

тором происходит оставно-валентный переход, и на перпендикулярное к нему направление соответственно. В расчете учитывались относительные величины матричных элементов, найденные для водородоподобных функций: $U_1 = 1$, $U_2 = 0,226$, $U_3 = -0,113$ и $U_4 = -0,451$.

В случае одноузельной локализации (рис. 2, *a*, кривая 1) спектр имеет вид плотности состояний валентной зоны (домноженной на квадрат частоты перехода), так как $F_{loc} = 1$, что указывает на равнозначное участие в спектральных переходах состояний из всей зоны Бриллюэна, формирующих оставную дырку. В случае двухузельной локализации $F_{loc} = \langle \cos^2(\mathbf{kR}_{loc}) \rangle$ (рис. 1, *b*) и часть состояний, расположенных на периферии зоны Бриллюэна, вносит меньший вклад в спектр. На этом фоне усиливаются переходы в Г-точке и вокруг нее, что проявляется в обострении двух линий на краях спектра (рис. 2, *b*, кривая 1). Учет зависимости матричного элемента перехода из валентного в оставное состояние от положения в зоне Бриллюэна приводит к тому, что переходы в некоторых точках высокой симметрии не наблюдаются. Это соответствует более гладкой форме спектров и исчезновению особенностей Ван-Хова (рис. 2, *a*, *b*, кривые 2). В частности, в Г-точке переходы запрещены, что согласуется с *p-p*-характером перехода.

Рассмотренные выше модели могут быть обобщены на случай бинарных кросслюминесцентных кристаллов с такими же подрешетками, как у BaF_2 (напр., CsCl , RbF и др.). Необходимо сказать, что предложенные выше модели не дают хорошего соответствия теоретических и экспериментальных спектров кросслюминесценции, но позволяют сопоставить изменение основных характеристик спектров с изменением параметров моделей.

Литература

1. Александров Ю.М., Махов В.Н., Родный П.А. и др. // ФТТ. 1984. **26**, № 9. С. 2865.
2. Ермаков Л.К., Родный П.А., Старостин Н.В. // ФТТ. 1991. **33**, № 9. С. 2542.
3. Соболев А.Б., Валбис Я.А., Бикметов И.Ф. // Изв. Латв. АН, сер. физ. 1990. № 4. С. 45.
4. Kyanuma Y., Kotani A. // J. Electr. Spectr. and Rel. Phen. 1996. **79**. Р. 219.
5. Pantelides S.T. // Phys. Rev. 1975. **B11**, No. 12. P. 5082.
6. Ellalioglu S., Wolfram T. // Ibid. 1977. **B15**, No. 12. P. 5909.
7. Ellalioglu S., Wolfram T. // Ibid. 1978. **B18**, No. 8. P. 4509.
8. Makhov V. N. // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. 1991. **A308**. Р. 187.
9. Itoh M., Kamada M., Ohno N. // J. Phys. Soc. Japan. 1997. **66**, No. 8. Р. 2502.
10. Makhov V.N., Terekhin M.A., Munro J.H. et al. // J. Luminescence. 1997. **72-74**. Р. 114.

Поступила в редакцию
07.12.98

УДК 535.41

ПОВЕРХНОСТНЫЕ И КРАЕВЫЕ ПЛАЗМОН-ПОЛЯРИТОНЫ И КОЛЬЦЕВИДНЫЕ СПЕКЛЫ

Ю. В. Васильев, А. В. Козарь, Е. Ф. Курицына, А. Е. Лукьянов

(кафедра общей физики; кафедра радиофизики; кафедра физической электроники)

Экспериментально обнаружено новое явление в оптике спеклов — местное резонансное усиление интенсивности кольцевидных краевых лазерных спеклов. Это явление объясняется возбуждением и срывом поверхностных и краевых плазмон-поляритонов на прямом заостренном крае лезвия в пучке лазерного излучения.

В опытах по дифракции гауссова пучка лазерного излучения на прямом заостренном крае полубесконечного металлического экрана (лезвие безопасной бритвы) обнаружен новый тип краевых лазерных спеклов (КЛС) — кольцевидные спеклы; высказано предположение, что физический механизм их образования импедансный [1]. Этот механизм сложен и непривычен для оптики спеклов, которая в основном имеет дело с узкой областью частот ω видимого лазерного излучения [2].

При падении света на поверхность металла происходит не только его частичное поглощение в тонком скин-слое металла. Падающее лазерное излучение возбуждает сильные поверхностные и краевые токи. Они эффективно излучают с внешней стороны металла, и этим обусловливается отражение света и/или его диффузное рассеяние, которое порождает

лазерные спеклы. Но в определенных условиях падающее излучение может частично преобразовываться в поверхностные и краевые плазмоны и поляритоны [3], которые способны внести дополнительный вклад в формирование спеклов.

Цель работы — экспериментально обнаружить оптические явления, подтверждающие существование такого вклада в картине КЛС.

В настоящей работе сообщается о новом явлении в оптике спеклов — местном резонансном усиении интенсивности кольцевидных спеклов. Оно обнаружено в опытах на голографической измерительной установке УИГ-22М при работе с аргоновым лазером типа ЛГН-503 (эффективный диаметр гауссова пучка монохроматического излучения 2,5 мм, длина волны $\lambda = 514,5$ нм, пространственная мода TEM_{00}). Прин-

ципиальная оптическая схема эксперимента показана на рис. 1.

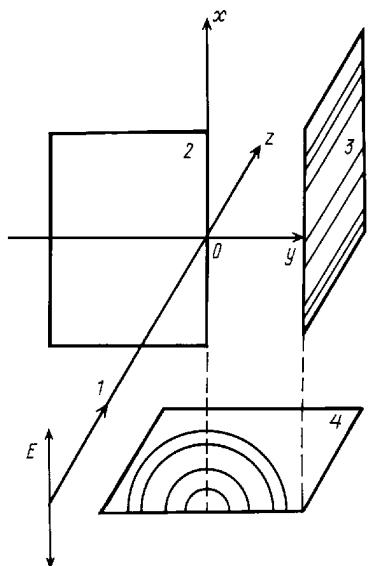


Рис. 1. Принципиальная оптическая схема эксперимента

Пучок излучения 1 падает перпендикулярно поверхности плоского лезвия 2 и рассеивается в окружающее пространство. Край лезвия совмещен с диаметром пучка. Электрический вектор \mathbf{E} падающей электромагнитной волны направлен параллельно краю лезвия, ось Ox неподвижной правой декартовой системы координат $Oxyz$ — вдоль края, Oy лежит в плоскости лезвия, Oz перпендикулярна к ней. С помощью механического устройства с винтовой микроподачей можно перемещать лезвие вдоль оси Ox . Картины КЛС регистрируются на листах фотобумаги в полупространстве $z > 0$ в плоскостях $y = \text{const}$ (3) и $x = \text{const}$ (4). Примеры линейных КЛС приведены в работе [4], а кольцевидных — в работе [1]. При качественном анализе изменений в картинах КЛС их визуально наблюдают на плоских экранах 3 и 4. При количественных измерениях интегральной интенсивности КЛС экраны 3 и 4 заменяются фотодиодами.

Установлено, что при смещении лезвия вдоль оси Ox изменения в интегральной интенсивности линейных и кольцевидных спеклов в общем случае не скоррелированы. Линейные спеклы на экране наблюдаются визуально всегда, тогда как кольцевидные могут быть и невидимыми. Но при входе в пучок излучения некоторого участка лезвия интенсивность кольцевидных спеклов начинает стремительно расти сразу на всей площади экрана. Она становится наибольшей при совмещении этого участка с серединой гауссова пучка, а затем снова убывает также стремительно при выходе его из пучка. Такие всплески интенсивности всей системы кольцевидных спеклов при перемещении лезвия на всю длину края наблюдаются несколько раз.

Предлагаемая ниже физическая интерпретация обнаруженного явления базируется на результатах наблюдений в растровом электронном микроскопе

JSM-U3 микрорельефа поверхности лезвия вблизи режущего края.

При большом увеличении в микроскопе заостренный край лезвия выглядит как симметричный клин со срезанной вершиной. Длинная режущая площадка на краю лезвия имеет среднюю ширину $\sim \lambda/2$. Как показано в работах [1] и [4], локальная ширина и локальная высота режущей площадки хаотически флуктуируют вдоль лезвия относительно среднего уровня. Этот факт обычно и привлекает внимание при обсуждении зарегистрированных картин КЛС.

При малом увеличении в микроскопе (рис. 2) на обеих сторонах клина наблюдается большое число самых различных квазипериодических пространственных структур (неидеальные дифракционные решетки), штрихи которых направлены почти перпендикулярно к режущей площадке лезвия. На микрофотографии (на площади обзора в кадре $100 \times 100 \mu\text{мм}$) показан типичный вид одного фрагмента лезвия при рассматривании его со стороны острого края.

Рис. 2. Нерегулярные дифракционные решетки на металлической поверхности вблизи заостренного края лезвия

Возникновение подобных дифракционных решеток обусловлено технологическими процессами заточки и правки острого края лезвия [5]. Этот факт имеет непосредственное отношение к обнаруженному нами оптическому явлению — местному резонансному усилению интенсивности сразу всей системы кольцевидных КЛС.

Известно [6], что на поверхности металла с дифракционной резонансной решеткой падающее лазерное излучение возбуждает поверхностную электромагнитную волну (ПЭВ), или поверхностный поляритон. ПЭВ связана не с токовым, а с зарядовым состоянием на поверхности — так называемым поверхностным плазмоном. Возбуждение ПЭВ на поверхности металла и сформированная перекачка в нее значительной по величине энергии падающего когерентного излучения — строго резонансный процесс. Срыв ПЭВ и превращение ее энергии снова в объемное излучение той же самой частоты ω — в общем случае процесс нерезонансный, широкополосный по волновым векторам \mathbf{k} излучаемых вторичных волн. Срыв ПЭВ легко происходит на любых дефектах поверхности — микровыступах или микропадинах. Фазовый хаос вторичных волн объемного

излучения приводит к возникновению особого типа лазерных спеклов.

В случае лезвия падающий пучок излучения возбуждает ПЭВ вблизи края. Она распространяется вдоль края и в свою очередь через скин-слой металла на микроребре режущей площадки возбуждает краевые плазмоны и поляритоны [3]. Они распространяются вдоль режущей площадки (как по открытому волноводу) до тех пор, пока (на длине свободного пробега) не столкнутся с микровыступами или микровпадинами площадки. Срыв краевых ПЭВ — нерезонансный, широкополосный по направлениям волнового вектора процесс. Он приводит к возникновению вторичного — краевого — объемного электромагнитного излучения той же самой частоты. Фазовый хаос этих волн порождает систему кольцевидных КЛС, обнаруженных в эксперименте [1]. Так как поверхностная ПЭВ возбуждается резонансно на дифракционной решетке вблизи края лезвия, то это и объясняет физическую сущность обнаруженного нами нового в оптике спеклов явления — местного резонансного усиления интенсивности кольцевидных

КЛС. Встреча неподвижного пучка лазерного излучения с резонансной дифракционной решеткой при смещении лезвия вдоль его края — событие случайное и, в принципе, достаточно редкое, оно и приводит к всплескам интенсивности кольцевидных КЛС в эксперименте.

Литература

1. Васильев Ю.В., Козарь А.В., Курицына Е.Ф., Лукьянов А.Е. // ЖТФ. 1998. № 7. С. 139.
2. Франсон М. Оптика спеклов. М., 1980.
3. Поверхностные поляритоны / Под ред. В.М. Аграновича, Д.Л. Миллса. М., 1985.
4. Васильев Ю.В., Курицына Е.Ф., Лукьянов А.Е. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1997. № 1. С. 73 (Moscow University Phys. Bull. 1997. No. 1. P. 102).
5. Герчиков А.Б. // Химия и жизнь. 1982. № 11. С. 87.
6. Либенсон М.Н. // Соросовский образовательный журнал. 1996. № 10. С. 92.

Поступила в редакцию
18.12.98

ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

УДК 538.951

КОРРЕЛЯЦИЯ МЕЖДУ ЭНЕРГИЯМИ СВЯЗИ И МЕЖАТОМНЫМИ РАССТОЯНИЯМИ В КРИСТАЛЛАХ И АТОМНЫХ КЛАСТЕРАХ

Д. В. Цивлин, В. С. Степанюк, Н. А. Леванов, В. Хергерт, А. А. Кацнельсон

(кафедра физики твердого тела)

Теоретически исследованы зависимости от атомного номера основных характеристик октаэдрических кластеров 10 простых и переходных ГЦК металлов. Обнаружено их сходство с аналогичными зависимостями для кристаллов. Это сходство дает основания считать октокластер элементарной структурной единицей кристалла, несущей важнейшую информацию о характере межатомных взаимодействий в нем.

Проблема миниатюризации элементной базы приборов — одна из важнейших в настоящее время. В этой связи принципиальное значение имеет вопрос о том, каким может быть минимальный кластер, воспроизводящий если не собственно физические характеристики кристаллов, то хотя бы тенденции в изменении этих характеристик. Для его анализа попытаемся найти и обсудить корреляции между такими важнейшими характеристиками кристаллов и кластеров, как равновесные межатомные расстояния и равновесные значения энергии связи.

Структурные характеристики кристаллов определяются их межатомными взаимодействиями. Поэтому атомные радиусы, энергия связи и другие обусловленные ими характеристики вполне закономерно меняются с изменением атомного номера элемента при условии, что сравниваются характеристики элементов с одинаковым типом связи [1, 2]. В то же время хорошо известно, что энергия связи металла определяется вкладами межионных взаимодействий, обменной и корреляционной энергией, кинетической энергией свободных электронов, зонной энергией [1, 3].

Анализ показывает, что среди вкладов межионных взаимодействий в энергию системы превалирующим является вклад ближайших соседей. Сравнительно небольшим оказывается вклад зонной энергии. Поэтому можно допустить, что хорошо известные закономерности изменения атомных радиусов r_a и энергии связи E_b кристаллов при изменении атомного номера будут наблюдаться и для атомных кластеров. Однако поскольку суммарная величина энергии связи определяется конкуренцией указанных выше составляющих, то справедливость этого допущения заранее не очевидна. Данная работа посвящена выяснению справедливости указанной гипотезы, иными словами, установлению корреляции между изменениями r_a и E_b в кристаллах и кластерах.

В качестве кластера нам представляется разумным выбрать наименьшую группу атомов, точечная группа симметрии которой будет совпадать с точечной группой симметрии кристалла. Только в этом случае взаимное расположение атомов в кластере (ближний порядок в их расположении) будет близким к взаимному расположению соседних атомов в кристал-