱՆՑԵՐՈՒՄ

Հ.Մ. ՄԱՆՈՒԿՅԱՆ

Տեսականորեն հետազոտված է ռենտգենյան Հառագայթների դինամիկ դիֆրակցիան դարսման արատ պարունակող գերցանցերում՝ գերցանցը կազմող նյութերի փոխադարձ դիֆուզիայի պայմաններում։ Արտածված է ռենտգենյան Հառագայթների անդրադարձման գործակցի բանաձևը սատելիտների ուղղությամբ՝ կախված դարսման արատի խորությունից, նրա վրա ալիքի կրած փուլի թռիչքից և գերցանցը կազմող նյութերի փոխադարձ դիֆուզիայի աստիՀանից։

INFLUENCE OF INTERDIFFUSION OF HETEROMATERIALS ON X-RAY DIFFRACTION BY SUPERLATTICE WITH STACKING FAULT

H.M. MANUKYAN

X-ray dynamic diffraction by a superlattice with a stacking fault between the layers in the case of interdiffusion of superlattice components is considered theoretically. Expressions for the X-ray reflectance within satellite limits, depending on the wave's phase jump on the stacking fault, its depth and the extent of interdiffusion of superlattice components are obtained.

УДК 541.64

ОРИЕНТАЦИОННЫЙ ПОРЯДОК В ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИТАХ, СОДЕРЖАЩИХ НАНО-НАПОЛНИТЕЛИ: ЭФФЕКТ ОСМОТИЧЕСКОГО ДАВЛЕНИЯ

З.А. ГРИГОРЯН*

Горисский государственный университет, Горис, Армения ^{*}e-mail: zareh01@rambler.ru

(Поступила в редакцию 11 ноября 2013 г.)

Теоретически рассмотрено фазовое поведение коротких молекул двухцепочечной ДНК, растворенных в полимерной водосодержащей матрице. Показано, что фазовое поведение фрагментов ДНК определяется эффективным притяжением, возникающим за счет поливалентных катионов, растворенных в воде, и осмотическим давлением гибкоцепного полимера.

1. Введение

Создание полимерных материалов с нано-наполнителями в последнее время является чрезвычайно актуальной задачей. Одним из ключевых элементов такого рода материалов является возможность изменения свойств этих материалов под влиянием внешних факторов [1]. Решение этой задачи, в частности, связано с контролем за расположением и/или ориентацией наполнителя в объеме или на поверхности. Интересным представляется подход, когда контролируемая самосборка осуществляется с использованием в качестве шаблона биологических молекул (например, ДНК). Перспективность такого подхода обусловлена малыми размерами ДНК (2 нм в диаметре), контролируемой длиной и, в особенности, возможностью межмолекулярного узнавания при образовании пар оснований.

Использование молекул ДНК в качестве функционального элемента нанокомпозитов исследовалось ранее в [2-5]. Так, в [2] были рассмотрены различные аспекты взаимодействия ДНК с углеродными нанотрубками (УНТ), в [3] – влияние ДНК на растворимость УНТ, а в [5] – самосборка ДНК – липид комплексов.

В данной работе, в основном, рассматривается фазовое поведение коротких фрагментов ДНК, растворенных в полимерной матрице. В частности, рассматривается влияние осмотического давления гибкоцепного полимера на образование ориентационно - упорядоченной фазы двунитевой ДНК. Показано, что асимптотическое давление гибкоцепного полимера вносит существенный вклад в свободную энергию ориентационного упорядочения фрагментов ДНК.
2. Свободная энергия смешения и осмотическое давление гибкоцепного полимера

Основой двойной спирали ДНК является однородный цепочечный сахаро-фосфатный остов, ко всем сахарам которого присоединены боковые группы– нуклеотиды (азотистые основания) четырех сортов: два пиримидиновых– цитозин (Ц) и тимин (Т), и два пуриновых – аденин (А) и гуанин (Г). При образовании двойной спирали ДНК две основные сахаро-фосфатные нити навиты снаружи, ковалентно присоединенные к ним азотистые основания находятся внутри; основания имеют плоскую форму и ориентируются поперек оси спирали. Они образуют комплементарные АТ и ГЦ пары и соединены водородными связями. Подобная структурная организация существенно ограничивает набор доступных конформаций цепей ДНК и делает двойную спираль ДНК достаточно жесткой. Жесткость двунитиевой ДНК характеризуется ее персистентной длиной \tilde{l} , которая оценивается как 50 нм, или 150 пар оснований и которая может быть определена как характерный масштаб, на котором сохраняется ориентация двойной спирали. Короткая молекула двунитиевой ДНК, контурная длина которой $L_r \cong \tilde{l}$ может быть аппроксимирована жестким стержнем.

Рассмотрим смесь N_r молекул двунитиевой ДНК, представленной как стержень длины L_r и диаметра d, а также N_p молекул гибкоцепного полимера контурной длины n_p . На основе теории Онсагера, включающей в себя как взаимодействия исключенного объема, так и ориентационно - зависимые притягивающие взаимодействия, свободная энергия смешения может быть представлена в виде

$$\Delta F_{mix} = F(N_p, N_r) - F_p(N_p) - F_r(N_r), \qquad (1)$$

где $F(N_p, N_r)$ – свободная энергия смеси двух типов молекул, $F_p(N_p)$ и $F_r(N_r)$ – свободные энергии чистого полимера и чистой ДНК в изотропной фазе, соответственно. Свободная энергия смеси жестких стержней и полимера была получена в [6] в виде

$$\frac{\Delta F_{mix}}{Nk_BT} = \frac{\Phi_p}{n_p} \ln \Phi_p + \frac{\Phi_r}{n_r} \ln \Phi_r + \chi \Phi_p \Phi_r + \frac{1}{2} (\chi_a + 5/4) \Phi_r^2 S^2 - \frac{\Phi_r}{n_r} \ln \frac{I_0(\Gamma_0 \Phi_r S)}{2}.$$
(2)

Третий член в уравнении (2) отвечает за изотропные взаимодействия между гибкоцепным полимером и молекулами ДНК. Последние два члена в выражении (2) представляют собой изменение свободной энергии, вызванное ориентацией молекул ДНК при образовании нематической фазы. Первые два члена в (2) описывают энтропию смешения. Здесь и далее предполагается, что система является несжимаемой:

$$\varphi_p + \varphi_r = 1$$
,

где $\varphi_p = v_p N_p / V$ есть объемная доля гибкоцепного полимера. Здесь $N = V/a^3$ – полное число вершин решетки, $\chi_a = \pi d^3 \chi_{rr} / 4$, $n_r = L_r / d$ и параметр взаимодействия Флори–Хаггинса [7]

$$\chi = a^3 \left(\frac{2v_{pr}}{v_p v_r} - \frac{v_{pp}}{v_p^2} - \frac{v_{rr}}{v_r^2} \right).$$
(3)

Притяжение между молекулами ДНК характеризуется безразмерным параметром $\chi_a = U_a/(k_BT)$, где U_a – ориентационно-зависимое взаимодействие Майера–Заупе между молекулами ДНК, рассматриваемыми как жесткие стержни [8].

Происхождение притяжения, описываемого параметром χ_a , обычно обусловлено дисперсионными взаимодействиями между молекулами нематогена. Однако, в случае коротких фрагментов ДНК, растворенных в полимерном расплаве, притяжение может быть обусловлено и другими факторами. Как известно [9], осмотическое давление нейтрального гибкоцепного полимера является одним из факторов, способствующих образованию конденсированной (гексагонально упакованной) фазы двунитевой ДНК. При этом, свободная энергия ДНК на единицу длины $f = F/L_r$ связана с осмотическим давлением гибкоцепного полимера соотношением

$$\frac{\partial f}{\partial d} = \pi d \sqrt{3} \, ,$$

где π – осмотическое давление гибкоцпного полимера, а *d* – среднее расстояние между «стержнями» ДНК в гексагональной упаковке. Таким образом, даже в отсутствие притягивающих ориентационно-зависимых ДНК–ДНК взаимодействий возможно эффективное притяжение за счет осмотического давления полимерного раствора. Кроме того, противоины, растворенные в полимерной матрице, будут вносить свой вклад в значения параметров χ_a и χ [10].

Химический потенциал в нематической фазе записывается в виде

$$\frac{\Delta\mu_{p}(\phi_{p},S)}{k_{B}T} = \frac{\mu_{p} - \mu_{p}^{0}}{k_{B}T} = \frac{\partial\Delta F_{mix}}{k_{B}T\partial N_{p}} = \ln\phi_{p} + (1 - n_{p} / n_{r})(1 - \phi_{p}) + n_{p}\chi(1 - \phi_{p})^{2} + \frac{n_{p}}{2}(\chi_{a} + 5 / 4)S^{2}(1 - \phi_{p})^{2}$$
(6)

для гибкоцепного полимера и

$$\frac{\Delta\mu_{r}(\phi_{p},S)}{k_{B}T} = \frac{\mu_{r} - \mu_{r}^{0}}{k_{B}T} = \frac{\partial\Delta F_{mix}}{k_{B}T\partial N_{r}} = \ln(1 - \phi_{p}) + (1 - n_{r} / n_{p})\phi_{p} + n_{r}\chi\phi_{p}^{2} + \frac{n_{r}}{2}(\chi_{a} + 5 / 4)S^{2}(1 - \phi_{p})^{2} - \ln\frac{I_{0}(\Gamma_{0}\phi_{r}S)}{2}$$
(7)

для молекул ДНК. В изотропной фазе химические потенциалы определяются как $\Delta \mu_r(\phi_p, 0)$ и $\Delta \mu_p(\phi_p, 0)$.

3. Результаты и обсуждение

Фазовый переход из изотропной в нематическую фазу характеризуется уравнениями

$$\Delta\mu_p(\varphi_p, 0) = \Delta\mu_p(\varphi_p, S) \tag{8}$$

И

$$\Delta \mu_r(\phi_p, 0) = \Delta \mu_r(\phi_p, S) .$$
(9)

В работах [6,8] показано, что, если $\Gamma_0 = \frac{L_r}{d} \left(\chi_a + \frac{5}{4} \right)$, то переход фрагментов

ДНК из изотропной в жидко кристаллическую фазу определяется условием

$$\frac{1}{\Gamma_0^{NI} \phi_r} = 4.55 \,. \tag{10}$$

Нематическая фаза будет стабильной при $1/\Gamma_0 < 1/\Gamma_0^N$. Можно показать, что температура перехода T_{IN} между изотропной и нематической фазами определяется уравнением

$$\chi_{IN} = \frac{1}{\alpha} \frac{4.55 - 1.25n_r(1 - \varphi_p)}{n_r(1 - \varphi_p)},$$
(11)

где $\alpha = \chi_a/\chi$ – параметр взаимодействия нематика, который предполагается температурно-независимым, $\chi_{IN} = \chi(T_{IN})$ и $\chi(T)$ – температурно-зависимый параметр Флори–Хаггинса. Взаимодействие ДНК–ДНК предполагается притягивающим. Следовательно, $\chi_a > 0$ и параметры χ и α имеют один и тот же знак. Таким образом, объемная доля полимера ϕ_p удовлетворяет условию

$$1 - \varphi_p < \frac{4.55}{1.25n_r} \,. \tag{12}$$

Если $\alpha > 0$, то переход из изотропной фазы в нематическую в смеси ДНК – гибкоцепной полимер должен наблюдаться при положительных значениях параметра Флори–Хаггинса $\chi_{IN} > 0$. Таким образом, если объемная доля ДНК $\phi_r = 1 - \phi_p \approx 10^{-3}$ (см. (12)), молекулы ДНК будут ориентироваться в нематической фазе при $\chi_{IN} > 0$ при комнатных температурах. Фазовая диаграмма представлена на рис.1.

Как было показано выше, параметр эффективного притяжение χ_a может зависеть от осмотического давления гибкоцепного полимера. Используемое в настоящей работе приближение среднего поля явлется адекватным приближением для полимерного расплава, где малы флуктуации плотности полимера. При этом, осмотическое давление гибкоцепного полимера в интересующей нас области $\varphi_p \approx 1$ ведет себя в виде [7]



Рис.1. Фазовая диаграмма ДНК, растворенной в матрице гибкоцепного полимера для $n_r = 10^3$.

$$a^{3} \frac{\pi}{k_{B}T} \cong \ln\left(\frac{1}{1-\varphi_{p}}\right)$$
(13)

и таким образом вносит существенный вклад в энергию ориентационно-зависимого притяжения ДНК–ДНК. В то же время, эффект осмотического давления будет зависеть от среднего расстояния между «стержнями» ДНК в нематической фазе, а значит, от эффектов фазового расслоения между гибкоцепным полимером и жесткими сегментами двунитевой ДНК.

ЛИТЕРАТУРА

- 1. M. Moniruzzaman, K.I. Winey. Macromolecules, 39, 5194 (2006).
- 2. H. Gao, Y. Kong. Ann. Rev. Mater. Res., 34, 123 (2004).
- 3. M. Zheng et al. Nature Materials, 2, 338 (2003).
- 4. N.C. Seeman. Annu. Rev. Biochem., 79, 65 (2010).
- 5. L. Gao, J. Cao, W. Fang. J. Phys. Chem. B, 114, 7261 (2010).
- 6. A. Matsuyama, T. Kato. J. Chem. Phys., 105, 1654 (1996).
- 7. P.-G. de Gennes. Scaling Concepts in Polymer Physics. Cornell Univ. Press, 1979.
- 8. P.-G.de Gennes, J.Prost. The Physics of Liquid Crystals, Oxford, Clarendon Press, 1993.
- 9. R. Podgornik, H.H. Strey, D.C. Rau, V.A. Parsegian. Biophys. Chem., 57, 111 (1995).
- 10. A.A. Kornyshev, D.J. Lee, S. Leikin, A. Wynveen. Rev. Mod. Phys., 79, 943 (2007).

ORIENTATIONAL ORDERING IN POLYMER COMPOSITES WITH NANOFILLERS: THE OSMOTIC PRESSURE EFFECT

Z.A. GRIGORYAN

We consider the phase behavior of short double-stranded DNA molecules dissolved in the water-containing polymer matrix. Flexible-chain polymer molecules are assumed to be neutral. The phase behavior of DNA fragments is governed by the effective attraction, occurring due to polyvalent cations dissolved in water, and the osmotic pressure of the flexible polymer.

ԲՈՎԱՆԴԱԿՈՒԹՅՈՒՆ

U.U.	Աղինյան, Կ.Ա. Իսպիրյան, Մ.Կ. Իսպիրյան, Գ.Ա. Սարգսյան. Չերենկովյան-	
	անցումային ձառագայթում հաձախականությունների գամմա-տիրույթում	299
ሆ.ቡ.	Հակոբյան, Ա.Ա. Ղանդեվոսյան, Ռ.Ս. Հակոբյան, Յու.Ս. Չիլինգարյան.	
	Նանոմասնիկներով հարստացված հեղուկ բյուրեղային հարթ-զուգահեռ բջջում	
	համասեռ կողմնորոշման կայունության մասին	309
U.Ե.	Մարտիրոսյան . Շրջանային բեվեռացված լույսի ուղղահայաց բաղադրիչների	
	փուլային շեղման ացդեցությունը՝ մրրիկային փուլային սկավառակում դիֆ-	
	րակցիայի	317
ጉ.ሆ.	Մեդրակյան, Լ.Ռ. Մեդրակյան. Բազմուղի ցրման ամպլիտուդների որոշումը	
	ցրման ուղղությամբ հաստատուն բարձրությամբ պոտենցիալային արգելքի վրա	327
Ա.Ը.	Վահանյան, Ե.Մ. Բաղիյան. Դոնորների և ակցեպտորների կոնցենտրացիաների	
	որոշումը բազմահովիտ կիսահաղորդիչներում	339
ч.Լ.	Հովհաննեսյան, Ա.Ս. Կուզանյան, Գ.Ռ. Բադալյան, Ա.Վ. Եգանյան,	
Ч.Ц.	Հովհաննեսյան, Ա.Ս. Կուզանյան, Գ.Ռ. Բադալյան, Ա.Վ. Եգանյան, Ռ.Վ. Սարգսյան, Վ.Ս. Կուզանյան, Ա.Գ. Պետրոսյան, Վ.Ս. Ստաթոպոուլոս.	
Ч.Ц.	Հովհաննեսյան, Ա.Ս. Կուզանյան, Գ.Ռ. Բադալյան, Ա.Վ. Եգանյան, Ռ.Վ. Սարգսյան, Վ.Ս. Կուզանյան, Ա.Գ. Պետրոսյան, Վ.Ս. Ստաթոպոուլոս. Հազվագյուտ հողային մագնեզիումային հեքսաալյումինատների պինդ լուծույթ-	
Ч. Ц.	Հովհաննեսյան, Ա.Ս. Կուզանյան, Գ.Ռ. Բադալյան, Ա.Վ. Եգանյան, Ռ.Վ. Սարգսյան, Վ.Ս. Կուզանյան, Ա.Գ. Պետրոսյան, Վ.Ս. Ստաթոպոուլոս. Հազվագյուտ հողային մագնեզիումային հեքսաալյումինատների պինդ լուծույթ- ների սինթեզումը և ուսումնասիրումը	342
ч.Ļ. U.U.	Հովհաննեսյան, Ա.Ս. Կուզանյան, Գ.Ռ. Բադալյան, Ա.Վ. Եգանյան, Ռ.Վ. Սարգսյան, Վ.Ս. Կուզանյան, Ա.Գ. Պետրոսյան, Վ.Ս. Ստաթոպոուլոս. Հազվագյուտ հողային մագնեզիումային հեքսաալյումինատների պինդ լուծույթ- ների սինթեզումը և ուսումնասիրումը Աբրահամյան, Ք.Գ. Սահակյան, Ռ.Յու. Չիլինգարյան. Լիցքի փոփոխությունը	342
Կ.Լ. Ա.Մ.	Հովհաննեսյան, Ա.Ս. Կուզանյան, Գ.Ռ. Բադալյան, Ա.Վ. Եգանյան, Ռ.Վ. Սարգսյան, Վ.Ս. Կուզանյան, Ա.Գ. Պետրոսյան, Վ.Ս. Ստաթոպոուլոս. Հազվագյուտ հողային մագնեզիումային հեքսաալյումինատների պինդ լուծույթ- ների սինթեզումը և ուսումնասիրումը Աբրահամյան, Ք.Գ. Սահակյան, Ռ.Յու. Չիլինգարյան. Լիցքի փոփոխությունը ակուստապլազմայում պարպման հոսանքի մոդուլացման պարբերության	342
ч.ц. Ц.U.	Հովհաննեսյան, Ա.Ս. Կուզանյան, Գ.Ռ. Բադալյան, Ա.Վ. Եգանյան, Ռ.Վ. Սարգսյան, Վ.Ս. Կուզանյան, Ա.Գ. Պետրոսյան, Վ.Ս. Ստաթոպոուլոս. Հազվագյուտ հողային մագնեզիումային հեքսաալյումինատների պինդ լուծույթ- ների սինթեզումը և ուսումնասիրումը Աբրահամյան, Ք.Գ. Սահակյան, Ռ.Յու. Չիլինգարյան. Լիցքի փոփոխությունը ակուստապլազմայում պարպման հոսանքի մոդուլացման պարբերության ընթացքում	342 353
ୟ.ፒ. ፒ.ፒ. Հ.ፒ.	Հովհաննեսյան, Ա.Ս. Կուզանյան, Գ.Ռ. Բադալյան, Ա.Վ. Եգանյան, Ռ.Վ. Սարգսյան, Վ.Ս. Կուզանյան, Ա.Գ. Պետրոսյան, Վ.Ս. Ստաթոպոուլոս. Հազվագյուտ հողային մագնեզիումային հեքսաալյումինատների պինդ լուծույթ- ների սինթեզումը և ուսումնասիրումը Աբրահամյան, Ք.Գ. Սահակյան, Ռ.Յու. Չիլինգարյան. Լիցքի փոփոխությունը ակուստապլազմայում պարպման հոսանքի մոդուլացման պարբերության ընթացքում Մանուկյան. Ռենտգենյան Ճառագայթների դիֆրակցիայի վրա նյութերի փոխա-	342 353
ч.ፒ. น.บ. Հ.Մ.	Հովհաննեսյան, Ա.Ս. Կուզանյան, Գ.Ռ. Բադալյան, Ա.Վ. Եգանյան, Ռ.Վ. Սարգսյան, Վ.Ս. Կուզանյան, Ա.Գ. Պետրոսյան, Վ.Ս. Ստաթոպոուլոս. Հազվագյուտ հողային մագնեզիումային հեքսաալյումինատների պինդ լուծույթ- ների սինթեզումը և ուսումնասիրումը Աբրահամյան, Ք.Գ. Սահակյան, Ռ.Յու. Չիլինգարյան. Լիցքի փոփոխությունը ակուստապլազմայում պարպման հոսանքի մոդուլացման պարբերության ընթացքում Մանուկյան. Ռենտգենյան Ճառագայթների դիֆրակցիայի վրա նյութերի փոխա- դարձ դիֆուզիայի ազդեցությունը դարսման արատ պարունակող գերցանցերում	342 353 360
ч.ц. u.u. Հ.บ. ഉ.ц.	Հովհաննեսյան, Ա.Ս. Կուզանյան, Գ.Ռ. Բադալյան, Ա.Վ. Եգանյան, Ռ.Վ. Սարգսյան, Վ.Ս. Կուզանյան, Ա.Գ. Պետրոսյան, Վ.Ս. Ստաթոպոուլոս. Հազվագյուտ հողային մագնեզիումային հեքսաալյումինատների պինդ լուծույթ- ների սինթեզումը և ուսումնասիրումը Աբրահամյան, Ք.Գ. Սահակյան, Ռ.Յու. Չիլինգարյան. Լիցքի փոփոխությունը ակուստապլազմայում պարպման հոսանքի մոդուլացման պարբերության ընթացքում Մանուկյան. Ռենտգենյան ձառագայթների դիֆրակցիայի վրա նյութերի փոխա- դարձ դիֆուզիայի ազդեցությունը դարսման արատ պարունակող գերցանցերում Գրիգորյան. Օրիենտացիոն կարգը նանո-լիցքավորիչներ պարունակող պոլիմե-	342 353 360

CONTENTS

M.A. Aginian, K.A. Ispirian, M.K. Ispiryan, G.A. Sargsyan. Cherenkov-transition	
radiation in gamma frequency region	299
M.R. Hakobyan, A.A. Ghandevosyan, R.S. Hakobyan, Yu.S. Chilingaryan. On the	
stability of homogenous orientation in a plane-parallel cell of a liquid crystal	
doped with nanoparticles	309
A.E. Martirosyan. Influence of retardation between orthogonal components of	
circularly polarized light in the vortex phase plate on the structure of diffraction	
pattern	317
D.M. Sedrakian, L.R. Sedrakian. Amplitudes of multichannel scattering on the	
barrier with a constant height in the scattering direction	327
A.I. Vahanyan, Y.M. Baghiyan. Determination of concentrations of donors and	
acceptors in many-valley semiconductors	339
K.L. Ovanesyan, A.S. Kuzanyan, G.R. Badalyan, A.V. Yeganyan, R.V. Sargsyan,	
V.S. Kuzanyan, A.G. Petrosyan, V.S. Stathopoulos. Preparation and	
investigation of lanthanide magnesium hexaaluminate solid solutions	342
A.S. Abrahamyan, Q.G. Sahakyan, R.Yu. Chilingaryan. Variation of charge in	
acoustoplasma during the period of modulation of the discharge current	353
H.M. Manukyan. Influence of interdiffusion of heteromaterials on X-ray diffraction	
by superlattice with stacking fault	360
Z.A. Grigoryan. Orientational ordering in polymer composites with nanofillers: the	
osmotic pressure effect	366

СОДЕРЖАНИЕ

М.А. Агинян, К.А. Испирян, М.К. Испирян, Г.А. Саргсян. Черенковское-пере-	
ходное излучение в гамма-области частот	299
М.Р. Акопян, А.А. Кандевосян, Р.С. Акопян, Ю.С. Чилингарян. О стабиль-	
ности однородной ориентации в плоскопараллельной ячейке жидкого кристалла, обогащенного наночастицами	309
А.Е. Мартиросян. Влияние фазового сдвига между ортогональными компонен- тами циркулярно-поляризованного света в вихревой фазовой пластине на структуру лифрагированного пучка	317
ЛМ Селовкан ЛР Селовкан Амплитулы многоканального рассеяния на	017
барьере имеющем постоянную высоту в направлении рассеяния	327
А.И. Ваганян, Е.М. Багиян. Определение концентраций доноров и акцепторов в многодолинных полупроводниках	339
К.Л. Ованесян, А.С. Кузанян, Г.Р. Бадалян, А.В. Еганян, Р.В. Саргсян, В.С. Кузанян, А.Г. Петросян, В.С. Статопоулос. Получение и исследова-	
ние твердых растворов редкоземельных гексаалюминатов магния	342
А.С. Абраамян, К.Г. Саакян, Р.Ю. Чилингарян. Изменение заряда в акусто-	
плазме в течение периода модуляции разрядного тока	353
А.М. Манукян. Влияние взаимной диффузии гетероматериалов на дифракцию	
рентгеновских лучей на сверхрешетке с дефектом упаковки	360
З.А. Григорян. Ориентационный порядок в полимерных композитах, содержащих нано-наполнители: эффект осмотического давления	366

Заказ № 524 Тираж 150. Сдано в набор 24.06.2014. Подписано к печати 01.07.2014. Печ. л. 4.75. Бумага офсетная. Цена договорная. Типография НАН РА. Ереван, пр. Маршала Баграмяна, 24.