



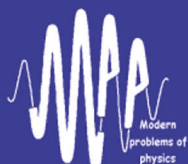
НАЦИОНАЛЬНАЯ АКАДЕМИЯ НАУК БЕЛАРУСИ  
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ ИМЕНИ Б.И. СТЕПАНОВА

X МЕЖДУНАРОДНАЯ ШКОЛА-КОНФЕРЕНЦИЯ  
МОЛОДЫХ УЧЁНЫХ И СПЕЦИАЛИСТОВ

СОВРЕМЕННЫЕ **20**  
ПРОБЛЕМЫ **22**  
ФИЗИКИ

МИНСК, 27–29 АПРЕЛЯ

Сборник научных трудов





Национальная академия наук Беларуси  
Государственное научное учреждение «Институт физики имени  
Б.И. Степанова Национальной академии наук Беларуси»



Сборник научных трудов  
X Международной школы-конференции  
молодых учёных и специалистов  
**Современные проблемы физики**

*Минск, 27 – 29 апреля 2022*

Под редакцией  
М. С. Леонени  
Е. С. Жарниковой

Минск, 2022

УДК 53; 615.849.19

Оргкомитет конференции:

Никончук И. С. (председатель), Леоненя М. С. (ученый секретарь)  
Василевская Д. С., Ковгар В. В., Лычковский В. В.,  
Нагорный А. В., Таболич А. А., Урманов Б. Д.,  
Шабров Д. В., Шуленкова В. А.

Рецензенты:

Курочкин Ю. А. – доктор физ.-мат. наук, доцент;  
Павловский В. Н. – кандидат физ.-мат. наук, доцент;  
Новицкий Д. В. – кандидат физ.-мат. наук;  
Жарникова Е. С. – кандидат физ.-мат. наук;  
Баран А. В. – кандидат физ.-мат. наук.

Сборник трудов составлен по материалам докладов, представленных на Международной школе-конференции молодых учёных и специалистов «Современные проблемы физики» 27 – 29 апреля 2022 г. в Институте физики НАН Беларуси. Тематика конференции охватывает следующие разделы физической науки: теоретическая физика и физика фундаментальных взаимодействий; оптика, лазерная физика и оптические технологии; физика конденсированного состояния, наноструктур и материалов; физика плазмы и тепломассопереноса; физика в биологии и медицине.

**«Современные проблемы физики», междунар. школа-конф. молодых учёных и специалистов (2022; Минск):** сборник научных трудов X Международной школы-конференции молодых учёных и специалистов «Современные проблемы физики», 27 – 29 апреля 2022 г. / под ред. М. С. Леонени, Е. С. Жарниковой. – Минск : Институт физики НАН Беларуси, 2022. – 167 с.

© Институт физики НАН Беларуси, 2022 г.

## Содержание

<b>Математическое моделирование распространения коронавирусной инфекции с применением дробно-дифференциальных операторов</b> <i>Т. А. Ефимова, И. А. Тимощенко, М.А. Глецевич, Н. Г. Абрашина-Жадаева</i>	<b>8</b>
<b>Статистические свойства оптоэлектронного искусственного нейрона на основе использования детекторов одиночных фотонов</b> <i>Н. В. Лахмицкий, В.Н. Чижевский</i>	<b>11</b>
<b>Сверхразрешающая оптическая флукуационная микроскопия: модификация метода путем предварительной обработки входных данных</b> <i>М. Ю. Галковский, А. Б. Михалычев, Д. С. Могилевцев</i>	<b>13</b>
<b>Эволюция кубита, взаимодействующего с многомодовым резервуаром и подверженного когерентному возмущению</b> <i>А. В. Ефимова</i>	<b>17</b>
<b>Информация Фишера для оптимизации и планирования измерений в рентгеновской дифрактометрии высокого разрешения</b> <i>К. И. Жевно, А. Б. Михалычев</i>	<b>21</b>
<b>Применение методов машинного обучения для оптимизации обработки данных сверхразрешающей микроскопии</b> <i>К. И. Жевно, А. Б. Михалычев, С. В. Власенко, Д. С. Могилевцев</i>	<b>25</b>
<b>Интерференционные эффекты новых нейтральных промежуточных бозонов в процессах рождения фермионных пар на будущих электрон-позитронных коллайдерах</b> <i>В. Р. Куриленко, С. А. Лукашевич, А. А. Панков</i>	<b>28</b>
<b>Генерация суммарной частоты в поверхностном слое цилиндрической частицы с большим радиусом основания. Приближение ВКБ</b> <i>В. Н. Капшай, Е. Д. Головин, А. А. Шамына</i>	<b>32</b>
<b>Электромагнитное поле вблизи заряда, падающего в черную дыру Шварцшильда</b> <i>С. О. Комаров</i>	<b>36</b>
<b>Измерение сечения процесса <math>e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0</math> с детектором КМД-3 на электрон-позитронном коллайдере ВЭПП – 2000</b> <i>Д.С. Василевская, Д.Н. Григорьев, С.С. Толмачев, Г.В. Федотович, Д.В. Шёлковий</i>	<b>39</b>



<b>Залежнасьць ефектыўнай тэмпературы і імгненных спектраў гама-ўсплёскаў ад пачатковага размеркавання энергіі ў абалонцы і ад часу прыбыцця</b>	<b>42</b>
<i>A. Э. Кургузава</i>	
<b>Spin 1 particle in external magnetic field and projective operators</b>	<b>46</b>
<i>A. V. Buryu, A. V. Ivashkevich, O. A. Semenyuk</i>	
<b>Massless spin 1 particle in cylindrical coordinates, exact solutions</b>	<b>51</b>
<i>O. A. Semenyuk, A. V. Buryu, A. V. Ivashkevich</i>	
<b>Точные решения уравнения для векторной частицы с нулевой массовой в сферических координатах, калибровочная симметрия для поля со спином 2</b>	<b>55</b>
<i>A. В. Ивашкевич, А. В. Бурый</i>	
<b>Mechanisms of additional luminosity for a dense medium</b>	<b>59</b>
<i>E. Reznikov</i>	
<b>Прецизионное определение угла смешивания Вайнберга в процессе рождения мюонных пар на электрон-позитронных коллайдерах следующего поколения</b>	<b>63</b>
<i>A. А. Садовский, А. А. Бабич, А. А. Панков</i>	
<b>Exploring the low-lying electronic states of molecular RaBr promising for direct laser cooling</b>	<b>66</b>
<i>Y. Osika, M. Shundalau</i>	
<b>Зонная структура объемного и двумерного дисульфида рения триклинной сингонии</b>	<b>69</b>
<i>A. В. Баглов, А. А. Жойдик, Д. М. Малахов, Л. С. Хорошко</i>	
<b>Electromagnetic properties of carbon fibre-based composites in the microwave range</b>	<b>71</b>
<i>I. Korobov, E. Prohorov, N. Sidoryk, A. Arlouski, D. Vychanok</i>	
<b>Электромагнітныя свойства боросілікатных складоў у мікраволновым, терагерцовым і аптычным дыяпазонах</b>	<b>75</b>
<i>A. В. Орловский, И. А. Галимский, Д. С. Быченко, М. В. Дяденко, А. Г. Сидоревич</i>	
<b>Исследование фотолюминесцентных свойств ионно-синтезированных нановключений оксида галлия</b>	<b>79</b>
<i>Д. С. Королев, К. С. Матюнина, А. А. Никольская, Р. Н. Крюков, А. И. Белов, А. Н. Михайлов, А. В. Нежданов, А. А. Сушков, Д. А. Павлов, П. А. Юнин, Д. И. Тетельбаум</i>	

<b>Влияние легирующего иона на кристаллическую структуру замещенного иттрий-алюминиевого граната, получаемого золь-гель методом</b>	<b>81</b>
<i>Л. С. Хорошко, А. В. Баглов, В. А. Яковчук</i>	
<b>Сравнение мощностей апертурно ограниченных лаггерр-гауссовых световых пучков различных порядков</b>	<b>83</b>
<i>И. В. Балыкин, А. А. Рыжевич, А. Г. Мащенко, А. П. Макаревич</i>	
<b>Эффективность преобразования двuosным кристаллом гауссова светового пучка в многокольцевой оптический вихрь</b>	<b>86</b>
<i>И. В. Балыкин, А. А. Рыжевич, Т.А. Железнякова, А. Г. Мащенко</i>	
<b>Выбор спектральных переменных в многопараметрической калибровке концентраций С, Мп, Si, Cr, Ni и Cu в низколегированных сталях методами лазерно-искровой эмиссионной спектроскопии</b>	<b>89</b>
<i>М.В. Бельков, Д.А. Борисевич, К.Ю. Кацалап, М.А. Ходасевич</i>	
<b>Дифференциация свекловичного и тростникового сахара с помощью применения многопараметрического спектрального анализа</b>	<b>93</b>
<i>Д.А. Борисевич, М. А. Ходасевич, Н. Eriklioğlu, E. İlhan, Mecit H. Oztop</i>	
<b>Применение ацилгидразона родамина Б в качестве оптического сенсора ионов железа (III)</b>	<b>95</b>
<i>А. Г. Тимошенко, Н. В. Лабода, А. М. Мальтанова, Н. В. Белько</i>	
<b>Luminescence Dissolved Oxygen sensor of the underwater measuring system</b>	<b>98</b>
<i>А. D. Borisovets</i>	
<b>Ускоренные испытания на надежность ультрафиолетовых светодиодов с использованием стохастического моделирования деградации оптической мощности</b>	<b>101</b>
<i>А. Е. Челябин</i>	
<b>Генераторы Аркадьева-Маркса с вложенными коаксиальными формирующими линиями</b>	<b>107</b>
<i>П. В. Молчанов, Е. А. Гурневич, К. Ю. Чертков</i>	
<b>SERS-подложки с пучками нанопроволок для детектирования внутриклеточных процессов</b>	<b>111</b>
<i>О.Г. Чечёкина, Е. П. Кожина, С. А. Бедин, А. А. Пирязев, Р.А. Акасов, Д.Б. Трушина</i>	
<b>Влияние плазменных потоков и высокотемпературного отжига на механические свойства меди</b>	<b>114</b>
<i>Н. О. Деменчук</i>	

<b>Получение и люминесцентные характеристики нанокристаллов CsPbBr<sub>3</sub> в растворах и полимерной матрице</b>	<b>118</b>
<i>В. В. Крюков, А. А. Романенко, С. В. Ващенко, О. С. Кулакович</i>	
<b>Синтез и спектроскопические исследования покрытий на основе оксида цинка и полианилина</b>	<b>122</b>
<i>А. М. Михалко, Е.В. Шараев</i>	
<b>Комплексное изучение микро- и макронеоднородностей плотности, а также адсорбции из газовой фазы на наночастицах с учетом пространственной релаксации параметров решетки вблизи их границы</b>	<b>126</b>
<i>А. А. Рогач, А. А. Кулеш</i>	
<b>Наноструктуры на основе аэрозольных наночастиц золота, серебра и алюминия для ГКР-спектроскопии</b>	<b>130</b>
<i>А. А. Романенко, А. А. Лизунова, С. С. Тихонов</i>	
<b>Синтез и исследование оксида висмута на наноструктурированных матрицах</b>	<b>134</b>
<i>В. С. Федосенко, М. М. Иджи, А. А. Лозовенко, Г. Г. Горох</i>	
<b>Оптические свойства пористых анодных пленок вентильных металлов на стеклянных подложках</b>	<b>138</b>
<i>А.С. Шастин, Л.С. Хорошко</i>	
<b>Влияние плазмонных эффектов наночастиц платины на фотопроцессы ароматических аминокислот</b>	<b>140</b>
<i>Е. А. Демшикевич, А. Ю. Зюбин, А. О. Евтифеев</i>	
<b>Оптические свойства кварцевых стёкол с модифицированной золотыми наностержнями поверхностью</b>	<b>143</b>
<i>Д. О. Евтифеев, А. С. Зозуля, Е. А. Демшикевич, А. А. Кундалевич, А. Ю. Зюбин, И. Г. Самусев</i>	
<b>Оптические свойства кварцевых стёкол с модифицированной золотыми нанозвездами поверхностью</b>	<b>146</b>
<i>А. А. Кундалевич, А. С. Зозуля, Е. А. Демшикевич, Д. О. Евтифеев, А. Ю. Зюбин, И. Г. Самусев</i>	
<b>Спектроскопия гигантского комбинационного рассеяния света в вопросах диагностики эффективности антитромбоцитарной терапии</b>	<b>149</b>
<i>А. Ю. Зюбин, В. В. Рафальский, Е. М. Моисеева, К. И. Матвеева, А. В. Цибульникова, А. А. Кундалевич, Е. А. Демшикевич, Д. О. Евтифеев</i>	



<b>Взаимодействие графеновых и борнитридных квантовых точек с эритроцитами</b>	<b>151</b>
<i>В.В. Екимчик, Е.И. Коваленко, Е.Н. Голубева, А.В. Богданова, М.И. Демиденко, Т.А. Кулагова</i>	
<b>Моделирование радиационного повреждения опухолевых клеток при нейтронной терапии с использованием препаратов на основе бора</b>	<b>154</b>
<i>В. К. Кулик, Т. А. Кулагова, Е. Н. Голубева, М. И. Демиденко</i>	
<b>Регуляция пальмитоксиацетоном редокс-активности фагоцитов крови</b>	<b>158</b>
<i>И. А. Новицкий, Н. В. Амаэзбери, Г. Н. Семенкова, О. И. Шадыро</i>	
<b>Спектроскопия электронного поглощения и электронного парамагнитного резонанса радикалов индотрикарбоцианинового красителя для фотодинамической терапии</b>	<b>161</b>
<i>А. А. Смоляков, Н. В. Белько, А. М. Мальтанова</i>	
<b>Исследование запрещенных в спорте препаратов методами гигантского комбинационного рассеяния света</b>	<b>165</b>
<i>М. С. Хецева, Е. П. Кожина, С. А. Бедин, А. В. Наумов</i>	

# Математическое моделирование распространения коронавирусной инфекции с применением дробно-дифференциальных операторов

Т. А. Ефимова<sup>a</sup>, И. А. Тимощенко<sup>a,b</sup>, М.А. Глецевич<sup>a</sup>, Н. Г. Абрашина-Жадаева<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Белорусский Государственный Университет, Минск, Беларусь

<sup>b</sup> НИУ «Институт ядерных проблем» БГУ, Минск, Беларусь

E-mail: efimovataya77@gmail.com

**Введение.** Новый коронавирус (SARS-CoV-2), или COVID-19 – одна из самых серьезных эпидемиологических проблем, с которыми сталкивалось современное человечество. Внезапное появление болезни и ее невероятно быстрое распространение привели к коллапсу многих мировых систем: от здравоохранения до экономики. Разработка математических моделей распространения и поведения вируса направлена на то, чтобы предотвратить подобные ситуации в будущем.

В данной работе мы предлагаем модифицированную дробно-дифференциальную модель распространения COVID-19, основанную на модели [1]:

$$\begin{aligned}D_t^{\alpha_1} s(t) &= \beta_i s i - \beta_e s e, \\D_t^{\alpha_2} e(t) &= \beta_i s i + \beta_e s e - \sigma e - \varphi_e e, \\D_t^{\alpha_3} i(t) &= \sigma e - \varphi_d i - \varphi_r i, \\D_t^{\alpha_4} r(t) &= \varphi_r i + \varphi_e e, \\D_t^{\alpha_5} d(t) &= \varphi_d i,\end{aligned}\tag{1}$$

где  $s(t)$  – число здоровых людей, восприимчивых к болезни,  $e(t)$  – число заразившихся людей, у которых заболевание находится в инкубационном периоде,  $i(t)$  – число заболевших людей,  $r(t)$  – число переболевших людей, более не восприимчивых к заболеванию,  $d(t)$  – число умерших людей. Данные функции нормированы на все население страны. Далее  $\sigma$  – величина, обратная инкубационному периоду болезни,  $\varphi_r$  – коэффициент выздоровления,  $\varphi_e$  – коэффициент бессимптомного выздоровления,  $\varphi_d$  – коэффициент смертности среди заболевших,  $\beta_e$  – коэффициент бессимптомных контактов,  $\beta_i$  – коэффициент контактов с симптомами. В предложенной модели был использован оператор дробной производной по времени в смысле Герасимова-Капуто:

$$D_t^\alpha u = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t \frac{u'(\tau) d\tau}{(t-\tau)^\alpha}, \quad 0 < \alpha \leq 1.\tag{2}$$

Статистические данные [2] дают информацию только о новых выявленных случаях заражения и числе смертей от болезни, поэтому параметры модели могут быть определены только из аппроксимации зависимостей  $\sigma e(t)$  и  $d(t)$ . Численное решение рассматриваемой модели основано на дробной модификации численных методов Адамса-Бэшфорда-Молтона [3]. При верификации алгоритма порядок дробной производной варьировался от 0 до 1.

В качестве исследуемых стран были выбраны Великобритания и Канада, так как там достаточно рано началась эпидемия и велась подробная отчетность о происходящем. В Канаде вспышка коронавирусной инфекции началась стремительно. 18 марта чрезвычайное положение было объявлено во всех регионах страны. Однако в Великобритании вспышка носила еще более агрессивный характер: уже 13 марта общее количество выявленных случаев заражения достигло 800 человек. Эти факты подтверждают полученные нами результаты: контактная скорость заражения очень

высока как для больных с выраженными симптомами, так и для бессимптомных переносчиков.

Таблица 1. Рассчитанные значения параметров модели для Канады и Великобритании.

Параметр	Канада	Великобритания
$\beta_e$ , дней <sup>-1</sup>	4.88	5.03
$\beta_i$ , дней <sup>-1</sup>	7.01	4.54
$\varphi_r$ , дней <sup>-1</sup>	1.99	1.55
$\varphi_d$ , дней <sup>-1</sup>	0.74	1.98
$\varphi_e$ , дней <sup>-1</sup>	4.76	4.76
$\sigma$ , дней <sup>-1</sup>	1\14	1\14

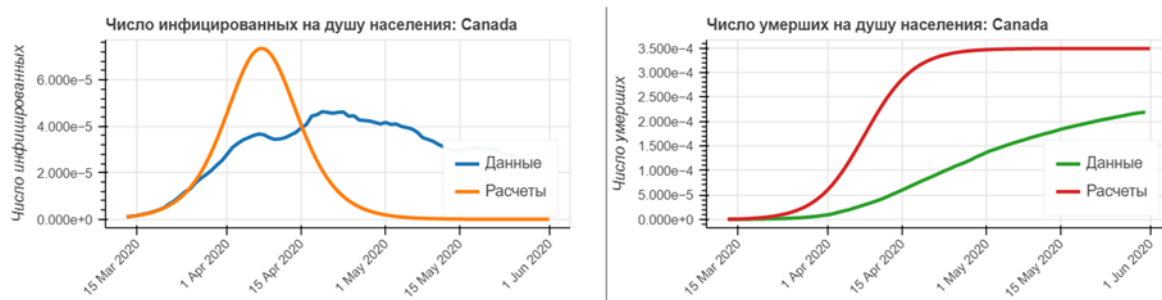


Рис. 1. Сравнение официальных данных для новых случаев заражения в день и умерших людей в Канаде с рассчитанными в предложенной модели с порядком производной 1.

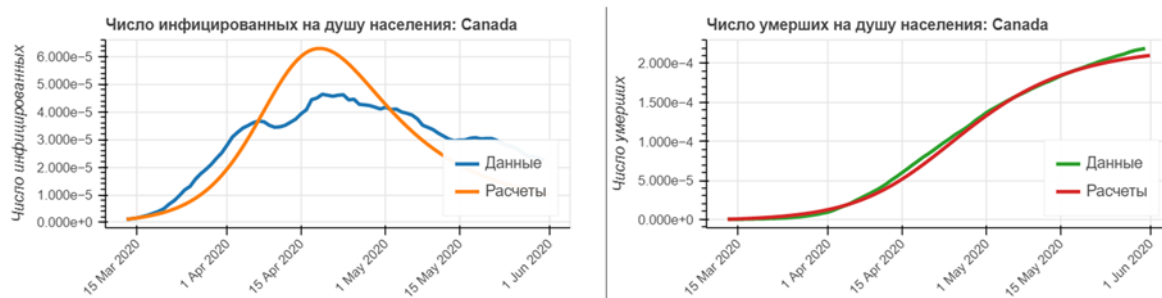


Рис. 2. Сравнение официальных данных для новых случаев заражения в день и умерших людей в Канаде с рассчитанными в предложенной модели с порядком производной 0.7.

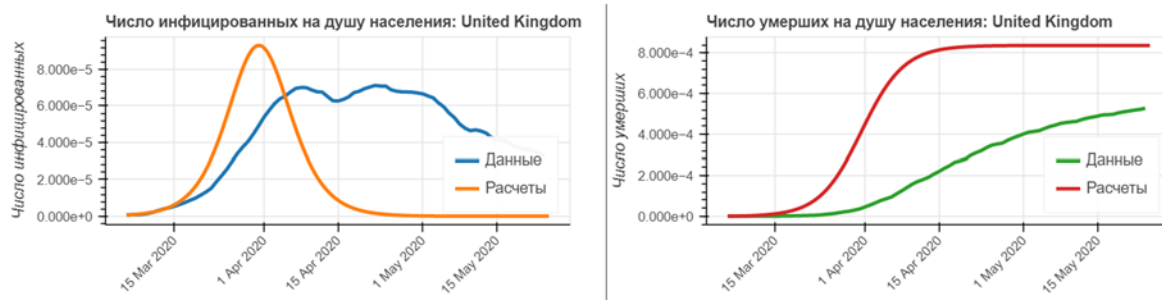


Рис. 3. Сравнение официальных данных для новых случаев заражения в день и умерших людей в Великобритании с рассчитанными в предложенной модели с порядком производной 1.



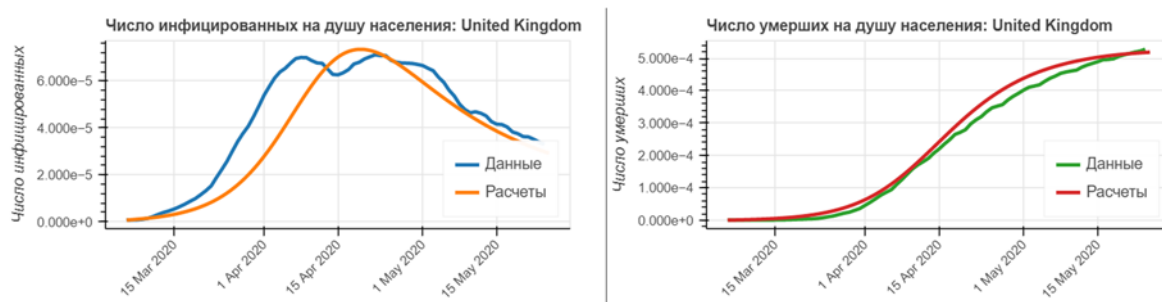


Рис. 4. Сравнение официальных данных для новых случаев заражения в день и умерших людей в Великобритании с рассчитанными в предложенной модели с порядком производной 0.7.

Из сравнительного анализа (рисунки 1–4) можно сделать вывод, что математическая модель описывает число смертей гораздо лучше, чем число новых случаев заражения. Это связано с объективными причинами, поскольку не каждый человек тестируется на наличие инфекции, а точное количество бессимптомных случаев в принципе невозможно получить, и наоборот, данные о случаях смерти от COVID-19 являются гораздо более объективными и надежными.

**Заключение.** На основании полученных результатов можно утверждать, что использование дробно-дифференциальных операторов абсолютно оправдано. Благодаря уменьшению порядка дробных производных можно добиться большей точности прогнозирования без необходимости введения большого количества параметров [4], затрудняющих подсчеты и общую оценку ситуации.

#### Литература.

1. Efimova T., Timoshchenko I., Abrashina-Zhadaeva N. / Fractional differential model of the spread of COVID-19 // Journal of Belarusian State University. Physics. No. 3. 2021. P. 40-48
2. Published online at Our World in Data.org. URL: <https://ourworldindata.org/explorers/coronavirus-data-explorer> (access date 19.04.2022)
3. Li C., Tao C. / On the fractional Adams Method // Computers & Mathematics with Application. 2009. Vol. 58. Issue 8. P. 1573-1588
4. Mellone A., Gong Z., Scarciotti G. / Modelling, prediction and design of COVID-19 lockdowns by stringency and duration // Sci Rep 11, 15708(2021)

# Статистические свойства оптоэлектронного искусственного нейрона на основе использования детекторов одиночных фотонов

Н. В. Лахмицкий, В.Н. Чижевский

*Институт физики НАН Беларуси, Минск, Беларусь*

*E-mail: nikita7828@gmail.com*

**Введение.** Недавно было показано, что оптоэлектронная пара вертикально-излучающий лазер – однофотонный лавинный фотодиод позволяет реализовать основные динамические свойства биологических нейронов [1]. В этом контексте исследование свойств детектора одиночных фотонов имеет важное значение при реализации подобного искусственного нейрона. Для детекторов одиночных фотонов вероятность срабатывания для слабых световых потоков может быть значительно меньше единицы и, в свою очередь, зависит от спектрального состава светового импульса. В данной работе представлены экспериментальные исследования статистических свойства отклика искусственного нейрона на основе оптоэлектронной пары «вертикально-излучающий лазер – однофотонный лавинный фотодиод», работающего в импульсном режиме кодирования. Показано, что в зависимости от амплитуды лазерного импульса реализуется два режима работы: детерминированный, когда вероятность срабатывания нейрона близка к единице, и вероятностный, когда вероятность срабатывания меньше единицы. В последнем случае вероятность срабатывания контролируется амплитудой лазерного импульса. Обнаружено, что при высоких уровнях мощности лазерных импульсов происходит значительное увеличение процента послеимпульсов в отклике однофотонного детектора, что может приводить к ухудшению характеристик искусственного нейрона. При этом существенно меняется функция распределения послеимпульсов, в которой появляется значительное количество послеимпульсов с малыми временами задержки. На основе исследования 7 детекторов (id Quantique, модель id101) обнаружено, что статистические свойства существенно зависят от конкретного образца детектора.

**Методика эксперимента.** Исследования проводились на установке, ранее использованной в работе [1]. Использовался вертикально-излучающий лазер (ВИЛ), генерирующий на длине волны 850 нм в импульсном режиме. Амплитуда лазерных импульсов контролировалось как с помощью регулируемого оптического аттенюатора, так и амплитудой приложенных на лазерный диод коротких импульсов напряжения с генератора сигналов. В работе исследовались коммерческие детекторы одиночных фотонов (ДОФ) на основе кремниевых лавинных фотодиодов фирмы id Quantique, модель id101, работающих в режиме Гейгера с активной схемой гашения лавины. Исследованные детекторы имели частоту темновых импульсов от единиц герц до 30 Гц и мертвое время около 45 нс. Выходной импульс детектора имеет длительность около 10 нс и амплитуду 2 В. Для регистрации световых импульсов длительностью 5 нс использовался фотодиод с полосой пропускания 1 ГГц. Все компоненты были соединены оптическими волокнами. Электрические импульсы, световые импульсы и выходные импульсы с детектора регистрировались USB цифровым осциллографом HS-5 (Tierie) и осциллографом с полосой пропускания 300 МГц и частотой дискретизации 2 ГГц.

**Результаты.** На рисунке 1 представлены результаты измерения вероятности детектирования фотона  $P$  в зависимости от амплитуды импульса напряжения накачки лазера и величины оптического ослабления. Вероятность детектирования  $P$  определялась как отношение числа зарегистрированных импульсов с детектора к числу лазерных импульсов ( $10^6$  импульсов, период-2 мкс).

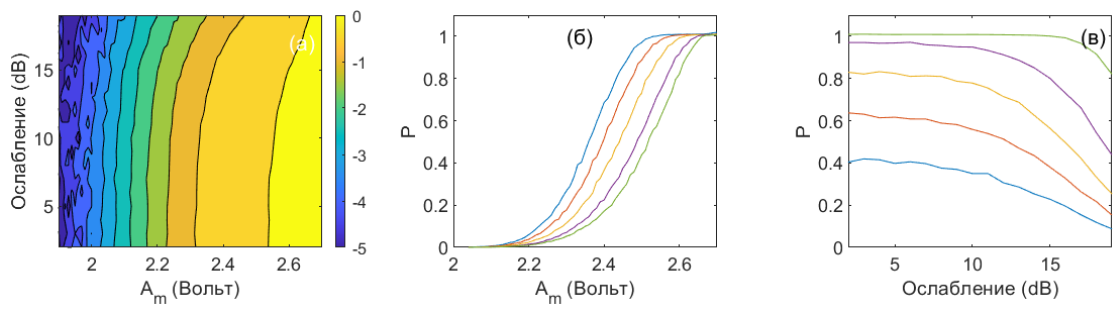


Рис. 1. Контурный график вероятности детектирования  $P$  фотонов в зависимости от амплитуды импульса  $A_m$  и ослабления (а); зависимость  $P$  от амплитуды импульса  $A_m$  при разных значениях ослабления (2, 13, 16, 18, 19 dB) (б); зависимость  $P$  от величины оптического ослабления для значений  $A_m = 2.34, 2.39, 2.44, 2.5, 2.6$  В (с).

Из рисунка 1б видно, что зависимость вероятности  $P$  имеет линейный участок, наклон которого в некоторой степени зависит от начального ослабления, в тоже время зависимость  $P$  от величины ослабления наблюдается главным образом при больших значениях ослабления. Следует отметить, что для больших значений интенсивности лазерных импульсов, для ряда детекторов наблюдается резкий рост числа послеимпульсов. Для исследованных детекторов при низких уровнях засветки вероятность послеимпульсов находится в пределах 1-3 процента, при этом распределения послимпульсов описывается не экспоненциальной функцией [2].

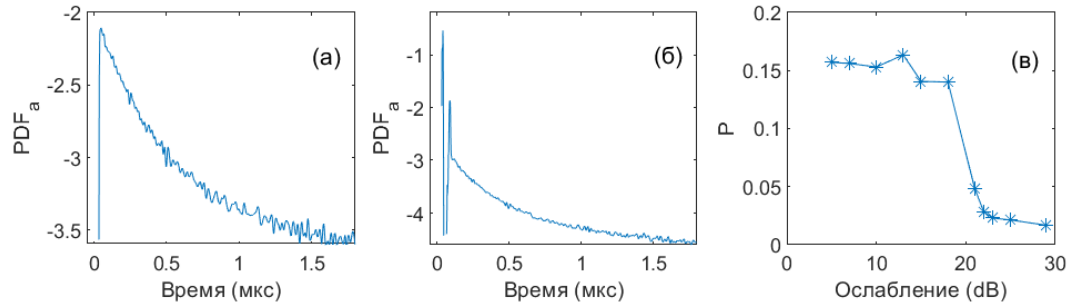


Рис. 2. Плотность вероятности распределения  $PDF_a$  послеимпульсов при ослаблении 29 dB (а) и 10 dB (б); вероятность появлений послеимпульсов в зависимости от ослабления интенсивности лазерного импульса (с).

На рисунках 2а и 2б приведены примеры изменения функции плотности вероятности  $PDF_a$  распределения послеимпульсов с увеличением амплитуды лазерного импульса. Из рисунка 2б виден резкий рост числа послеимпульсов с малыми временами задержки. При этом вероятность появления послеимпульсов увеличивается более чем в 10 раз (рисунок 1в). Однако, подобный рост наблюдается не для всех детекторов. Полученные результаты важны с точки зрения оптимизации работы искусственного нейрона на основе оптоэлектронной пары «ВИЛ -ДОФ».

**Литература.**

1. V. N. Chizhevsky, V. A. Kulchitsky, S. Ya. Kilin, / Artificial spiking neuron based on a single-photon avalanche diode and a microcavity laser // Appl. Phys. Lett. – 2021 - Vol. 119. - P. 041107.
2. DB Horoshko, VN Chizhevsky, SY Kilin / Afterpulsing model based on the quasi-continuous distribution of deep levels in single-photon avalanche diodes // Journal of Modern Optics - 2017. – Vol. 64 (2). – P. 191-195.



# Сверхразрешающая оптическая флуктуационная микроскопия: модификация метода путем предварительной обработки ВХОДНЫХ ДАННЫХ

М. Ю. Галковский <sup>a,b</sup>, А. Б. Михалычев <sup>a</sup>, Д. С. Могилевцев <sup>a</sup>

<sup>a</sup>Институт физики НАН Беларуси, Минск, Беларусь,

<sup>b</sup>Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь

E-mail: galkovkii100@gmail.com

**Введение.** Для оптической микроскопии характерно ограничение разрешения, связанное с дифракцией света [1, 2]. Данное ограничение можно преодолеть, если выйти за пределы классической микроскопии [3]. Такого эффекта можно добиться путем модификации измерительной установки: использования микроскопии на основе подавления спонтанного испускания (STED-микроскопии), фотоактивируемой локализационной микроскопии (PALM/fPALM-микроскопии), микроскопии стохастической оптической реконструкции (STORM-микроскопии) и ряда других методов [4]. Альтернативный подход – оптическая флуктуационная микроскопия сверхвысокого разрешения (SOFI) – в большей степени основывается на статистической обработке регистрируемого сигнала, накладывая на исследуемый образец только требование стохастического мерцания: быстрого и независимого переключения оптических состояний (интенсивности, поляризации и т.д.) наблюдаемых флюоресцирующих излучателей [5].

Идея метода SOFI заключается в регистрации последовательности кадров, представляющих динамику флуктуаций источников излучения, с последующим вычислением кумулянтов различных порядков [5]. Если флуктуации всех источников происходят независимо, получаемые кумулянтные изображения обладают повышенной резкостью (возрастающей при увеличении порядка кумулянта) и могут обеспечить более высокое разрешение. Однако реальная возможность наблюдения мелких деталей объекта определяется не только резкостью изображения, но и соотношением сигнал-шум, которое быстро ухудшается при возрастании порядка кумулянта и ограничивает применение высоких порядков на практике. Снижение вклада неизбежного дробового шума в результирующий сигнал позволило бы обойти указанное ограничение и добиться более высокого разрешения при той же измерительной установке. Эффективным подходом к снижению шумов является сглаживание (фильтрация) сигнала. Однако сглаживание результирующего кумулянтного изображения, хотя и приводит к визуальным улучшениям, не может увеличить содержащуюся в изображении информацию. Для решения данной проблемы в настоящей работе предложена предварительная обработка данных, *предшествующая* расчету кумулянтных изображений. Проведен анализ влияния такой предобработки на работоспособность метода SOFI и показано, что она позволяет достигнуть повышения разрешения.

**Общая теория SOFI.** Реализация сверхвысокого разрешения методом SOFI заключается в построении кумулянтных изображений. Пусть изображение формируется из вкладов  $M$  излучателей. Интенсивность  $m$ -го излучателя в  $n$ -ом кадре описывается случайной величиной  $X_m(n)$ , статистические свойства которой (дисперсия  $\text{var}(X_m(n))$ , ковариации интенсивности между кадрами  $\text{cov}(X_m(n), X_m(n'))$ , автокумулянты для последовательности кадров  $k_N(X_m)$  и т.д.) зависят от параметров переключения источников. Значение интенсивности, соответствующее пикселю  $[i, j]$  в  $n$ -м кадре, можно представить как:

$$I_{ij}(n) = A_{ij}^{(1)} X_1(n) + \dots + A_{ij}^{(M)} X_M(n), \quad (1)$$

где  $A_{ij}^{(m)} = PSF(s_m, r_{ij})$  – коэффициент передачи излучения  $m$ -го источника в пиксель  $[i, j]$ , определяемый функцией рассеяния точки (ФРТ)  $PSF(s, r)$  оптической системы. При построении кумулянтного изображения для каждого пикселя рассматривается последовательность величин  $\{I_{ij}(n)\}_n$  и рассчитывается ее автокумулянт порядка  $N$ . В основу SOFI положено предположение об отсутствии корреляций между переключением различных источников:  $\text{cov}(X_m(n), X_{m'}(n')) = 0$  для  $m \neq m'$  и любых  $n, n'$ . Перекрестные кумулянты независимых величин равны нулю [6]. Следовательно, в выражении для результирующего сигнала остаются только автокумулянты для отдельных источников:

$$AC_{ij}^{(N)} = k_N [A_{ij}^{(1)} X_1(n) + \dots + A_{ij}^{(M)} X_M(n)] = [(A_{ij}^{(1)})^N + \dots + (A_{ij}^{(M)})^N] \cdot C, \quad (2)$$

где предполагается, что статистика переключений всех источников одинакова:  $k_n(X_m) = C$  для  $m = 1, M$ .

Возведение ФРТ в степень  $N$  приводит к ее эффективному сужению. Например, для  $PSF(s, r) \propto \exp[-(s-r)^2 / \omega^2]$  справедливо уменьшение ширины ФРТ в  $\sqrt{N}$  раз:  $PSF^N(s, r) \propto \exp[-(s-r)^2 / (\omega/\sqrt{N})^2]$ .

При реальном измерении, кроме слагаемых входящих в правую часть соотношения (1), в регистрируемом сигнале также неизбежно присутствует дробовой шум:  $I_{ij}^{(\text{real})}(n) = I_{ij}(n) + W_{ij}(n)$ . Рассчитывая значения кумулянтов  $AC_{ij}^{(N)}$ , можно увидеть, что, помимо слагаемых из формулы (2), возникают дополнительные члены, связанные с  $W_{ij}$ , вклад которых в общую сумму также зависит от порядка кумулянта  $N$ . Исходя из этого, можно сделать вывод, что при увеличении  $N$  растет не только разрешенность изображения, но и вклад шума, вносящий искажения и препятствующий дальнейшей реконструкции положений излучателей. Так шум ограничивает оптимальный порядок кумулянтов и, следовательно, достижимое увеличение разрешения [7].

**Сглаживание исходных данных.** В качестве методов предобработки измеряемых данных до расчета кумулянтов были выбраны два подхода: сглаживание сплайнами (а именно сглаживание по Уиттекеру [8]) и обратная свертка (алгоритм Ричардсона-Люси [9, 10]). Первый из подходов переключается с использованием виртуальных пикселей для более плотной дискретизации изображений и эффективного устранения шумов [11]. Применяемое в настоящей работе сглаживание Уиттекера-Хендерсона – дискретная версия сплайнового сглаживания для равномерно распределенных одномерных данных [12]. Для двумерных изображений сглаживание осуществляется в два этапа: по строкам и по столбцам. Так как в рассматриваемой модели отклонения исходных интенсивностей полностью описываются пуассоновским распределением, базовую реализацию метода можно считать устойчивой ввиду отсутствия выбросов. Алгоритм обратной свертки Ричардсона-Люси – итерационная процедура восстановления действительного изображения, искаженного известной ФРТ. Данный подход является популярным методом обработки изображений в области медицины и астрономии [9, 10]. Алгоритм более устойчив к шумам, чем реконструкция на основе преобразования Фурье, и способен восстанавливать сильно зашумленные изображения.

**Результаты.** Для первичной оценки (потенциально отрицательного) влияния сглаживания на разрешенность (резкость) конечных кумулянтных изображений был использован критерий Рэля [2]. Результаты такой оценки для сглаживания по Уиттекеру и обратной свертки Ричардсона-Люси представлены на рисунке 1 (а,б). Видно, что оба метода не вносят существенных искажений в разрешающую способность SOFI. Более

того, алгоритм Ричардсона-Люси улучшает видимую различимость объектов благодаря учету формы ФРТ.

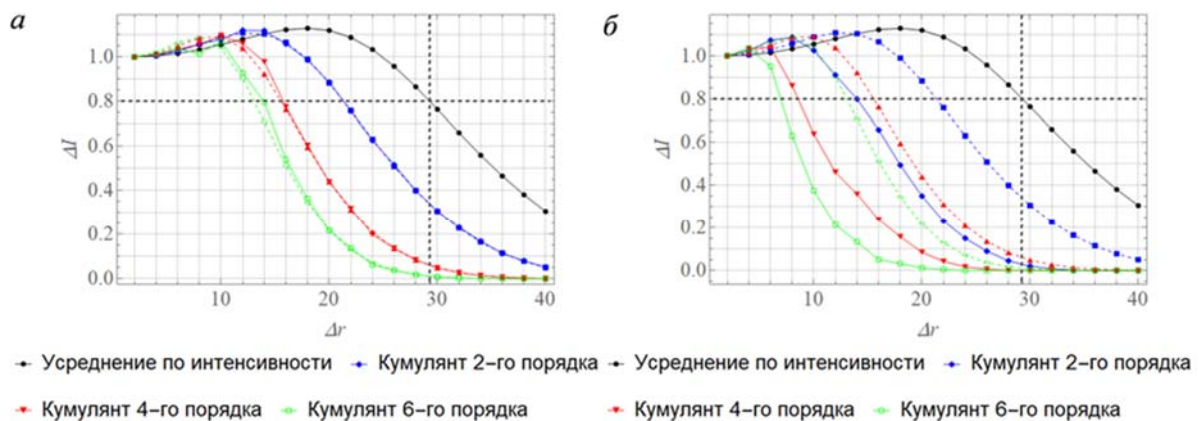


Рис. 1. Применение критерия Рэля к модельным кумулянтным изображениям пары источников: зависимость нормированного сигнала на оси симметрии изображения от расстояния между излучателями, выраженного в пикселях (при моделировании использовался размер пикселя 10 нм) для сглаживания по Уиттекеру (а) и методом Ричардсона-Люси (б). Пунктирная линия соответствует кумулянтным изображениям для идеальных данных без шума; сплошная – для ошумленных и обработанных данных.

Горизонтальные пунктирные линии указывают критерий успешного разрешения, вертикальные пунктирные линии – классический дифракционный предел.

На рисунке 2 представлены модельные изображения: обычное изображение на основе суммарной интенсивности и три кумулянтных изображения для  $N=6$ , соответствующие различным типам предобработки. Видно, что использованные методы сглаживания действительно позволяют значительно снизить вклад шума в кумулянтные изображения.

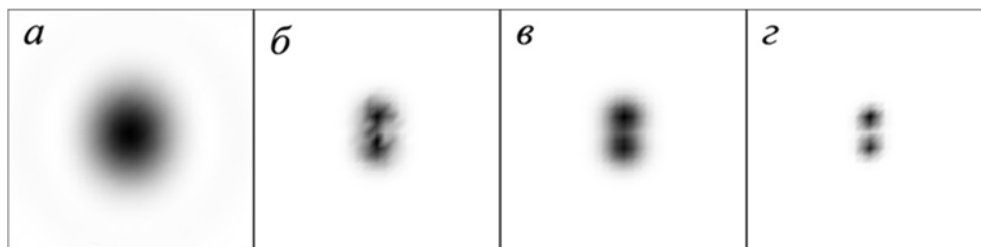


Рис. 2. Изображения двух излучателей: усредненное по интенсивности изображение (а) и кумулянтные изображения 6-го порядка с необработанными входными данными (б), сглаживанием по Уиттекеру (в) и обратной сверткой Ричардсона-Люси (г) исходного набора кадров.

Для количественной оценки эффекта от сглаживания входных данных был использован подход на основе операционального разрешения [7]: анализа зависимости погрешности реконструкции положений излучателей для модельных изображений от расстояния между излучателями. Результаты, представленные на рисунке 3, подтверждают эффективность применения сглаживания входных данных методом Уиттекера для повышения информативности результирующих изображений. Для обратной свертки такого эффекта на данный момент добиться не удалось, несмотря на существенное улучшение визуального восприятия получаемых кумулянтных изображений.

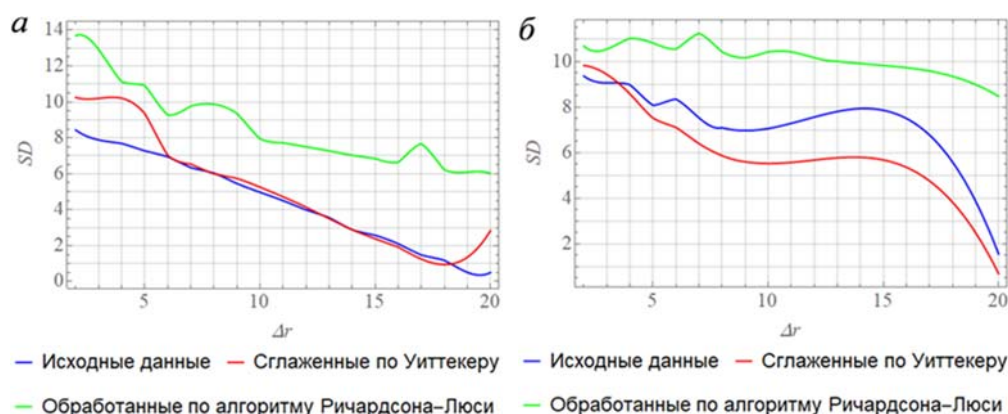


Рис. 3. Зависимость суммарной погрешности реконструкции положений пары излучателей от расстояния между ними для кумулянтов 2-го (а) и 4-го (б) порядков.

### Литература.

1. E. Abbe. Beitrage zur Theorie des Mikroskops und der mikroskopischen Wahrnehmung. Archiv fur mikroskopische Anatomie, 9(1):413–468, 1873.
2. L. Rayleigh. XXXI. Investigations in optics, with special reference to the spectroscope. The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science, 8(49):261–274, 1879.
3. S. W. Hell and J. Wichmann. Breaking the diffraction resolution limit by stimulated emission: stimulated-emission-depletion fluorescence microscopy. Optics Letters, 19 (11):780–782, 1994.
4. W. Vandenberg et al. Diffraction-unlimited imaging: from pretty pictures to hard numbers. Cell and Tissue Research, 360(1):151–178, 2015.
5. T. Dertinger et al. Fast, background-free, 3D super-resolution optical fluctuation imaging (SOFI). Proceedings of the National Academy of Sciences, 106(52):22287–22292, 2009.
6. M. G. Kendall and A. Stuart. The Advanced Theory of Statistics (Volume 1). Griffin, 1969.
7. S. Vlasenko et al. Optimal correlation order in superresolution optical fluctuation microscopy. Physical Review A, 102(6):063507, 2020.
8. P. Craven and G. Wahba. Smoothing noisy data with spline functions. Numerische Mathematik, 31(4):377–403, 1978.
9. W. H. Richardson. Bayesian-based iterative method of image restoration. JoSA, 62 (1):55–59, 1972.
10. L. B Lucy. An iterative technique for the rectification of observed distributions. The astronomical journal, 79:745, 1974.
11. S. Geissbuehler et al. Live-cell multiplane three-dimensional super-resolution optical fluctuation imaging. Nature communications, 5(1):1–7, 2014.
12. S. J. Orfanidis. Applied optimum signal processing. Piscataway, NJ, 2018.

# Эволюция кубита, взаимодействующего с многомодовым резервуаром и подверженного когерентному возмущению

А. В. Ефимова

*Институт физики НАН Беларуси, Минск, Беларусь*  
*E-mail: efimovaalexandra@yandex.ru*

Рассмотрено взаимодействие кубита с многими модами поля, образующими резервуар. В рамках метода цепочки зацепляющихся уравнений Боголюбова для операторов моментов полевых операторов получено основное управляющее уравнение для редуцированной матрицы плотности кубита. В предположении, что спектр релаксационных возмущений является лоренцевским, получено немарковское управляющее уравнение, которое в марковском пределе принимает стандартный вид уравнения Линдблада. Решение полученного уравнения, дополненного оператором когерентного возмущения вне рамок приближения вращающейся волны, проведено численно методом Рунге-Кутты 4 порядка. Показано хорошее соответствие данного решения с численным решением дифференциальных уравнений в пакете Mathematica. Продемонстрировано стремление траектории вектора Блоха к предельному циклу.

Предположим, что кубит взаимодействует с многими модами поля, образующими многомодовый резервуар. Оператор Гамильтона такой системы имеет вид

$$\hat{H} = \hbar\omega_0\hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_- + \hbar\sum_{\kappa}\omega_{\kappa}a_{\kappa}^+a_{\kappa} + \hbar\sum_{\kappa}g_{\kappa}(a_{\kappa}^+\hat{\sigma}_- + a_{\kappa}\hat{\sigma}_+), \quad (1)$$

где  $\hat{a}_{\kappa}$ ,  $\hat{a}_{\kappa}^+$  – полевые операторы уничтожения и рождения, а  $\hat{\sigma}_-$ ,  $\hat{\sigma}_+$  – спиновые операторы Паули с соответствующими коммутационными соотношениями  $[\hat{a}_{\kappa}, \hat{a}_{\kappa'}^+] = \delta_{\kappa\kappa'}$ ,  $[\hat{a}_{\kappa}, \hat{\sigma}_{\pm}] = 0$ ,  $[\hat{a}_{\kappa}^+, \hat{\sigma}_{\pm}] = 0$  [1].

В представлении Шредингера временная эволюция матрицы плотности  $\hat{\rho}(t)$  определяется уравнением фон Неймана, или квантовым уравнением Лиувилля [2]:

$$\frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[\hat{H}(t), \hat{\rho}(t)]. \quad (2)$$

Переходя в представление взаимодействия

$$\hat{\rho}(t) = e^{-i\left(\omega_0\hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_- + \sum_{\kappa}\omega_{\kappa}a_{\kappa}^+a_{\kappa}\right)t} \hat{\tilde{\rho}}(t) e^{i\left(\omega_0\hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_- + \sum_{\kappa}\omega_{\kappa}a_{\kappa}^+a_{\kappa}\right)t}, \quad (3)$$

получим

$$\frac{d}{dt}\hat{\tilde{\rho}}(t) = -\frac{i}{\hbar}[\hat{V}^{(t)}, \hat{\tilde{\rho}}(t)], \quad (4)$$

где  $\hat{V}^{(t)} = \hbar\sum_{\kappa}\left(g_{\kappa}^{(t)}a_{\kappa}^+\hat{\sigma}_- + g_{\kappa}^{*(t)}a_{\kappa}\hat{\sigma}_+\right)$ ,  $g_{\kappa}^{(t)} = g_{\kappa}e^{i(\omega_{\kappa}-\omega_0)t}$ ,  $\Delta_{\kappa} = \omega_{\kappa} - \omega_0$  – частотная расстройка мод резервуара от собственной частоты кубита.

Вводя обозначение для средних по полю от нормально-упорядоченного произведения операторов  $Tr_n\left(\hat{a}_{\kappa_1}^+\hat{a}_{\kappa_2}^+ \dots \hat{a}_{\kappa_n}\hat{a}_{\kappa_{n+1}} \dots \hat{\tilde{\rho}}(t)\right) = \hat{\sigma}_{\kappa_1\kappa_2 \dots \kappa_n\kappa_{n+1} \dots}$  из уравнения (4) найдем уравнение для матрицы плотности кубита, усредненного по состояниям поля,

$$\frac{d\hat{\sigma}^{(t)}}{dt} = -i\sum_{\kappa}\left(g_{\kappa}^{(t)}[\hat{\sigma}_-, \hat{\sigma}_{\kappa,0}] + g_{\kappa}^{*(t)}[\hat{\sigma}_+, \hat{\sigma}_{0,\kappa}]\right). \quad (5)$$

Для входящих в (5) операторов  $\hat{\sigma}_{\kappa,0}, \hat{\sigma}_{0,\kappa}$ , связанных соотношением  $(\hat{\sigma}_{\kappa,0})^+ = \hat{\sigma}_{0,\kappa}$ , аналогичным образом получаем следующее уравнение

$$\frac{d\hat{\sigma}_{\kappa,0}(t)}{dt} = i g_{\kappa}^{*(t)} \hat{\sigma}(t) \hat{\sigma}_+ - i \sum_{\kappa'} (g_{\kappa'}^{(t)} (\hat{\sigma}_- \hat{\sigma}_{\kappa\kappa',0} - \hat{\sigma}_{\kappa\kappa',0} \hat{\sigma}_-) + g_{\kappa'}^{*(t)} [\hat{\sigma}_+, \hat{\sigma}_{\kappa,\kappa'}]). \quad (6)$$

В уравнениях (6) и эрмитово-сопряженном (6) появляются слагаемые, содержащие операторы второго порядка  $\hat{\sigma}_{\kappa\kappa',0}, \hat{\sigma}_{\kappa'\kappa,0}$  вида  $\hat{\sigma}_{\kappa_1\kappa_2\dots\kappa_n\kappa_{n+1}\dots}$ . Составляя для них уравнения аналогично уравнениям (6) и эрмитово-сопряженному (6), получим бесконечную цепочку зацепляющихся уравнений Боголюбова [3] для операторов

$$\hat{\sigma}(t); \hat{\sigma}_{\kappa,0}(t), \hat{\sigma}_{0,\kappa}(t); \hat{\sigma}_{\kappa,\kappa'}(t), \hat{\sigma}_{0,\kappa\kappa'}(t), \hat{\sigma}_{\kappa\kappa',0}(t); \hat{\sigma}_{\kappa\kappa'\kappa''}(t), \hat{\sigma}_{\kappa,\kappa'\kappa''}(t), \dots$$

Учитывая, что в случае малых значений коэффициентов связи  $|g_{\kappa}^{(t)}|$ , вклад корреляторов  $\hat{\sigma}_{\kappa_1\kappa_2\dots\kappa_n\kappa_{n+1}\dots}$  высшего порядка значительно меньше, чем корреляторов низшего порядка, можно в качестве первого приближения оборвать цепочку, оставив только первые члены. В итоге получаем

$$\frac{d\hat{\sigma}_{\kappa,0}(t)}{dt} = i g_{\kappa}^{*(t)} \hat{\sigma}(t) \hat{\sigma}_+ \left( |0\rangle = \prod_{\kappa} |0\rangle_{\kappa}, \hat{\sigma}_{\kappa,0}(0) = 0 \right) \Rightarrow \hat{\sigma}_{\kappa,0}(t) = i \int_0^t dt g_{\kappa}^{*(t)} \hat{\sigma}(\tau) \hat{\sigma}_+. \quad (7)$$

Подставляя уравнения (7) и эрмитово-сопряженное (7) в (5), получим основное управляющее уравнение для редуцированной матрицы плотности кубита, взаимодействующего с многомодовым резервуаром,

$$\frac{d\hat{\sigma}(t)}{dt} = \int_0^t d\tau K^{(t,\tau)} [\hat{\sigma}_-, \hat{\sigma}(\tau) \hat{\sigma}_+] + \int_0^t d\tau K^{*(t,\tau)} [\hat{\sigma}_- \hat{\sigma}(\tau), \hat{\sigma}_+], \quad (8)$$

где введена корреляционная функция возмущений резервуара  $K^{(t,\tau)} = \sum_{\kappa} g_{\kappa}^{(t)} g_{\kappa}^{*(\tau)} = \sum_{\kappa} |g_{\kappa}|^2 e^{i\Delta_{\kappa}(t-\tau)}$ .

В пределе непрерывного спектра частот  $\omega_{\kappa}$  мод резервуара с плотностью  $\rho(\Delta_{\kappa})$

$$K^{(t,\tau)} = \sum_{\kappa} |g_{\kappa}|^2 e^{i\Delta_{\kappa}(t-\tau)} = \int_{-\infty}^{\infty} d\Delta_{\kappa} \rho(\Delta_{\kappa}) e^{i\Delta_{\kappa}(t-\tau)}. \quad (9)$$

Для лоренцевского спектра релаксационных возмущений с шириной  $\gamma$  и интенсивностью  $K_0 = \int_0^{\infty} d\tau K^{(t,\tau)}$

$$\rho(\Delta_{\kappa}) |g_{\kappa}(\Delta_{\kappa})|^2 = \frac{K_0 \gamma}{\pi} \frac{\gamma}{\gamma^2 + \Delta_{\kappa}^2}, \quad (10)$$

корреляционная функция (9) становится экспоненциальной

$$K^{(t,\tau)} = \int_{-\infty}^{\infty} d\Delta_{\kappa} \frac{K_0 \gamma}{\pi} \frac{\gamma}{\gamma^2 + \Delta_{\kappa}^2} e^{i\Delta_{\kappa}(t-\tau)} = K_0 \gamma e^{-\gamma(t-\tau)}, \quad (11)$$

а управляющее уравнение – интегро-дифференциальным

$$\frac{d\hat{\sigma}(t)}{dt} = K_0 \int_0^t dt \gamma e^{-\gamma(t-\tau)} ([\hat{\sigma}_-, \hat{\sigma}(\tau) \hat{\sigma}_+] + [\hat{\sigma}_- \hat{\sigma}(\tau), \hat{\sigma}_+]) dt. \quad (12)$$



В марковском пределе, когда время корреляций стремится нулю, а ширина спектра к бесконечности ( $\gamma \rightarrow \infty$ ), с учетом соотношения  $\lim_{\gamma \rightarrow \infty} \gamma e^{-\gamma(t-\tau)} = \delta(t-\tau)$  из немарковского уравнения (12) получим стандартный вид управляющего уравнения в виде уравнения Линдблада [4, 5]

$$\frac{d\hat{\sigma}(t)}{dt} = K_0([\hat{\sigma}_-, \hat{\sigma}(\tau)\hat{\sigma}_+] + [\hat{\sigma}_- \hat{\sigma}(\tau), \hat{\sigma}_+]). \quad (13)$$

При когерентном возмущении, вид которого определяется оператором

$$\hat{V}_{\text{возм}}^{(t)} = v_0 \cos \omega t (\hat{\sigma}_+ e^{i\omega_0 t} + \hat{\sigma}_- e^{-i\omega_0 t}), \quad (14)$$

уравнение (13) запишется так

$$\frac{d\hat{\sigma}(t)}{dt} = K_0([\hat{\sigma}_-, \hat{\sigma}(\tau)\hat{\sigma}_+] + [\hat{\sigma}_- \hat{\sigma}(\tau), \hat{\sigma}_+]) - \frac{i}{\hbar} [\hat{V}_{\text{возм}}^{(t)}, \hat{\sigma}(t)]. \quad (15)$$

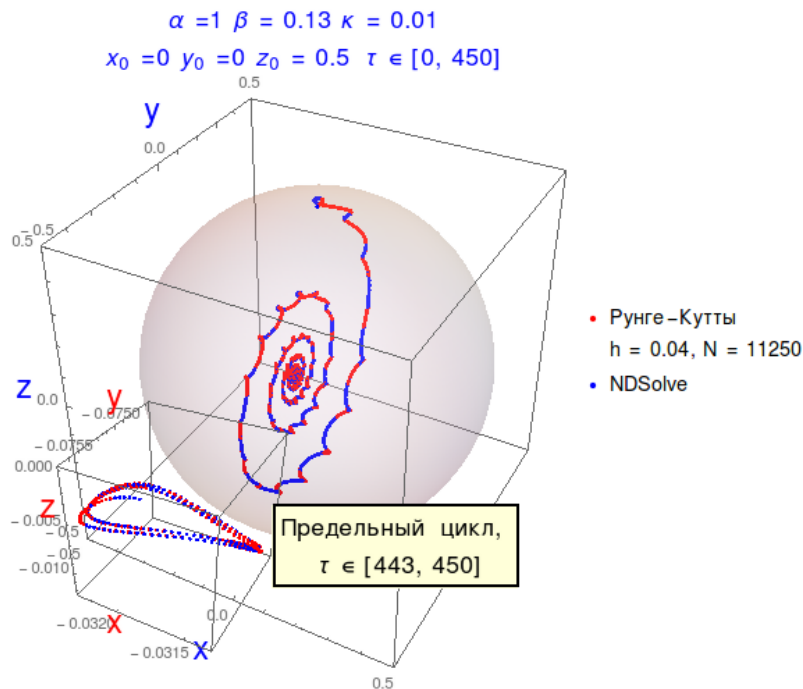


Рис. 1. Траектории вектора Блоха для случая точного резонанса ( $\alpha = 1$ ) и  $\beta = 0.13$  при спонтанном распаде ( $\kappa = 0.01$ ). Красные траектории получены методом Рунге-Кутты 4-го порядка, синие – с использованием функции NDSolve в пакете Mathematica. Траектории вычислялись с шагом итераций  $h = 0.04$  на временном промежутке  $\tau = [0, 450]$ . На вставке изображено стремление траектории к предельному циклу при  $\tau = [443, 450]$ .

Переходя в систему координат, вращающуюся с частотой  $\omega$ ,

$$\hat{\sigma}(t) = e^{-i(\omega-\omega_0)\hat{\sigma}_+ \hat{\sigma}_- t} \hat{\rho}(t) e^{i(\omega-\omega_0)\hat{\sigma}_+ \hat{\sigma}_- t}, \quad (16)$$

запишем уравнение (15) в явном виде в собственном базисе кубита

$$\begin{pmatrix} \dot{\rho}_{11} & \dot{\rho}_{12} \\ \dot{\rho}_{21} & \dot{\rho}_{22} \end{pmatrix} = K_0 \begin{pmatrix} 2\rho_{22} & -\rho_{12} \\ -\rho_{12} & 2\rho_{22} \end{pmatrix} + i(\omega - \omega_0) \begin{pmatrix} 0 & -\rho_{12} \\ \rho_{21} & 0 \end{pmatrix} - \frac{i}{\hbar} \cos\omega t \begin{pmatrix} \rho_{21}e^{-i\omega t} - \rho_{12}e^{i\omega t} & (\rho_{22} - \rho_{11})e^{-i\omega t} \\ (\rho_{11} - \rho_{22})e^{i\omega t} & \rho_{12}e^{i\omega t} - \rho_{21}e^{-i\omega t} \end{pmatrix}. \quad (17)$$

Уравнение (17) эквивалентно следующей системе уравнений для компонент вектора Блоха  $x = \text{Re}\rho_{12}$ ,  $y = -\text{Im}\rho_{12}$ ,  $z = (\rho_{22} - \rho_{11})/2$ :

$$\begin{aligned} \dot{x} &= -\kappa x - \beta \sin 2\alpha \tau z + (1 - \alpha)y, \\ \dot{y} &= -\kappa y + \beta(1 + \cos 2\alpha \tau)z - (1 - \alpha)x, \\ \dot{z} &= -\kappa(1 + 2z) + \beta \sin 2\alpha \tau x - \beta(1 + \cos 2\alpha \tau)y. \end{aligned} \quad (18)$$

где введены обозначения  $\tau = \omega_0 t$ ,  $\beta = \nu_0 / (\hbar \omega_0)$ ,  $\alpha = \omega / \omega_0$ ,  $\kappa = K_0 / \omega_0$ .

Решение уравнений (18) проведено численно в пакете Mathematica методом Рунге-Кутты 4-го порядка [6, 7] с шагом итераций, равным 0.04, позволившим получить на временном промежутке  $\tau = [0, 450]$  решения, отражающие особенности траектории, связанные с уходом от приближения вращающейся волны [8] (рисунок 1), а также с использованием функции NDSolve. В пределе больших времен  $\tau = N/\kappa$  при  $N \approx 4$  траектория вектора Блоха выходит на предельный цикл [9]. Решение с помощью пакета Mathematica подтверждает закономерность.

### Литература.

1. Зубайри, М. С. Квантовая оптика: пер. с англ. / М. О. Скалли, М. С. Зубайри ; под ред. В.В. Самарцева. – Москва : ФИЗМАТЛИТ, 2003. – 512 с.
2. Могилевцев, Д. С. Методы квантовой оптики структурированных резервуаров / Д. С. Могилевцев, С. Я. Килин. – Минск : Беларус. Наука, 2007. – 174 с.
3. Кузнецов, Д. В. Локальное поле и скорость радиационной релаксации в диэлектрической среде / Д. В. Кузнецов, Вл. К. Рерих, М. Г. Гладуш // ЖЭТФ. – 2011. – Т. 140, вып. 4 (10). – С. 742–754.
4. Трушечкин, А. С. Нахождение стационарных решений уравнения Линдблада посредством исследования функционала производства энтропии / А. С. Трушечкин // Труды МИ-АН. – 2018. – Т. 301. – С. 276–286.
5. Башаров, А. М. Уравнение Линдблада спонтанно излучающего атомно-фотонного кластера в неланжевенском случае / А. М. Башаров // Учен. зап. Казан. ун.-та. Сер. Физ.-матем. науки. – 2013. – Т. 155, кн. 1. – С. 7–15.
6. Tay, K. G. The Fourth Order Runge-Kutta Spreadsheet Calculator Using VBA Programming For Ordinary Differential Equations / K. G. Tay et al. // Procedia – Social and Behavioral Sciences. – 2015. – P. 231–239.
7. Simangunsong, L. Fourth order Runge-Kutta method for solving a mathematical model of the spread of HIV-AIDS / L. Simangunsong, S. Mungkasi // AIP Conference Proceeding. – 2021. – P. 030092-1–030092-6.
8. Ефимова, А. В. Касп-сингулярность траектории блоховского вектора кубита во внешнем периодическом световом поле / А. В. Ефимова // Вес. Нац. акад. наук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2018. – Т. 54, № 1. – С. 62–68.
9. Адронов, А. А. Теория колебаний / Адронов А. А. и др. – Москва : Государственное издательство физико-математической литературы, 1959. – 916 с.

## Информация Фишера для оптимизации и планирования измерений в рентгеновской дифрактометрии высокого разрешения

К. И. Жевно <sup>a</sup>, А. Б. Михалычев <sup>b</sup>

<sup>a</sup> Белорусский государственный университет, 22004 Минск, Беларусь

<sup>b</sup> Институт физики НАН Беларуси, 220072 Минск, Беларусь

E-mail: 3do10@mail.ru

Рентгеновское излучение (РИ) является мощным инструментом изучения разнообразных микро- и наноразмерных объектов. Из-за относительно слабого взаимодействия с исследуемым образцом оно не только не разрушает его, но и способно проникать на достаточно большую глубину без существенных потерь интенсивности. Длина волны РИ сопоставима с типичными размерами структуры часто используемых в современном высокотехнологичном производстве и научных исследованиях объектов, например с ячейкой кристаллической решетки полупроводниковых материалов или с биологическими молекулами в кристаллографии белка. Информация о структуре образцов может быть получена из анализа рассеянного РИ.

Рентгеновская дифрактометрия высокого разрешения (РДВР) применяется для исследования структуры плоскостойких образцов. На достоверность получаемых результатов исследования, проводимого посредством обработки экспериментальных данных, влияет оптимальность выбора условий измерения с учетом как инструментальных эффектов, так и особенностей определяемых параметров. Как правило, для стандартных образцов в РДВР оптимальные экспериментальные условия известны. В противном случае их можно определить экспериментально или теоретически. Экспериментальное определение достаточно трудоемко и затратно по времени, в то время как теоретическое определение может быть выполнено без каких-либо предварительных измерений. Для теоретического определения наилучших условий проведения эксперимента может быть применен информационный подход, основанный на использовании информации Фишера и неравенства Крамера-Рао.

Для реализации такого подхода необходимо иметь теоретическую модель, описывающую получаемые экспериментальные данные. Чем лучше теоретическая модель описывает экспериментальные данные, тем выше точность оценки, построенной на основе неравенства Крамера-Рао. Для описания экспериментальных данных РДВР в данной работе используется динамическая теория дифракции (ДТД), в рамках которой поле РИ в каждом слое представляется в виде суммы двух волн: прошедшей и дифрагированной, которые взаимосвязаны и обмениваются энергией в процессе распространения. Уравнения ДТД можно записать в следующем виде [1]:

$$\frac{k_0^2 - K_0^2}{k_0^2} D_0 = \chi_0 D_0 + \chi_{\bar{h}} D_h, \quad (1)$$

$$\frac{k_h^2 - K_h^2}{k_h^2} D_h = \chi_h D_0 + \chi_0 D_h, \quad (2)$$

где  $K_0$  и  $K_h$  – волновые векторы падающей и дифрагированной волн в вакууме, которые равны при упругом рассеянии,  $k_0$  и  $k_h$  – волновые векторы прошедшей (дифрагированной вперед) и дифрагированной волн в веществе,  $\chi_{\bar{h}}$  – диэлектрическая восприимчивость, соответствующая вектору обратной решетки  $-\mathbf{h}$ ,  $D_0$  и  $D_h$  – амплитуды падающей и дифрагированной волн.

Из уравнений (1), (2) следует дисперсионное уравнение 4 порядка, а также отношения амплитуд прошедшей и дифрагированной волн [1]. Используя стандартные граничные условия для каждой пары соседних слоев образца и решая дисперсионное

уравнение для каждого слоя, с помощью рекурсивного матричного формализма можно найти поле в интересующей точке пространства [2]. При анализе релаксированных структур используется модифицированная версия данного алгоритма [3].

Учет инструментальных эффектов при моделировании сигнала проводится путем свертки идеального отклика образца с модельной инструментальной функцией: функцией Пирсона седьмого типа с двумя свободными параметрами, а именно параметром ширины и формы, которые можно варьировать для получения наиболее приемлемого результата [4].

Информация Фишера количественно характеризует чувствительность измерения к искомым параметрам и позволяет оценить ошибку их определения при помощи неравенства Крамера-Рао. На основе априорных предположений об образце строится теоретическая модель: плотность вероятности  $f(\vec{x}|\vec{\beta})$  различных значений измеряемого сигнала  $\vec{x}$  в зависимости от исследуемых параметров образца  $\vec{\beta}$ . Сама матрица информации Фишера может быть записана в виде

$$F_{\mu,\nu}(\vec{\beta}_{fix}) = \sum_{\vec{x}} \frac{1}{f(\vec{x}|\vec{\beta})} \frac{\partial f(\vec{x}|\vec{\beta})}{\partial \beta_{\mu}} \frac{\partial f(\vec{x}|\vec{\beta})}{\partial \beta_{\nu}} \Bigg|_{\vec{\beta}=\vec{\beta}_{fix}} \quad (3)$$

где  $\vec{\beta}_{fix}$  – априорно предполагаемые значения исследуемых параметров. Неравенство Крамера-Рао связывает дисперсию оценки соответствующих параметров и матрицу информации Фишера:

$$Var(\beta_{\mu}) \geq (F^{-1})_{\mu,\mu}. \quad (4)$$

В данной работе информативность эксперимента оценивается по полному спектру РДВР. Интенсивность сигнала для каждого положения гониометра (количество зарегистрированных фотонов) является случайной величиной, подчиняющейся распределению Пуассона и обусловленной дробовым шумом. Среднее значение такой случайной величины определяется величиной, предсказанной теоретически с помощью построенной модели.

Вместе с интересующими неизвестными параметрами модели вклад в ошибку вносят и не интересующие параметры, которые также нужно учесть [5]. В частности, таким параметром является суммарная интенсивность РИ. Для учета влияния данного параметра на результирующую ошибку определения интересующих параметров, или на информативность, выражение (3) необходимо модифицировать и, с учетом распределения Пуассона, можно записать в виде [4, 5]:

$$F_{\mu,\nu}^{(res)}(\vec{\beta}_{fix}) = F_{\mu,\nu}(\vec{\beta}_{fix}) - \frac{1}{X_{tot}(\vec{\beta})} \frac{\partial X_{tot}(\vec{\beta})}{\partial \beta_{\mu}} \frac{\partial X_{tot}(\vec{\beta})}{\partial \beta_{\nu}} \Bigg|_{\vec{\beta}=\vec{\beta}_{fix}}, \quad (5)$$

где  $X_{tot}(\vec{\beta}) = \sum_i X_i^{expected}(\vec{\beta}), i = 1..N$  – суммарная интенсивность зарегистрированного сигнала, где суммирование идет по всем точкам измерения, величина  $F_{\mu,\nu}(\vec{\beta}_{fix})$  выражается согласно формуле (3) с учетом распределения Пуассона,  $\vec{\beta}$  – вектор интересующих параметров образца.

С точки зрения информационного подхода, каждый фотон несет информацию, и, тем самым, чем больше интенсивность спектра, тем он более информативен. Однако важна не только интенсивность сигнала, но и информативность каждого фотона, причем чем сильнее инструментальные эффекты, тем менее информативен каждый фотон. Таким образом, одной из задач, решаемых на стадии планирования эксперимента, является поиск экспериментальной конфигурации, максимизирующей суммарную

информативность фотонов, составляющих измеряемый спектр. В случае учета инструментальных эффектов с помощью функции Пирсона задача поиска оптимальной экспериментальной конфигурации сводится к определению оптимального значения параметра ширины, обеспечивающего компромисс между общим количеством регистрируемых фотонов и средней информативностью каждого фотона.

Информативность получаемой конфигурации оценивается согласно критерию А – оптимальности [6], который с учетом выражения (4) можно представить в следующем виде:

$$\Delta^2 \equiv \sum_{\mu} \text{Var}(\beta_{\mu}) \geq \sum_{\mu} (F^{-1})_{\mu,\mu} = \text{Tr}(F^{-1}). \quad (6)$$

Для исследования выбраны 2 типа образцов: без релаксации и с присутствием релаксации. Первый тип образцов представляет собой тонкий слой твердого раствора кремния и германия, находящийся на кремниевой подложке. Слой настолько тонкий, что релаксационные процессы отсутствуют, иначе говоря, образец псевдоморфный. В образце второго типа слои достаточно толстые, так что необходимо учитывать их релаксацию. В данной работе рассматривается компланарная геометрия и используется дифракция Брэгга, которая позволяет изучать тонкие пленки. Оптимальная экспериментальная конфигурация, таким образом, определяется оптимальным брэгговским отражением. Также изучено влияние ширины инструментальной функции на информативность спектров РДВР.

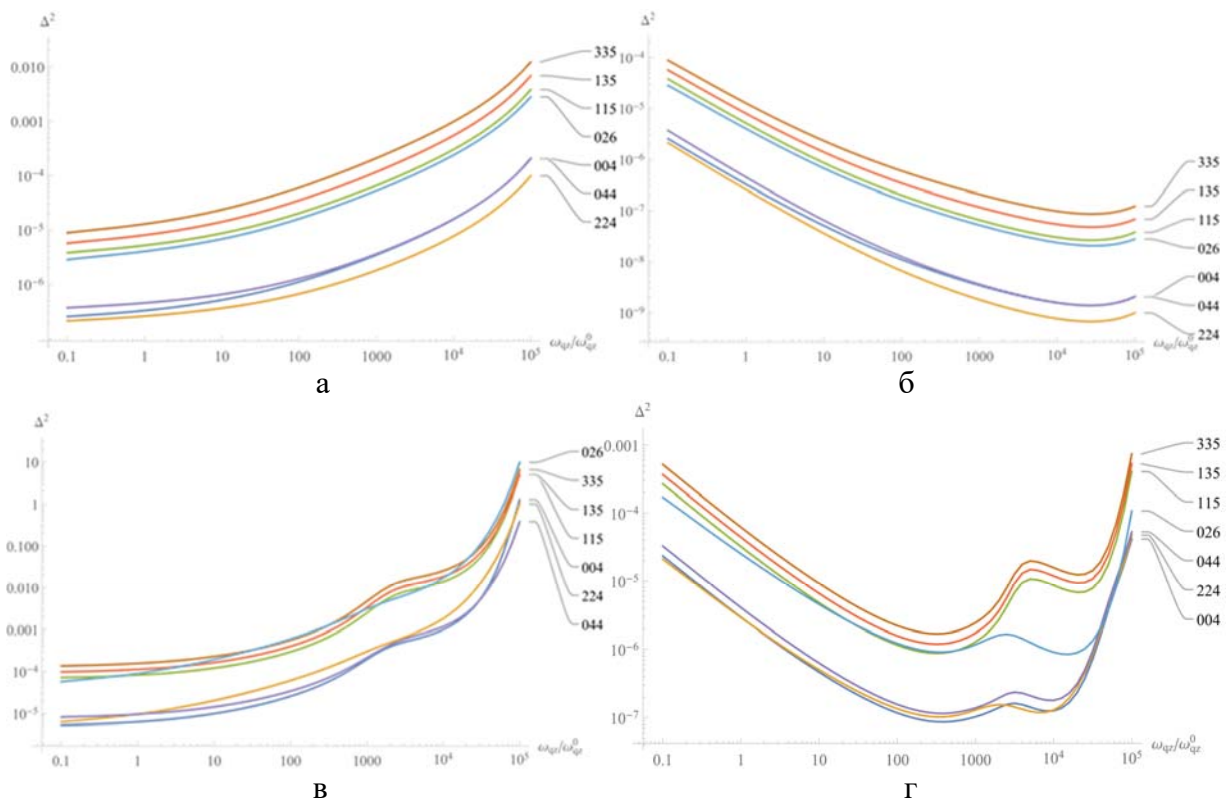


Рис. 1. Зависимость общей погрешности определения неизвестных параметров для исследуемых брэгговских отражений для псевдоморфного и релаксированного образцов при наличии зависимости интенсивности сигнала от ширины инструментальной функции (б), (г), и при отсутствии такой зависимости (а), (в).

В результате выяснено, что с увеличением ширины инструментальной функции как для псевдоморфного, так и для релаксированного образцов происходит монотонное возрастание неопределенности оценки параметров слоя (рисунок 1 (а), (в)). Однако, если

интенсивность зависит от полуширины инструментальной функции, то в зависимости неопределенности от полуширины инструментальной функции присутствует локальный минимум для псевдоморфного образца, и два локальных минимума для релаксированного (рисунок 1(б), (г)).

Для подтверждения полученной оценки информативности проведено восстановление неизвестных параметров псевдоморфного образца по модельному спектру с пуассоновским шумом для двух близких по информативности брэгговских отражений, и вычислена их погрешность определения. Полученные результаты численного моделирования согласуются с предсказаниями оптимальности параметров измерения на основе информации Фишера. Например, для нормированной ширины инструментальной функции, равной  $w_{qz}/w_{qz}^0 = 10^{-1}$ , суммарная относительная погрешность определения параметров для отражений 004 и 044 составила  $\Delta_{rel}^{004} = 0,00706$  и  $\Delta_{rel}^{044} = 0,00490$  соответственно. Погрешность определения параметров для 004 больше, чем для 044, что согласуется с оценкой, приведенной на рисунке 1(а).

Представленные результаты позволяют провести аналогию между влиянием величины инструментального уширения в РД и рэлеевским дифракционным пределом в квантовой и классической оптической микроскопии [7]. Для анализа объектов, характерный размер которых превышает разрешение оптической системы, ключевым является уменьшение дробового шума, что достигается при использовании классических источников излучения. При необходимости разрешения деталей, более мелких, чем классический предел разрешения, наиболее существенной оказывается чувствительность измерения – выгодно применение квантово-коррелированных источников излучения, несмотря на их малую интенсивность. В РДВР совместное влияние ширины инструментальной функции и интенсивности сигнала характеризуется сходным поведением. Для широкой инструментальной функции выгодно повышение чувствительности измерения при ее сужении, даже в ущерб интенсивности сигнала. Если инструментальные эффекты приводят к уширению, незначительному по сравнению с характерной структурой спектра РДВР, выгодно использование более широкой инструментальной функции, обеспечивающей более высокую интенсивность. Представленная аналогия способствует расширению методологии РДВР и может быть продуктивной при разработке новых методов анализа.

### Литература.

1. Динамическое рассеяние рентгеновских лучей в идеальных кристаллах/ З. Г. Пинскер. – Москва, Наука. – 1974. – 370 с.
2. Dynamical x-ray diffraction of multilayers and superlattices: Recursion matrix extension to grazing angles / S. Stepanov, E. Kondrashkina, R. Kohler. // Phys. Rev. B. – Vol. 57. – 1998. – P. 4829.
3. X-ray dynamical diffraction from partly relaxed epitaxial structures / A. I. Benediktovich, I. D. Feranchuk, A. P. Ulyanenko. // Phys. Rev. B. – Vol. 80. – 2009. – P. 235315.
4. Theory of point estimation. / E. L. Lehmann and G. Casella. – 2nd. ed. – Springer Science & Business Media. – 1998. – 617 p.
5. Fisher information for optimal planning of X-ray diffraction experiments / A. Mikhalychev, et. al. // Journal of Applied Crystallography. – 2021. – Vol. 54. – P. 1676.
6. Designing robust optimal dynamic experiments / S.P. Asprey, S. Macchietto. // Journal of Process Control. – Vol. 12. – 2002. – P. 545.
7. Efficiently reconstructing compound objects by quantum imaging with higher-order correlation Functions/ A.B. Mikhalychev, et. al. // Communications Physics. – Vol. 2. – 2019. – P. 134.



## Применение методов машинного обучения для оптимизации обработки данных сверхразрешающей микроскопии

К. И. Жевно <sup>a</sup>, А. Б. Михальчев <sup>b</sup>, С. В. Власенко <sup>b</sup>, Д. С. Могилевцев <sup>b</sup>

<sup>a</sup> *Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь*

<sup>b</sup> *Институт физики НАН Беларуси, Минск, Беларусь*

*E-mail: 3do10@mail.ru*

Для исследования микрообъектов активно используются оптические методы ввиду их относительной простоты, наглядности получаемых данных и универсальности. Однако для любой оптической системы существует естественный предел разрешения, обусловленный дифракцией [1]. Существует ряд методов, позволяющих преодолеть классический дифракционный предел разрешения. Один из эффективных методов – сверхразрешающая оптическая флуктуационная микроскопия (SOFI).

Повышенное разрешение в SOFI получается в результате статистического анализа корреляций интенсивностей случайно флуктуирующих флуоресцентных источников, таких как квантовые точки [2], органические красители [3] и флуоресцентные белки. Строится кумулянтное изображение, обеспечивающее большее разрешение по сравнению с классическим изображением на основе интенсивности. Тем самым функция рассеяния точки становится более узкой, или изображение становится менее размытым. Подход применим как для исследования неорганических структур, так и для визуализации живых клеток и субклеточных структур [2].

Статистический шум ограничивает достижимое разрешение и приводит к конечному оптимальному порядку кумулянтов, причем этот порядок зависит от изучаемого объекта: от взаимного положения источников излучения и их характеристик. Более того, иногда выгодно использовать для анализа несколько кумулянтных изображений разных порядков одновременно [4,5]. Оптимальный порядок кумулянтного изображения можно определить при помощи максимизации информации Фишера [4].

Измерение в SOFI производится относительно быстро, и занимает порядка нескольких секунд. Сами изображения могут иметь достаточно большое разрешение (до 1 миллиона пикселей). Чтобы воспользоваться этими преимуществами метода (особенно при анализе быстрых процессов в живых клетках), необходимо иметь возможность выполнять быструю обработку полученных данных по мере их накопления. Для анализа данных SOFI в режиме реального времени требуется алгоритм, обеспечивающий определение оптимального порядка кумулянтного изображения за время, сравнимое со временем измерения. Хотя подход, основанный на информации Фишера, намного быстрее и надежнее, чем прямое моделирование методом Монте-Карло, он по-прежнему требует относительно больших вычислительных ресурсов и временных затрат для принятия таких решений в реальном времени.

В данной работе предложено решение задачи определения оптимального порядка кумулянтного изображения (или оптимальной комбинации порядков) при помощи нейронной сети. Сама задача в таком случае сводится к задаче классификации, где данные, характеризуемые определенным выбором оптимального порядка кумулянтов или их комбинации, принадлежат к определенному классу. В качестве входных данных используется изображение интенсивности объекта, которое формируется очень быстро на основе измеренных данных. Сама нейросеть так же быстро устанавливает принадлежность изображения к определенному классу, и, тем самым, определяет оптимальный режим дальнейшего анализа измеренных данных (порядок кумулянтного изображения, используемого для реконструкции положений излучателей).

В представленной работе обучающие наборы данных строятся на основе применения формализма информации Фишера к ошумленным модельным изображениям. Случайным образом генерируются модели объекта, содержащие от 1 до 4 флюоресцирующих излучателей со случайным пространственным расположением и интенсивностью. Для каждого построенного таким образом объекта моделируется последовательность кадров (одномерных 80-пиксельных изображений), соответствующая измерительной методике SOFI. Учитываются флуктуации интенсивности излучателей и дробовой шум при детектировании оптического сигнала. Суммирование полученных кадров обеспечивает формирование входных данных (изображения интенсивности) для нейронной сети. Дополнительно для построенной модели и разных порядков кумулянтов рассчитываются матрицы информации Фишера, учитывающие конечное время измерения, особенности переключения флюоресцирующих источников между «ярким» и «темным» состояниями и реалистичную функцию рассеяния точки. На основе неравенства Крамера-Рао рассчитывается предсказываемая суммарная погрешность реконструкции положений излучателей [4] для всех рассматриваемых порядков кумулянтов и их комбинаций. В качестве оптимального выбирается режим анализа, минимизирующий предсказываемую погрешность при дополнительном условии минимального объема анализируемых данных (для ускорения расчетов). Номер выбранного оптимального режима используется для обучения нейронной сети. Для анализа правильности принятия решения при дальнейшем тестировании все рассмотренные порядки кумулянтов и их комбинации упорядочивались по возрастанию предсказываемой погрешности и каждому из них присваивался индекс качества – порядковый номер в полученном ранжировании (начиная с 1 – оптимального решения).

При обучении нейронной сети каждый элемент учебной выборки содержит одномерное изображение размером 80 пикселей в качестве входных данных и один индекс оптимального режима анализа, описывающий правильный выходной сигнал. Перед использованием входные данные проходят предобработку: значения интенсивностей пикселей заменяются на значения квадратов арктангенсов соответствующих интенсивностей, нормированных на максимум среди сумм измененных значений интенсивностей изображений. Далее к каждому из нормированных изображений добавляется сумма интенсивностей оригинального изображения, нормированная на максимальное значение такой суммы из всей тестовой выборки. Таким образом, все значения лежат в промежутке от -1 до 1. Вид используемой нейронной сети – 5-слойный перцептрон с распределением узлов 81–100–200–300–200–100–5, где первый слой используется для подачи исходных данных (80-пиксельного нормированного изображения и дополнительно суммарной интенсивности изображения, нормированной на максимальную сумму по всем изображениям), а последний – для получения вероятности принадлежности данных к соответствующему классу. Рекомендованный нейронной сетью режим анализа соответствует классу изображений, для которого выходная вероятность максимальна. Для обучения нейронной сети была использована выборка, содержащая 33000 элементов.

Для тестирования работы нейронной сети была построена выборка, содержащая 12000 элементов и не пересекающаяся с учебной выборкой. Выбранный нейронной сетью режим анализа сравнивался с результатами, получаемыми на основе информации Фишера, и определялся его индекс качества. На рисунке 1(а) представлено распределение вероятностей для индекса качества выбираемых нейронной сетью решений. С вероятностью 68% успешно выбирается оптимальный режим анализа. Фиксированный выбор некоторого режима анализа без адаптации к изображению приводил бы к существенно меньшей вероятности удовлетворения условию

оптимальности (рисунок 1(б)). Кроме того, в ряде случаев выбор решения, не являющегося оптимальным, не приводит к существенному увеличению прогнозируемой погрешности (рисунок 1(в)). Такая ситуация характерна для близких значений погрешности в нескольких конкурирующих режимах.

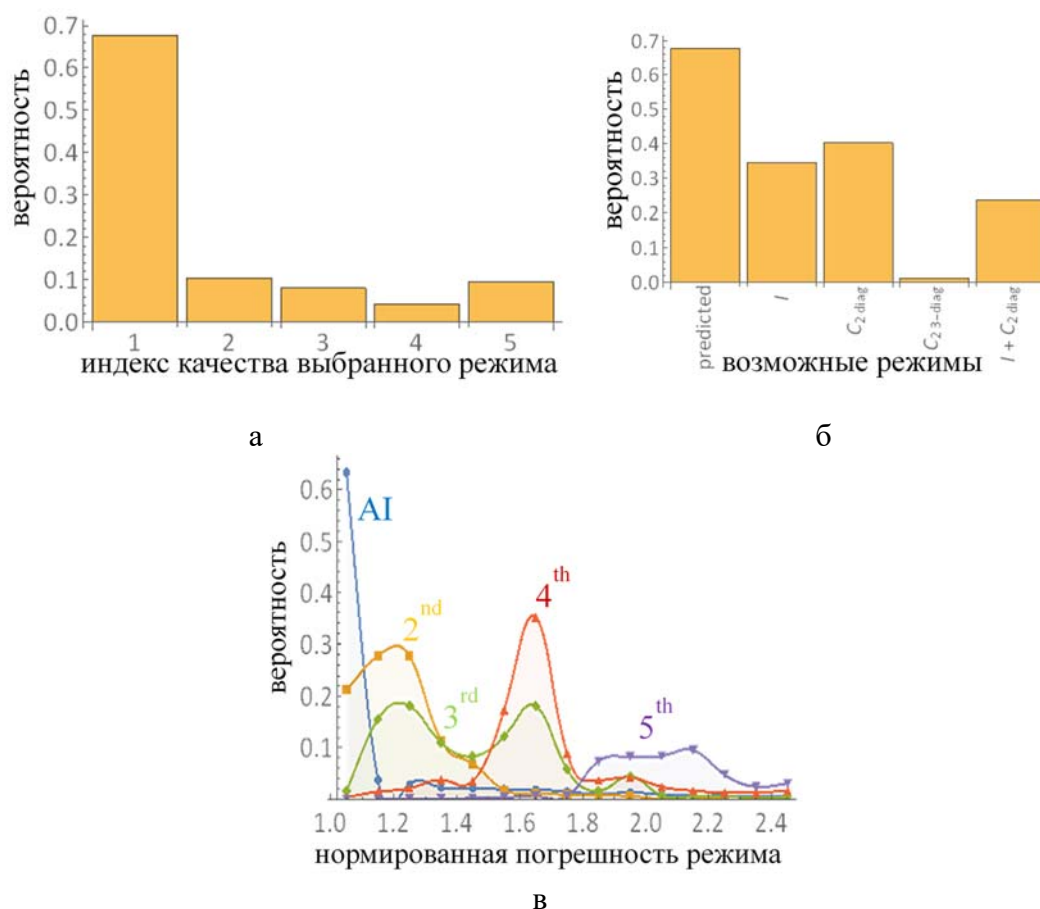


Рис. 1. Представление результатов обучения нейронной сети: (а) – гистограмма вероятности выбора обученной нейронной сетью режима анализа с определенным индексом качества, (б) – сравнение вероятности выбора оптимального режима анализа нейронной сетью (predicted) и при фиксированном использовании одного из возможных режимов анализа для всех элементов обучающей выборки (остальные столбцы), (в) – распределение вероятностей для погрешности для данного выбора режима анализа, нормированной на погрешность при оптимальном выборе: для результата работы нейросети (AI) и для решений с заданным индексом качества (2-5).

Полученные результаты позволяют сделать вывод о перспективности использования нейронных сетей для оптимизации обработки данных в SOFI и возможности их применения для построения автоматических систем микроскопии.

### Литература.

1. Born, M. Wolf, E. 2013 Principles of Optics: Electromagnetic Theory of Propagation, Interference and Diffraction of Light (Amsterdam: Elsevier), Cambridge University Press., 1999.
2. Dertinger, T. et al., *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, 2009, 106, 22287.
3. Dertinger, T. et al., M., *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2010, 49, 9441.
4. Vlasenko, S. et al., *Phys. Rev. A*, 2020, 102, 063507.
5. Kurdziałek, S. and Demkowicz-Dobrzański, R., *J. Opt.*, 2021, 23, 075701.

# Интерференционные эффекты новых нейтральных промежуточных бозонов в процессах рождения фермионных пар на будущих электрон-позитронных коллайдерах

В. Р. Куриленко <sup>a,b</sup>, С. А. Лукашевич <sup>a</sup>, А. А. Панков <sup>b,c</sup>

<sup>a</sup> Гомельский государственный университет им. Ф.Скорины, Гомель, Беларусь,

<sup>b</sup> Гомельский государственный технический университет им. П.О. Сухого, Гомель, Беларусь,

<sup>c</sup> Объединенный институт ядерных исследований, ОИЯИ, Дубна, Россия,  
E-mail: valera.kaban4ik@gmail.com

**Введение.** Стандартная модель (СМ) сильных и электрослабых взаимодействий элементарных частиц достигла поистине впечатляющих успехов в описании экспериментальных данных во всем интервале достижимых на сегодняшний день энергий. Физические программы экспериментов на действующих и будущих коллайдерах высоких энергий в качестве основных задач включают в себя прецизионную проверку СМ, а также поиск новых частиц и взаимодействий, существование которых предсказывается моделями «новой» физики, являющимися обобщениями СМ. При возрастании энергии сталкивающихся пучков и светимости коллайдеров проводимые эксперименты представляются весьма перспективными с точки зрения достижения высоких точностей при проверке СМ, а также для поиска и обнаружения новых физических явлений и закономерностей.

Настоящая работа посвящена разработке метода обнаружения интерференционных эффектов новых нейтральных промежуточных бозонов в процессах рождения лептонных и кварковых пар на будущих электрон-позитронных коллайдерах таких, например, как FCC-ee, CLIC и ILC. Кроме того, оптимизация стратегии поиска эффектов нестандартной физики (новых тяжелых бозонов) на будущих электрон-позитронных коллайдерах является чрезвычайно актуальной и важной задачей. В работе поставленные задачи решаются с помощью традиционных физических наблюдаемых величин – сечения аннигиляционного рождения и асимметрии вперед-назад. В частности, в работе выполнен модельный и модельно-независимый анализ эффектов новых нейтральных промежуточных бозонов в процессах аннигиляционного рождения лептонных и кварковых пар. Определены возможности обнаружения новых бозонных состояний на электрон-позитронных коллайдерах высоких энергий.

**Сечение процесса аннигиляционного рождения фермионных пар. Асимметрия вперед-назад.** Дифференциальное сечение электрон-позитронной аннигиляции в пару фермионов  $e^+e^- \rightarrow f\bar{f}$  для неполяризованных начальных пучков может быть представлено в борновском приближении в виде:

$$\frac{d\sigma_{ff}}{d\cos\theta} = \frac{\pi\alpha^2}{2s} \left[ (1 + \cos^2\theta)F_1 + 2\cos\theta F_2 \right], \quad (1)$$
$$F_1 = F_1^{SM} + \Delta F_1, \quad F_2 = F_2^{SM} + \Delta F_2.$$

Функции  $F_{1,2}$  зависят от констант связи и масс стандартного  $Z$ -бозона и нового тяжелого нейтрального  $Z'$ -бозона [1-3].

Парциальные ширины распада  $Z'$ -бозона в фермионные пары имеют вид:

$$\Gamma_{Z'}^{ff} = N_C \frac{\alpha_{e.m.} M_{Z'}}{3} \sqrt{1 - 4m_f^2 / M_{Z'}^2} \left[ v_f^2 + a_f^2 + 2m_f^2 / M_{Z'}^2 (v_f^2 - 2a_f^2) \right]. \quad (2)$$

Полная ширина распада  $\Gamma_{Z'}$ , состоит из суммы парциальных фермионных и бозонных ширин распада [1-3].

Лептонный канал процесса  $e^+e^- \rightarrow f\bar{f}$  ( $f=l$ ) в предположении  $e$ - $l$ -универсальности имеет очевидное преимущество перед процессом с произвольным конечным фермионным состоянием, состоящее в зависимости наблюдаемых от меньшего числа свободных параметров. В частности, лептонный процесс зависит от двух констант связи  $v'_l$  и  $a'_l$ , и массы  $M_{Z'}$ . Для описания же процесса  $e^+e^- \rightarrow q\bar{q}$  в общем случае требуется также информация о кварковых константах связи.

При анализе процесса парного рождения фермионов традиционно используется следующая пара интегральных наблюдаемых: полное сечение рассеяния  $\sigma_{ff}$ , и асимметрия вперед-назад  $A_{FB}$  [1]

$$\sigma_{ff} = \int_{-1}^1 \frac{d\sigma_{ff}}{d\cos\theta} d\cos\theta = N_C \sigma_{pt} F_1, \quad A_{FB} = \frac{\sigma_{FB}}{\sigma_{ff}} = \frac{\sigma_{ff}^F - \sigma_{ff}^B}{\sigma_{ff}} = \frac{3F_2}{4F_1}, \quad (3)$$

где  $\sigma_{pt} \equiv \sigma(e^+e^- \rightarrow \gamma \rightarrow \mu^+\mu^-) = (4\pi\alpha_{e.M.}^2)/s$ . Цветовой фактор  $N_C = 3(1)$  для кварков (лептонов). Сечения рассеяния в переднюю и заднюю полусферы определяются, соответственно, как

$$\sigma_{ff}^F = \int_0^1 \left(\frac{d\sigma_{ff}}{d\cos\theta}\right) d\cos\theta, \quad \sigma_{ff}^B = \int_{-1}^0 \left(\frac{d\sigma_{ff}}{d\cos\theta}\right) d\cos\theta, \quad (4)$$

здесь  $ff = \mu^+\mu^-, b\bar{b}, c\bar{c}$ .

**Модельно независимые ограничения на константы связи  $Z'$ -бозона.** Для количественного представления интерференционной картины рассмотрим три случая, отличающиеся друг от друга разным выбором фермионных констант связи  $v'_l$  и  $a'_l$ , но с одной и той же массой  $M_{Z'}$ : 1) векторный  $Z'_V$ -бозон ( $v'_l=1, a'_l=0$ ); 2) аксиально-векторный  $Z'_A$ -бозон ( $v'_l=0, a'_l=1$ ); 3)  $Z'_{AV}$ -бозон ( $v'_l=1, a'_l=1$ ). Во всех случаях, представленных на рисунках 1 и 2, берется  $M_{Z'} = 500$  ГэВ.

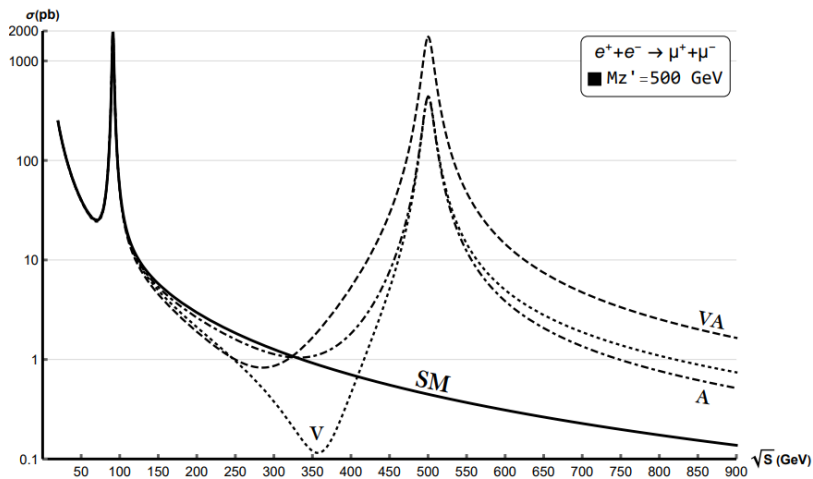


Рис. 1. Энергетическая зависимость полного лептонного сечения для Стандартной модели и для модели, предсказывающей существование  $Z'$ -бозона.

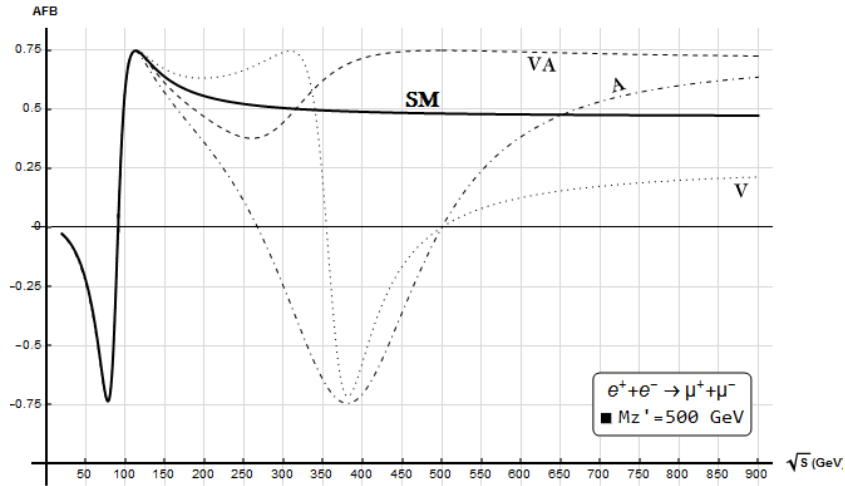


Рис.2. Энергетическая зависимость асимметрии лептонного сечения для Стандартной модели и для модели, предсказывающей существование  $Z'$ -бозона.

Если на ILC(International Linear Collider) не удастся обнаружить отклонения наблюдаемых от предсказаний СМ на уровне ожидаемой экспериментальной точности, то в этом случае можно оценить ограничения на параметры (константы связи)  $Z'$ -бозона. Далее в работе будут получены модельно независимые ограничения на лептонные и кварковые константы связи  $Z'$ -бозона на основе статистического анализа данных, ожидаемых из экспериментов на коллайдере ILC.

Чувствительность, например, полного сечения  $\sigma$  к параметрам  $Z'$ -бозона можно оценить с помощью функции  $\chi^2$ :

$$\chi^2 = \left(\frac{\Delta\sigma}{\delta\sigma}\right)^2. \quad (5)$$

Здесь  $\Delta\sigma$  есть отклонение сечения от поведения в СМ. Экспериментальная погрешность  $\delta\sigma$  учитывает как статистическую, так и систематическую ошибки.

Критерием для ограничений модельно-независимых фермионных констант связи  $v_f'$  и  $a_f'$  служит условие, согласно которому  $\chi^2 < \chi_{crit}^2$ . Величина  $\chi_{crit}^2$  определяется требуемым уровнем статистической достоверности. Аналогично определяется и функции  $\chi^2$  для асимметрии вперед-назад.

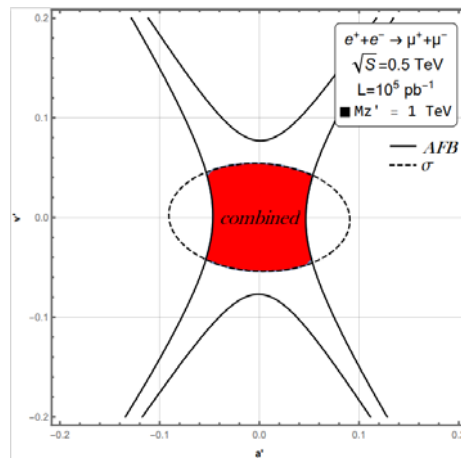


Рис. 3. Модельно-независимые ограничения на лептонные константы  $Z'$ -бозона



Результаты модельно-независимого анализа эффектов  $Z'$ -бозонов из (ожидаемых) данных коллайдера ILC по измерению физических наблюдаемых величин для лептонных и кварковых процессов представлены на Рис.3 и Рис.4.

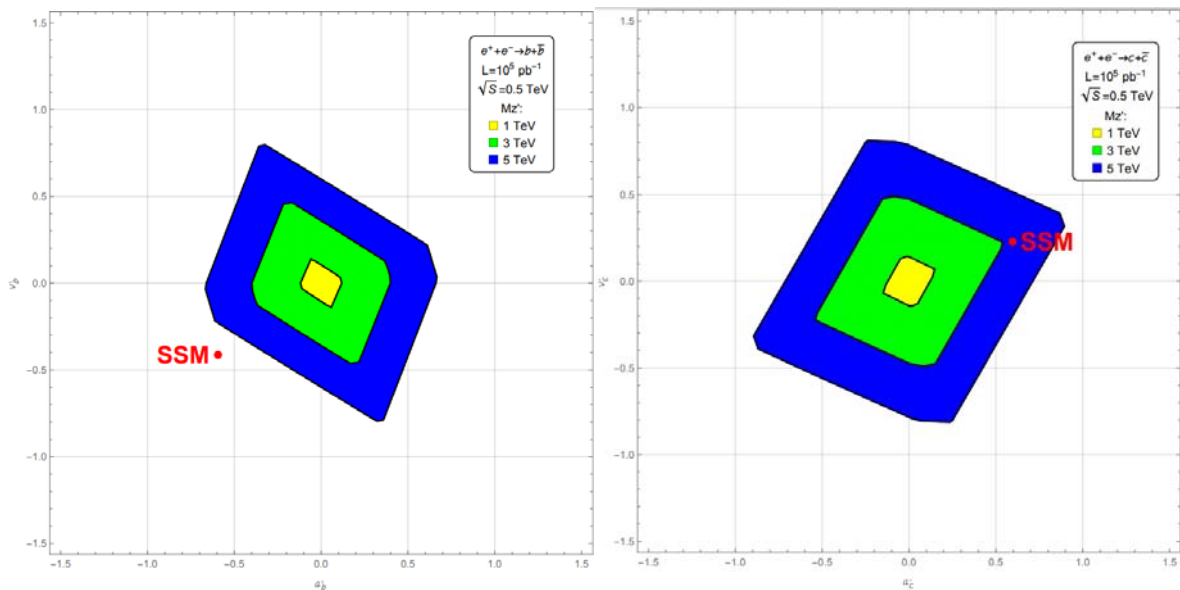


Рис.4. Модельно-независимые ограничения на константы  $Z'$ -бозонов  $(a'_f, v'_f), (f = c, b)$ .

Модельно-независимые ограничения, представленные на рисунках 3 и 4, получены из комбинированного анализа полного сечения и асимметрии вперед-назад.

**Заключение.** В работе исследованы интерференционные эффекты новых нейтральных  $Z'$ -бозонов в полном сечении и асимметрии вперед-назад в лептонных и кварковых процессах. Выявлены их характерные особенности в энергетическом поведении в сравнении с эффектами в СМ.

Выполнен статистический анализ эффектов  $Z'$ -бозонов, на основе которого впервые получены модельно-независимые ограничения на константы  $Z'$ -бозона для процессов  $e^+e^- \rightarrow \mu^+\mu^-$ ,  $e^+e^- \rightarrow b\bar{b}$ ,  $e^+e^- \rightarrow c\bar{c}$ , ожидаемые из экспериментов на коллайдере ILC.

**Благодарности.** Настоящая работа выполнена при поддержке БРФФИ.

### Литература.

1. Pankov A.A., Osland P. /  $Z'$ -prime interference effects from TRISTAN to LEP-2 // Phys. Lett.B – 1997. - Vol. 403. - P. 93-100.
2. Pankov A.A., Tsytrinov A.V., Babich A.A., Karpenko N.V. / Searches for new neutral gauge  $Z'$ -prime bosons at the  $e^+e^-$  International Linear Collider and their identification // Phys. Atom. Nucl. - 2010. - Vol. 73. - P. 773-784.
3. Pankov A.A., Serenkova I.A., Osland P. / Updated constraints on  $Z'$  and  $W'$  bosons decaying into bosonic and leptonic final states using the run 2 ATLAS data // Phys. Rev. D – 2021. - Vol. 103, № 5. - P. 053009.

# Генерация суммарной частоты в поверхностном слое цилиндрической частицы с большим радиусом основания. Приближение ВКБ

В. Н. Капшай, Е. Д. Головин, А. А. Шамына

Гомельский государственный университет им. Ф. Скорины, Гомель, Беларусь  
E-mail: golovinjenya@gmail.com

**Введение.** При исследовании поверхностей и тонких слоёв частиц используются нелинейные оптические явления второго порядка. Среди таких явлений можно выделить генерацию излучения суммарной частоты, которую можно описать следующими моделями: нелинейной моделью Релея–Ганса–Дебая (РГД), приближением Вентцеля–Крамерса–Бриллюэна (ВКБ) и нелинейной моделью на основе точного решения задачи Ми. В данной работе рассмотрим генерацию на основе приближения ВКБ.

**Постановка задачи и определение фаз волн в дальней зоне.** Рассмотрим диэлектрическую цилиндрическую частицу с радиусом основания  $a$  и высотой  $h$  ( $h \ll a$ ), на поверхности которой локализован оптически нелинейный слой толщиной  $d_0$  ( $d_0 \ll a$ ,  $d_0 \ll h$ ). Пусть на частицу под углами  $\theta_1$  и  $\theta_2$  к оси  $Oz$  падают две электромагнитные волны, характеризующиеся частотами  $\omega_1$  и  $\omega_2$  и волновыми векторами  $\mathbf{k}^{(1)}$  и  $\mathbf{k}^{(2)}$  соответственно. Расположение осей выберем таким образом, чтобы вектор  $(1 - \mathbf{e}_z \otimes \mathbf{e}_z)(\mathbf{k}^{(1)} + \mathbf{k}^{(2)})$  оказался направлен вдоль оси  $Ox$ ;  $\mathbf{e}^{(1)}$  и  $\mathbf{e}^{(2)}$  — единичные векторы, характеризующие азимут поляризации падающих волн. В результате будет наблюдаться генерация электромагнитных волн, частоту которых обозначим символом  $\omega_{12}$ . Волновой вектор генерируемого излучения, зависящий от направления наблюдения, обозначим символом  $\mathbf{k}^{(12)}$ . Отношение показателя преломления частицы к показателю преломления окружающей её среды при частотах  $\omega_1$ ,  $\omega_2$  и  $\omega_{12}$  обозначим переменными  $\eta_1$ ,  $\eta_2$  и  $\eta_{12}$  соответственно.

Найдём компоненты вектора электрической напряжённости поля суммарной частоты, генерируемого в поверхностном слое рассматриваемой частицы. С этой целью определим фазы падающих и генерируемых электромагнитных волн. В данном случае генерацией излучения от боковой поверхности цилиндра можно пренебречь, поэтому в задаче будем учитывать только генерацию в слоях на торцевых поверхностях частицы.

Номера рассматриваемых падающих волн будем обозначать буквой  $j$  ( $j$  принимает значения 1 и 2). Пусть произвольный луч падающей электромагнитной волны с частотой  $\omega_j$  проходит через поверхность частицы в точках  $A$  и  $B$  (рисунок 1,  $a$ ). Для упрощения расчётов при рассмотрении траектории луча  $AB$  не будем учитывать преломление электромагнитных волн на границах раздела сред. Возможность применения такого подхода подтверждена экспериментально в статье [1]. Тогда фазы волны в точках  $A$  и  $B$  равны  $\varphi_{be,A}^{(j)}(\mathbf{x}'_A) = \mathbf{k}^{(j)} \mathbf{x}'_A$  и  $\varphi_{be,B}^{(j)}(\mathbf{x}'_B) = \mathbf{k}^{(j)} \mathbf{x}'_B + \Delta\varphi_{be}^{(j)}$  соответственно. Здесь  $\Delta\varphi_{be}^{(j)}$  — дополнительный сдвиг фазы, вызванный прохождением волны через среду с показателем преломления, отличным от окружающей среды. Сдвиг фазы можно описать следующим образом

$$\Delta\varphi_{be}^{(j)} = (\eta_j - 1) |\mathbf{k}^{(j)}| L_{AB} = (\eta_j - 1) |\mathbf{k}^{(j)}| \frac{L_{B'B}}{\cos(\theta'_j)} = (\eta_j - 1) |\mathbf{k}^{(j)}| \frac{2|\mathbf{x}'_{B,z}|}{\cos(\theta'_j)}, \quad (1)$$

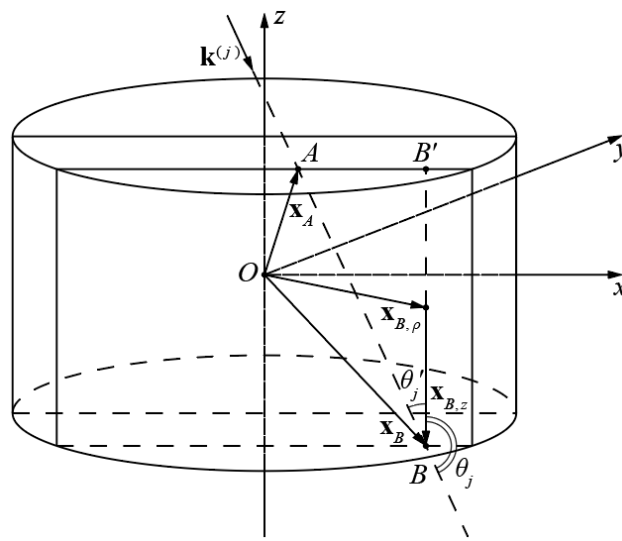
где  $L_{AB}$  — расстояние, которое волна проходит внутри частицы,  $L_{B'B}$  — проекция  $L_{AB}$  на ось  $Oz$ ,  $\mathbf{x}'_{B,z}$  — составляющая  $\mathbf{x}'_B$  вдоль оси  $Oz$ ,  $\theta'_j$  — угол, смежный углу  $\theta_j$ . Учтём, что  $|\mathbf{k}^{(j)}| |\mathbf{x}'_{B,z}| = \mathbf{k}^{(j)} \mathbf{x}'_{B,z} / \cos(\theta'_j)$ ,  $\theta'_j = 180 - \theta_j$ ,  $\mathbf{k}^{(j)} \mathbf{x}'_z = \mathbf{k}_z^{(j)} \mathbf{x}'_z$ , где  $\mathbf{k}_z^{(j)}$  — составляющая  $\mathbf{k}^{(j)}$ , параллельная оси  $Oz$ , и получим:

$$\Delta\varphi_{be}^{(j)}(\mathbf{x}'_B) = 2(\eta_j - 1)\mathbf{k}_z^{(j)}\mathbf{x}'_B \frac{1}{\cos^2(\theta_j)}, \quad (2)$$

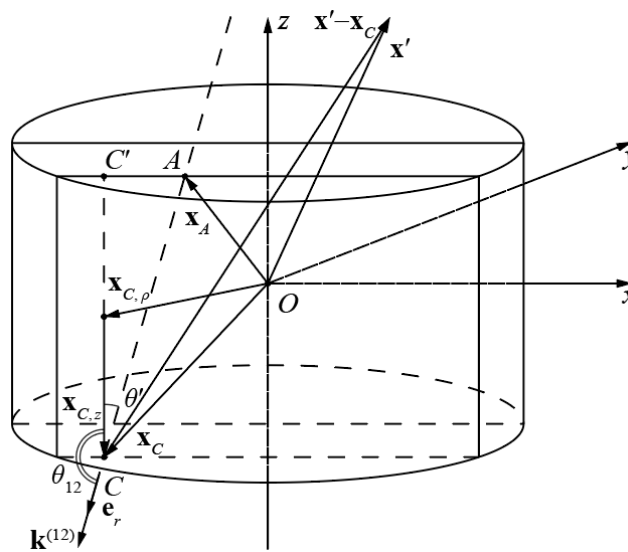
$$\varphi_{be,B}^{(j)}(\mathbf{x}'_B) = \mathbf{k}^{(j)}\mathbf{x}'_B + 2(\eta_j - 1)\mathbf{k}_z^{(j)}\mathbf{x}'_B \frac{1}{\cos^2(\theta_j)}. \quad (3)$$

Обобщим выражение для фазы так, чтобы её значение в точке  $A$  было равно  $\varphi_A^{(j)}$ , а в точке  $B$  —  $\varphi_B^{(j)}$ , учитывая при этом, что  $1/\cos(\theta_j) = |\mathbf{k}^{(j)}|/|\mathbf{k}_z^{(j)}|$ . Получим:

$$\varphi_{be}^{(j)}(\mathbf{x}') = \mathbf{k}^{(j)}\mathbf{x}' + (\eta_j - 1)(\mathbf{k}_z^{(j)}\mathbf{x}' + |\mathbf{k}_z^{(j)}\mathbf{x}'|) \left( \frac{|\mathbf{k}^{(j)}|}{|\mathbf{k}_z^{(j)}|} \right)^2. \quad (4)$$



a)



b)

Рис. 1. Схемы распространения волн через торцевые поверхности цилиндрической частицы: а) волновой вектор падающей волны; б) волновой вектор генерируемой волны

Теперь определим фазу генерируемой волны. Пусть в поверхностном слое частицы генерируется волна, волновой вектор которой параллелен вектору  $\mathbf{e}_r$ . Единичный вектор  $\mathbf{e}_r$  является встречным к направлению наблюдения, производящемуся из дальней зоны (рисунок 1, б). Фаза волны, пришедшей из точки  $C$  к наблюдателю, равна  $\varphi_{be,C}^{(12)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'_C) = k_{12} |\mathbf{x} - \mathbf{x}'_C|$ , где  $k_{12}$  — модуль волнового вектора  $\mathbf{k}^{(12)}$  генерируемой волны. Фаза генерируемой волны, пришедшей к наблюдателю из точки  $A$ , равна  $\varphi_{be,A}^{(12)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'_A) = k_{12} |\mathbf{x} - \mathbf{x}'_A| + \Delta\varphi_{be}^{(12)}$ . Здесь  $\mathbf{x}$  — вектор, определяющий положение наблюдателя относительно начала координат, а векторами  $\mathbf{x}'_C$  и  $\mathbf{x}'_A$  определено положение элементов поверхности сферической частицы (точек  $C$  и  $A$  соответственно) относительно начала координат. Аналогично предыдущим рассуждениям, учитывая что  $1/\cos(\theta_{12}) = |\mathbf{k}^{(12)}|/|\mathbf{k}_z^{(12)}|$ , где  $\theta_{12}$  — угол между вектором  $\mathbf{k}^{(12)}$  и осью  $Oz$ , и  $\mathbf{k}^{(12)}\mathbf{x}'_{A,z} = \mathbf{k}_z^{(12)}\mathbf{x}'_A$ , запишем выражения для сдвига фазы и фазы в точке  $A$  для генерируемой волны:

$$\Delta\varphi_{be}^{(12)}(\mathbf{x}'_A) = -2(\eta_{12} - 1)\mathbf{k}_z^{(12)}\mathbf{x}'_A \left( \frac{|\mathbf{k}^{(12)}|}{|\mathbf{k}_z^{(12)}|} \right)^2, \quad (5)$$

$$\varphi_{be,A}^{(12)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'_A) = k_{12} |\mathbf{x} - \mathbf{x}'_A| - 2(\eta_{12} - 1)\mathbf{k}_z^{(12)}\mathbf{x}'_A \left( \frac{|\mathbf{k}^{(12)}|}{|\mathbf{k}_z^{(12)}|} \right)^2. \quad (6)$$

В выражении (5) присутствует знак минус, так как скалярное произведение  $\mathbf{k}_z^{(12)}\mathbf{x}'_A$  отрицательное, а сдвиг фазы должен быть положительным числом. Аналогично предыдущим рассуждениям, объединим полученные выражение для фаз в точках  $C$  и  $A$  и воспользуемся приближением дальней зоны [2]:

$$\varphi_{be}^{(12)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = k_{12} |\mathbf{x}| - \mathbf{k}^{(12)}\mathbf{x}' + (\eta_{12} - 1)(-\mathbf{k}_z^{(12)}\mathbf{x}' + |\mathbf{k}_z^{(12)}\mathbf{x}'|) \left( \frac{|\mathbf{k}^{(12)}|}{|\mathbf{k}_z^{(12)}|} \right)^2. \quad (7)$$

**Выражения для вектора напряжённости электрического поля суммарной частоты.** Для определения напряжённости электрического поля генерируемой волны запишем выражения для напряжённости падающих электромагнитных волн, с учётом (4):

$$\mathbf{E}_{be}^{(j)}(\mathbf{x}') = \frac{2}{\eta_j + 1} \mathbf{e}^{(j)} E_j \exp \left( i\mathbf{k}^{(j)}\mathbf{x}' + i(\eta_j - 1)(\mathbf{k}_z^{(j)}\mathbf{x}' + |\mathbf{k}_z^{(j)}\mathbf{x}'|) \left( \frac{|\mathbf{k}^{(j)}|}{|\mathbf{k}_z^{(j)}|} \right)^2 \right), \quad (8)$$

где  $j$  принимает значения 1 и 2. Для удобства в (8) опущена временная часть.

Причиной генерации суммарной частоты в дипольной модели является наличие нелинейной части поляризации [3]. Учитывая (7) и (8), запишем выражение для компонент вектора напряжённости электрического поля генерируемого излучения:

$$E_i^{(12)}(\mathbf{x}) = \pi\mu_{12} \frac{\omega_{12}^2}{c^2} \frac{\exp(ik_{12}r)}{r} a^2 d_0 E_1 E_2 (\delta_{im} - e_{r,i} e_{r,m}) X_{be,mjk}^{(12)} e_j^{(1)} e_k^{(2)}. \quad (9)$$

Здесь  $X_{be,mjk}^{(12)}$  — эффективная восприимчивость, определяемая следующим образом:

$$X_{be,mjk}^{(12)} = \frac{2}{\eta_1 + 1} \frac{2}{\eta_2 + 1} [\exp[i\Phi_{be}(h/2)]\chi_{ijk}^{(2)}(h/2) + \exp[i\Phi_{be}(-h/2)]\chi_{ijk}^{(2)}(-h/2)] \times \\ \times [J_0(q_\rho a) + J_2(q_\rho a)], \quad (10)$$

где  $J_m(z)$  – цилиндрические функции Бесселя порядка  $m$ .  $\Phi_{be}(z')$  в (10) введено для упрощения записи фазы и определяется следующим образом:

$$\Phi_{be}(z') = q_z z' + (\eta_{12} - 1)(-k_z^{(12)} z' + |k_z^{(12)} z'|) \left( \frac{|k^{(12)}|}{|k_z^{(12)}|} \right)^2 + \\ + (\eta_1 - 1)(k_z^{(1)} z' + |k_z^{(1)} z'|) \left( \frac{|k^{(1)}|}{|k_z^{(1)}|} \right)^2 + (\eta_2 - 1)(k_z^{(2)} z' + |k_z^{(2)} z'|) \left( \frac{|k^{(2)}|}{|k_z^{(2)}|} \right)^2. \quad (11)$$

Здесь  $q_z$  — проекция на ось  $Oz$  вектора рассеяния  $\mathbf{q}$  на ось  $Oz$ , который определяется по формуле

$$\mathbf{q} = \mathbf{k}^{(1)} + \mathbf{k}^{(2)} - \mathbf{k}^{(12)}. \quad (12)$$

Тензоры  $\chi_{ijk}^{(2)}(h/2)$  и  $\chi_{ijk}^{(2)}(-h/2)$  в (10) выражаются через компоненты единичного вектора  $\mathbf{e}_z$  (для верхнего торца вектор нормали  $\mathbf{n} = \mathbf{e}_z$ , для нижнего —  $\mathbf{n} = -\mathbf{e}_z$ ) [4]:

$$\chi_{ijk}^{(2)}(h/2) = \chi_1^{(2)} e_{z,i} e_{z,j} e_{z,k} + \chi_2^{(2)} e_{z,i} \delta_{jk} + \chi_3^{(2)} e_{z,j} \delta_{ki} + \chi_4^{(2)} e_{z,k} \delta_{ij} + \\ + \chi_5^{(2)} e_{z,m} e_{z,i} \varepsilon_{mjk} + \chi_6^{(2)} e_{z,m} e_{z,k} \varepsilon_{ijm} + \chi_7^{(2)} e_{z,m} e_{z,j} \varepsilon_{imk}, \quad (13) \\ \chi_{ijk}^{(2)}(-h/2) = -(\chi_1^{(2)} e_{z,i} e_{z,j} e_{z,k} + \chi_2^{(2)} e_{z,i} \delta_{jk} + \chi_3^{(2)} e_{z,j} \delta_{ki} + \chi_4^{(2)} e_{z,k} \delta_{ij}) + \\ + \chi_5^{(2)} e_{z,m} e_{z,i} \varepsilon_{mjk} + \chi_6^{(2)} e_{z,m} e_{z,k} \varepsilon_{ijm} + \chi_7^{(2)} e_{z,m} e_{z,j} \varepsilon_{imk}.$$

**Заключение.** В работе предложена модель генерации суммарной частоты в поверхностном слое диэлектрической цилиндрической частицы с большим радиусом основания с использованием приближения ВКБ. На основе описанной модели определены фазы падающих и генерируемых волн, получено выражение для вектора напряжённости электрического поля генерируемого излучения в приближении дальней зоны. Полученные результаты могут быть использованы при планировании экспериментального исследования генерации суммарной частоты в поверхностном слое диэлектрических частиц цилиндрической формы, а также при разработке моделей генерации в частицах других форм.

### Литература.

1. Size dependence of second-harmonic generation at the surface of microspheres / S. Viarbitskaya [et al.] // Physical Review A. – 2010. – Vol. 81, № 5. – P. 053850.
2. Шамына А.А. Генерация суммарной частоты от тонкого сферического слоя. I. Аналитическое решение / А.А. Шамына, В.Н. Капшай // Оптика и спектроскопия. – 2018. – Т. 124, № 6. – С. 795–803.
3. Шамына А.А. Генерация суммарной частоты от тонкого сферического слоя. II. Анализ решения / А.А. Шамына, В.Н. Капшай // Оптика и спектроскопия. – 2018. – Т. 125, № 1. – С. 71–78.
4. Шамына А.А. Генерация суммарной частоты от тонкого цилиндрического слоя / А.А. Шамына, В.Н. Капшай // Оптика и спектроскопия. – 2018. – Т. 124, № 1. – С. 71–78.

# Электromагнитное поле вблизи заряда, падающего в черную дыру Шварцшильда

С. О. Комаров <sup>a, b</sup>

<sup>a</sup> Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь

<sup>b</sup> Институт физики НАН Беларуси, Минск, Беларусь

E-mail: StasKomarov@tut.by

**Введение.** Изучение движения и электромагнитного излучения заряженных частиц во внешнем гравитационном поле играет ключевую роль для понимания процессов, происходящих в двойных рентгеновских источниках, гамма-всплесках и ядрах галактик [1–4], а также для понимания многих фундаментальных вопросов физики гравитационного взаимодействия. В данной работе рассмотрен случай медленного движения частицы в окрестности черной дыры. Получены общие аналитические выражения, позволяющие вычислять электромагнитное поле такой системы. На основании указанных соотношений найдено влияние черной дыры на электромагнитное поле, создаваемое частицей, находящейся достаточно далеко от горизонта событий черной дыры.

Показано, что основным фактором, влияющим на отклонение закона движения заряженной частицы от закона движения нейтральной, в этом случае является сила самодействия частицы, вызванная эффектом «поляризации» черной дыры, различные аспекты которого были проанализированы в ряде работ [4-6]. Численно получен закон движения для такой частицы.

В работе используется система единиц, в которой  $c = 1$ .

**Электromагнитное поле заряда, медленно движущегося в окрестности черной дыры Шварцшильда.** Рассмотрим пробную заряженную частицу, движущуюся вблизи сферически-симметричной черной дыры (рисунок 1).



Рис. 1. Пробная частица в окрестности черной дыры. Точка с координатой  $x^i$  лежит на изотропной геодезической с прицельным параметром  $D$ .

4-потенциал электромагнитного поля частицы во внешнем по отношению к мировой линии пространстве-времени является решением уравнения Даламбера (в пространстве-времени Шварцшильда) и может быть представлен в виде [7]:

$$A^i = q \frac{g^i_{i'} u^{i'} \sqrt{\Delta}}{\sigma_{k'} u^{k'}} \Big|_{\sigma=0} + q \int_{-\infty}^{\tau} V^i_{i'} u^{i'} d\tau'. \quad (1)$$

Здесь  $q$  – заряд частицы,  $\sigma = \sigma(x, x')$  – мировая функция Синга [7,8],  $\sigma_{k'}$  – ее производная по координате  $x^{k'}$ ,  $\sigma^i_{j'}$  – вторая производная функции Синга по соответствующим координатам. Функция Синга определена для точек положения частицы  $x^{i'}$  и произвольной точки пространства-времени  $x^i$ , соединенных между собой изотропной геодезической с прицельным параметром  $D$ ,  $g^i_{i'}$  – оператор параллельного



переноса вдоль рассматриваемой изотропной геодезической,  $\Delta = \det(g^i_{i'} \sigma^{i'}_j)$  – определитель ван Влекка [7].

Если пробная частица движется не слишком быстро, ее электромагнитное поле можно представить как совокупность стационарных электрических полей, создаваемых покоящейся частицей [4]. Таким образом,

$$u^{i'} = \left\{ 0, 0, 0, \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{2M}{r'}}} \right\}. \quad (2)$$

Рассмотрим случай малых прицельных параметров изотропной геодезической. Тогда для первого слагаемого в (1) получим следующее выражение:

$$q \frac{g_{4i'} u^{i'} \sqrt{\Delta}}{\sigma_{k'l'} u^{k'}} \Big|_{\sigma=0} = \frac{q}{r' - r} \left( 1 - \frac{M}{r} - \frac{M}{r'} \right) + O\left(\frac{1}{r^4}, \frac{D^2}{r^2}\right). \quad (3)$$

Теперь рассмотрим второе слагаемое в (1). Так как поле стационарно, то в верхнем пределе интеграла можем положить  $\tau = 0$ . Битензор  $V^i_{i'}$  является решением уравнения Даламбера с нулевым начальным условием:

$$g^{ij} \frac{D}{Dx^i} \frac{D}{Dx^j} V_{ll'} - R^s_{\ l} V_{sl'} = 0, \quad V^i_{i'}(0, x^\alpha) = 0. \quad (4)$$

Учитывая также стационарность поля, получим, что второе слагаемое в (1) является решением уравнения Лапласа. Следовательно, первое слагаемое в (1) является решением уравнения Пуассона с правой частью  $4\pi q \delta(x^i - x^{i'})$ , причем граничное значение на горизонте черной дыры:

$$q \frac{g_{4i'} u^{i'} \sqrt{\Delta}}{\sigma_{k'l'} u^{k'}} \Big|_{\sigma=0, r=2M} \approx \frac{q}{2r'}. \quad (5)$$

С другой стороны, все выражение (1) представляет собой решение Линет [5] для потенциала поля заряда, покоящегося вблизи черной дыры. Для этого решения потенциал равен 0 на границе. Следовательно:

$$q \int_{-\infty}^0 V_{4i'} u^{i'} d\tau' \approx -\frac{qM}{rr'}. \quad (6)$$

**Сила электромагнитного самодействия.** Радиальная составляющая силы, действующей на свободно падающую вдоль радиального направления с 4-скоростью  $u^i$  пробную частицу, имеет вид [7]:

$$F^1 = \frac{2q^2}{3} \left\{ \frac{d^2 u^1}{d\tau^2} - \frac{2u^1}{r^3} - \frac{u^1 \left( \frac{du^1}{d\tau} + \frac{M^2}{r^2} \right)}{(u^1)^2 + 1 - \frac{2M}{r}} \right\} + \left( 1 - \frac{2M}{r} \right) q^2 \int_{-\infty}^0 V_{j i'; 1} u^{i'} g^j_{k'} u^{k'} d\tau', \quad (7)$$

где в интеграле необходимо взять предел совпадения  $x^{i'} \rightarrow x^i$ . Если движение частицы близко к геодезическому, то первое слагаемое в (7) близко к нулю. Следовательно, сила самодействия частицы, возникающая вследствие ее взаимодействия с создаваемым электромагнитным полем, представлена вторым слагаемым в (7). С учетом (6) и пренебрегая слагаемыми порядка  $M^2/r^2$  получим, что она имеет вид:

$$F^1_{\text{самод.}} \approx \frac{q^2 M}{r^3}. \quad (8)$$

Полученное выражение (8) согласуется с результатами, представленными в литературе [6].

**Численные результаты.** На рисунке 2 представлены результаты численного вычисления закона движения частицы согласно уравнению (7), используя выражение для силы самодействия (8).

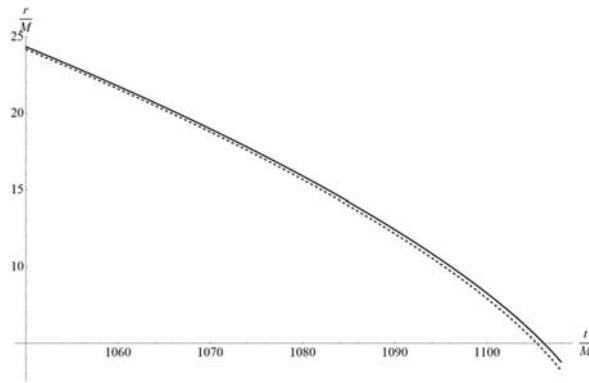


Рис. 2. Зависимость радиальной координаты от безразмерного координатного времени для пробной частицы с учетом самодействия – сплошная и без него – пунктир. Частица начинает свободно падать в момент времени  $t = 0$  без начальной скорости.

$$q^2 = 0,1 Mm, \text{ где } m \text{ – масса пробной частицы.}$$

**Заключение.** В работе найдено электромагнитное поле вблизи заряженной частицы, падающей в черную дыру. Также определено влияние черной дыры на это электромагнитное поле. При этом в работе предполагалось, что частица находится достаточно далеко от черной дыры. Это позволило считать скорость ее движения малой, а также пренебречь величинами порядка  $M^2/r^2$ . Для определения значения электромагнитного поля также предполагается квазирадимальный характер изотропных геодезических, соединяющий току пространства-времени с частицей. Это приближение можно также считать оправданным в случае, если частица находится достаточно далеко от горизонта событий черной дыры. Получен закон движения частицы, свободно падающей в черную дыру. В этом случае влияние заряда частицы на закон движения невелико. Однако результаты, представленные в литературе, говорят о возможном значительном влиянии заряда на движение частицы в некоторых более общих случаях [1,4,5]. Для исследования таких случаев необходимо провести вычисления в следующем приближении.

**Благодарности.** Работа выполнена при поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований, грант БРФФИ-ИКРАНет №Ф21ИКР-002.

### Литература.

1. Ruffini, R. The inner engine of GeV-radiation-emitting gamma-ray bursts / R. Ruffini, J. A. Rueda, R. Moradi, et. al. // arXiv:1811.01839v4 [astro-ph.HE] 18 Jul 2019. – P. 1–7.
2. Ruffini, R. On the GeV emission of the type I BdHN GRB 130427A / R. Ruffini, R. Moradi, J. A. Rueda, et. al. // The Astrophysical Journal. – Vol. 886, №82. – 2019. –10.3847/1538-4357/ab4ce6.
3. Ruffini, R. The blackholic quantum / R. Ruffini, J. A. Rueda // The European Physical Journal C. – Vol. 30, №300. – 2020.
4. Прайс Р. Черные дыры: Мембранный подход / Р. Прайс, К. Торн, Д. Макдоналд и др. // – пер. с англ. А. Г. Полнарева. – Москва, Мир. – 1988. – 428 с.
5. Linet B. Electrostatics and magnetostatics in the Schwarzschild metric / B. Linet // J. Phys. A: Math. Gen. – Vol. 9. – No 7. – 1976. – Pp. 1081-1087.
6. McGruder, C. H. Field Energies and principles of equivalence / C. H. McGruder // Nature. – Vol. 272. – 1978. – Pp. 806-807.
7. Poisson, E. The motion of point particles in curved spacetime / Eric Poisson, Adam Pound and Ian Vega // Living Rev. Relativ. – Vol. 14, 7. – 2011.
8. Синг, Дж. Л. Общая теория относительности / Дж. Л. Синг // – пер. с англ. Б. Т. Вавилова. – под. ред. А. З. Петрова. – Москва. – 1963. – 432 с.

# Измерение сечения процесса $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0$ с детектором КМД-3 на электрон-позитронном коллайдере ВЭПП – 2000

Д. С. Василевская <sup>a</sup>, Д. Н. Григорьев <sup>b,c,d</sup>, С. С. Толмачев <sup>b</sup>,  
Г. В. Федотович <sup>b,c</sup>, Д. В. Шёлковский <sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Институт физики НАН Беларуси, Минск, Беларусь*

<sup>b</sup> *Институт Ядерной Физики им. Г.И. Будкера СО РАН, Новосибирск, Россия*

<sup>c</sup> *Новосибирский Государственный Университет, Новосибирск, Россия*

<sup>d</sup> *Новосибирский Государственный Технический Университет, Новосибирск, Россия*  
*E-mail: [d.vasilevskaya@ifanbel.bas-net.by](mailto:d.vasilevskaya@ifanbel.bas-net.by)*

**Введение.** Несмотря на успехи Стандартной модели (СМ) ее нельзя считать полностью завершенной теорией. Одним из основных направлений исследований в области физики частиц является поиск явлений и процессов, которые не могут быть описаны в рамках СМ. Данный поиск возможен на высокоэнергетичных экспериментах, на которых возможно рождение частиц с массой до несколько ТэВ. Другой класс экспериментов, осуществляется при относительно низких энергиях, но с высокой точностью для поиска сильно подавленных или запрещенных в рамках СМ явлений, или отличий измеренного значения наблюдаемой величины от ее значения, предсказанного теорией.

Измерение аномального магнитного момента мюона  $a_\mu = (g - 2)\mu / 2$  представляет собой, пример эксперимента последнего типа [1, 2]. На сегодняшний день наблюдается отличие в 4,2 стандартных отклонения между предсказанием СМ и наиболее точным результатом измерения [1]. Такое отклонение от теории при дальнейшем уменьшении погрешности измерений может указать на существование еще не открытых частиц или сил. В настоящий момент одна из основных систематических ошибок при вычислении адронного вклада в аномальный магнитный момент мюона связан с расхождением результатов измерений сечения процесса  $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0$  в области энергий  $\omega$  и  $\phi$ -мезонов детекторами СНД [3] и КМД-2 [4] на электрон-позитронном коллайдере ВЭПП-2000 [5]. Это различие приводит к неточности при вычислении аномального магнитного мюона порядка 0,1 ppm, что сравнимо с проектной точностью измерений этой величины в эксперименте Muon g-2 [1].

**Анализ процесса  $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0$ .** В работе представлены результаты анализа процесса  $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0$  в области энергий  $\omega$ -мезона с использованием интегральной светимости порядка  $7,8 \text{ пб}^{-1}$  набранной в сезоне 2013 г. Область энергий  $\omega$ -мезона была в диапазоне энергий от 660 МэВ до 980 МэВ в 35 точках.

На первом этапе анализа проведено полное моделирование процесса  $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0$  и всех основных фоновых процессов ( $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-$ ,  $e^+e^- \rightarrow \mu^+\mu^-$ ,  $e^+e^- \rightarrow e^+e^-$ ) с использованием программного инструментария CMD3SIM, написанная на основе пакета Geant4 коллегами из ИЯФ СО РАН. Для подавления основных фоновых процессов разработаны критерии отбора. Из полного моделирования определяли эффективность регистрации детектором КМД-3 процесса  $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0$  в зависимости от энергии в системе центра масс.

Следующий шаг определение функций, описывающих форму сигнала и фона. Определение числа сигнальных событий основано на аппроксимации распределения по квадрату недостающей массы с помощью библиотек RooFit [6]. Форма сигнала для каждой точки по энергии фиксировалась из моделирования и аппроксимировалось суммой четырех функций Гаусса, как показано на рисунке 1а. Форма физического фона также фиксировалась из моделирования и аппроксимировалось суммой трех Гауссов (рисунок 1б).

После определения числа полезных событий вычислялось видимое сечение

$$\sigma_{vis} = \frac{N_{sel}}{L \varepsilon_{MC} (1 + \delta_{trig})(1 + \delta_{track})}, \quad (1)$$

где  $N_{sel}$  – число отобранных событий,  $L$  – интеграл светимости,  $\varepsilon_{MC}$  – эффективность регистрации событий (моделирование),  $\delta_{trig}$  – поправка к эффективности триггера,  $\delta_{track}$  – поправка на эффективность реконструкции трека в ДК.

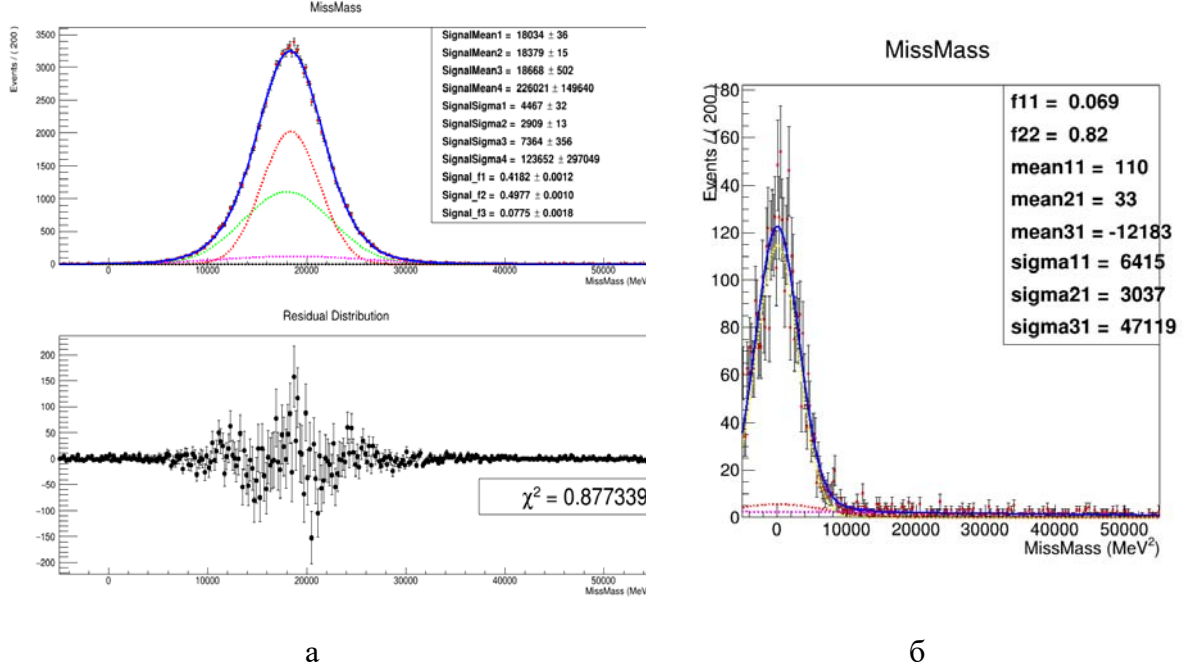


Рис. 1. Функции, описывающих форму сигнала (а) и фона (б).

Борновское сечение  $\omega$ -мезона определялось решением интегрального уравнения (см. рисунок 2):

$$\sigma_{vis}(s) = \int_0^{x_0} dx \sigma_{born}(s(1-x)) F(x,s), \quad (2)$$

где  $s = 4E_{c.m.}^2$ ,  $x_0$  – определяется порогом реакции,  $1 - \frac{s_{nop}}{s}$ ,  $F(x,s)$  – функция Кураева – Фаина [7], учитывающая излучение многих фотонов в коллинеарной области.

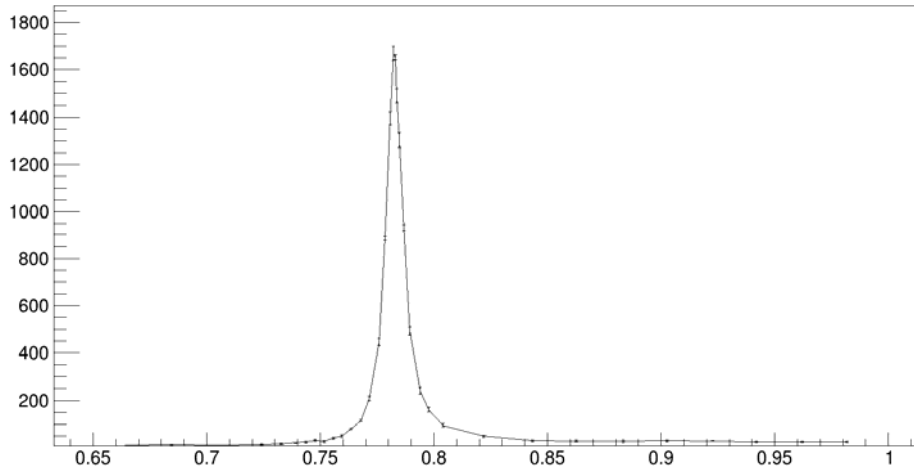


Рис. 2. Борновское сечение процесса  $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\pi$  в области  $\omega$ -мезона.

В настоящее время продолжается анализ систематических ошибок и измерение параметров борновского сечения процесса  $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\pi$ . Основными источниками систематической погрешности являются: неточность измерения светимости, которая оценивается на уровне 1.5 – 2.5 %, неточность измерения энергии пучков коллайдера ВЭПП-2000 и разброс энергии в пучке также дает вклад в неточность измерения сечения на уровне 1%, вариации критериев отбора меняет сечения изучаемого процесса внутри коридора на уровне  $\sim \pm 1\%$ . Кроме того, мы оцениваем не точность поправок на распад пионов и их ядерное взаимодействие с веществом детектора не более чем 1%. В итоге, при консервативном сложении этих погрешностей, наши текущие результаты измерения сечения имеют систематическую ошибку порядка 5%.

**Заключения.** В работе представлены предварительные результаты измерения борновского сечения процесса  $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0$  в области  $\omega$ -мезона. Ведется работа по анализу всей накопленной статистики детектором КМД-3 за 2013-2020 года.

**Благодарности.** Авторы работы выражают благодарность коллективу ВЭПП-2000 за обеспечение отличной работы комплекса во время набора статистики.

### Литература.

1. Abi, B. Albahri, T. Al-Kilani, S. Allspach, D. Alonzi, L. P. Anastasi, A. Anisenkov, A. [et al. Muon ( $g - 2$ ) Collaboration] Measurement of the Positive Muon Anomalous Magnetic Moment to 0.46 ppm. Phys. Rev. Lett., 2021, vol. 126, no 14, pp. 141801.
2. Brown, H.N. and Bunce, G. and Carey, R.M. and Cushman, P. and Danby, G.T. and Debevec, P.T. and Deile, M. and Deng, H. and Deninger, W. and Dhawan, S. K. and Druzhinin, V. P [et al. Muon ( $g - 2$ ) Collaboration] Precise Measurement of the Positive Muon Anomalous Magnetic Moment, Physical Review Letters, 2001, vol. 86, no. 11, pp. 2227-2231.
3. Achasov M.N., Beloborodov K.I., Berdyugin A.V., Bogdanchikov A.G., Bozhenok A. V., Bukin A.D., Bukin D.A. [et al.] Study of the process  $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0$  in the energy region below 0.98 GeV, Physical Review D, 2003, vol. 68, no 5, pp. 052006 - 052006-20.
4. Akhmetshin R.R., Anashkin E.V., Aulchenko V.M., Banzarov V.Sh., Barkov L.M., Baru S.E., Bashtovoy N.S., Bondar A.E. [et al.], Measurement of  $\omega$  meson parameters in  $\pi^+\pi^-\pi^0$  decay mode with CMD-2, Physics Letters B, 2000, vol. 376, no1-2, pp. 33-39.
5. Khazin, B.I. Physics and Detectors for VEPP-2000, Nuclear Physics B - Proceedings Supplements, 2008, vol. 181-182, pp. 376-380.
6. Verkerke W., Kirkby D. The RooFit toolkit for data modeling, Available at <https://arxiv.org/abs/physics/0306116> (Accessed 15 October 2020).
7. Kuraev E.A. and Fadin V.S., On Radiative Corrections to  $e^+ e^-$  Single Photon Annihilation at High-Energy, Sov. J. Nucl. Phys., 1985, vol. 41, pp. 466-472.

# Залежнасць эфектыўнай тэмпературы і імгненнага спектраў гама-ўсплёскаў ад пачатковага размеркавання энергіі ў абалонцы і ад часу прыбыцця

А.Э. Кургузава

*Інстытут фізікі НАН Беларусі, Мінск, Беларусь  
E-mail: kuppory@gmail.com*

**Уводзіны.** Маштабныя касмічныя выкіды энергіі выбуховага характару, якія адбываюцца падчас успышак некаторых звышновых ці зліцця кампактных аб'ектаў (падвойных нейтронных зорак, нейтроннай зоркі і чорнай дзіры), называюцца гама-ўсплёскамі [1]. Пачатковы этап гама-ўсплёску можна апісаць дыфузіяй выпраменьвання ў абалонцы, якая ўльтрарэлятывісцкі пашыраецца [2].

**Інтэнсіўнасць выпраменьвання.** Разгледзім выпадак, калі пачатковае значэнне функцыі  $L$  унутры абалонкі залежыць ад глыбіні  $\xi$  па лінейным законе  $L_0 \rightarrow a \left( \xi - \frac{l}{2} \right) + b$  ( $a, b - \text{const}$ ), такі выгляд функцыі выбраны дзеля таго, каб пачатковае значэнне энергіі ў сярэдзіне абалонкі  $L_0 \left( \xi = \frac{l}{2} \right) = b$  было канстантай. У дадзеным выпадку мы маем:

$$L = \frac{2}{l} \sum_{n=1}^{\infty} \left( \exp \left[ -\frac{\Delta c^3 \pi^2 n^2 t^3}{9R_0 l^2} \right] \sin \left( \frac{n\pi x}{l} \right) \frac{b(1 - (-1)^n) - al/2(1 + (-1)^n)}{n\pi} \right) \quad (1)$$

Выраз для інтэнсіўнасці выпраменьвання на мяжы  $\xi \rightarrow 0$  мае выгляд

$$J_1 = \frac{c^2 t t_0 \beta^2}{\ln_0 R_0^2 \sigma} \left( \frac{t_0}{t} \right)^{5/3} \left( al + \left( b - \frac{al}{2} \right) \vartheta_3 \left( 0, \exp \left[ -\frac{\Delta c^3 \pi^2 t^3}{9R_0 l^2} \right] \right) - \left( b + \frac{al}{2} \right) \vartheta_4 \left( 0, \exp \left[ -\frac{\Delta c^3 \pi^2 t^3}{9R_0 l^2} \right] \right) \right) \quad (2)$$

дзе  $\vartheta_a(u, q)$  – тэта-функцыя.

**Эфектыўная тэмпература абалонкі.** Эфектыўная тэмпература абалонкі знаходзіцца з закона Стэфана-Больцмана:

$$T = \left( \frac{4\pi}{3\sigma_{SB}} J_1 \right)^{1/4} \quad (3)$$

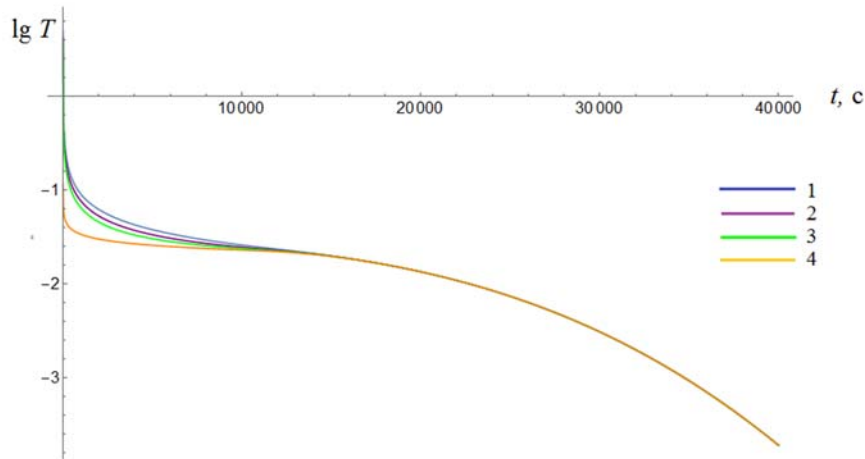
Толькі значэнні  $-2T_0/l \leq a \leq 2T_0/l$  маюць фізічны сэнс. Пры значэннях  $0 < a \leq 2T_0/l$  выгляд графіка залежнасці тэмпературы ад часу не змяняецца пры змяненні значэння параметра  $a$ , пры  $-2T_0/l \leq a \leq 0$  тэмпература хутчэй падае з часам з павялічэннем параметра  $a$  пры  $t \rightarrow 0$  с, але пасля часу дыфузіі ( $t_D = 15000$  с для параметраў гама-ўсплёска, якія разглядаюцца) графікі супадаюць. Пачатковае значэнне тэмпературы памяншаецца па меры павялічэння  $a$ . Залежнасць тэмпературы ад часу для пэўных значэнняў параметра  $a$  з інтэрвалу  $-2T_0/l \leq a \leq 0$  паказана на мал. 1.

Тут і далей выкарыстоўваліся тыповыя параметры гама-ўсплёска:  $l \rightarrow 10^8$  см;  $R_0 \rightarrow 10^8$  см;  $\Delta \rightarrow 10^{-16}$ ;  $\Gamma \rightarrow 100$ ;  $t_0 \rightarrow 1$  с;  $T_0 \rightarrow 1$  К; а таксама прымалася  $b = T_0$ .

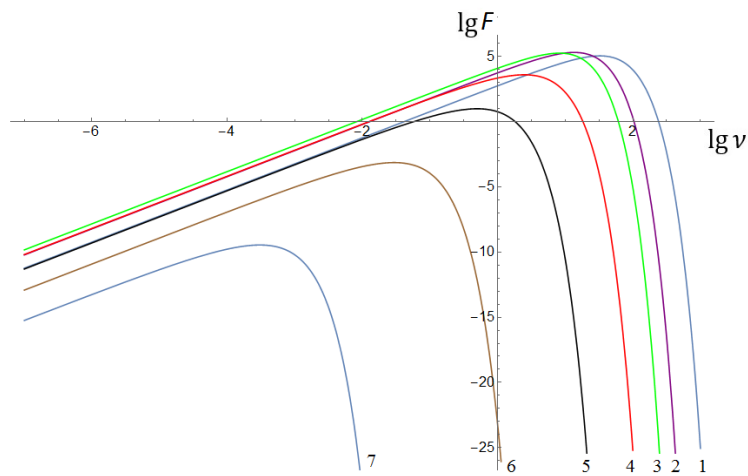
**Імгненны спектр.** Імгненныя спектры для пэўных значэнняў параметра  $a$  і часу прыбыцця  $t_a$  прадстаўлены на мал. 2-4. Пры павялічэнні часу прыбыцця, максимум патоку назіраецца на меншай частаце, значэнне патоку для розных частот памяншаецца

з павялічэннем  $t_a$  пры  $t_a \geq 1$  с і павялічваецца пры  $t_a < 1$  с, што мае месца для ўсіх значэнняў параметра  $a$ . Заўважым, што нахілы графікаў супадаюць пры ўсіх значэннях  $t_a$ .

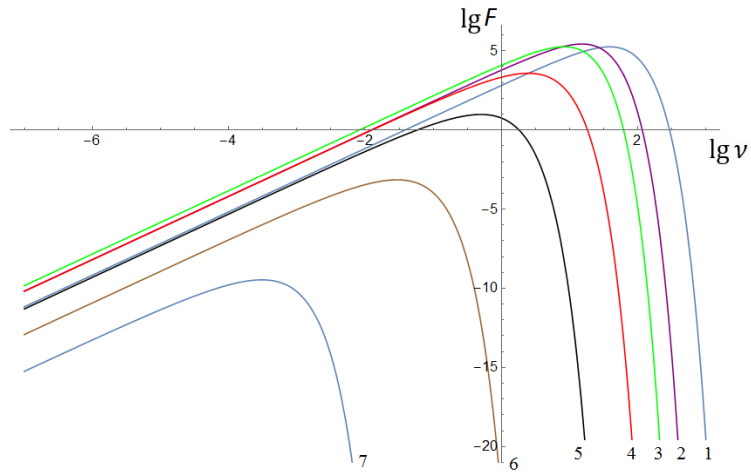
Разгледзім імгненныя спектры пры розным пачатковым размеркаванні энергіі (розных значэннях параметра  $a$ ) і фіксаваных значэннях часу прыбыцця  $t_a$  (мал. 5,6). Пры  $t_a < 1$  с максімум патоку назіраецца на большай частаце з памяншэннем  $a$ , пры  $t_a \geq 1$  с імгненныя спектры для розных параметраў  $a$  супадаюць, інакш кажучы, імгненныя спектры не залежаць ад пачатковага размеркавання энергіі ў абалонцы пры  $t_a \geq 1$  с.



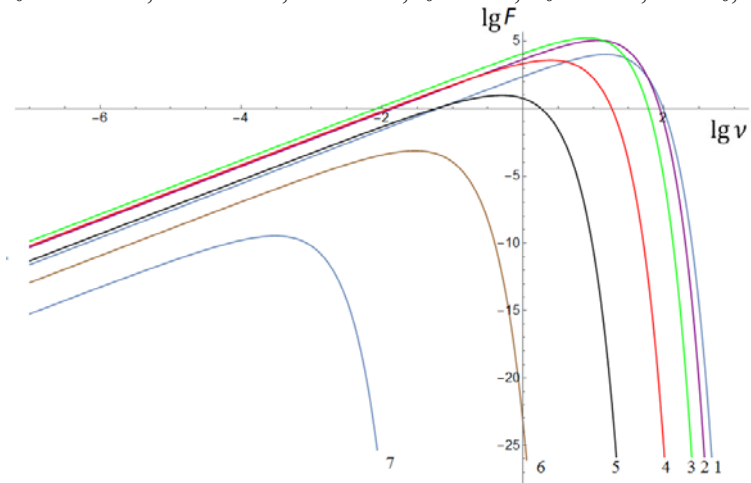
Мал. 1. Эфектыўная тэмпература абалонкі ў залежнасці ад часу і параметра  $a$ :  
 $1 - a = -2 T_0/l$ ;  $2 - a = -T_0/l$ ;  $3 - a = -1,5 T_0/l$ ;  $4 - a = 0$ .  
 ( $l \rightarrow 10^8$  см;  $R_0 \rightarrow 10^8$  см;  $\Delta \rightarrow 10^{-16}$ ;  $\Gamma \rightarrow 100$ ;  $t_0 \rightarrow 1$  с;  $T_0 \rightarrow 1$  К;  $b = T_0$ ;  $t_D = 15\,000$  с).



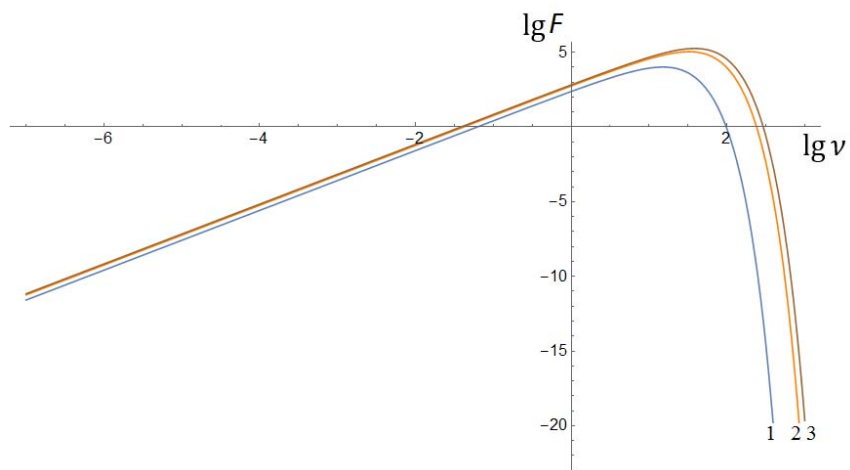
Мал. 2. Імгненны спектр пры  $a = 0$ :  $1 - t_a = 0,1$  с;  $2 - t_a = 0,5$  с;  $3 - t_a = 1$  с;  
 $4 - t_a = 2$  с;  $5 - t_a = 3$  с;  $6 - t_a = 4$  с;  $7 - t_a = 5$  с.  
 ( $l \rightarrow 10^8$  см;  $R_0 \rightarrow 10^8$  см;  $\Delta \rightarrow 10^{-16}$ ;  $\Gamma \rightarrow 100$ ;  $t_0 \rightarrow 1$  с;  $T_0 \rightarrow 1$  К;  $b = T_0$ ;  $t_D = 15\,000$  с).



Мал. 3. Имгненны спектр пры  $a = -2 T_0/l$ : 1 -  $t_a = 0,1$  с; 2 -  $t_a = 0,5$  с; 3 -  $t_a = 1$  с; 4 -  $t_a = 2$  с; 5 -  $t_a = 3$  с; 6 -  $t_a = 4$  с; 7 -  $t_a = 5$  с.  
 ( $l \rightarrow 10^8$  см;  $R_0 \rightarrow 10^8$  см;  $\Delta \rightarrow 10^{-16}$ ;  $\Gamma \rightarrow 100$ ;  $t_0 \rightarrow 1$  с;  $T_0 \rightarrow 1$  К;  $b = T_0$ ;  $t_D = 15\,000$  с).

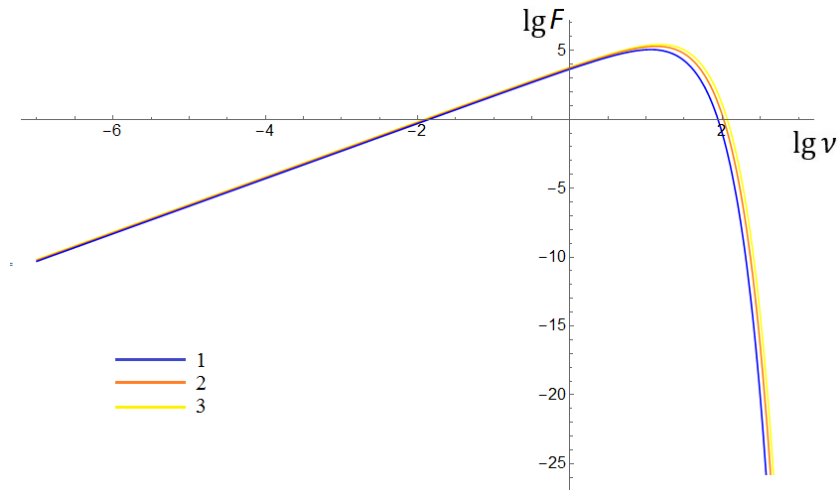


Мал. 4. Имгненны спектр пры  $a = 2 T_0/l$ : 1 -  $t_a = 0,1$  с; 2 -  $t_a = 0,5$  с; 3 -  $t_a = 1$  с; 4 -  $t_a = 2$  с; 5 -  $t_a = 3$  с; 6 -  $t_a = 4$  с; 7 -  $t_a = 5$  с.  
 ( $l \rightarrow 10^8$  см;  $R_0 \rightarrow 10^8$  см;  $\Delta \rightarrow 10^{-16}$ ;  $\Gamma \rightarrow 100$ ;  $t_0 \rightarrow 1$  с;  $T_0 \rightarrow 1$  К;  $b = T_0$ ;  $t_D = 15\,000$  с).



Мал. 5. Имгненны спектр пры  $t_a = 0,1$  с: 1 -  $a = 2 T_0/l$ , 2 -  $a = 0$ ; 3 -  $a = -2 T_0/l$ .  
 ( $l \rightarrow 10^8$  см;  $R_0 \rightarrow 10^8$  см;  $\Delta \rightarrow 10^{-16}$ ;  $\Gamma \rightarrow 100$ ;  $t_0 \rightarrow 1$  с;  $T_0 \rightarrow 1$  К;  $b = T_0$ ;  $t_D = 15\,000$  с).





Мал. 6. Імгненны спектр пры  $t_a = 0,5$  с: 1 –  $a = 2 T_0/l$ , 2 –  $a = 0$ ; 3 –  $a = -2 T_0/l$ .  
 ( $l \rightarrow 10^8$  см;  $R_0 \rightarrow 10^8$  см;  $\Delta \rightarrow 10^{-16}$ ;  $\Gamma \rightarrow 100$ ;  $t_0 \rightarrow 1$  с;  $T_0 \rightarrow 1$  К;  $b = T_0$ ;  $t_D = 15\,000$  с).

**Заклучэнне.** Пачатковы этап гама-ўсплёску можна апісаць дыфузіяй выпраменьвання ў абалонцы, якая ўльтрарэлятывісцкі пашыраецца. Мы разгледзелі выпадак, калі пачатковае размеркаванне энергіі ў абалонцы залежыць ад глыбіні па лінейным законе. Пры гэтым эфектыўная тэмпература і імгненны спектр гама-ўсплёску ў пачатковы момант часу залежаць ад нахілу функцыі пачатковага размеркавання энергіі ў абалонцы. Тэмпература хутчэй падае з часам пры павялічэнні нахілу, яе пачатковае значэнне памяншаецца. Пры павялічэнні часу прыбыцця максімум патоку ў імгненным спектры гама-ўсплёска назіраецца на меншай частаце незалежна ад пачатковага размеркавання энергіі ў абалонцы; велічыня патоку для розных частот памяншаецца з павялічэннем часу прыбыцця пры яго значэннях большых за 1 с, павялічваецца пры значэннях часу прыбыцця меншых за 1 с; максімум патоку назіраецца на большай частаце з памяншэннем нахілу функцыі пачатковага размеркавання энергіі, калі час прыбыцця меншы за 1 с, далей пры павялічэнні часу прыбыцця імгненны спектр не залежыць ад пачатковага размеркавання энергіі ў абалонцы.

#### Літаратура.

1. Zhang, B. The Physics of Gamma-Ray Bursts / B. Zhang // Rev. Mod. Phys. – 2004. – Vol. 76, no. 4. – P. 1143–1210.
2. Сіўцоў, І. А. Дыфузія выпраменьвання ў абалонцы, якая рэлятывісцкі пашыраецца, у дачыненні да гама-ўсплёскаў / І. А. Сіўцоў, А. Э. Кургузава // Вес. Нац. акад. навук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2021. – Т. 57, № 1. – С. 85–98.

# Spin 1 particle in external magnetic field and projective operators

A. V. Buryy<sup>a</sup>, A. V. Ivashkevich<sup>a</sup>, O. A. Semenyuk<sup>b</sup>

<sup>a</sup> *B.I. Stepanov Institute of Physics of National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus*

<sup>b</sup> *Brest State University named after A. S. Pushkin, Brest, Belarus*  
*Email: anton.buryy.97@mail.ru*

**Introduction.** In the present paper, the system of Duffin – Kemmer equations describing a spin 1 particle in cylindric coordinates with the use of tetrad formalism and 10-dimension matrix formalism are studied. Applying the method by Fedorov – Gronskiy [1, 2], we examine this field in massive case in presence of external magnetic field, getting three independent classes of wave functions and corresponding energy spectra. The Proca system of equations for the vector particle has the form (where  $D_a = \partial_a + ieA_a$ ):

$$D^b \Psi_{ab} - M \Psi_a = 0, \quad D_a \Psi_b - D_b \Psi_a - M \Psi_{ab} = 0 \quad (1)$$

We will use the wave function  $\Phi = (H_1; H_2)$ . Let us transform eqs. (1) to the matrix form:

$$K^a D_a H_2 - M H_1 = 0, \quad D_a L^a H_1 - M H_2 = 0, \\ (D_a \beta^a - M) \Phi = 0, \quad \beta^a = \begin{vmatrix} 0 & K^a \\ L^a & 0 \end{vmatrix}, \quad \Phi = \begin{vmatrix} H_1 \\ H_2 \end{vmatrix}. \quad (2)$$

Let us apply a generalized form of this equation for any Riemannian space-time (with the use of the Ricci rotation coefficients):

$$[\beta^c (e_{(c)}^\alpha \frac{\partial}{\partial x^\alpha} + \frac{1}{2} J^{ab} \gamma_{abc}) - M] \Psi(x) = 0. \quad (3)$$

In the block form, instead of (6) we have equations:

$$[K^c e_{(c)}^\alpha \partial_\alpha + K^c J_{(2)}^{ab} \frac{1}{2} \gamma_{abc}] H_2 - M H_1 = 0, \quad [L^c e_{(c)}^\alpha \partial_\alpha + L^c J_{(1)}^{ab} \frac{1}{2} \gamma_{abc}] H_1 - M H_2 = 0. \quad (4)$$

**Cylindric coordinates and tetrad.** In cylindric coordinates  $x^\alpha = (t, r, \phi, z)$  and tetrad equations (4) take on the form:

$$[K^0 \frac{\partial}{\partial t} + K^1 \frac{\partial}{\partial r} + K^2 \frac{\partial_\phi + J_{(2)}^{12}}{r} + K^3 \frac{\partial}{\partial z}] H_2 = M H_1, \\ [L^0 \frac{\partial}{\partial t} + L^1 \frac{\partial}{\partial r} + L^2 \frac{\partial_\phi + J_{(1)}^{12}}{r} + L^3 \frac{\partial}{\partial z}] H_1 = M H_2. \quad (5)$$

When separating the variables, it is convenient to use the cyclic basis. This basis is defined by the requirement of diagonality of the matrix  $j^{12}$  for the vector field  $H_1 = (\Psi_l)$ . In this basis we separate the variables in the equations (5) taking into account the substitutions:

$$\bar{H}_1 = e^{-i\epsilon t} e^{im\phi} e^{ikz} \begin{vmatrix} \Phi_0 \\ \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \end{vmatrix}, \quad \bar{H}_2 = e^{-i\epsilon t} e^{im\phi} e^{ikz} \begin{vmatrix} E_1 \\ E_2 \\ E_3 \\ B_1 \\ B_2 \\ B_3 \end{vmatrix}. \quad (6)$$

With the use of notations

$$a_m = \frac{d}{dr} + \frac{m}{r}, \quad a_{m+1} = \frac{d}{dr} + \frac{m+1}{r}, \quad b_m = \frac{d}{dr} - \frac{m}{r}, \quad b_{m-1} = \frac{d}{dr} - \frac{m-1}{r},$$

the resulting system of differential equations in the variable  $r$  reads:

$$\begin{aligned} b_{m-1}E_1 - a_{m+1}E_3 - \sqrt{2}ikE_2 &= \sqrt{2}M\Phi_0, & a_mB_2 - \sqrt{2}i(kB_3 - \epsilon E_1) &= \sqrt{2}M\Phi_1, \\ -a_{m+1}B_1 - b_{m-1}B_3 + \sqrt{2}i\epsilon E_2 &= \sqrt{2}M\Phi_2, & b_mB_2 + \sqrt{2}i(kB_1 + \epsilon E_3) &= \sqrt{2}M\Phi_3; \\ a_m\Phi_0 - \sqrt{2}i\epsilon\Phi_1 &= \sqrt{2}ME_1, & -\sqrt{2}i(k\Phi_0 + \epsilon\Phi_2) &= \sqrt{2}ME_2, \\ -b_m\Phi_0 - \sqrt{2}i\epsilon\Phi_3 &= \sqrt{2}ME_3, & -b_m\Phi_2 + \sqrt{2}ik\Phi_3 &= \sqrt{2}MB_1, \\ b_{m-1}\Phi_1 + a_{m+1}\Phi_3 &= \sqrt{2}MB_2, & -a_m\Phi_2 - \sqrt{2}ik\Phi_1 &= \sqrt{2}MB_3. \end{aligned} \quad (7)$$

**Projective operator method.** In order to solve the system (7) we will use the method of projective operators [1] (we will take into account the external magnetic field later). We start with the operator of third projection of the spin  $Y = -i\bar{J}^{12}$ ; it is readily verified that it satisfies the minimal equation  $Y(Y-1)(Y+1)=0$ . This minimal equation permits us to introduce three projective operators:

$$P_0 = 1 - Y^2, \quad P_{+1} = \frac{1}{2}Y(Y+1), \quad P_{-1} = \frac{1}{2}Y(Y-1). \quad (8)$$

Accordingly, the complete wave function can be expanded into the sum of three parts:

$$\Psi = \Psi_0 + \Psi_{+1} + \Psi_{-1}, \quad \Psi_\sigma = P_\sigma \Psi, \quad \sigma = 0, +1, -1. \quad (9)$$

These components have the following structure (these expressions refer to the cyclic basis):

$$\Psi_0 = \begin{pmatrix} \Phi_0(r) \\ 0 \\ \Phi_2(r) \\ 0 \\ 0 \\ E_2(r) \\ 0 \\ 0 \\ B_2(r) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \Psi_{+1} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \Phi_3(r) \\ 0 \\ 0 \\ E_3(r) \\ B_1(r) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \Psi_{-1} = \begin{pmatrix} 0 \\ \Phi_1(r) \\ 0 \\ 0 \\ E_1(r) \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ B_3(r) \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Let us act on this system by projective operators; the system (10) is equivalent to three subsystems:

$$\begin{aligned} P_0, \quad b_{m-1}E_1 - i\sqrt{2}E_2k - a_{m+1}E_3 &= \sqrt{2}M\Phi_0, \\ i\sqrt{2}\epsilon E_2 - a_{m+1}B_1 - b_{m-1}B_3 &= \sqrt{2}M\Phi_2, \\ -i\sqrt{2}(k\Phi_0 + \epsilon\Phi_2) &= \sqrt{2}ME_2, \quad b_{m-1}\Phi_1 + a_{m+1}\Phi_3 = \sqrt{2}MB_2; \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} P_{+1}, \quad i\sqrt{2}\epsilon E_3 + i\sqrt{2}kB_1 + b_mB_2 &= \sqrt{2}M\Phi_3, \\ -b_m\Phi_0 - i\sqrt{2}\epsilon\Phi_3 &= \sqrt{2}ME_3, \quad -b_m\Phi_2 + i\sqrt{2}k\Phi_3 = \sqrt{2}MB_1; \end{aligned} \quad (12)$$

$$P_{-1}, \quad \begin{aligned} i\sqrt{2}\epsilon E_1 + a_m B_2 - i\sqrt{2}k B_3 &= \sqrt{2}M\Phi_1, \\ a_m \Phi_0 - i\sqrt{2}\epsilon \Phi_1 &= \sqrt{2}ME_1, \quad -i\sqrt{2}k\Phi_1 - a_m \Phi_2 = \sqrt{2}MB_3. \end{aligned} \quad (13)$$

In accordance with the Fedorov – Gronskey method [1, 2], each projective component from (10) has to be determined by only one function:

$$\Psi_0(r) = \begin{vmatrix} \Phi_0 \\ 0 \\ \Phi_2 \\ 0 \\ 0 \\ E_2 \\ 0 \\ 0 \\ B_2 \\ 0 \end{vmatrix} f_0(r), \quad \Psi_{+1}(r) = \begin{vmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \Phi_3 \\ 0 \\ 0 \\ E_3 \\ B_1 \\ 0 \\ 0 \end{vmatrix} f_{+1}(r), \quad \Psi_{-1}(r) = \begin{vmatrix} 0 \\ \Phi_1 \\ 0 \\ 0 \\ E_1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ B_3 \end{vmatrix} f_{-1}(r); \quad (14)$$

where the columns are composed of some numerical coefficients. So we reduce the systems to other form:

$$P_0, \quad \begin{aligned} E_1 b_{m-1} f_{-1} - i\sqrt{2}k E_2 f_0 - E_3 a_{m+1} f_{+1} &= \sqrt{2}M\Phi_0 f_0, \\ i\sqrt{2}\epsilon E_2 f_0 - B_1 a_{m+1} f_{+1} - B_3 b_{m-1} f_{-1} &= \sqrt{2}M\Phi_2 f_0, \\ -i\sqrt{2}(k\Phi_0 f_0 + \epsilon\Phi_2 f_0) &= \sqrt{2}ME_2 f_0, \quad \Phi_1 b_{m-1} f_{-1} + \Phi_3 a_{m+1} f_{+1} = \sqrt{2}MB_2 f_0; \end{aligned} \quad (15)$$

$$P_{+1}, \quad \begin{aligned} i\sqrt{2}\epsilon E_3 f_{+1} + i\sqrt{2}k B_1 f_{+1} + B_2 b_m f_0 &= \sqrt{2}M\Phi_3 f_{+1}, \\ -\Phi_0 b_m f_0 - i\sqrt{2}\epsilon \Phi_3 f_{+1} &= \sqrt{2}ME_3 f_{+1}, \quad -\Phi_2 b_m f_0 + i\sqrt{2}k \Phi_3 f_{+1} = \sqrt{2}MB_1 f_{+1}; \end{aligned} \quad (16)$$

$$P_{-1}, \quad \begin{aligned} i\sqrt{2}\epsilon E_1 f_{-1} + B_2 a_m f_0 - i\sqrt{2}k B_3 f_{-1} &= \sqrt{2}M\Phi_1 f_{-1}, \\ \Phi_0 a_m f_0 - i\sqrt{2}\epsilon \Phi_1 f_{-1} &= \sqrt{2}ME_1 f_{-1}, \quad -i\sqrt{2}k \Phi_1 f_{-1} - \Phi_2 a_m f_0 = \sqrt{2}MB_3 f_{-1}. \end{aligned} \quad (17)$$

Besides, according to the Fedorov – Gronskey method [1, 2], equations (15) – (17) are to be consistent with the following differential constraints:

$$b_{m-1} f_{-1}(r) = C_1 f_0(r), \quad a_m f_0(r) = C_2 f_{-1}(r), \quad a_{m+1} f_{+1}(r) = C_3 f_0(r), \quad b_m f_0(r) = C_4 f_{+1}(r); \quad (18)$$

where  $C_1, C_2, C_3, C_4$  are some numerical parameters. Relations (25) will allow us to transform the differential equations (15)–(17) to the algebraic form. In this way, the previous three systems take the form (each equation is divided by a common factor):

$$P_0, \quad \begin{aligned} E_1 C_1 - i\sqrt{2}k E_2 - E_3 C_3 &= \sqrt{2}M\Phi_0, \\ i\sqrt{2}\epsilon E_2 - B_1 C_3 - B_3 C_1 &= \sqrt{2}M\Phi_2, \\ -i\sqrt{2}(k\Phi_0 + \epsilon\Phi_2) &= \sqrt{2}ME_2, \quad \Phi_1 C_1 + \Phi_3 C_3 = \sqrt{2}MB_2; \end{aligned} \quad (19)$$

$$P_{+1}, \quad \begin{aligned} i\sqrt{2}\epsilon E_3 + i\sqrt{2}k B_1 + B_2 C_4 &= \sqrt{2}M\Phi_3, \\ -\Phi_0 C_4 - i\sqrt{2}\epsilon \Phi_3 &= \sqrt{2}ME_3, \quad -\Phi_2 C_4 + i\sqrt{2}k \Phi_3 = \sqrt{2}MB_1; \end{aligned} \quad (20)$$

$$P_{-1}, \quad \begin{aligned} i\sqrt{2}\epsilon E_1 + B_2 C_2 - i\sqrt{2}k B_3 &= \sqrt{2}M\Phi_1, \\ \Phi_0 C_2 - i\sqrt{2}\epsilon \Phi_1 &= \sqrt{2}ME_1, \quad -i\sqrt{2}k \Phi_1 - \Phi_2 C_2 = \sqrt{2}MB_3. \end{aligned} \quad (21)$$

From constraints (18) one can derive the second order equations for separate functions:

$$\begin{aligned} b_{m-1}a_m f_0(r) &= C_1 C_2 f_0(r), & a_m b_{m-1} f_{-1}(r) &= C_2 C_1 f_{-1}(r), \\ a_{m+1} b_m f_0(r) &= C_3 C_4 f_0(r), & b_m a_{m+1} f_{+1}(r) &= C_4 C_3 f_{+1}(r). \end{aligned} \quad (22)$$

Taking in mind linearity of eqs. (22), we conclude that the parameters in each pair can be chosen as equal:  $C_2 = C_1, C_4 = C_3$ . Therefore the constraints and the second order equations take on the form:

$$b_{m-1} f_{-1}(r) = C_1 f_0(r), \quad a_m f_0(r) = C_1 f_{-1}(r), \quad a_{m+1} f_{+1}(r) = C_3 f_0(r), \quad b_m f_0(r) = C_3 f_{+1}(r): \quad (23)$$

$$(b_{m-1} a_m - C_1^2) f_0 = 0, \quad (a_m b_{m-1} - C_1^2) f_{-1} = 0, \quad (a_{m+1} b_m - C_3^2) f_0 = 0, \quad (b_m a_{m+1} - C_3^2) f_{+1} = 0 \quad (24)$$

Now let us take into account the presence of the external magnetic field; this is achieved by the formal change,  $m \Rightarrow m + eBr^2 / 2$  (below for brevity we use the notation  $eB \Rightarrow B$ ). Further we get the explicit form of the second order operators:

$$\begin{aligned} \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \frac{B^2 r^2}{4} - \frac{m^2}{r^2} - Bm + B - C_1^2 \right) f_0 &= 0, & \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \frac{B^2 r^2}{4} - \frac{m^2}{r^2} - Bm - B - C_3^2 \right) f_0 &= 0, \\ \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \frac{B^2 r^2}{4} - \frac{(m-1)^2}{r^2} - Bm - C_1^2 \right) f_{-1} &= 0, & \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \frac{B^2 r^2}{4} - \frac{(m+1)^2}{r^2} - Bm - C_3^2 \right) f_{+1} &= 0. \end{aligned}$$

Thus, we have only three different equations and the identity  $C_3^2 = C_1^2 - 2B$ . Let us introduce the new parameter  $X = B - C_1^2$ . In the variable  $x = Br^2 / 2$ , these three equations read

$$\begin{aligned} 1, & \quad \left( \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{d}{dx} - \frac{1}{4} - \frac{(m/2)^2}{x^2} + \frac{1}{x} \left( -\frac{m}{2} + \frac{X}{2B} \right) \right) f_0 = 0, \\ 2, & \quad \left( \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{d}{dx} - \frac{1}{4} - \frac{[(m-1)/2]^2}{x^2} + \frac{1}{x} \left( -\frac{m+1}{2} + \frac{X}{2B} \right) \right) f_{-1} = 0, \\ 3, & \quad \left( \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{d}{dx} - \frac{1}{4} - \frac{[(m+1)/2]^2}{x^2} + \frac{1}{x} \left( -\frac{m-1}{2} + \frac{X}{2B} \right) \right) f_{+1} = 0. \end{aligned} \quad (25)$$

These three equations are of the same type. They are resolved in terms of the confluent hypergeometric function within the substitution  $f_0(x) = x^A e^{Cx} F(x)$ ; equation for  $F(x)$  reads

$$xF'' + (2A+1+2Cx)F' + \left\{ \frac{1}{x} (A^2 - (m/2)^2) + (2AC + C - \frac{m}{2} + \frac{X}{2B}) + x(C^2 - \frac{1}{4}) \right\} F = 0;$$

to get solutions that vanish at the point  $r = 0$  and in infinity, we choose  $A = +|m/2|, C = -1/2$ ; so the equation simplifies

$$xF'' + (|m|+1-x)F' - \left( \frac{|m|+m}{2} + \frac{1}{2} - \frac{X}{2B} \right) F = 0.$$

This is an equation of confluent hypergeometric type with parameters

$$a = \frac{|m|+m}{2} + \frac{1}{2} - \frac{X}{2B}, \quad c = |m|+1, \quad F = \Phi(a, c, x).$$

The polynomial condition  $a = -n_1$  gives

$$1, \quad \frac{|m|+m+1}{2} - \frac{X}{2B} = -n_1 \Rightarrow X = +2B \left( \frac{|m|+m}{2} + \frac{1}{2} + n_1 \right) > 0, \quad n_1 = 0, 1, 2, \dots \quad (26)$$

Thus we have

$$\begin{aligned}
1, f_0(x) &= x^{\frac{|m|}{2}} e^{-x/2} F_1(x), \quad F_1(x) = \Phi(-n_1, |m|+1, x), \quad X = 2B\left(\frac{|m|+m}{2} + \frac{1}{2} + n_1\right) > B; \\
2, f_{-1}(x) &= x^{\frac{|m-1|}{2}} e^{-x/2} F_2(x), \quad F_2(x) = \Phi(-n_2, |m-1|+1, x), \quad X = 2B\left(\frac{|m-1|+m+1}{2} + \frac{1}{2} + n_2\right) > B; \quad (27) \\
3, f_{+1}(x) &= x^{\frac{|m+1|}{2}} e^{-x/2} F_3(x), \quad F_3(x) = \Phi(-n_3, |m+1|+1, x), \quad X = 2B\left(\frac{|m+1|+m-1}{2} + \frac{1}{2} + n_3\right) > B,
\end{aligned}$$

**The study of algebraic system.** Let us turn to the algebraic system in presence of the uniform magnetic field. We write the system in the matrix form  $AZ = 0$ ; from vanishing the determinant of the matrix, we obtain

$$\det A = 32M^2 \left( k^2 + M^2 + X - \epsilon^2 \right) \left( B^2(k - \epsilon)(k + \epsilon) + M^2 \left( k^2 + M^2 + X - \epsilon^2 \right)^2 \right) = 0; \quad (28)$$

The variable  $X$  can take three different values. In dimensionless variables

$$\frac{\epsilon}{M} = E, \quad \frac{k}{M} = K, \quad \frac{B}{M^2} = b, \quad \frac{X_i}{M^2} = x_i, \quad i = 1, 2, 3, \quad (29)$$

where the roots are given by the formulas

$$x_1 = E^2 - K^2 - 1, \quad x_2 = -b\sqrt{E^2 - K^2} + E^2 - K^2 - 1, \quad x_3 = +b\sqrt{E^2 - K^2} + E^2 - K^2 - 1. \quad (30)$$

Eqs. (30) can be solved with respect to the energy parameter (taking in mind that  $E^2 - K^2 > 0$ ):

$$E^2 - K^2 = 1 + 2bN, \quad E^2 - K^2 = \frac{1}{4}(b \pm \sqrt{b^2 + 8bN + 4})^2. \quad (31)$$

**Conclusions.** The system of equations describing a spin 1 particle has been studied in cylindrical coordinates with the use of tetrad formalism and matrix 10-dimension formalism by Duffin – Kemmer. After separating the variables, to resolve the system of 10 equations in the variable  $r$ , we have applied the the method proposed by Fedorov – Gronskiy and based on the use of projective operators. In presence of external uniform magnetic field, we have constructed in explicit form three independent classes of wave functions with corresponding energy spectra.

### References.

1. F.I. Fedorov. Projective operators in the theory of elementary particles. JETP, 1958, vol. 35, no. 2, pp. 493 – 5000.
2. V.K. Gronskiy, F.I. Fedorov. Magnetic properties of the particle with spin 3/2. Doklady AN BSSR, 1960, vol. 4, no. 7, pp. 278–283.

## Massless spin 1 particle in cylindrical coordinates, exact solutions

O. A. Semenyuk <sup>a</sup>, A. V. Buryy <sup>b</sup>, A. V. Ivashkevich <sup>b</sup>

<sup>a</sup> *Brest State University named after A. S. Pushkin, Brest, Belarus,*

<sup>b</sup> *B.I. Stepanov Institute of Physics of National Academy of Sciences of Belarus,*

*Minsk, Belarus*

*Email: olya.vasiluyk.97@yandex.by*

**Introduction.** In the present paper, we continue the study of spin 1 particle in cylindrical coordinates on the base of the Fedorov – Gronskiy method, restricting ourselves to the massless case (electromagnetic field). First, we are to recalculate the second order equations for three basic functions for the case of massless particle.

**Massless case.** In the massless case, interaction with magnetic field should be excluded; so the second order equations are simplified to the following ones

$$\begin{aligned} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \frac{m^2}{r^2} - C_1^2\right) f_0 = 0, \quad \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \frac{m^2}{r^2} - C_3^2\right) f_0 = 0, \\ \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \frac{(m-1)^2}{r^2} - C_1^2\right) f_{-1} = 0, \quad \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \frac{(m+1)^2}{r^2} - C_3^2\right) f_{+1} = 0. \end{aligned} \quad (1)$$

Here we have three equations (let us apply the notation  $X = -C_1^2$ ):

$$\begin{aligned} 1, \quad \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \frac{m^2}{r^2} + X\right) f_0 = 0, \\ 2, \quad \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \frac{(m-1)^2}{r^2} + X\right) f_{-1} = 0, \quad 3, \quad \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \frac{(m+1)^2}{r^2} + X\right) f_{+1} = 0. \end{aligned} \quad (2)$$

In order to have solutions of eqs. (2) consistent with the gauge solutions (which will be specified below), parameter  $X$  should be equal to  $-C_1^2 = X = \epsilon^2 - k^2$ . In the variable  $z = \sqrt{X}r$ , equations from (2) take the Bessel form:

$$f_0(z) = L_1 J_{|m|}(z), \quad f_{-1}(z) = L_2 J_{|m-1|}(z), \quad f_{+1}(z) = L_3 J_{|m+1|}(z). \quad (3)$$

Let us transform the above constraints (taking in mind  $C_1 = C_2 = C_3 = \sqrt{-X}$ )

$$\begin{aligned} b_{m-1} f_{-1}(r) = \sqrt{-X} f_0(r), \quad a_m f_0(r) = \sqrt{-X} f_{-1}(r), \\ a_{m+1} f_{+1}(r) = \sqrt{-X} f_0(r), \quad b_m f_0(r) = \sqrt{-X} f_{+1}(r), \\ a_m = \frac{d}{dr} + \frac{m}{r}, \quad a_{m+1} = \frac{d}{dr} + \frac{m+1}{r}, \quad b_m = \frac{d}{dr} - \frac{m}{r}, \quad b_{m-1} = \frac{d}{dr} - \frac{m-1}{r}, \end{aligned} \quad (4)$$

to the variable  $z$ . In this way we get the following equations

$$\begin{aligned} \left(\frac{d}{dz} - \frac{m-1}{z}\right) L_2 J_{|m-1|}(z) = i L_1 J_{|m|}(z), \quad \left(\frac{d}{dz} + \frac{m}{z}\right) L_1 J_{|m|}(z) = i L_2 J_{|m-1|}(z), \\ \left(\frac{d}{dz} + \frac{m+1}{z}\right) L_3 J_{|m+1|}(z) = i L_1 J_{|m|}(z), \quad \left(\frac{d}{dz} - \frac{m}{z}\right) L_1 J_{|m|}(z) = i L_3 J_{|m+1|}(z). \end{aligned} \quad (5)$$

Further we will apply the well-known formulas for the Bessel functions

$$\left(\frac{d}{dz} + \frac{p}{z}\right) J_p = J_{p-1}, \quad \left(\frac{d}{dz} - \frac{p}{z}\right) J_p = -J_{p+1}.$$

Correspondingly, we have solutions

$$\begin{aligned}
A \quad f_0(z) &= L_1 J_m(z), \quad f_{-1}(z) = -iL_1 J_{m-1}(z), \quad f_{+1}(z) = +iL_1 J_{m+1}(z); \\
B \quad f_0(z) &= L'_1 J_{-m}(z), \quad f_{-1}(z) = +iL'_1 J_{-m+1}(z), \quad f_{+1}(z) = -iL'_1 J_{-m-1}(z).
\end{aligned} \tag{6}$$

Let us turn to the basic algebraic system for massless case (let:  $C_1 = C_2 = C_3 = C_4 = \sqrt{-X} = \mu = i\sqrt{\epsilon^2 - k^2}$ ):

$$\begin{aligned}
P_0, \quad & \mu E_1 - i\sqrt{2}kE_2 - \mu E_3 = 0, \quad i\sqrt{2}\epsilon E_2 - \mu B_1 - \mu B_3 = 0, \\
& -i\sqrt{2}(k\Phi_0 + \epsilon\Phi_2) = \sqrt{2}E_2, \quad \mu\Phi_1 + \mu\Phi_3 = \sqrt{2}B_2; \\
P_{+1}, \quad & i\sqrt{2}\epsilon E_3 + i\sqrt{2}kB_1 + \mu B_2 = 0, \\
& -\mu\Phi_0 - i\sqrt{2}\epsilon\Phi_3 = \sqrt{2}E_3, \quad -\mu\Phi_2 + i\sqrt{2}k\Phi_3 = \sqrt{2}B_1; \\
P_{-1}, \quad & i\sqrt{2}\epsilon E_1 + \mu B_2 - i\sqrt{2}kB_3 = 0, \\
& \mu\Phi_0 - i\sqrt{2}\epsilon\Phi_1 = \sqrt{2}E_1, \quad -i\sqrt{2}k\Phi_1 - \mu\Phi_2 = \sqrt{2}B_3.
\end{aligned} \tag{7}$$

This system is written in the matrix form  $A_{10 \times 10} \Psi = 0$ ; the rank of the matrix  $A$  equals to 7; we may verify that when removing the rows 2, 3, 4 the rank of the matrix remains the same. If in the resulting matrix we remove the columns 2, 3, 4, then we will get the  $7 \times 7$  matrix with the non-vanishing determinant; thus, we obtain the inhomogeneous system with the following general solution

$$\begin{aligned}
\Phi_0 &= \frac{\sqrt{\epsilon^2 - k^2}}{\sqrt{2}\epsilon} \Phi_1 - \frac{\sqrt{\epsilon^2 - k^2}}{\sqrt{2}\epsilon} \Phi_3 - \frac{k}{\epsilon} \Phi_2, \\
E_1 &= -\frac{i(k^2 + \epsilon^2)}{2\epsilon} \Phi_1 + \frac{i(k^2 - \epsilon^2)}{2\epsilon} \Phi_3 - \frac{ik\sqrt{\epsilon^2 - k^2}}{\sqrt{2}\epsilon} \Phi_2, \\
E_2 &= -\frac{ik\sqrt{\epsilon^2 - k^2}}{\sqrt{2}\epsilon} \Phi_1 + \frac{i(k^2 - \epsilon^2)}{\epsilon} \Phi_2 + \frac{ik\sqrt{\epsilon^2 - k^2}}{\sqrt{2}\epsilon} \Phi_3, \\
E_3 &= \frac{i(k^2 - \epsilon^2)}{2\epsilon} \Phi_1 + \frac{ik\sqrt{\epsilon^2 - k^2}}{\sqrt{2}\epsilon} \Phi_2 - \frac{i(k^2 + \epsilon^2)}{2\epsilon} \Phi_3, \\
B_1 &= ik\Phi_3 - \frac{i\sqrt{\epsilon^2 - k^2}}{\sqrt{2}} \Phi_2, \quad B_2 = \frac{i\sqrt{\epsilon^2 - k^2}}{\sqrt{2}} \Phi_1 + \frac{i\sqrt{\epsilon^2 - k^2}}{\sqrt{2}} \Phi_3, \quad B_3 = -\frac{i\sqrt{\epsilon^2 - k^2}}{\sqrt{2}} \Phi_2 - ik\Phi_1
\end{aligned} \tag{8}$$

Another method of solving the system (7) is possible. Indeed, eliminating the tensor components from four remaining equations, then we get the system for 4 variables

$$\begin{vmatrix}
-\sqrt{2}\epsilon^2 & \epsilon\sqrt{\epsilon^2 - k^2} & -\sqrt{2}k\epsilon & -\epsilon\sqrt{\epsilon^2 - k^2} \\
\sqrt{2}k\epsilon & -k\sqrt{\epsilon^2 - k^2} & \sqrt{2}k^2 & k\sqrt{\epsilon^2 - k^2} \\
\epsilon\sqrt{\epsilon^2 - k^2} & \frac{k^2 - \epsilon^2}{\sqrt{2}} & k\sqrt{\epsilon^2 - k^2} & \frac{\epsilon^2 - k^2}{\sqrt{2}} \\
-\epsilon\sqrt{\epsilon^2 - k^2} & \frac{\epsilon^2 - k^2}{\sqrt{2}} & -k\sqrt{\epsilon^2 - k^2} & \frac{k^2 - \epsilon^2}{\sqrt{2}}
\end{vmatrix} \begin{vmatrix} \Phi_0 \\ \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \end{vmatrix} = 0.$$

We verify that the rank of the matrix equals to 1. Without changing the rank of the matrix, we can remove the rows 2, 3, 4. Thus, we get the expression for  $\Phi_0$ :



$$\Phi_0 = \frac{\sqrt{\epsilon^2 - k^2}}{\sqrt{2}\epsilon} \Phi_1 - \frac{k}{\epsilon} \Phi_2 - \frac{\sqrt{\epsilon^2 - k^2}}{\sqrt{2}\epsilon} \Phi_3. \quad (9)$$

For corresponding tensor components we find

$$\begin{aligned} E_2 &= -i \frac{k\sqrt{\epsilon^2 - k^2}}{\sqrt{2}\epsilon} \Phi_1 - i \frac{\epsilon^2 - k^2}{\epsilon} \Phi_2 + i \frac{k\sqrt{\epsilon^2 - k^2}}{\sqrt{2}\epsilon} \Phi_3, & B_2 &= i \frac{\sqrt{\epsilon^2 - k^2}}{\sqrt{2}} \Phi_1 + i \frac{\sqrt{\epsilon^2 - k^2}}{\sqrt{2}} \Phi_3; \\ E_3 &= -i \frac{\epsilon^2 - k^2}{2\epsilon} \Phi_1 + i \frac{\sqrt{\epsilon^2 - k^2} k}{\sqrt{2}\epsilon} \Phi_2 - i \frac{k^2 + \epsilon^2}{2\epsilon} \Phi_3, & B_1 &= -i \frac{\sqrt{\epsilon^2 - k^2}}{\sqrt{2}} \Phi_2 + ik \Phi_3; \\ E_1 &= -i \frac{\epsilon^2 + k^2}{2\epsilon} \Phi_1 - i \frac{\sqrt{\epsilon^2 - k^2} k}{\sqrt{2}\epsilon} \Phi_2 - i \frac{\epsilon^2 - k^2}{2\epsilon} \Phi_3, & B_3 &= -ik \Phi_1 - i \frac{\sqrt{\epsilon^2 - k^2}}{\sqrt{2}} \Phi_2. \end{aligned} \quad (10)$$

Let us examine three solutions for tensor components, referring to to the variants

$$(\Phi_1 = 1, 0, 0); \quad (0, \Phi_2 = 1, 0); \quad (0, 0, \Phi_3 = 1);$$

making up the  $3 \times 6$  matrix

$$\begin{vmatrix} -i \frac{\epsilon^2 + k^2}{2\epsilon} & -i \frac{k\sqrt{\epsilon^2 - k^2}}{\sqrt{2}\epsilon} & -i \frac{\epsilon^2 - k^2}{2\epsilon} & 0 & i \frac{\sqrt{\epsilon^2 - k^2}}{\sqrt{2}} & -ik \\ -i \frac{\sqrt{\epsilon^2 - k^2} k}{\sqrt{2}\epsilon} & -i \frac{\epsilon^2 - k^2}{\epsilon} & +i \frac{\sqrt{\epsilon^2 - k^2} k}{\sqrt{2}\epsilon} & -i \frac{\sqrt{\epsilon^2 - k^2}}{\sqrt{2}} & 0 & -i \frac{\sqrt{\epsilon^2 - k^2}}{\sqrt{2}} \\ -i \frac{\epsilon^2 - k^2}{2\epsilon} & +i \frac{k\sqrt{\epsilon^2 - k^2}}{\sqrt{2}\epsilon} & -i \frac{k^2 + \epsilon^2}{2\epsilon} & +ik & i \frac{\sqrt{\epsilon^2 - k^2}}{\sqrt{2}} & 0 \end{vmatrix}.$$

We can see that rows in this matrix are linearly dependent:

$$(Row\ 1) + \frac{-\sqrt{2}k}{\sqrt{\epsilon^2 - k^2}} \times (Row\ 2) = Row\ 3, \quad (11)$$

what means that among three independent solutions (10) one has the gauge nature.

There exists possibility to find another gauge solution as a 4-gradient of scalar function. Let the scalar function  $\Phi(x)$  obey the massless Klein – Fock – Gordon wave equation

$$\left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} + \epsilon^2 - k^2 - \frac{m^2}{r^2} \right) f = 0,$$

in the variable  $x = \sqrt{\epsilon^2 - k^2} r$ , the last equation takes on the Bessel form  $f = LJ_{\pm|m|}(x)$ . Tetrad components of this gauge solution are determined by the formulas

$$\Phi_0 = \partial_t \Phi(x), \quad \Phi_1 = \partial_r \Phi(x), \quad \Phi_2 = \frac{1}{r} \partial_\phi \Phi(x), \quad \Phi_3 = \partial_z \Phi(x).$$

Taking in mind the substitution for  $\Phi$ , we get (the total multiplier  $e^{-i\epsilon t} e^{im\phi} e^{ikz}$  is omitted)

$$\Phi_0 = -i\epsilon f, \quad \Phi_1 = \frac{d}{dr} f, \quad \Phi_2 = \frac{im}{r} f, \quad \Phi_3 = ikf.$$

This 4-vector should be transformed to cyclic basis, so we derive

$$\bar{\Phi}_0 = -i\epsilon J_{|m|}, \quad \bar{\Phi}_2 = ikJ_{|m|}, \quad \bar{\Phi}_1 = -\frac{\sqrt{\epsilon^2 - k^2}}{\sqrt{2}} \left( \frac{d}{dz} + \frac{m}{z} \right) J_{|m|}, \quad \bar{\Phi}_3 = \frac{\sqrt{\epsilon^2 - k^2}}{\sqrt{2}} \left( \frac{d}{dz} - \frac{m}{z} \right) J_{|m|}.$$

Whence, with the use of the known properties of Bessel functions, we jbtain

$$\begin{aligned}
 I, \quad \bar{\Phi}_0 &= -i\epsilon J_m, \quad \bar{\Phi}_2 = ikJ_m, \quad \bar{\Phi}_1 = -\frac{\sqrt{\epsilon^2 - k^2}}{\sqrt{2}} J_{m-1}, \quad \bar{\Phi}_3 = -\frac{\sqrt{\epsilon^2 - k^2}}{\sqrt{2}} J_{m+1}. \\
 II, \quad \bar{\Phi}_0 &= -i\epsilon J_{-m}, \quad \bar{\Phi}_2 = ikJ_{-m}, \quad \bar{\Phi}_1 = \frac{\sqrt{\epsilon^2 - k^2}}{\sqrt{2}} J_{-m+1}, \quad \bar{\Phi}_3 = \frac{\sqrt{\epsilon^2 - k^2}}{\sqrt{2}} J_{-m-1}.
 \end{aligned} \tag{12}$$

Thus, we have found four independent solutions in massless case, two of them are gauge ones.

**Conclusions.** It should be noted that all four solutions for massless spin 1 particle are needed when constructing the gauge solutions for massless spin 2 particle in accordance with the Pauli – Fierz approach [1, 2].

### References.

1. Fierz M. Über die relativistische theorie Kraftfreier Teilchenmitbeliebigem Spin. Helvetica Physica Acta, 1939, vol. 12, pp. 3–37.
2. Pauli W. Überre lativistische Feldgleichungen von Teilchenmitbeliebigem Spin im elektromagnetischen Feld. Helvetica Physica Acta, 1939, vol. 12, pp. 297–300.

# Точные решения уравнения для векторной частицы с нулевой массовой в сферических координатах, калибровочная симметрия для поля со спином 2

А. В. Ивашкевич, А. В. Бурый

*Институт физики НАН Беларуси, Минск, Беларусь  
Email: anton.buryu.97@mail.ru*

**Введение.** Для безмассовой частицы со спином 2 существует калибровочная симметрия, которая обобщает калибровочную симметрию в электродинамике Максвелла, она была установлена еще Паули и Фирцем (см. [1–4]). Эти решения не должны давать вклада в наблюдаемые величины типа тензора энергии-импульса поля. 1. Основные калибровочные скалярная и тензорная компоненты, входящие в описание безмассового поля со спином 2, определяются произвольным векторным полем следующими формулами:

$$\bar{\Phi} = \nabla^\alpha \Lambda_\alpha, \quad \bar{\Phi}_{(\alpha\beta)} = \nabla_\alpha \Lambda_\beta + \nabla_\beta \Lambda_\alpha - \frac{1}{2} g_{\alpha\beta}(x) \nabla^\sigma \Lambda_\sigma \quad (1)$$

Построение независимых решений уравнения для безмассовой частицы со спином 1 является основной целью данной работы.

**Сферические решения для безмассовой векторной частицы.** Приведем подстановку для волновой функции в уравнении Даффина – Кеммера для векторной частицы в базисе сферической тетрады:

$$\bar{H} = e^{-i\epsilon t} h(r) D_0, \quad \bar{H}_1 = e^{-i\epsilon t} \begin{vmatrix} h_0(r) D_0 \\ h_1(r) D_{-1} \\ h_2(r) D_0 \\ h_3(r) D_{+1} \end{vmatrix}, \quad \bar{H}_2 = e^{-i\epsilon t} \begin{vmatrix} E_1(r) D_{-1} \\ E_2(r) D_0 \\ E_3(r) D_{+1} \\ B_1(r) D_{+1} \\ B_2(r) D_0 \\ B_3(r) D_{-1} \end{vmatrix}, \quad (2)$$

где  $D_\sigma = D_{-m,\sigma}^j(\phi, \theta, 0)$  – функции Вигнера;  $j = 0, 1, 2, \dots; m = -j, -j+1, \dots, j-1, j$ . После разделения переменных была получена система радиальных уравнений:

$$\begin{aligned} -E_2' - \frac{2}{r} E_2 - \frac{1}{r\sqrt{2}} a (E_1 + E_3) &= 0, & i\epsilon E_1 - B_3' - \frac{1}{r} B_3 + \frac{1}{r\sqrt{2}} a B_2 &= 0, \\ i\epsilon E_2 - \frac{1}{r\sqrt{2}} a (B_1 - B_3) &= 0, & i\epsilon E_3 + B_1' + \frac{1}{r} B_1 - \frac{1}{r\sqrt{2}} a B_2 &= 0, \\ -i\epsilon h_1 + \frac{1}{r\sqrt{2}} a h_0 &= -E_1, & -i\epsilon h_2 - h_0' &= -E_2, & -i\epsilon h_3 + \frac{1}{r\sqrt{2}} a h_0 &= -E_3, \\ h_3' + \frac{1}{r} h_3 + \frac{1}{r\sqrt{2}} a h_2 &= -B_1, & -\frac{1}{r\sqrt{2}} a h_1 + \frac{1}{r\sqrt{2}} a h_3 &= -B_2, & -h_1' - \frac{1}{r} h_1 - \frac{1}{r\sqrt{2}} a h_2 &= -B_3; \end{aligned}$$

используется обозначение  $a = \sqrt{j(j+1)}$ . Известно, что на решениях можно диагонализировать оператор пространственной инверсии. Возникает 2 типа состояний с соответствующими ограничениями на радиальные функции

$$\begin{aligned} P = (-1)^{j+1}, \quad h_0 = 0, h_2 = 0, h_3 = -h_1, E_3 = -E_1, E_2 = 0, B_3 = B_1; \\ P = (-1)^j, \quad h_3 = h_1, \quad B_3 = -B_1, \quad B_2 = 0, \quad E_3 = E_1. \end{aligned} \quad (3)$$

Учтем ограничения по четности. В случае  $P = (-1)^{j+1}$  получаем

$$\frac{aB_2}{\sqrt{2}r} - B_1 - \frac{B_1}{r} + iE_1\varepsilon = 0, \quad E_1 = i\varepsilon h_1, \quad B_1 = h_1 + \frac{h_1}{r}, \quad B_2 = \frac{\sqrt{2}a}{r} h_1.$$

Исключая три переменные, находим

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \varepsilon^2 - \frac{a^2}{r^2}\right)h_1 = 0; \quad z = \varepsilon r, \quad h_1(r) = \frac{1}{\sqrt{z}} J_{j+1/2}(z); \quad (4)$$

будем обозначать это решение символом 1:

$$1) \quad P = (-1)^{j+1}, \quad h_0 = 0, \quad h_2 = 0, \quad h_3 = -h_1 = -\frac{1}{\sqrt{z}} J_{j+1/2}(z). \quad (5)$$

В случае четности  $P = (-1)^j$  получаем 6 уравнений:

$$\begin{aligned} E_2 + \sqrt{2} \frac{a}{r} E_1 + 2 \frac{1}{r} E_2 = 0, \quad B_1 + \frac{B_1}{r} + iE_1\varepsilon = 0, \quad -\frac{\sqrt{2}aB_1}{r} + iE_2\varepsilon = 0, \\ E_1 = -\frac{ah_0}{\sqrt{2}r} + i\varepsilon h_1, \quad E_2 = h_0 + i\varepsilon h_2, \quad B_1 = -\frac{ah_2}{\sqrt{2}r} - h_1 - \frac{h_1}{r}. \end{aligned}$$

Исключая переменные  $E_1, E_2$  и  $B_1$ , получаем 3 уравнения для векторных компонент:

$$\begin{aligned} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{a^2}{r^2}\right)h_0 + i\varepsilon \frac{\sqrt{2}a}{r} h_1 + i\varepsilon \left(\frac{d}{dr} + \frac{2}{r}\right)h_2 = 0, \\ i\varepsilon \frac{\sqrt{2}a}{2r} h_0 + \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \varepsilon^2\right)h_1 + \frac{\sqrt{2}a}{2r} \frac{d}{dr} h_2 = 0, \\ i\varepsilon \frac{d}{dr} h_0 + \frac{\sqrt{2}a}{r} \left(\frac{d}{dr} + \frac{1}{r}\right)h_1 + \left(\frac{a^2}{r^2} - \varepsilon^2\right)h_2 = 0. \end{aligned} \quad (6)$$

Можно найти преобразование над переменными, которое избавляет уравнения от мнимой единицы  $i$  и квадратных корней; существуют две возможности:

$$\begin{aligned} I, \quad h_0 = \sqrt{2}\sqrt{j+1}H_0, \quad h_1 = i\sqrt{j}H_1, \quad h_2 = i\sqrt{2}\sqrt{j+1}H_2, \\ II, \quad h_0 = i\sqrt{2}\sqrt{j}H_0, \quad h_1 = \sqrt{j+1}H_1, \quad h_2 = \sqrt{2}\sqrt{j}H_2. \end{aligned} \quad (7)$$

**Условие Лоренца.** Можно существенно упростить задачу, если накладывать на решение условие Лоренца  $\nabla_\alpha \Psi^\alpha = 0$ . Можно показать, что оно приводит к следующему радиальному соотношению

$$-i\varepsilon h_0 - \frac{a}{\sqrt{2r}} h_1 - \frac{a}{\sqrt{2r}} h_3 - \left(\frac{d}{dr} + \frac{2}{r}\right) h_2 = 0. \quad (8)$$

Учет ограничения по четности дает

$$P = (-1)^{j+1}, \quad h_0 = 0, h_2 = 0, h_3 = -h_1 \Rightarrow 0 \equiv 0; \quad (9)$$

$$P = (-1)^j, \quad h_3 = +h_1 \Rightarrow -i\varepsilon h_0 - \frac{2a}{\sqrt{2r}} h_1 - \left(\frac{d}{dr} + \frac{2}{r}\right) h_2 = 0. \quad (10)$$

Условие (10) позволяет из системы (6) исключить переменную  $h_0$ . Рассматриваем по отдельности подстановки  $I$  и  $II$  (см. (7)). В случае  $I$  получим систему уравнений для двух функций, приводим ее в матричной форме:

$$\Delta \begin{vmatrix} H_1 \\ H_2 \end{vmatrix} = \frac{2}{r^2} \begin{vmatrix} 0 & j+1 \\ j & 1 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} H_1 \\ H_2 \end{vmatrix}, \quad \Delta = \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \varepsilon^2 - \frac{j(j+1)}{r^2}. \quad (11)$$

Диагонализируя линейным преобразованием матрицу смешивания, приходим к двум раздельным уравнениям:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \varepsilon^2 - \frac{(j-1)j}{r^2}\right) \bar{H}_1 = 0, \quad \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \varepsilon^2 - \frac{(j+1)(j+2)}{r^2}\right) \bar{H}_2 = 0. \quad (12)$$

Простой подстановкой эти уравнения приводятся к бесселевому виду:

$$I, \quad z = \varepsilon r, \quad \bar{H}_1(r) = \frac{1}{\sqrt{z}} J_{j-1/2}(z), \quad \bar{H}_2(r) = \frac{1}{\sqrt{z}} J_{j+3/2}(z). \quad (13)$$

Исходные функции задаются соотношениями

$$I, \quad H_1 = \frac{j+1}{2j+1} \bar{H}_1 + \frac{j}{2j+1} \bar{H}_2, \quad H_2 = -\frac{j}{2j+1} \bar{H}_1 + \frac{j}{2j+1} \bar{H}_2. \quad (14)$$

Случай  $II$  рассматривается аналогично. В результате получим

$$z = \varepsilon r, \quad \bar{H}_1(r) = \frac{1}{\sqrt{z}} J_{j-1/2}(z), \quad \bar{H}_2(r) = \frac{1}{\sqrt{z}} J_{j+3/2}(z) \quad (15)$$

Исходные функции строятся так:

$$II, \quad H_1 = \frac{j+1}{2j+1} \bar{H}_1 + \frac{j}{2j+1} \bar{H}_2, \quad H_2 = -\frac{j+1}{2j+1} \bar{H}_1 + \frac{j+1}{2j+1} \bar{H}_2 \quad (16)$$

Легко убедиться, что два решения  $I$  и  $II$  связаны линейным преобразованием. Следовательно, мы можем использовать только один случай: либо  $I$ , либо  $II$  (для определенности будем использовать вариант  $I$ ). Причем, поскольку уравнения для функций  $\bar{H}_1$  и  $\bar{H}_2$  не связаны между собой, то два линейно независимых решения можно выбрать так (обозначаем их символами 2 и 3):

$$2) \quad \bar{H}_1 = \frac{1}{\sqrt{z}} J_{j-1/2}, \quad H_1 = \frac{j+1}{2j+1} \bar{H}_1, \quad H_2 = -\frac{j}{2j+1} \bar{H}_1, \quad H_0 = -\frac{j}{z} H_1 - \left(\frac{d}{dz} + \frac{2}{z}\right) H_2;$$

$$3) \quad \bar{H}_2 = \frac{1}{\sqrt{z}} J_{j+3/2}, \quad H_1 = \frac{j}{2j+1} \bar{H}_2, \quad H_2 = \frac{j}{2j+1} \bar{H}_2, \quad H_0 = -\frac{j}{z} H_1 - \left(\frac{d}{dz} + \frac{2}{z}\right) H_2.$$

Преобразуем эти решения к переменным  $h_i$ ; в результате получаем:

$$2) h_3 = +h_1 = i\sqrt{j} \frac{j+1}{2j+1} \frac{1}{\sqrt{z}} J_{j-1/2}, h_2 = -i\sqrt{2}\sqrt{j+1} \frac{j}{2j+1} \frac{1}{\sqrt{z}} J_{j-1/2}, h_0 = -\sqrt{2}\sqrt{j+1} \frac{j}{2j+1} \frac{1}{\sqrt{z}} J_{j+1/2};$$

$$3) h_3 = +h_1 = i\sqrt{j} \frac{j}{2j+1} \frac{1}{\sqrt{z}} J_{j+3/2}, h_2 = i\sqrt{2}\sqrt{j+1} \frac{j}{2j+1} \frac{1}{\sqrt{z}} J_{j+3/2}, h_0 = -\sqrt{2}\sqrt{j+1} \frac{j}{2j+1} \frac{1}{\sqrt{z}} J_{j+1/2}.$$

**Градиентное решение.** Известно, что должны существовать калибровочные решения градиентного типа, найдем их явный вид. Исходим из определения

$$\Psi_\alpha(x) = \partial_\alpha \Lambda(x), \quad \Lambda(x) = e^{-i\epsilon t} D_0 f(r), \quad D_0 = D_{-m,0}^j(\theta, \phi, 0).$$

После проведения необходимых вычислений находим

$$\bar{h}_0 = -i\epsilon f, \quad \bar{h}_2 = \frac{df}{dr}, \quad \bar{h}_1 = \bar{h}_3 = -\frac{\sqrt{j(j+1)/2}}{r} f.$$

Построенное калибровочное решение имеет четность  $P = (-1)^j$ . Если предполагать, что скалярная функция  $\Lambda(x)$  является решением уравнения Клейна – Фока – Гордона, то

$$f(r) \sim \frac{1}{\sqrt{r}} F(r), \quad f(r) = \frac{1}{\sqrt{z}} J_{j+1/2}(z).$$

Таким образом, находим четвертое решение:

$$4) \quad h_3 = h_1 = -\frac{\sqrt{j(j+1)}}{\sqrt{2}} \frac{1}{z\sqrt{z}} J_{j+1/2}, \quad h_0 = -\frac{i}{\sqrt{z}} J_{j+1/2}, \quad h_2 = \frac{d}{dz} \frac{1}{\sqrt{z}} J_{j+1/2}. \quad (17)$$

Из решений 2 и 3 можно образовать специальную линейную комбинацию, которая соответствует второму калибровочному решению (согласно общей теории, из четырех решений два должны быть калибровочными, а два – нет).

**Заключение.** В явном виде построены 4 линейно независимых решения уравнения Даффина – Кемера – Петье для безмассовой частицы со спином 1. Это позволяет в явном виде получить выражения для калибровочных решений уравнения для безмассовой частицы со спином 2 в теории Паули – Фирца.

### Литература.

1. Pauli, W. Über relativistische Feldgleichungen von Teilchen mit beliebigem Spin im elektromagnetischen Feld / W. Pauli, M. Fierz // Helv. Phys. Acta. – 1939. – Bd. 12. – S. 297–300.
2. Fierz, M. On relativistic wave equations for particles of arbitrary spin in an electromagnetic field / M. Fierz, W. Pauli // Proc. Roy. Soc. London. A. – 1939. – Vol. 173. – P. 211–232.
3. Федоров, Ф.И. К теории частицы со спином 2 / Ф.И. Федоров // Уч. зап. БГУ. Сер. физ.–мат. – 1951. – Вып. 12. – С. 156–173.
4. Regge, T. On properties of the particle with spin 2 / T. Regge // Nuovo Cimento. – 1957. – Vol. 5, № 2. – P. 325–326.

## Mechanisms of additional luminosity for a dense medium

E. Reznikov

*Oles Honchar Dnipro National University, Dnipro, Ukraine  
e-mail: reznikovev1988@gmail.com*

Observation of heavy-ion collisions exposed the insufficiency of the known mechanisms for the generation of the background - electron-positron pairs, and gamma-rays. The luminosity of the plasma, measured in experiments, exceeds the theoretically calculated one [1].

In a dense media violation of the Furry theorem occurs. Therefore, in the nuclear plasma, new types of phenomena have to have arisen. One of the prominent ones is the emergence of the induced charge and the generation of the corresponding classical potential [2,3]. As well the generation of three-photon vertexes has to be expected, which results in plasmon splitting into two real photons, and inelastic scattering of photons on the plasma. Also, the polarization tensor in dense media has corrections to its form, which results, in particular, that the process of the splitting of the single plasmon on electron-positron pair becomes permitted.

The aforementioned processes completely change the specter of the emitted particles. These are some of the distinguishable signals of plasma formation. Moreover, the splitting of the plasmons, produced by the initial and induced charge, is one of the new mechanisms of the additional plasma luminosity.

In case of the stationary and homogeneous field the vertex tensor components are:

$$\Pi_4 = \frac{e}{(2\pi)^3} \int dp_3 dp_4 \sum_n \left[ \frac{p_4 - i\mu}{[(p_4 - i\mu)^2 + (2n+1)eH - \sigma eH + p_3^2 + m^2]} \right] \quad (1)$$

$$\Pi_i = 0$$

with spin variable  $\sigma = \pm 1$ . By summing over  $\sigma$  and then over  $n$ , we get

$$\Pi_4 = \frac{e}{(2\pi)^3} \int dp_3 dp_4 \left[ \frac{p_4 - i\mu}{[(p_4 - i\mu)^2 + eH + p_3^2 + m^2]} \right]. \quad (2)$$

After integration we obtain

$$\Pi_4 = \frac{e}{2\pi} \Theta(\mu^2 - eH - m^2) (\mu^2 - eH - m^2), \quad (3)$$

where  $\Theta(\mu^2 - (eH + m^2))$  is the Heaviside step function.

The structure of the tensor element is similar to that in [4, 5]. But in the presence of a magnetic field the magnitude of the tensor components changes. The function's argument is different from the case of a "pure" medium: the square of the mass is replaced by the sum of the magnetic field strength and the mass squared. In the case under consideration not only the threshold of the function is shifted, but also its value in the allowed regions changes. Thus, at zero temperature and in the presence of strong magnetic field, the induced charge generation is partially or completely suppressed, dependently on the field strength and medium parameters.

In a general case of nonzero temperature tensor temporal component can be calculated in the form of the sum

$$\Pi_4 = \frac{e}{2\pi} \frac{\left(\frac{\pi}{\beta} + i\mu\right)\Theta(\lambda)}{\beta\sqrt{\left(\frac{\pi}{\beta} + i\mu\right)^2 + eH + m^2}} - \frac{e}{8\pi^2} \int dp_3 \frac{i \sinh(\beta\mu)}{\left(\cosh(\beta\mu) + \cosh\left(\beta\sqrt{eH + p_3^2 + m^2}\right)\right)}, \quad (4)$$

where  $\lambda$  is the function of the mass, magnetic field, chemical potential, and  $\beta$ ,  $\lambda = \mu^2 - \frac{\pi^2}{\beta^2} - m^2 - eH + \sqrt{\frac{4\pi^2\mu^2}{\beta^2} + \left(\mu^2 - \frac{\pi^2}{\beta^2} - m^2 - eH\right)^2}$ . In the low-temperature approximation, it tends to  $\lambda = 2\left(\mu^2 - (eH + m^2)\right)$  and  $\lambda = 0$ . Step-function comes from the

strict inequality,  $\text{Im}\sqrt{\left(\frac{\pi}{\beta} + i\mu\right)^2 + eH + m^2} > 0$ , So it is defined as  $\Theta(\lambda) = \begin{cases} 0, \lambda \leq 0, \\ 1, \lambda > 0. \end{cases}$  Therefore,

in case  $\lambda = 0$  the Heaviside function equals zero. Then the analytical term tends to the expression  $\frac{e}{2\pi} \frac{i\mu\Theta\left(2\left(\mu^2 - (eH + m^2)\right)\right)}{\beta\sqrt{eH + m^2 - \mu^2}}$ .

In the case of high temperature asymptotic,  $\beta$  approaches to zero, hyperbolic sinuses can be replaced by their arguments and cosines tend to one. Then integration of non-analytic part of (4) can be fully performed and yields

$$\int dp_3 F = \frac{i\mu\pi\Theta(\lambda)}{\beta\sqrt{4 + \beta^2(eH + m^2)}}. \quad (5)$$

Combining this result and the analytical part of (4), we obtain the exact expression for the temporal element:

$$\Pi_4 = \frac{e}{2\pi} \frac{\left(\frac{\pi}{\beta} + i\mu\right)\Theta(\lambda)}{\beta\sqrt{\left(\frac{\pi}{\beta} + i\mu\right)^2 + eH + m^2}} - \frac{e}{4\pi} \frac{i\mu\Theta(\lambda)}{\beta\sqrt{4 + \beta^2(eH + m^2)}}. \quad (6)$$

In the case of  $T \gg \mu$  this is simplified to

$$\Pi_4 = \frac{e}{2\pi} \Theta(\lambda) \left(\frac{1}{\beta} - \frac{i\mu}{4}\right). \quad (7)$$

In high temperature approximation,  $\lambda$  tends to  $\lambda = 2\mu^2 \left(1 - \frac{(eH + m^2)\beta^2}{\pi^2}\right)$ . Therefore,

the contribution of the sum of squared masses is strongly diminished, and the allowed region for the tensor component is any non-zero  $\mu$ . Thus, we have a linear dependence on the temperature with the addition of a small imaginary correction. The influence of high temperature ensures the generation of the induced charge even for small values of the chemical potential.

Aforementioned results obtained in paper [2]. We used them here to obtain the density of the induced charge. In the low temperature approximation, we get



$$\rho(\mu, m, \beta) = 2e\Theta(\lambda) \operatorname{Re} \left( \frac{\left( \frac{\pi}{\beta} + i\mu \right)}{\beta \sqrt{\left( \frac{\pi}{\beta} + i\mu \right)^2 + eH + m^2}} - \frac{eH - \mu^2 + m^2}{1 + \cosh\left(\pi\beta\sqrt{eH - \mu^2 + m^2}\right)^2} \right), \quad (8)$$

$$\lambda = \mu^2 - eH - m^2 + \sqrt{(eH - \mu^2 + m^2)^2} + \frac{2\mu^2\pi^2}{(\mu^2 - eH - m^2)\beta^2}$$

and in high temperature approximation, we obtain

$$\rho(\mu, m, \beta) = 2e \operatorname{Re} \Theta(\lambda) \left( \frac{1}{\beta} - \frac{i\mu}{4} \right), \quad \lambda = 2\mu^2 \left( 1 - \frac{(eH + m^2)\beta^2}{\pi^2} \right), \quad (9)$$

We plotted the dependence of induced charge density on temperature for several values of chemical potential and magnetic field.

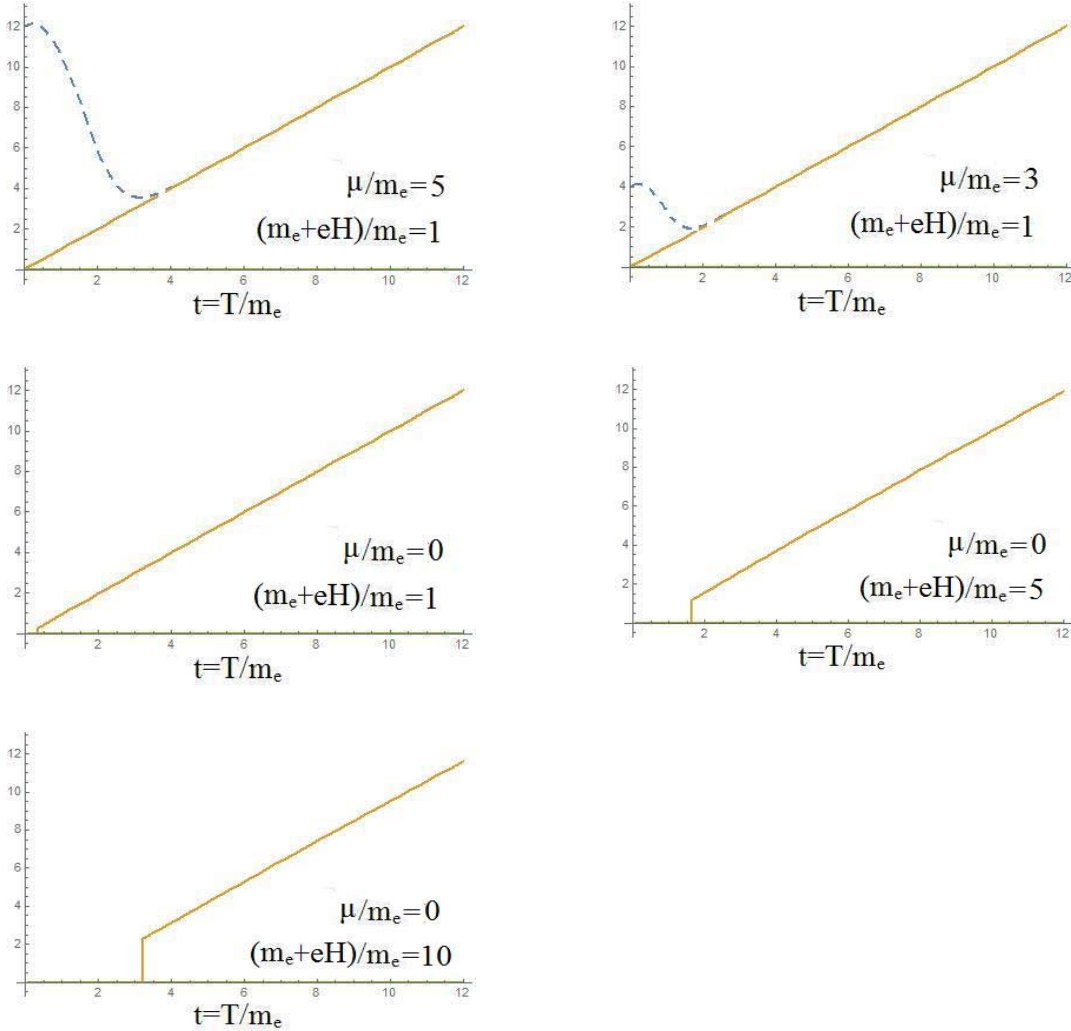


Fig. 1. The temperature dependence of the induced charge density. The solid line presents the plot for high temperature approximation; the dashed line shows the plot for low temperature approximation.

In the case when the sum of the squared fermion mass and the magnetic field strength is lower than the square of the chemical potential, the approximation of the low temperature gives a substantial density for the induced charge in the field of applicability. But its contribution decreases rapidly at a temperature increase. In the opposite case, the low temperature approximation gives zero for the induced charge density and the high temperature approximation has a threshold. At some temperature, dependent on chemical potential and magnetic field, induced charge density occurs sharply. Thus, by changing the magnetic field, we can control at what temperature the induced charge generation begins.

Generation of induced charge is the root cause of the three mechanisms of the additional luminosity of dense plasma.

The first mechanism is simple induction – on the short time of nuclei collision ( $10^{-22}$ - $10^{-23}$  sec) induced charge of some density is generated, which, in turn, produces electromagnetic waves as any charge density change do.

The second mechanism is the process of the splitting of the single plasmon on electron-positron pair. This effect becomes permitted because polarization tensor changes and thus massless virtual photons of an electrostatic field transform into plasmons with some effective mass. Polarization tensor component for the case of electric field are

$$\Pi_{44} = -\frac{e}{2\pi} \Theta(\mu^2 - eH - m^2) \left( \mu - \sqrt{eH + m^2} \right), \quad (10)$$

The third mechanism is the process of the plasmon splitting into two real photons. This process is permitted because the violation of the Furry theorem made the occurrence of three-photon vertexes possible.

These are also the distinguishable signals of plasma formation.

### References.

1. Observation of direct-photon collective flow in  $\sqrt{s_{NN}}=200$  GeV Au+Au collisions A. Adareet al. [PHENIX Collaboration], Phys. Rev.Lett.109, 122302 (2012) [arXiv:1105.4126 [nucl-ex]].
2. E. Reznikov, V.V. Skalozub, Induced Charge in Dense Magnetized Fermionic Medium at Finite Temperature, Nonlinear Phenomena in Complex Systems, Vol.22, № 3, (2019), pp. 305-309.
3. E. Reznikov, V.V. Skalozub Induced Charge and Electric Field in Dense Magnetized Fermionic Medium at Finite Temperature, Journal of Physics and Electronics, Vol.27, № 2, (2019), pp. 9-16.
4. Skalozub, V.V. The polarization operator and the three-photon vertex in QED<sub>2+1</sub> in a dense medium / V.V. Skalozub, A.Yu. Tishchenko // Zh. Eksp. Teor. Fiz. – 1993. – Vol. 104. – P. 3921 – 3927.
5. Skalozub, V.V. Effective Lagrangian and the nonlinear interaction of a nonuniform electromagnetic field in QED<sub>2+1</sub> in a dense fermion medium / V.V. Skalozub, A.Yu. Tishchenko // Journal of Experimental and Theoretical Physics. – 1995. – Vol. 81. – P. 207 – 209.

# Прецизионное определение угла смешивания Вайнберга в процессе рождения мюонных пар на электрон-позитронных коллайдерах следующего поколения

А. А. Садовский <sup>a,b</sup>, А. А. Бабич <sup>b</sup>, А. А. Панков <sup>b,c</sup>

<sup>a</sup> Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины, Гомель, Беларусь

<sup>b</sup> Гомельский государственный технический университет имени П.О. Сухого, Гомель, Беларусь

<sup>c</sup> Объединенный институт ядерных исследований, ОИЯИ, Дубна, Россия  
E-mail: aasadouski@yahoo.com

Проверка стандартной модели (СМ) электрослабых и сильных взаимодействий элементарных частиц осуществлялась на протяжении ряда лет в ускорительных экспериментах на высокоэнергетических коллайдерах, таких как LEP (опции LEP1 и LEP2), SLC, Tevatron, HERA и др., а также интенсивно ведется в настоящее время на Большом адронном коллайдере LHC. При этом результаты экспериментов, как правило, согласуются с предсказаниями СМ. Последний громкий успех СМ связан с открытием хиггсовского бозона в экспериментах CMS и ATLAS на LHC.

В представленной работе излагаются результаты исследований, посвященные разработке методов прецизионной проверки СМ на высокоэнергетических электрон-позитронных коллайдерах следующего поколения, таких как FCC-ee (Future Circular Collider), ILC (International Linear Collider), CLIC (Compact Linear Collider). В частности, определена светимость коллайдера FCC-ee, при которой точность измерения квадрата синуса угла Вайнберга  $\pm \delta(\sin^2 \theta_W)$  (угла смешивания) в окрестности резонансного пика стандартного Z-бозона превысит современные предельные значения, полученные из глобального анализа электрослабых данных.

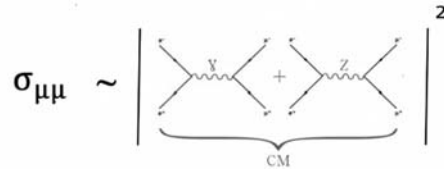


Рис. 1. Наборы фейнмановских диаграмм для амплитуды электрон-позитронной аннигиляции в пару мюонов в СМ.

Полное сечение рассеяния  $\sigma_{\mu\mu}$  и относительное сечение  $R^\mu$  определяются [1-3] в соответствии с выражениями:

$$\sigma_{\mu\mu} = \int_{-1}^1 \frac{d\sigma_{\mu\mu}}{d\cos\theta} d\cos\theta \quad (1)$$

$$\sigma_{pt} \equiv \sigma(e^+e^- \rightarrow \gamma^* \rightarrow \mu^+\mu^-) = (4\pi\alpha_{e.m.}^2) / (3s), \text{ где } \alpha = \frac{e^2}{4\pi} \quad (2)$$

$$R^\mu = \frac{\sigma_{\mu\mu}}{\sigma_{e.m.}} = 1 + 2v^2 \operatorname{Re}(\chi) + (v^2 + a^2)^2 |\chi|^2 \quad (3)$$

где  $a$  – постоянная тонкой структуры,  $\chi$  – пропагатор  $Z$  – бозона (с учетом ширины распада  $Z$  – бозона). В СМ лептонные константы связи  $Z$ -бозона имеют вид:  $\nu = -1 + 4 \sin^2 \theta_W$  ( $a = -1$ ).

Определим функцию  $\chi^2$  как:  $\chi^2 = \left( \frac{\Delta \sigma_{\mu\mu}}{\delta \sigma_{\mu\mu}} \right)^2$ , где отклонение сечения  $\Delta \sigma_{\mu\mu}$

вызвано возможным изменением параметра  $x_W = \sin^2 \theta_W$ :

$\Delta \sigma_{\mu\mu} = \sigma_{\mu\mu}(x_W \pm \delta x_W) - \sigma_{\mu\mu}(x_W)$ . Величина  $\delta \sigma_{\mu\mu} = \sqrt{\frac{\sigma_{\mu\mu}}{L}}$  является статической

погрешностью эксперимента. Установлено, что при планируемой максимальной светимости коллайдера FCC-ее удастся более чем на порядок увеличить современную точность измерения квадрата синуса угла Вайнберга (рисунок 2).

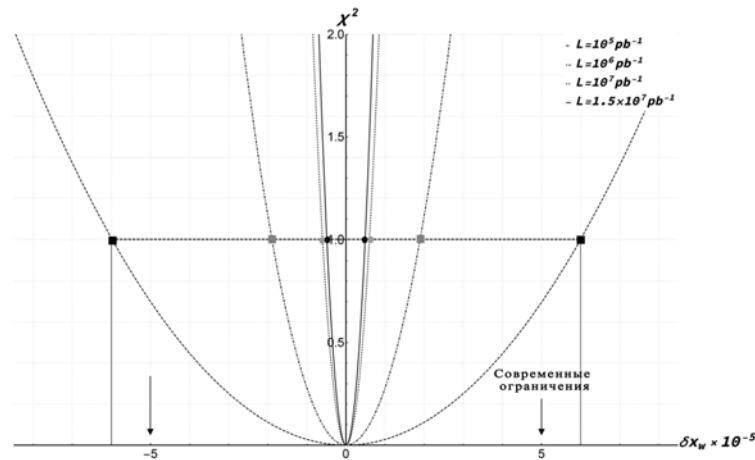


Рис. 2. Функция  $\chi^2$  в зависимости от  $\delta x_W$  в окрестности резонансного пика стандартного  $Z$ -бозона при различных значениях интегральной светимости.

На рисунке 3 отражена точность определения синуса квадрата угла Вайнберга  $\sin^2 \theta_W$ , достигнутая при измерении полного сечения аннигиляционного рождения мюонных пар в окрестности резонансного пика стандартного  $Z$ -бозона, асимметрии вперед-назад и полученная из комбинированного анализа обеих наблюдаемых.

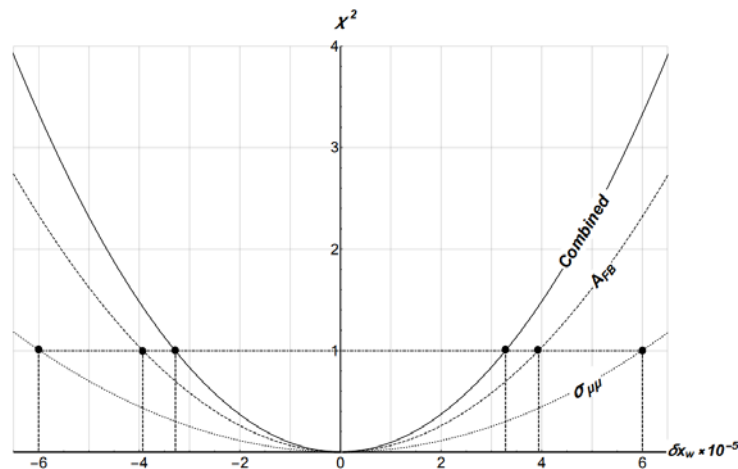


Рис. 3. Точность определения синуса квадрата угла Вайнберга  $\sin^2 \theta_W$ .

**Заключение.** Определена светимость коллайдера FCC-ee, при которой точность измерения синуса квадрата угла Вайнберга (угла смешивания)  $\pm\delta(\sin^2\theta_W)$  в окрестности резонансного пика стандартного Z-бозона превысит современные предельные значения, полученные из глобального анализа электрослабых данных. Показано, что при планируемой максимальной светимости коллайдера FCC-ee, а так же при увеличении количества наблюдаемых физических величин удастся более чем на порядок улучшить современную точность измерения ключевого параметра SM – синуса квадрата угла Вайнберга.

#### **Литература.**

1. Babich, A. A. New physics signatures at a linear collider: Model independent analysis from conventional polarized observables/ A. A. Babich, P. Osland, A. A. Pankov, N. Paver // Phys. Lett. B. – 2001. – 518. – pp.128–136.
2. Pankov, A. A. High-precision limits on W–W' and Z–Z' mixing from diboson production using the full LHC Run 2 ATLAS data set /A. A. Pankov, P. Osland, I. A. Serenkova, V. A. Bednyakov // Eur. Phys. J.C. – 2020. – 80. – no.6, – pp.503–525.
3. Pankov, A. A. Updated constraints on Z' and W' bosons decaying into bosonic and leptonic final states using the run 2 ATLAS data t /A. A. Pankov, P. Osland, I. A. Serenkova // Phys. Rev. D – 2021. – 103. – no.5, – pp. 053009.

# Exploring the low-lying electronic states of molecular RaBr promising for direct laser cooling

Y. Osika <sup>a</sup>, M. Shundalau <sup>b</sup>

<sup>a</sup> Faculty of Physics, Belarusian State University, 220030 Minsk, Belarus

<sup>b</sup> B.I. Stepanov Institute of Physics of NAS of Belarus, 220072 Minsk, Belarus  
E-mail: yulia.osika@gmail.com

Direct laser cooling is one of the effective techniques to obtain ultracold molecules. Among possible applications of ultracold molecules, are the creation of a Bose–Einstein condensate, quantum information processing, controlled chemical reactions, research for parity-violation effects: measuring an electron’s electric dipole moment with high precision [1].

The monohalides of alkaline earth metals are promising diatomic molecules for direct laser cooling due to coincidence of the equilibrium internuclear distances of potential energy curves (PECs) involved in the cooling scheme states and, as a consequence, highly diagonal Franck–Condon factors (FCFs). Other essential features required for the effective direct laser cooling are strong transition dipole moment between the states involved in the cooling scheme and the absence of intervening electronic states between them in order to avoid leaks in the cooling cycle [2]. Generally, the monohalides of alkaline earth metals possess the mentioned key factors. Recently, the strontium monofluoride SrF and calcium monofluoride CaF molecules were successfully cooled and caught into a magneto-optical trap.

In this work the potential energy functions of the low-lying electronic states of the radium monobromide RaBr molecule (Fig. 1) are calculated at the Fock-space relativistic coupled cluster level of theory using package DIRAC19 [3].

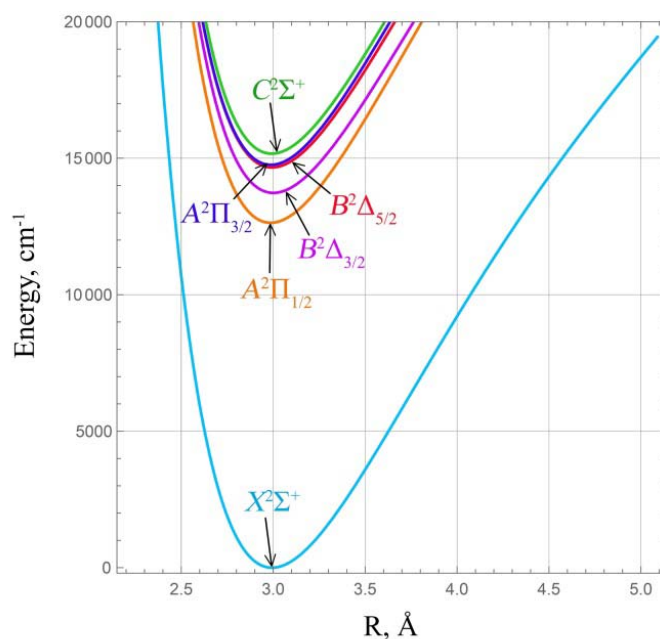


Fig. 1. The calculated PECs for low-lying states of the RaBr molecule.

The permanent and transition dipole moments, as well as other radiative properties for the vibronic transitions, which can be involved into the laser cooling schemes, are predicted. All calculated results correspond to the trend for other studied radium monohalides (RaF, RaCl, and RaBr) and can be used for the further spectroscopic experiments with the RaBr molecule.

We calculated the vibrational energies for the  $^{226}\text{Ra}^{79}\text{Br}$  and  $^{226}\text{Ra}^{81}\text{Br}$  molecules for six low-lying PECs and then obtained the harmonic vibrational frequencies  $\omega_e$  and other molecular spectroscopic parameters for these electronic states.

Based on the calculated PECs, we predicted the FCFs between the relevant states of the RaBr molecule. High accuracy of the reproduction of spectroscopic parameters, in its turn, ensures the correctness of radiative properties. Since the equilibrium internuclear distances for all calculated PECs are almost the same, the FCFs distribution has a pronounced diagonal character. The large values of the diagonal FCFs for the vibronic transitions between the low-lying vibrational states of the excited and ground electronic states are critical for the realization of the scheme of direct laser cooling [2]. The  $0' \rightarrow 0''$  FCF for the  $A^2\Pi_{1/2} \rightarrow X^2\Sigma^+$  transition demonstrates the trend to decreasing in a series of the RaF, RaCl, and RaBr molecules: 0.999998 (RaF), 0.998516 (RaCl), 0.990752 (RaBr).

The Einstein coefficients for spontaneous emission and lifetimes of vibrational levels were estimated based on the calculated transition dipole moments, FCFs, and vibrational levels.

Based on the radiative lifetime  $\tau$  of the  $A^2\Pi_{1/2}$  ( $v' = 0$ ) state and its excitation energy, the Doppler temperature  $T_D$ , or the minimum temperature, which can be achieved by the Doppler cooling, as well as the recoil temperature  $T_r$ , or sub-Doppler cooling temperature, were estimated to be 60  $\mu\text{K}$  and 100 nK, respectively.

From an efficiency perspective of the direct laser cooling scheme, among all studied radium monohalides (RaF, RaCl, and RaBr) the radium monofluoride molecule looks the most promising due to the highest values of diagonal FCFs. In principle, it allows to use only one laser for effective cooling of the RaF medium. Nevertheless, the heavier species also have some advantages. The increase of radiative lifetime, mass of molecule and excitation wavelength in the series RaF  $\rightarrow$  RaCl  $\rightarrow$  RaBr reduces Doppler  $T_D$  and recoil  $T_r$  temperatures. So, the corresponding values for the RaF, RaCl, and RaBr molecules are 89  $\mu\text{K}$  and 138 nK, 75  $\mu\text{K}$  and 121 nK, and 60  $\mu\text{K}$  and 100 nK, respectively. It means that for the RaBr medium it is possible to reach Doppler  $T_D$  and recoil  $T_r$  temperatures up to 30% lower than for the RaF molecules.

The possibilities for the realization of the quasi-closed scheme for direct laser cooling involving ground  $X^2\Sigma^+$  and first excited  $A^2\Pi_{1/2}$  states are considered. The vibrational cooling scheme, including one pump and two repump lasers for the  $^{226}\text{Ra}^{79}\text{Br}$  molecule is shown in Fig. 2.

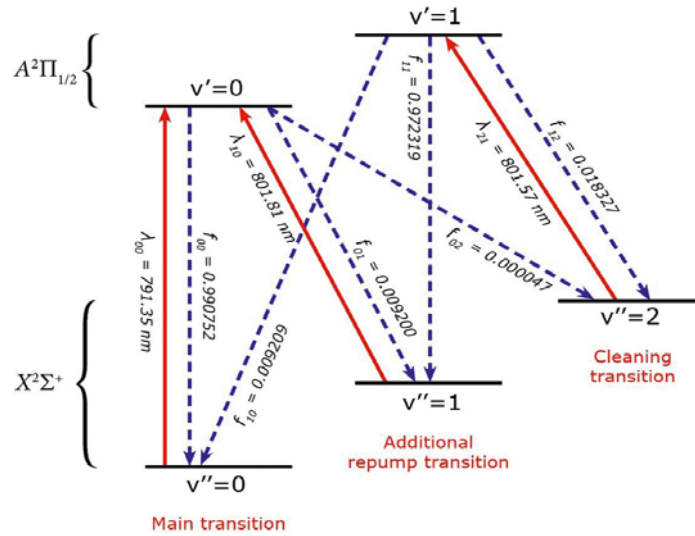


Fig. 2. Proposed laser cooling scheme the  $^{226}\text{Ra}^{79}\text{Br}$  molecule using the  $A^2\Pi_{1/2}$  ( $v' \leftarrow X^2\Sigma^+$  ( $v''$ )) pump transitions (solid lines) and spontaneous decay (dashed lines).  $f_{v'v''}$  is the FCF,  $\lambda_{v'v''}$  is the wavelength.

The main laser with the wavelength  $\lambda_{00} = 791.35$  nm drives the  $A^2\Pi_{1/2} (v' = 0) \leftarrow X^2\Sigma^+ (v'' = 0)$  transition. Since the value of the FCF for  $0' \rightarrow 0''$  transition is equal to 0.990752, it provides only about 100 photon absorption/emission cycles. So, the additional repump laser with wavelength  $\lambda_{10} = 801.81$  nm returns population directly from the  $X^2\Sigma^+ (v'' = 1)$  state to the  $A^2\Pi_{1/2} (v' = 0)$  state. The calculations predict that the sum of the two first vibrational loss channels is 0.999952, which increases the number of scattered photons per molecule up to 20 800. This number is twice as large as typical number ( $10^4$ ) required to slow a molecular beam and catch it into a magneto-optical trap [2]. According to calculations, the effective cooling scheme can be implemented using only one pump and one repump lasers, but it is desirable to use one more cleaning laser with wavelength  $\lambda_{21} = 801.57$  nm, which returns population indirectly to the main cycle by driving the  $A^2\Pi_{1/2} (v' = 1) \leftarrow X^2\Sigma^+ (v'' = 2)$  transition.

The data obtained in this study suggests that the RaBr molecule is a very promising candidate for direct laser cooling [4].

### Acknowledgments.

This work was supported by the Belarusian State Scientific Research Program "Convergence-2025".

### References.

1. Isaev, T.A. / Laser-cooled RaF as a promising candidate to measure molecular parity violation // T.A. Isaev, S. Hoekstra, R. Berger. Phys. Rev. A. – 2010. – Vol. 82. – P. 052521.
2. Di Rosa, M.D. / Laser-cooling molecules. Concept, candidates, and supporting hyperfine-resolved measurements of rotational lines in the A–X(0,0) band of CaH // M.D. Di Rosa. Eur. Phys. J. D. – 2004. – Vol. 31. – P. 395–402.
3. Saue, T. / The DIRAC code for relativistic molecular calculations // T. Saue et al. J. Chem. Phys. – 2020. – Vol. 152. – P. 204104.
4. Osika, Y. / Fock-space relativistic coupled cluster study on the spectroscopic properties of the low-lying states of the radium monobromide RaBr molecule // Y. Osika, M. Shundalau. J. Quant. Spectrosc. Rad. Transf. – 2021. – Vol. 276. – P. 107947.



## Зонная структура объемного и двумерного дисульфида рения триклинной сингонии

А. В. Баглов<sup>a, b</sup>, А. А. Жойдик<sup>a</sup>, Д. М. Малахов<sup>a</sup>, Л. С. Хорошко<sup>a, b</sup>

<sup>a</sup> Белорусский государственный университет, 220030 Минск, Беларусь

<sup>b</sup> Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,  
220013 Минск, Беларусь  
E-mail: baglov@bsu.by

**Введение.** Дихалькогениды тугоплавких металлов (ДТМ) длительное время удерживают интерес исследователей благодаря наличию сочетанию слоистой структуры и уникальных электронных свойств, перспективных для создания различных изделий, в том числе пост-кремниевой электроники нового поколения [1]. Наиболее изученными являются дихалькогениды молибдена ( $\text{MoS}_2$ ) и вольфрама ( $\text{WS}_2$ ), проявляющие полупроводниковые свойства как в объемном, так и в двумерном состоянии.

В то же время дисульфид рения ( $\text{ReS}_2$ ) изучен значительно меньше, хотя опубликованные экспериментальные работы демонстрируют наличие у  $\text{ReS}_2$  привлекательных свойств для изготовления солнечных элементов, (фото)катализаторов, электронных изделий [2].

Не глядя на то, что дисульфиды рения, молибдена и вольфрама являются слоистыми материалами, в отличие от гексагональных  $\text{MoS}_2$  и  $\text{WS}_2$  кристаллы  $\text{ReS}_2$  принадлежат триклинной сингонии. Присущее низкосимметричной решетке  $\text{ReS}_2$  искажение делает его подходящим материалом для создания элементов устройств стрейнтроники, а возможность замещения атомов серы другим халькогеном позволяет предположить возможность гибкого изменения электронными свойствами за счет четырех неэквивалентных позиций атома халькогена вместо одной для  $\text{MoS}_2$  и  $\text{WS}_2$ . Целью данной работы является изучение зонной структуры триклинного дисульфида рения в объемном и двумерном состоянии методами из первых принципов.

**Методика проведения моделирования.** Численное моделирование проводили в рамках теории функционала плотности и теории псевдопотенциала, реализованных в пакете *OpenMX* [3 – 5]. Мы используем приближение локальной плотности (ПЛП), т.к. в его рамках удается корректно описать структурные свойства слоистых материалов с выраженным Ван-дер-Ваальсовым взаимодействием между слоями, в том числе дихалькогенидов молибдена и вольфрама. Критерий сходимости расчета самосогласованного поля составлял  $10^{-6}$  эВ/ион, оптимизацию элементарной ячейки продолжали до тех пор, пока силы, действующие на атомы и компоненты тензора напряженности элементарной ячейки, становились менее 10 мэВ/Å.

**Обсуждение результатов.** Полученные результаты демонстрируют хорошее согласие между теорией и экспериментом, что позволяет рекомендовать этот метод для расчета дихалькогенидов рения триклинной сингонии. Различные же свойства (энергии атомизации, транспорт носителей и т.д.) можно рассчитывать в рамках других приближений в геометрии, полученной в рамках ПЛП.

Зонная структура объемного и двумерного  $\text{ReS}_2$  представлена на рисунке 1. Напомним, что в рамках ПЛП ширина межзонного зазора занижается, но дисперсия энергетических зон воспроизводится корректно. Для объемного  $\text{ReS}_2$  ширина запрещенной зоны ( $E_g$ ) составляет 1,26 эВ, что хорошо согласуется с обычно принимаем в литературе значением  $E_g \approx 1,4$  эВ. Прямозонный характер (переход в точке X) объемного  $\text{ReS}_2$  согласуется с спектроскопическими наблюдениями. Понижение размерности приводит к увеличению  $E_g$  до 1,44 эВ с одновременным изменением

дисперсии на отрезке  $\Gamma - X$ , смещением положения максимума валентной зоны из точки  $\Gamma$  в направлении к точке  $X$ , чего не наблюдается для  $\text{MoS}_2$  и  $\text{WS}_2$ .

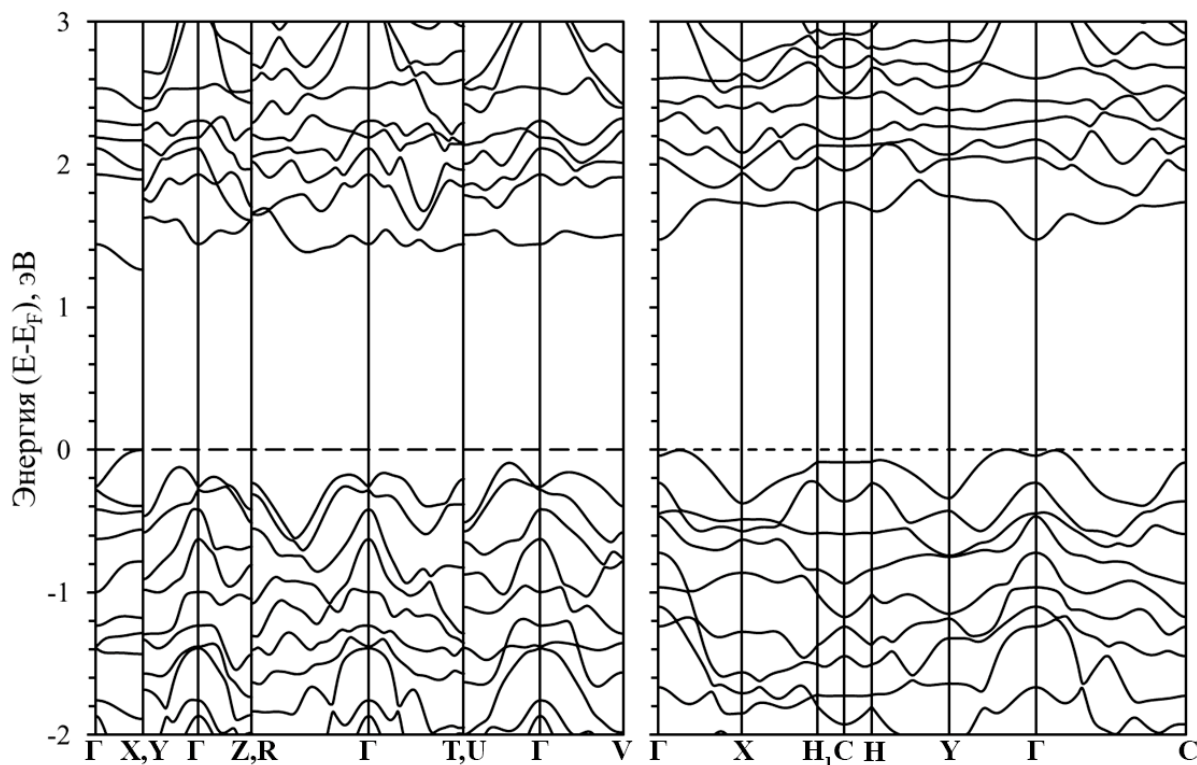


Рис. 1. Зонная структура трехмерного (слева) и двумерного (справа)  $\text{ReS}_2$ .

**Заключение.** Методами из первых принципов в приближении локальной плотности исследована зонная структура объемного и двумерного дисульфида рения триклинной сингонии. Показано, что понижение размерности сопровождается увеличением ширины запрещенной зоны, что, в целом, характерно для слоистых ДТМ, однако в отличие от ДТМ гексагональной сингонии в случае триклинного  $\text{ReS}_2$  происходит изменение типа первого перехода с прямого на непрямой с уширением запрещенной зоны на 0,18 эВ до 1,44 эВ. Дисперсия электронов в валентной зоне и зоне проводимости при переходе к двумерному состоянию несколько уменьшается, хотя типичная ширина зон 0,3 – 0,5 эВ сохраняется. Такое поведение может быть обусловлено низкосимметричной ячейкой  $\text{ReS}_2$ , а учитывая сложную многодолинную зонную структуру, можно предполагать наличие сильной анизотропии электрофизических свойств у  $\text{ReS}_2$  как в объемном состоянии, так и в двумерном состоянии.

#### Литература.

1. Wu F., Tian H., Shen Y., Hou Z., Ren J., Gou G., Sun Y., Yang Y., Ren T.-L. / Vertical  $\text{MoS}_2$  transistors with sub-1-nm gate lengths // *Nature*. – 2022. – Vol. 603. – P. 259–264.
2. Rahman M., Davey K., Qiao S.-Z. / Advent of 2D Rhenium Disulfide ( $\text{ReS}_2$ ): Fundamentals to Applications // *Adv. Func. Mater.* – 2017. – Vol. 27. – P. 1606129.
3. Ozaki T. / Variationally optimized atomic orbitals for large-scale electronic structures // *Phys. Rev. B*. – 2003. – Vol. 67. – P. 155108.
4. Ozaki T., Kino H. / Numerical atomic basis orbitals from H to Kr / *Phys. Rev. B*. – 2004. – Vol. 67. – P. 195113.
5. Ozaki T., Kino H. / Efficient projector expansion for the ab initio LCAO method / *Phys. Rev. B*. – 2005. – Vol. 72. – P. 045121.

# Electromagnetic properties of carbon fibre-based composites in the microwave range

I. Korobov, E. Prohorov, N. Sidoryk, A. Arlouski, D. Bychanok

*Research Institute for Nuclear Problems Belarusian State University, Minsk, Belarus*  
*E-mail: ianbelarus@gmail.com*

**Introduction.** A large number of works are devoted to the study of the electromagnetic properties of composite materials based on various forms of carbon inside the polymer matrix. Carbon fibres are the most useful carbon filler widely used for practical applications related to the design of microwave devices, solution of electromagnetic compatibility problems, design of electromagnetic shielding surfaces, microwave absorption, etc. [1] In the present work, we study both theoretically and experimentally how parameters of carbon fibres (shape, conductivity, volume concentration, etc.) are related to the effective electromagnetic characteristics of composite (complex dielectric permittivity  $\epsilon = \epsilon' - i\epsilon''$ ) in the frequency range 8-12 GHz.

**Effective permittivity model.** Consider a mixture with dielectric background material of permittivity  $\epsilon_m$  containing ellipsoidal inclusions with semiaxes  $a$ ,  $b$ ,  $c$ , and assume that the volume fraction of the ellipsoids is  $n$ . If these ellipsoids are randomly distributed in all directions, then the effective permittivity of the mixture is given by the Maxwell-Garnett formula generalized for ellipsoidal inclusion [2, 3]

$$\epsilon_{\text{eff}} = \epsilon_m + \frac{\frac{1}{3} \sum_{i=a,b,c} n \alpha_i / V}{1 - \frac{1}{3} \sum_{i=a,b,c} N_i \frac{n \alpha_i / V}{\epsilon_m}}, \quad (1)$$

where  $V$  is the volume of the ellipsoid,  $\alpha_i$  is the polarizability of the scatterer along the respective axis of the ellipsoid, and  $N_i$  is the corresponding depolarization factor. The polarizability of conductive ellipsoid immersed in a media with dielectric permittivity  $\epsilon_m$

$$\alpha_i = \frac{4\pi abc}{3} \frac{\epsilon_m \left(1 - \frac{i\sigma}{2\pi\nu\epsilon_0} - \epsilon_m\right)}{\epsilon_m + N_i \left(1 - \frac{i\sigma}{2\pi\nu\epsilon_0} - \epsilon_m\right)}, \quad (2)$$

and the depolarization factors are

$$N_i = \frac{abc}{2} \int_0^\infty \frac{ds}{(s+i^2)\sqrt{(s+a^2)(s+b^2)(s+c^2)}}. \quad (3)$$

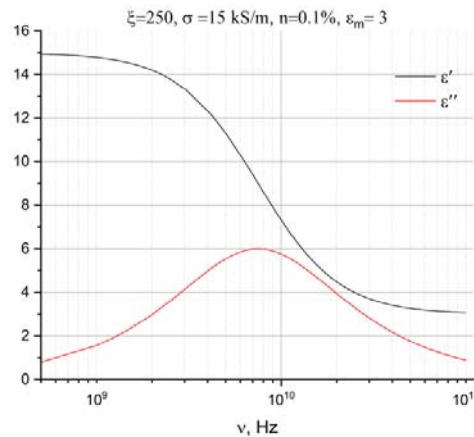


Fig. 1.  $\epsilon_{\text{eff}}$  typical frequency dependence ( $\xi=250$ ,  $\sigma=15$  kS/m,  $n=0.1\%$ ,  $\epsilon_m=3$ ).

If we have an ellipsoid of revolution with the major axis  $a$ , then the integral in (3) can be expressed in a closed-form

$$N_a = \frac{1}{1 - \left(\frac{a}{b}\right)^2} + \frac{\frac{a}{b} \operatorname{arch} \frac{a}{b}}{\left(\left(\frac{a}{b}\right)^2 - 1\right)^{3/2}}, \quad (4)$$

$$N_b = N_c = -\frac{1}{2} \left( \frac{\left(\frac{a}{b}\right)^2}{1 - \left(\frac{a}{b}\right)^2} + \frac{\frac{a}{b} \operatorname{arch} \frac{a}{b}}{\left(\left(\frac{a}{b}\right)^2 - 1\right)^{3/2}} \right). \quad (5)$$

So, we can see that  $\varepsilon_{\text{eff}}$  depends on several factors:  $\varepsilon_m$ , the aspect ratio of ellipsoid's axes, the concentration of ellipsoids, their conductivity, and the frequency of the electromagnetic field. Typical frequency dependence of dielectric permittivity (1) for composite ( $\xi=250$ ,  $\sigma=15\,000$  S/m,  $n=0.1\%$ ,  $\varepsilon_m=3$ ) is shown in figure 1, where  $\varepsilon=\varepsilon'-i\varepsilon''$ .

**Preparing of the samples.** The commercially available carbon fibres Ural N/100 (produced by "SvetlogorskKhimvolokno" www.sohim.by) were used as fillers for the fabrication of epoxy resin composite materials. The diameter of elementary fibre was 5 microns, with the average length about 1 mm. The typical SEM images of used CF (carbon fibres) are presented in figure 2.

Composites based on ANATERM-205 epoxy resin containing 0.05-0.2 vol % of carbon flock were prepared using the technique described in detail in [1]. Carbon flock first was dispersed in epoxy resin using an ultrasonic treatment for 5 min. Then hardener was added to the mixture of resin and carbon flock. After manual stirring for 5 min, the composite was poured into molds. The solidification of samples took 16 h at room temperature, after which the composites were kept for 3 h in an oven at 80°C for final polymerization. After the final polymerization, the composite samples were extracted from the molds, polished, and subjected to milling to obtain samples in the form of cuboids with a cross-section of 23x10mm for further microwave measurements inside the waveguide cell.

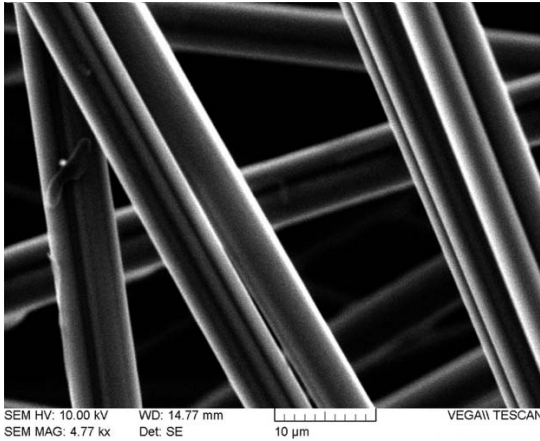


Fig. 2 (a). SEM-images of carbon fibres.

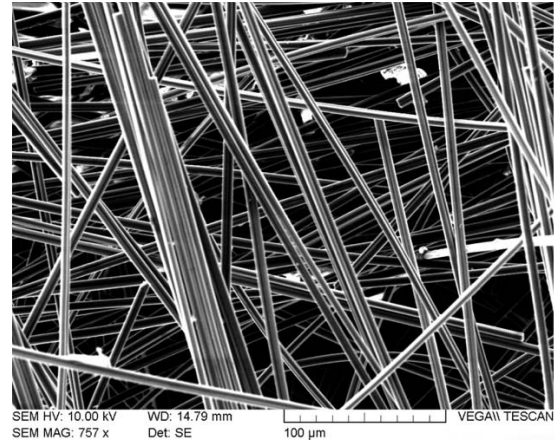


Fig. 2 (b). SEM-images of carbon fibres.

**Measurements.** The methods of broadband dielectric spectroscopy were used for the characterization of electromagnetic characteristics of obtained composites in the microwave range. The samples were put into a rectangular 23x10mm waveguide, and complex elements of the scattering matrix (S-parameters) were measured using the vector network analyzer MICRAN P4M. Using experimental data of S-parameters the complex dielectric permittivity was calculated in the 8-12 GHz range using equations [4], which were realized within the EM-Calculator project [5].

**Results and conclusions.** It was necessary to determine fibre conductivity to calculate effective dielectric permittivity and compare it with the measured one. This was done by measuring several samples with different CF concentrations and fitting one of the measurements to theory by varying conductivity. It was determined  $\sigma=20$  kS/m for the fibre. Results are shown in figures 3-5.

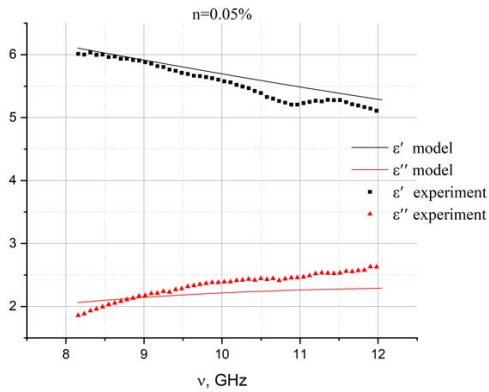


Fig. 3.  $\epsilon_{\text{eff}}$  frequency dependence for the sample with  $n = 0.05\%$ .

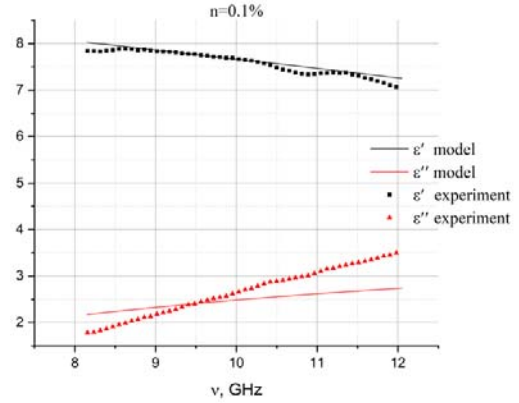


Fig. 4.  $\epsilon_{\text{eff}}$  frequency dependence for the sample with  $n = 0.1\%$ .

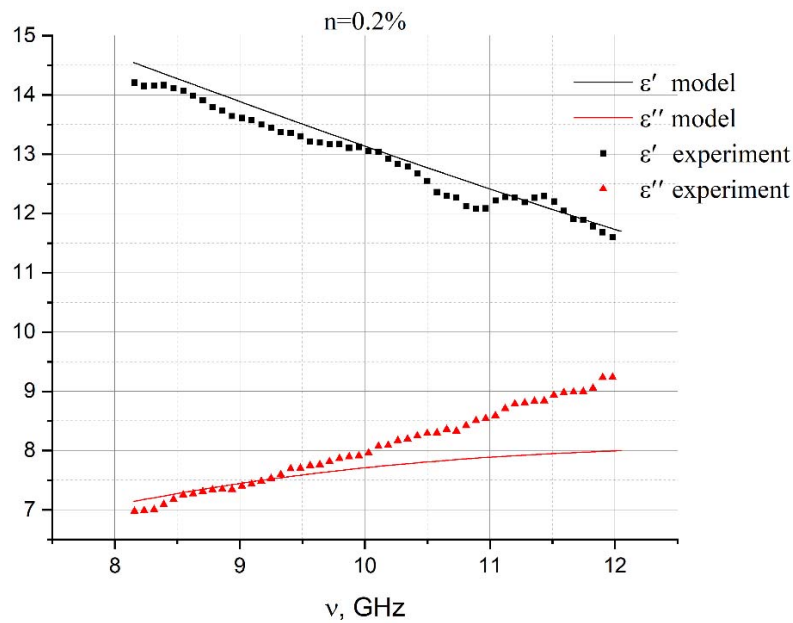


Fig. 5.  $\epsilon_{\text{eff}}$  frequency dependence for the sample with  $n = 0.2\%$ .

From figure 3 one can see that all studied composites demonstrate similar frequency behaviour of the complex dielectric permittivity:  $\text{Re}(\epsilon)$  is generally decreasing and  $\text{Im}(\epsilon)$  is increasing with frequency. This type of spectra is typical composites with conductive filler content below the percolation threshold. Also, both components are increasing when the CF content is increasing. The experimental data are in good consideration with the results of modelling. Nevertheless, in each case aspect ratio of ellipsoids was slightly varied to model fit the experiment. The possible reason is the change of CF size distribution inside the after milling of the sample from the bulk composite. This causes a decrease in the effective average aspect

ratio of CF inside the sample. The obtained effective conductivity of about 20 kS/m is close to the expected value. Additionally, for all studied samples the loss tangent is high (about 0.4) and increases with frequency.

The good agreement between experimental and theoretical data allows producing composite materials with controlled electromagnetic characteristics in 8-12 GHz. The studied composites demonstrate great potential for applications related to effective absorption of electromagnetic radiation in the microwave range.

### References.

1. Быченко, Д. С., Плющ, А. О., Горохов, Г. В., Быченко, В. С., Кужир, П. П., & Максименко, С. А. (2016). Поглотители СВЧ излучения на основе гофрированных композитов с углеродными волокнами. *Журнал технической физики*, 86(12), 124.
2. Priou, A. (Ed.). (1992). *Dielectric properties of heterogeneous materials*. Elsevier Science Limited.
3. D Bychanok, P Angelova, A Paddubskaya, D Meisak, L Shashkova, M Demidenko, A Plyushch, E Ivanov, R Krastev, R Kotsilkova, F Y Ogrin and P Kuzhir “Terahertz absorption in graphite nanoplatelets/polylactic acid composites” *Journal of Physics D: Applied Physics*, Vol. 51(14), p.145307, 2018, doi: 10.1088/1361-6463/aab1a5
4. Baker-Jarvis, J., Vanzura, E. J., & Kissick, W. A. (1990). Improved technique for determining complex permittivity with the transmission/reflection method. *IEEE Transactions on microwave theory and techniques*, 38(8), 1096-1103.
5. EM-Calculator, Online calculator of complex dielectric permittivity and magnetic permeability in microwaves, (2022) <http://www.em-calculator.com/>.

## **Электромагнитные свойства боросиликатных стекол в микроволновом, терагерцовом и оптическом диапазонах**

А. В. Орловский <sup>a</sup>, И. А. Галимский <sup>a</sup>, Д. С. Быченко <sup>a</sup>, М. В. Дяденко <sup>b</sup>,  
А. Г. Сидоревич <sup>b</sup>

<sup>a</sup>Научно-исследовательский институт Ядерных проблем Белорусского  
государственного университета, Минск, Беларусь

<sup>b</sup>Белорусский государственный технологический университет, Минск, Беларусь  
E-mail: [aleks-bel-2011@mail.ru](mailto:aleks-bel-2011@mail.ru)

**Введение.** Боросиликатные стекла представляют собой широко распространенный класс стекол с кремнеземом и триоксидом бора в качестве основных стеклообразующих компонентов. Важнейшей особенностью боросиликатных стекол является очень низкий коэффициент теплового расширения, что делает их гораздо более устойчивыми к тепловому удару и позволяет выдерживать существенные перепады температур без разрушения [1].

В работах [2-3] показано, что введение различных добавок в состав боросиликатных стекол позволяет существенно варьировать их физические характеристики. Тем не менее, большинство комплексных исследований боросиликатных стекол с различного рода добавками сфокусировано на изучении их оптических и механических характеристик.

Широкополосные исследования электромагнитных свойств боросиликатных стекол довольно редко встречаются в литературе и представляют большой практический интерес для применений стекол в составе высокочастотных устройств.

Электромагнитные свойства боросиликатных стекол также представляют большой интерес, если рассматривать их в качестве матрицы для разработки термически стабильных и механически прочных радиопоглощающих композиционных материалов.

**Синтез стекол.** На первом этапе работы в состав шихты для приготовления стекла вводились добавки Se, CuO и ZnO в количестве 1-5% (по массе). Синтез опытных стекол осуществляли в фарфоровых тиглях при температуре  $1475 \pm 25$  °C в газовой пламенной печи периодического действия. Скорость подъема температуры составляла 250 °C/ч с выдержкой при максимальной температуре 1 ч. Подъем температуры в печи контролировали термопарой градуировки ТПП, точность измерения которой составляла  $\pm 5$  °C. При достижении однородности стекломассы тигли со стекломассой извлекали из печи и осуществляли формование изделий отливкой в формы. После выработки образцы толщиной 7–10 мм подвергались отжигу в муфельной печи марки SNOL 6,7/1100 при температуре  $560 \pm 5$  °C с выдержкой при максимальной температуре в течение 1 ч.

После окончания синтеза стекла подвергались полировке, после чего из них вырезались образцы в виде прямоугольных параллелепипедов размерами 16x8x1мм для дальнейших исследований методами широкополосной диэлектрической спектроскопии.

**Свойства боросиликатных стекол в микроволновом диапазоне.** Электромагнитные свойства боросиликатных стекол в диапазоне частот 12-18 ГГц исследовались при помощи векторного анализатора цепей МИКРАН Р4М-18. Образцы помещались в прямоугольный волновод сечением 16x8 мм, после чего проводились измерения комплексных элементов матрицы рассеяния (S-параметров) с помощью векторного анализатора цепей. На основе полученных экспериментальных данных была рассчитана комплексная диэлектрическая проницаемость  $\epsilon$  стекол в диапазоне 8-12 ГГц по уравнениям из [3] с помощью проекта EM-Calculator [4].



На рисунке 1 представлены результаты расчетов  $\epsilon$  исследуемых образцов. Сколь угодно заметная зависимость комплексной диэлектрической проницаемости от концентрации вводимых добавок наблюдается лишь для селена; для оксида меди действительная и мнимая части во всем диапазоне приблизительно составляют соответственно 5.2 и 0.5, а для оксида цинка - 5.5 и 0.4. Также для всех образцов в данном диапазоне не наблюдается явно выраженной дисперсии.

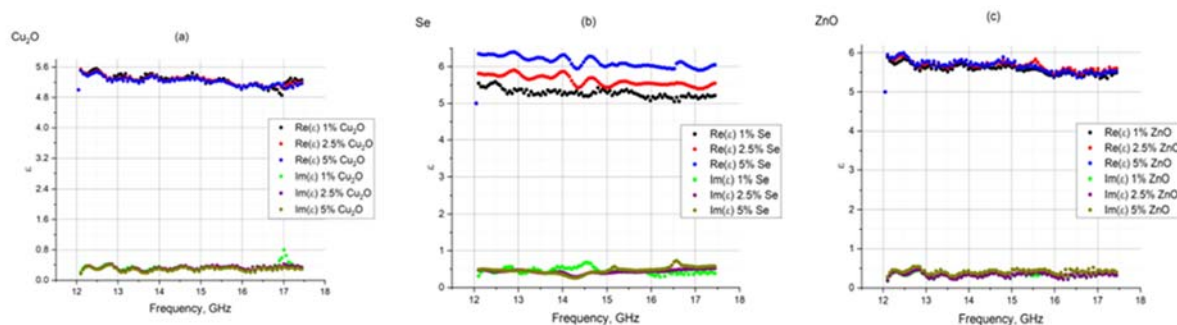


Рис. 1. Значения действительной и мнимой частей диэлектрической проницаемостей для различных концентраций (а) оксида меди, (б) селена и (с) оксида цинка.

**Свойства боросиликатных стекол в терагерцовом диапазоне.** Свойства боросиликатных стекол в диапазоне 200-1000 ГГц исследовались при помощи терагерцового спектрометра T-Spec (EKSPLA). Результаты расчетов комплексной диэлектрической проницаемости на основе экспериментальных значений комплексного коэффициента прохождения представлены на рисунке 2.

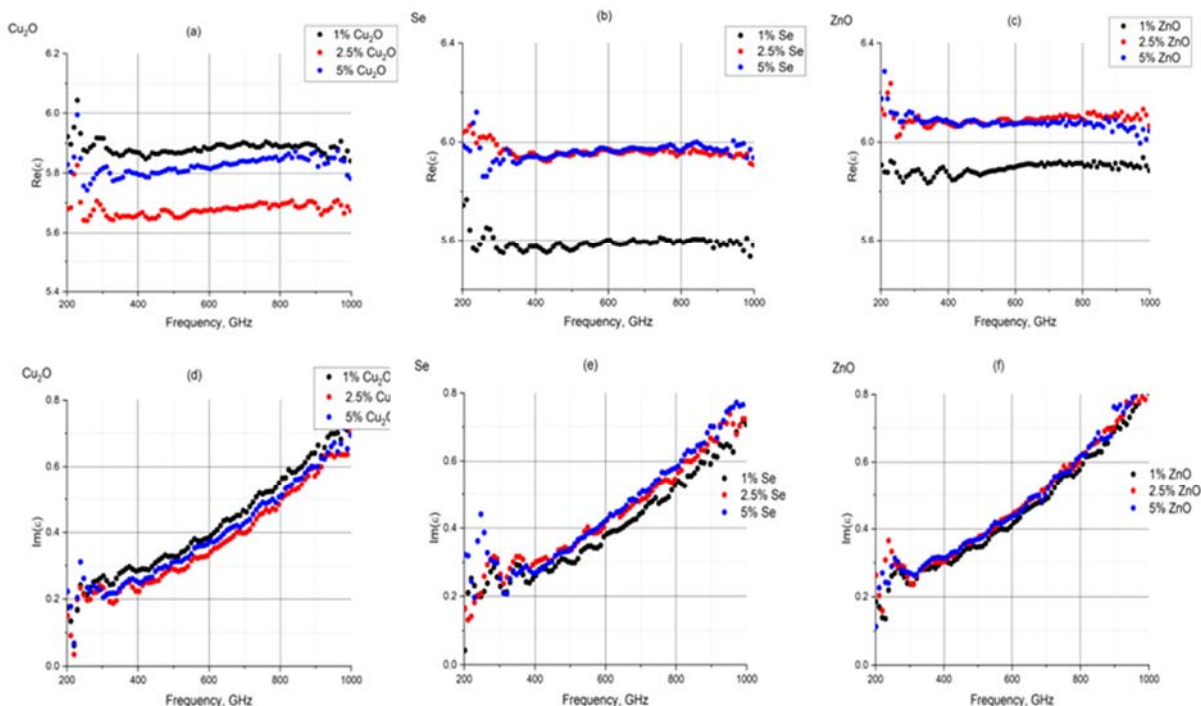


Рис. 2. Действительная часть диэлектрической проницаемости в зависимости от концентрации оксида меди (а), селена (б) и оксида цинка (с); мнимая часть диэлектрической проницаемости при разных концентрациях оксида меди (d), селена (е) и оксида цинка (f).



Анализ зависимостей на рисунке 2 показывает, что в терагерцовом диапазоне мнимая часть диэлектрической проницаемости растет для всех образцов, причем при различных концентрациях добавок имеет приблизительно одно и то же значение, из чего можно сделать вывод о независимости мнимой части  $\epsilon$  от концентрации вводимых добавок в хорошем приближении.

Действительная же часть меняется хоть и более выражено, чем мнимая, но большого разброса также не наблюдается. В терагерцовой области зависимость от концентрации примесей в исследуемых образцах гораздо более выражена по сравнению с микроволновым диапазоном частот. При этом для образцов с добавлением селена и оксида цинка действительная часть возрастает с увеличением концентрации.

**Свойства боросиликатных стекол в оптическом диапазоне.** Зависимость коэффициента оптического пропускания от длины волны для образцов боросиликатных стекол исследовалась в оптическом диапазоне при помощи спектрофотометра Solar PB 2201. Как видно из рисунка 3, для образцов с добавлением селена и оксида цинка пропускная способность возрастает с увеличением концентрации, а для образцов с добавлением оксида меди – наоборот падает. Кроме того, для образцов с добавлением оксида меди наблюдается пик усиленного пропускания при длине волны около 500 нм.

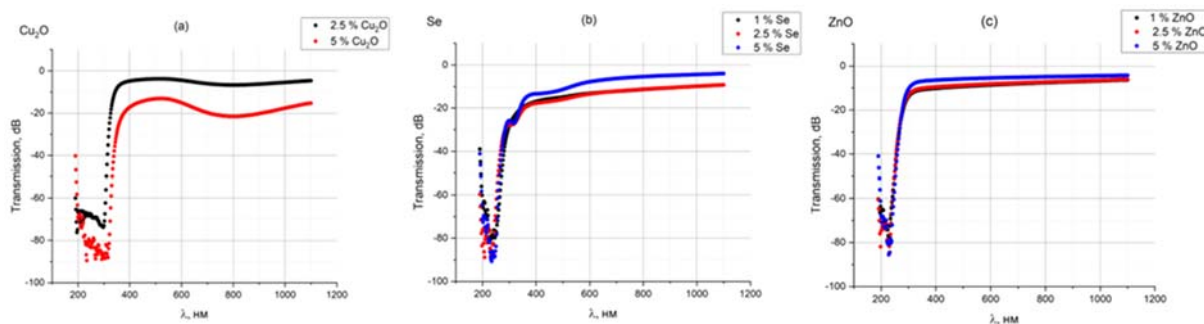


Рис. 3. Зависимость коэффициента оптического пропускания от концентрации оксида меди (а), селена (b) и оксида цинка (с)

**Заключение.** В данной работе были измерены параметры боросиликатных стекол с различными добавками в микроволновом, терагерцовом и оптическом диапазонах. Анализ полученных данных показывает, что в исследуемых образцах наблюдается существенный рост потерь на затухание с увеличением частоты падающей электромагнитной волны. В диапазоне частот 8-12 ГГц исследуемые образцы имеют очень близкие электромагнитные характеристики. Вещественная часть комплексной диэлектрической проницаемости принимает значения около 5, а мнимая близка к нулю. При переходе в терагерцовый диапазон частот у всех исследуемых образцов наблюдается существенный рост мнимой части комплексной диэлектрической проницаемости, что приводит к увеличению затухания при прохождении электромагнитных волн через исследуемые образцы. В оптическом диапазоне частот образцы имеют различную окраску и при этом наблюдается существенная зависимость коэффициента пропускания от длины волны. При этом для образцов с добавлением оксида цинка и селена коэффициент пропускания возрастает с ростом количества примесей.

Исследуемые образцы отличаются малой диссипацией энергии в СВЧ-диапазоне. Данная особенность позволяет рассматривать боросиликатные стекла в качестве материала для элементов СВЧ-соединений. Совокупность структурных и электромагнитных характеристик стекол определяет возможность их использования также в качестве термостойких прозрачных окон для вывода СВЧ-излучения в свободное пространство.

### **Литература.**

1. Manara, D., A. Grandjean, and D. R. Neuville. "Structure of borosilicate glasses and melts: a revision of the Yun, Bray and Dell model." *Journal of Non-Crystalline Solids* 355.50-51 (2009): 2528-2531.
2. Khanna A., Saini A., Chen B., González F., Ortiz B. Structural characterization of PbO–B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>–SiO<sub>2</sub> glasses. *Phys. Chem. Glasses: Eur. J. Glass Sci. Technol. B.* 2014. V. 55. N 2. P. 65–73.
3. Lima M., Monteiro R.C.C., Graça M.P.F., Ferreira da Silva M.G. Structural, electrical and thermal properties of borosilicate glass-alumina composites. *Journal of alloys and compounds.* 2012. V. 538. P. 66-72. DOI: 10.1016/j.jallcom.2012.05. 024.
4. EM-Calculator, Online calculator of complex dielectric permittivity and magnetic permeability in microwaves, (2022) <http://www.em-calculator.com/>.

## Исследование фотолюминесцентных свойств ионно-синтезированных нановключений оксида галлия

Д. С. Королев<sup>a</sup>, К. С. Матюнина<sup>a</sup>, А. А. Никольская<sup>a</sup>, Р. Н. Крюков<sup>a</sup>, А. И. Белов<sup>a</sup>,  
А. Н. Михайлов<sup>a</sup>, А. В. Нежданов<sup>a</sup>, А. А. Сушков<sup>a</sup>, Д. А. Павлов<sup>a</sup>, П. А. Юнин<sup>a,b</sup>,  
Д. И. Тетельбаум<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия

<sup>b</sup> Институт физики микроструктур – филиал ФИЦ Институт прикладной  
физики РАН, Нижний Новгород, Россия  
E-mail: dmkorolev@phys.unn.ru

**Введение.** Исследование широкозонных полупроводников привлекает внимание благодаря перспективам их использования в устройствах силовой электроники, а также при создании газовых сенсоров. В последнее время набирает популярность изучение оксида галлия – широкозонного полупроводника, который может существовать в различных полиморфных модификациях, отличающихся по своим физическим свойствам. Наиболее изученной является  $\beta$ -фаза  $\text{Ga}_2\text{O}_3$  с шириной запрещенной зоны  $\sim 4,7\text{-}4,9$  эВ. Для таких материалов продемонстрирована возможность создания эффективных газовых сенсоров, а также «солнечно-слепых» фотодетекторов УФ-диапазона. Однако широкое применение оксида галлия ограничено по причине высокой стоимости монокристаллических подложек, а также сложностью получения высококачественных тонкопленочных структур. В данной работе предлагается новый метод получения материалов на основе оксида галлия, а именно – ионно-лучевой синтез нановключений  $\text{Ga}_2\text{O}_3$  в диэлектрической матрице. Приводятся результаты исследования состава, структуры и люминесцентных свойств синтезированных образцов.

**Методика эксперимента.** В качестве исходных образцов использовались пластины кремния КЭФ-4,5 (100), на которые методом электронно-лучевого испарения осаждались пленки  $\text{SiO}_2$  и  $\text{Al}_2\text{O}_3$ . На первом этапе ионного синтеза образцы облучались ионами  $\text{Ga}^+$  (80 кэВ,  $5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$ ) и  $\text{O}^+$  (23 кэВ,  $6 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$ ) с вариацией порядка имплантации. Второй этап представлял собой отжиг облученных образцов. Образцы отжигались в трубчатой печи последовательно при температурах 300, 500, 700 и 900 °С (по 30 мин) в атмосфере осушенного азота. Исследование образцов проводилось методами спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС), фотолюминесценции (ФЛ), рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС), рентгеновской дифракции (РД) и просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ).

**Результаты и их обсуждение.** Для определения состава имплантированных образцов использовался метод РФЭС, совмещенный с ионным травлением, который позволяет изучать распределение внедренных атомов, а также связанных с ними химических связей, по глубине. Рассмотрим поведение имплантированных атомов в пленках  $\text{SiO}_2/\text{Si}$  и  $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Si}$ . Исследование состава выявило интересную закономерность – наряду с наличием металлического галлия (связей Ga-Ga), образуются связи Ga-O, притом это происходит даже в отсутствие отжига. В случае матрицы  $\text{SiO}_2/\text{Si}$  образование оксидных связей происходит даже в отсутствие дополнительной имплантации кислорода. Другой интересной особенностью является разделение профилей металлического и окисленного галлия, причем металлический галлий оказывается ближе к поверхности, тогда как максимум профиля окисленного галлия располагается вблизи расчетного максимума распределения ионов. В матрице  $\text{Al}_2\text{O}_3$  образование связей Ga-O

происходит только в случае дополнительного облучения ионами кислорода, и разделение профилей наблюдается только в случае имплантации  $\text{Ga}^+$  после имплантации  $\text{O}^+$ . Также в матрице  $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Si}$  наблюдается значительно меньшая концентрация галлия в имплантированном слое.

Перейдем к рассмотрению результатов, полученных методом КРС. Исходные образцы без отжига содержали в спектрах КРС только линии, связанные с подложкой кремния. Отжиг при температуре  $300\text{ }^\circ\text{C}$  не привел к каким-либо изменениям, тогда как повышение температуры отжига до  $500\text{ }^\circ\text{C}$  привело к появлению новых пиков для некоторых вариантов структур. Интенсивность этих пиков очень мала и не позволяет однозначно идентифицировать появление новой фазы. Увеличение температуры отжига до  $700$  и  $900\text{ }^\circ\text{C}$  существенно не изменило наблюдаемую картину. Это может объясняться тем, что формируемые включения содержат дефекты, вносящие вклад в поглощение, а также тем, что объемная доля формируемых включений достаточно низка и не вносит существенного вклада в результирующий сигнал КРС. Методом РД также было обнаружено появление слабых пиков для образцов после отжига при  $900\text{ }^\circ\text{C}$ , однако однозначно выявить их природу затруднительно.

Исследование спектров ФЛ выявило появление новых линий в области  $410\text{-}420\text{ нм}$ , обусловленных рекомбинацией донорно-акцепторных пар в оксиде галлия, которые связаны с наличием вакансий  $\text{O}$  и  $\text{Ga}$ . Появление пика в области  $500\text{-}550\text{ нм}$  может быть связано с рекомбинацией на локализованных дефектных состояниях, вносящих дополнительные уровни в запрещенную зону. Увеличение температуры отжига приводит к увеличению интенсивности ФЛ с максимумом при  $\sim 480\text{ нм}$ , при отжиге при  $900\text{ }^\circ\text{C}$  интенсивность этой линии максимальна (рисунок 1). Стоит отметить, что в случае матрицы  $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Si}$  люминесценция практически не наблюдается.

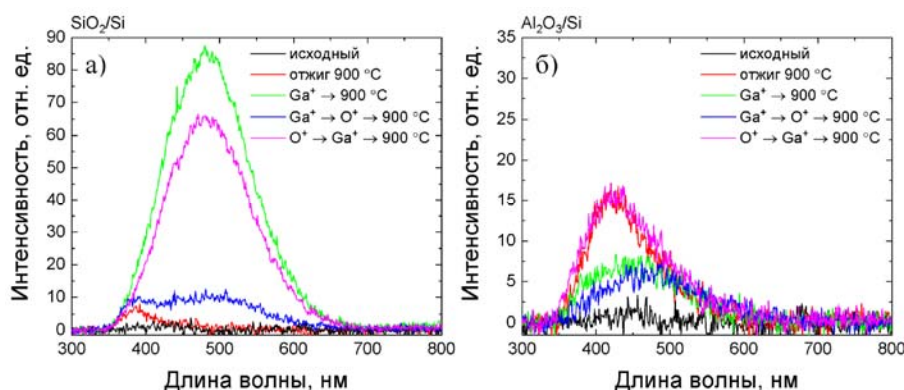


Рис. 1. Спектры ФЛ облученных структур  $\text{SiO}_2/\text{Si}$  (а) и  $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Si}$  (б) после отжига при  $900\text{ }^\circ\text{C}$

Исследование поперечного среза структуры  $\text{SiO}_2/\text{Si}$ , облученной ионами  $\text{Ga}^+$ ,  $\text{O}^+$  и отожженной при  $900\text{ }^\circ\text{C}$  методом ПЭМ выявило формирование нановключений оксида галлия в имплантированном слое.

**Заключение.** Продемонстрирована возможность ионного синтеза нановключений оксида галлия, обладающих люминесценцией в видимой части спектра. Показано, что структура и светоизлучающие свойства образцов существенно зависят от условий синтеза.

**Благодарности.** Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-79-10233, <https://rscf.ru/project/21-79-10233/>. Исследования рентгеновской дифракции образцов выполнялись в лаборатории диагностики радиационных дефектов в твердых наноструктурах ИФМ РАН при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (г/з № 0030-2021-0030).

# Влияние легирующего иона на кристаллическую структуру замещенного иттрий-алюминиевого граната, получаемого золь-гель методом

Л. С. Хорошко <sup>a,b</sup>, А. В. Баглов <sup>a,b</sup>, В. А. Яковчук <sup>a</sup>

<sup>a</sup> Белорусский государственный университет, 220030 Минск, Беларусь

<sup>b</sup> Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, 220013 Минск, Беларусь

E-mail: l.s.khoroshko@gmail.com

**Введение.** Материалы, легированные лантаноидами, стабильно удерживают интерес исследователей в течение последних десятилетий. Ионы лантаноидов, встраиваясь в различные кристаллические окружения, демонстрируют интенсивную люминесценцию в широком диапазоне длин волн, что является перспективным для широкого ряда практических применений [1]. Наноструктурированные люминесцентные материалы в виде пленок и порошков различного состава, варьируемого в широком диапазоне, могут быть получены с использованием золь-гель технологии. Золь-гель технология прочно удерживает внимание исследователей благодаря своей гибкости, вариативности, возможности управляемого синтеза. Температуры формирования искомым фаз материала из золь, как правило, значительно ниже, чем для более традиционных методик твердофазного синтеза. Так для иттрий-алюминиевых композитов температура формирования фазы граната составляет 800–1000 °С для золь-гель метода против 1400–1800 °С для твердофазного синтеза [2]. В данной работе исследовано влияние замещения атома иттрия атомами лантаноидов эрбия и иттербия на кристаллическую решетку иттрий-алюминиевого граната, получаемого золь-гель методом.

**Материалы и методы.** Для получения золь иттрий-алюминиевого граната, легированного эрбием и иттербием, использовали метод цитратного геля (нитрат-цитратный метод). В качестве исходных компонентов использовали нитраты иттрия и алюминия и нитраты лантаноидов, в качестве комплексообразователя – лимонную кислоту, как подробно описано в [3]. Для оценки влияния замещающего иона на кристаллическую структуру приготовили порошки с соотношением 2:1 основного катиона  $Y^{2+}$  и заместителей  $Er^{2+}$  и  $Yb^{2+}$ . Структуру готовых порошков  $Y_2ErAl_5O_{12}$  и  $Y_2Er_{0,5}Yb_{0,5}O_{12}$  исследовали методом рентгеновского дифракционного рассеяния.

**Результаты и обсуждение.** В дифрактограммах обоих полученных порошков основные линии относятся к структуре граната с пространственной группой Ia-3d (рис. 1). На рисунке справочно также нанесены точки, соответствующие положению рефлексов чистого иттрий-алюминиевого граната (ICDD DataBase № 79-1891). Для первичной оценки размера кристаллитов использовали формулу Шеррера, средний размер кристаллитов составил 24,49 и 24,47 нм для легированного Er и солегирированного Er и Yb порошков соответственно. Также на основе дифрактограмм рассчитаны межплоскостные расстояния и параметры элементарной ячейки для обоих порошков, а также оценены среднее значение деформации кристаллической структуры ( $\epsilon$ ) и влияние структуры кристаллитов на уширение линии рентгенограмм, результаты обобщены в табл. 1. Согласно полученным данным, более значительный вклад в уширение пиков дифрактограмм вносит наличие кристаллитов различного размера. Параметр ячейки у обоих порошков близок к значению для нелегированного  $Y_3Al_5O_{12}$  (12,01 Å), при этом оба порошка характеризуются малыми значениями искажения кристаллической структуры, при этом для порошка, солегирированного эрбием и иттербием, эти значения

несколько больше. Таким образом, значительного влияния природы замещающего иона на структуру монофазного порошка, получаемого золь-гель методом, не выявлено.

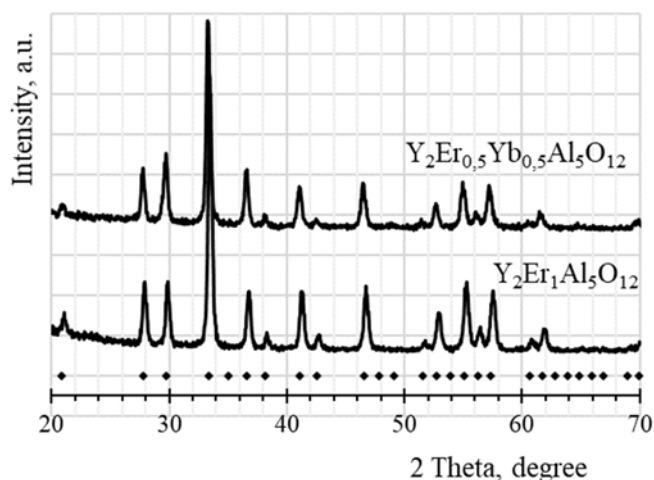


Рис. 1. Дифрактограммы порошков иттрий-алюминиевых гранатов с замещенным иттрием.

Таблица 1. Результаты анализа структуры порошков.

Состав порошка	Средний размер кристаллитов, нм	Параметр элементарной ячейки, Å	$\varepsilon$
$Y_2Er_1Al_5O_{12}$	24,49	11,97	0,00257
$Y_2Er_{0,5}Yb_{0,5}Al_5O_{12}$	24,47	12,03	0,00258

**Заключения.** Исследование структуры монофазных порошков иттрий-алюминиевого граната, полученных золь-гель методом, показывает, что при легировании эрбием и солегировании эрбием и иттербием замещение иттрия в основном соединении происходит без нарушения симметрии основного соединения. С учетом ранее проведенных исследований [3, 4], мы полагаем, что соблюдение стехиометрического соотношения  $Y_{3-x}B_xAl_5O_{12}$ , где **B** – катион-заместитель (ион лантаноида), позволяет методом цитратного геля получать монофазные порошки с кристаллической структурой, близкой к нелегированному соединению.

**Благодарности.** Авторы выражают благодарность старшему научному сотруднику физического факультета БГУ Злоцкому С.В. за помощь в проведении рентгенодифракционного анализа.

#### Литература.

1. D. Kim [et al.] / Recent Advances in Inorganic Nanoparticle-Based NIR Luminescence Imaging: Semiconductor Nanoparticles and Lanthanide Nanoparticles // Bioconjugate Chem. – 2017. – Vol. 28. – P. 115-123.
2. M. Singlard [et al.] / Sol-gel synthesis of yttrium aluminum garnet (YAG): effects of the precursor nature and concentration on the crystallization // J. Sol-Gel Sci. Technol. – 2018. – Vol. 87. – P. 496–503.
3. L. S. Khoroshko [et al.] / Erbium luminescence in  $(Y, Er, Yb)_3Al_5O_{12}$  powders // Journal of Optical Technology. – 2019. – Vol. 86, Iss. 2. – P. 124–128.
4. A. Podhorodecki [et al.] / Ion–ion interaction in two-dimensional nanoporous alumina filled with cubic  $YAlO_3: Tb^{3+}$  matrix // Journal of Physics D: Applied Physic. – 2013. – Vol. 46. – P. 355302.

## Сравнение мощностей апертурно ограниченных лаггерр-гауссовых световых пучков различных порядков

И. В. Балыкин <sup>a</sup>, А. А. Рыжевич <sup>a, b</sup>, А. Г. Мащенко <sup>a</sup>, А. П. Макаревич <sup>a</sup>

<sup>a</sup> Институт физики НАН Беларуси, Минск, Беларусь

<sup>b</sup> Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь

E-mail: tol@dragon.bas-net.by

**Введение.** Благодаря появлению такого универсального инструмента, как пространственный модулятор света [1], стало возможным формирование самых различных конфигураций световых пучков и полей [2]. Большой интерес в плане передачи информации и энергии на расстояние наряду с гауссовыми и бесселевыми вызывают однокольцевые лаггерр-гауссовы световые пучки, обладающие дислокацией волнового фронта  $n$ -го порядка (LG <sub>$n$ 0</sub>, первый индекс – азимутальный) [3]. В настоящей работе проведено сравнение переносимых пучками LG <sub>$n$ 0</sub> мощностей при наложении некоторых ограничений, обусловленных стандартной экспериментальной практикой.

**Сравниваемые конфигурации лаггерр-гауссовых пучков.** Сравнивались мощности, переносимые LG <sub>$n$ 0</sub> при значениях  $n$  от 0 до 9 (рисунок 1). На пучки были наложены следующие практические ограничения: 1) максимальная интенсивность пучка равна заданному верхнему порогу  $I_{\max}$ , 2) интенсивность на границе круглой апертуры диаметром  $D$  равна  $I_{\max} / e^2$ .  $I_{\max}$  соответствует лучевой прочности самого нестойкого из используемых в конструкции установки оптических элементов, интенсивность на границе апертуры зафиксирована на уровне  $I_{\max} / e^2$  во избежание сильного нагрева диафрагмы из-за поглощения ею лазерного излучения и слишком интенсивной дифракции выходного излучения на краю диафрагмы. Дифракционные эффекты начинают заметно сказываться при радиусе диафрагмы в 2 раза меньше радиуса пучка по уровню  $I_{\max} / e^2$  [3, 4]. На рисунке 1 все пучки имеют одинаковый радиус  $w_l$ , определенный по уровню  $I_{\max} / e^2$ .

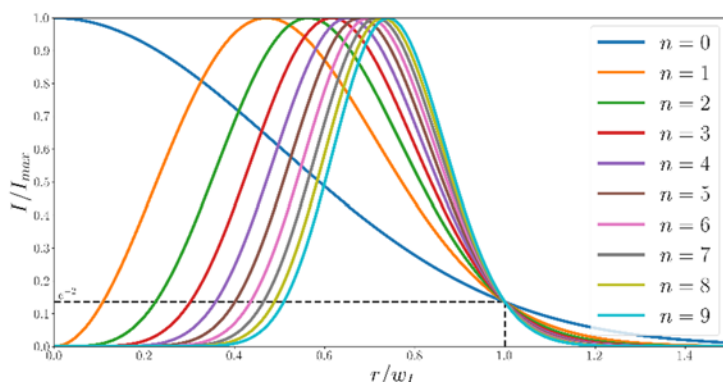


Рис. 1. Радиальные распределения интенсивности в лаггерр-гауссовых пучках различных порядков, обладающих одинаковой максимальной интенсивностью и одинаковой полушириной  $w_l$ .

**Мощность лаггерр-гауссовых световых пучков.** Для сравнения мощностей, переносимых ограниченными лаггерр-гауссовыми пучками, рассчитаны интегралы лаггерр-гауссовых функций в пределах от 0 до  $I_{\max} / e^2$ . На рисунке 2 показана зависимость мощности  $P_n/P_0$ , переносимой пучком LG <sub>$n$ 0</sub> и нормированной на мощность  $P_0$  ограниченного гауссова пучка LG<sub>00</sub>, от порядка  $n$ . Из рисунка 1 видно, что наибольшая мощность проходящего через диафрагму пучка LG <sub>$n$ 0</sub> при данных условиях переносится световым пучком LG<sub>10</sub>. Она превышает мощность ограниченного по уровню



$I_{\max} / e^2$  пучка LG<sub>00</sub> в 1,311 раз. Мощность лаггерр-гауссовых пучков более высоких порядков вплоть до  $n = 10$  также превышает мощность  $P_0$ , однако для  $n \geq 11$  переносимая мощность меньше  $P_0$ .

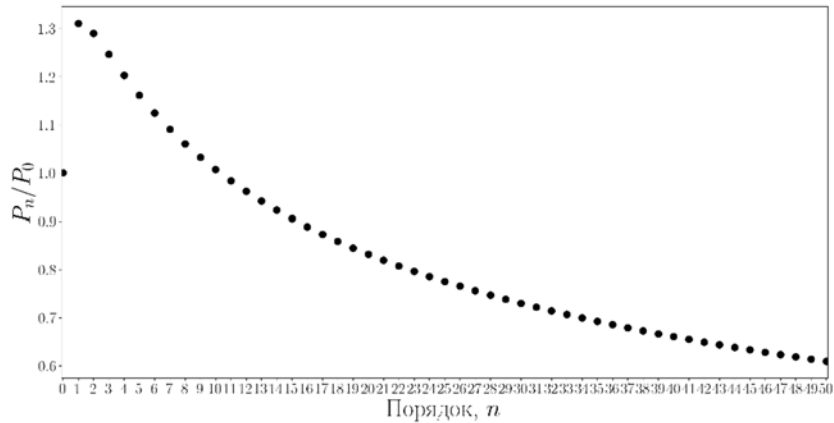


Рис. 2. Зависимость нормированной на мощность ограниченного гауссова пучка мощности пучка LG<sub>n0</sub> от порядка  $n$ .

**Расходимость лаггерр-гауссовых световых пучков.** На рисунке 3 показаны пучки LG<sub>n0</sub> для  $n$  от 1 до 4 с одинаковыми радиусами  $w_0$ . (значение параметра  $w$  пучка в плоскости с продольной координатой  $z = 0$ ).

При одинаковом радиусе  $w_0$  пучки LG<sub>n0</sub> имеют одинаковую дифракционную расходимость  $\theta$  [5-7]. Расходимость пучка в параксиальном приближении:

$$\begin{aligned} \theta &= \lim_{z \rightarrow \infty} \arctan\left(\frac{w(z)}{z}\right) = \lim_{z \rightarrow \infty} \arctan\left(\frac{w_0 \sqrt{1 + (z/z_R)^2}}{z}\right) = \arctan\left(\frac{w_0}{z_R}\right) = \\ &= \arctan\left(\frac{w_0 \lambda}{\pi n_a w_0^2}\right) = \arctan\left(\frac{\lambda}{\pi n_a w_0}\right) \approx \frac{\lambda}{\pi n_a w_0} \end{aligned} \quad (1)$$

У подходящих под оба ограничения пучков LG<sub>n0</sub>, показанных на рисунке 1, радиусы  $w_0$  уменьшаются по сравнению с радиусом  $w_0$  пучка LG<sub>n0</sub> с увеличением  $n$ . Поэтому расходимость LG<sub>n0</sub> увеличивается при увеличении  $n$ . Произведено сравнение значений расходимости световых пучков LG<sub>n0</sub> для  $n$  от 0 до 9. Полученная зависимость расходимости пучков LG<sub>n0</sub> от  $n$  приведена на рис. 4.

Из рисунках 2 и 4 следует, что оптимальным с точки зрения переноса энергии через круглую диафрагму заданного диаметра  $D$  среди рассмотренных LG<sub>n0</sub> пучков является пучок LG<sub>10</sub>.

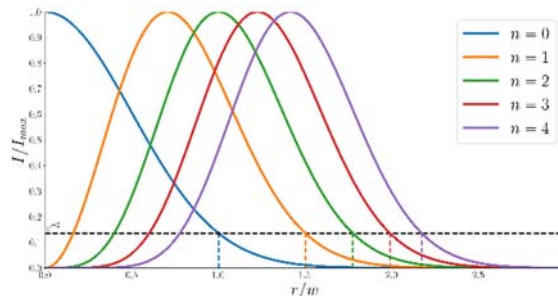


Рис. 3. Распределение интенсивности в пучках LG<sub>n0</sub> с одинаковым радиусом  $w = 1$ .

Поскольку расходимость неограниченного диафрагмой пучка LG<sub>10</sub> превышает расходимость неограниченного диафрагмой пучка LG<sub>00</sub> с таким же радиусом  $w$  в 1,501 раз, можно сделать вывод, что существует некоторая дистанция после ограничивающей диафрагмы, на которой энергия, переносимая пучком LG<sub>10</sub> через круг диаметром  $D$ ,



превышает энергию, переносимую через такой же круг пучком LG<sub>00</sub>.

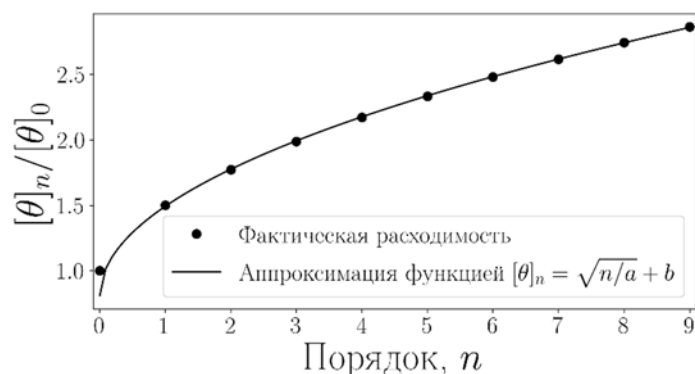


Рис. 4. Зависимость расходимости лаггерр-гауссова пучка LG<sub>n0</sub> от порядка при фиксированной полуширине  $w_l$  (параметры аппроксимации:  $a = 2,14$ ;  $b = 0,81$ ).

При длине волны лазерного излучения 0,633 мкм и  $D = 100$  мм эта дистанция составляет около 5 километров.

**Закключение.** Сравнение мощностей ограниченных круглой диафрагмой лаггерр-гауссовых пучков LG<sub>n0</sub>, где  $1 \leq n \leq 10$  с максимальной мощностью  $I_{\max}$  и минимальной мощностью  $I_{\max} / e^2$  на краю диафрагмы с мощностью ограниченного такой же диафрагмой гауссова пучка LG<sub>00</sub>, показало, что они переносят большую мощность. Преимущество пучков LG<sub>n0</sub> перед гауссовым пучком с точки зрения переноса мощности через диафрагму из-за большей расходимости сохраняется только на протяжении некоторого расстояния. Оптимальным из-за наименьшей расходимости и наибольшей переносимой через диафрагму мощности является пучок LG<sub>10</sub>.

### Литература.

1. Coomber, S. D. Optically addressed spatial light modulators for replaying computer-generated holograms / S. D. Coomber, C. D. Cameron, J. R. Hughes, D. T. Sheerin, C. W. Slinger, M. A. G. Smith, M. Stanley // Proc. SPIE – 2001. – Vol. 4457. – P. 9-19. <https://doi.org/10.1117/12.447756>
2. Zinchik A. A. Application of spatial light modulators for generation of laser beams with a spiral phase distribution / A. A. Zinchik // Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics – 2015. – Vol. 15, №5. – P. 817–824. <https://doi.org/10.17586/2226-1494-2015-15-5-817-824>
3. Testorf M. Phase-Space Optics, Fundamentals and Applications / M. Testorf, B. M. Hennelly, J. Ojeda-Castaneda – New York: McGraw-Hill, 2010. – 416 p.
4. Климков Ю.М. Лазерная техника: Учебное пособие / Ю. М. Климков, М. В. Хорошев – М.: МИИГАиК, 2014. – 143 с.
5. Сизмин Д.В. Регистрация пространственных характеристик лазерного излучения: Учебно-методическое пособие — Издание второе, исправленное и дополненное (1-е изд. 2012 г.). — Саров: СарФТИ, 2015. — 70 с.
6. Солимено С. Дифракция и волноводное распространение оптического излучения: Пер. с англ. / С. Солимено, Б. Крозиньяни, П. Ди Порто — М.: Мир, 1989. — 664 с.
7. Методы измерений ширин, углов расходимости и коэффициентов распространения лазерных пучков: ГОСТ Р ИСО/ТО 11146-3-2008 – М.: Стандартиформ, 2010. – 24 с.

# Эффективность преобразования двусным кристаллом гауссова светового пучка в многокольцевой оптический вихрь

И. В. Балыкин<sup>a</sup>, А. А. Рыжевич<sup>a, b</sup>, Т.А. Железнякова<sup>b</sup>, А. Г. Машенко<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Институт физики НАН Беларуси, Минск, Беларусь

<sup>b</sup> Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь

E-mail: tol@dragon.bas-net.by

**Введение.** Исследованы эффективности преобразования предложенных в [1] метода и оптической схемы формирования из гауссова светового пучка многокольцевых световых пучков (МКСП) с винтовой дислокацией волнового фронта (ВДВФ) с помощью двусного кристалла, ориентированного вдоль бинормали (рисунок 1).

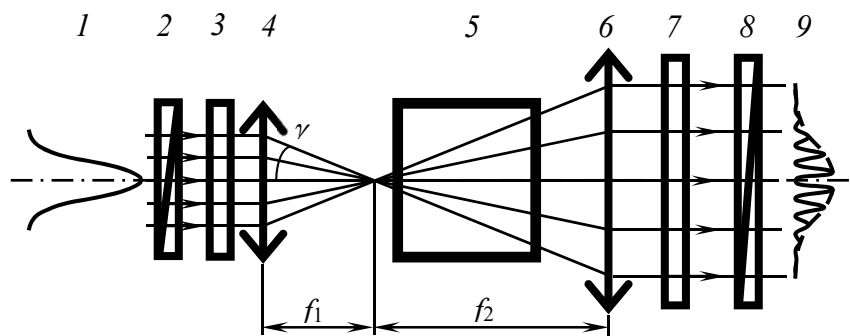


Рис. 1. Схема формирования многокольцевого светового пучка с использованием двусного кристалла (1 – входной гауссов пучок, 2,8 – поляризатор и анализатор, 3,7 – четвертьволновые пластинки, 4, 6 – линзы, формирующие телескоп, 5 – двусный кристалл, 9 – выходное многокольцевое поле)

В зависимости от диаметра входного гауссова пучка, материала кристалла и фокусного расстояния положительной линзы в оптической схеме метода возможно получение МКСП с различным количеством видимых колец. В [2] были найдены оптимальные условия для выделения однокольцевого пучка. В данной работе были поставлены актуальные задачи выбора параметров оптической схемы, обеспечивающих наибольший коэффициент преобразования энергии входящего светового пучка в  $n$  первых колец и в  $n$ -ое кольцо выходного многокольцевого пучка, содержащего ВДВФ (оптический вихрь).

**Эффективность преобразования в  $n$  первых колец и  $n$ -ое кольцо.** Интенсивность поля на выходе схемы с рисунка 1 описывается выражением:

$$I(r) = (f_1 / f_2)^2 I_0((f_2 / f_1)r) \sin^2(2\pi\alpha Lr / \lambda f_1), \quad (1)$$

где  $f_1, f_2$  – фокусные расстояния линз, формирующих телескоп,  $\alpha$  – параметр двусного кристалла,  $L$  – длина кристалла,  $I_0(r)$  – распределение интенсивности во входном поле.

Таким образом, на выходе схемы, представленной на рисунке 1, формируется поле, огибающая которого совпадает по форме со входным, но обладающее модуляцией вдоль радиальной координаты вида  $\sin^2(\pi r / r_1) = (1 - \cos(2\pi r / r_1)) / 2$ , формирующей многокольцевое поле. Обозначим пространственный период этой модуляции как  $r_1 = \lambda f_1 / 2\alpha L$ , в этом случае радиус круговой апертуры, содержащей первые  $n$  колец многокольцевого пучка запишется как  $r_n = nr_1$ . Будем рассматривать гауссов пучок,

полная мощность которого нормирована на единицу. В таком случае интенсивность можно записать как

$$I_0(r) = I_{Gs}(r) \equiv \frac{2}{\pi w^2} \exp\left(-\frac{2r^2}{w^2}\right). \quad (2)$$

Распределение интенсивности на выходе схемы, представленной на рисунке 1, опуская масштабирующий множитель  $f_2/f_1$  (положив  $f_2 = f_1$ ) можно записать как (MR – Multi Ring)

$$I_{MR}(r) = \frac{2}{\pi w^2} \exp\left(-\frac{2r^2}{w^2}\right) \sin^2\left(\frac{\pi r}{r_1}\right). \quad (3)$$

Полную мощность, содержащуюся в первых  $n$  кольцах формируемого многокольцевого пучка, можно записать как

$$P_n \equiv \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{m_1} I_{MR}(r) r dr = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{m_1} \frac{2}{\pi w^2} \exp\left(-\frac{2r^2}{w^2}\right) \sin^2\left(\frac{\pi r}{r_1}\right) r dr. \quad (4)$$

Путем интегрирования по частям и применения известного интеграла [3]

$$\int \exp(-x^2) \sin ax dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \exp\left(-\frac{a^2}{4}\right) \operatorname{Im}\left(\operatorname{erf}\left(x - \frac{ia}{2}\right)\right). \quad (5)$$

Вводя безразмерный параметр, характеризующий отношение полуширины гауссова пучка и периода модуляции  $h = \pi w / \sqrt{2} r_1$ , можно получить

$$P_n(h) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} h \exp(-h^2) \operatorname{Im}\left\{\operatorname{erf}\left(n \frac{\pi}{h} - ih\right) - \operatorname{erf}(-ih)\right\}. \quad (6)$$

Путем изменения параметра  $h$  получена зависимость для суммарной мощности  $n$  колец  $P_n$  (рисунок 2), из которой видно, что наибольшая мощность концентрируется в первых  $n$  кольцах вне зависимости от значения  $n$  при разных, но близких значениях параметра  $h$ , находящихся в диапазоне от 1,480 для одного кольца до 1,540 для бесконечного количества колец.

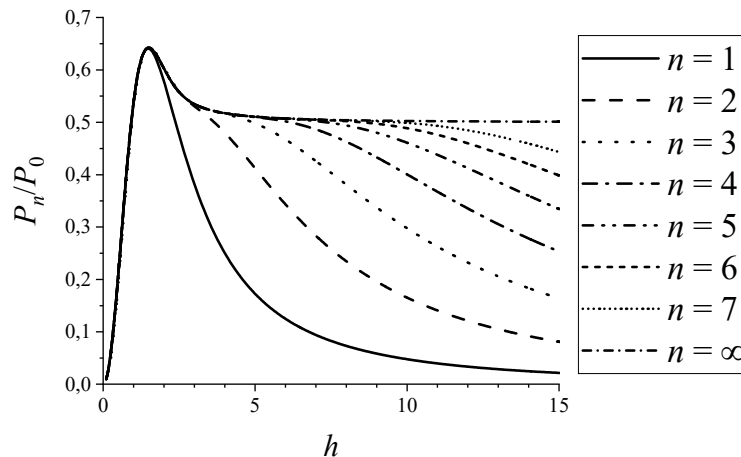


Рис. 2. Зависимость отношения мощности в первых  $n$  кольцах пучка на выходе схемы к полной мощности пучка на входе от параметра  $h$ .

При оптимальных значениях  $h$  во всех случаях выходные поля визуально практически не отличаются от оптимального однокольцевого светового поля, т.к. все кольца, кроме первого, в оптимальной конфигурации имеют очень слабую интенсивность. Максимальная эффективность преобразования в первое кольцо составляет 64,06 %, а при стремлении  $h$  к бесконечности эффективность преобразования стремится к значению 0,5.

**Эффективность преобразования в  $n$ -ое кольцо.** Мощность одного  $n$ -го кольца на выходе схемы, представленной на рисунке 1, описывается выражением  $P_n - P_{n-1}$ . Зависимость величины  $P_n - P_{n-1}$  от параметра  $h$  исследована на оптимум. На рисунке 3а приведена рассчитанная зависимость оптимального параметра  $h$  многокольцевых полей при оптимизации  $n$ -го кольца конкретных колец. На рисунке 3б показано, какая доля мощности от мощности исходного пучка содержится в оптимизированном  $n$ -ом кольце.

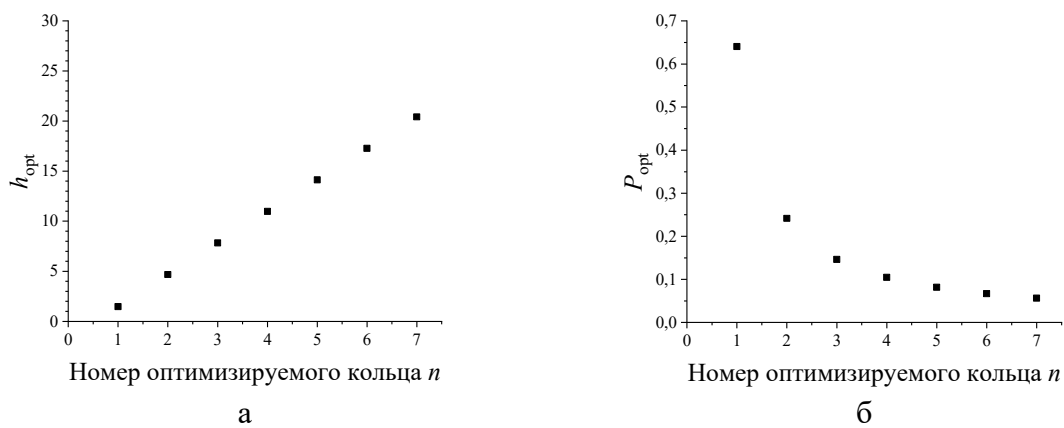


Рис. 3. Зависимость оптимального параметра  $h$  (а) и доли мощности в оптимизированном  $n$ -ом кольце (б) от номера пучка  $n$ .

### Заключение

Полная мощность выходного многокольцевого пучка в схеме преобразования на основе двуосного кристалла зависит от параметра  $h$ , обратно пропорционального пространственному периоду модуляции. Рассчитанные оптимальные условия позволяют с наибольшей эффективностью формировать оптические вихри с энергией, максимально сконцентрированной в заданном количестве колец либо в заданном кольце. Результаты могут быть использованы в топографии для провешивания линий (вешения) вдоль конических направляющих.

### Литература.

1. Рыжевич, А.А. Параметры качества бесселевых световых пучков нулевого порядка / А. А. Рыжевич, И. В. Балыкин, Т. А. Железнякова // ЖПС. – 2018. – Т. 85, № 1. – С. 144–153.
2. Балыкин, И.В. Условия оптимального преобразования гауссова светового пучка в однокольцевой лаггер-гауссов в двуосном кристалле / И. В. Балыкин, Т. А. Железнякова, А. А. Рыжевич // «Современные проблемы физики», Междунар. школа-конф. молодых учёных и специалистов, Минск, 4-6 ноября 2020 г. [сб. тезисов] / под ред. И.С. Никончук, М.С. Усачёнка. – Минск : Институт физики НАН Беларуси, 2020./ – С. 47-48.
3. Прудников, А. П. Интегралы и ряды. В 3 т. Т.1. Элементарные функции / А. П. Прудников, Ю. А. Брычков, О.И. Маричев – М. : «Наука», 1981. – 800 с.

# Выбор спектральных переменных в многопараметрической калибровке концентраций C, Mn, Si, Cr, Ni и Cu в низколегированных сталях методами лазерно-искровой эмиссионной спектроскопии

М. В. Бельков, Д. А. Борисевич, К. Ю. Кацалап, М. А. Ходасевич

*Институт физики НАН Беларуси, Минск, Беларусь  
E-mail: d.borisevich@ifanbel.bas-net.by*

**Введение.** Стали и сплавы на основе железа являются материалами, которые широко распространены практически во всех отраслях деятельности человека и занимают особое место среди объектов применения метода лазерно-искровой эмиссионной спектроскопии (LIBS - laser induced breakdown spectroscopy) [1–3]. С помощью метода LIBS проводится экспрессный анализ состава различных объектов с минимальной пробоподготовкой или совсем без нее, что является существенным преимуществом перед эталонными химическими методами. Содержание в сталях технологических примесей и легирование хромом, марганцем и другими химическими элементами определяют их физические, химические и технологические свойства. Методы количественного анализа для определения концентрации легирующих добавок и технологических примесей актуальны для классификации и сортировки сталей.

**Эксперимент.** Экспериментальная установка и условия измерений эмиссионных спектров низкого разрешения (190–440 нм, разрешение 0.4 нм, шаг по спектру 0.1 нм) приведены в [4]. В представленной работе по этим спектрам, нормированным на интенсивность на характерной длине волны эмиссии железа 252.0609 нм, нами осуществляется калибровка концентраций C, Mn, Si, Cr, Ni и Cu в выборках, содержащих от 31 до 39 эталонов низколегированных сталей.

**Методы и результаты.** Предварительно эталоны были разделены на обучающую и проверочную выборки в соответствии с алгоритмом Кеннарда–Стоуна [5]: образец с величиной концентрации ближайшей к центру исследуемого диапазона выбирается в обучающую выборку первым, далее выбираются образцы с концентрацией наиболее удаленной от концентраций уже выбранных эталонов.

Широкополосные многопараметрические модели для каждого калибруемого элемента, построенные с помощью применения метода частичных наименьших квадратов (PLS – partial least squares) [6], характеризуются следующими величинами среднеквадратичных отклонений оценок от соответствующих эталонных значений в проверочной выборке:  $RMSEP = 0.06\%$  для C,  $0,12\%$  для Mn,  $0,09\%$  для Si,  $0,13\%$  для Cr,  $0,07\%$  для Ni и  $0,08\%$  для Cu.

Далее к широкополосной многопараметрической модели были применены три метода выбора спектральных переменных: метод RSV (ranking of spectral variables) [7], основанный на ранжировании спектральных переменных по их коэффициенту корреляции с величиной искомого параметра, алгоритм последовательного проецирования SPA (successive projections algorithm) [8] и оригинальная модификация [9] метода поиска комбинации движущихся окон (scmwiPLS – searching combination moving window iPLS) [10].

Сравнение величин среднеквадратичного отклонения в моделях PLS и PLS+RSV показывает, что применение корреляционного метода выбора спектральных переменных недостаточно эффективно в рассматриваемых случаях. Качество калибровочных моделей для Cr и Cu не изменилось, так как из 3630 спектральных переменных выбраны 3629 и 3625, соответственно. Для остальных четырех элементов качество калибровки улучшилось, но недостаточно для того, чтобы модели стали количественными. Качество

калибровочных моделей PLS+SPA улучшилось по сравнению с PLS+RSV для Mn, Si и Cu, но ухудшилось для C и Cr. Для Ni  $RMSEP$  не изменилось. Количество выбранных спектральных переменных и величины  $RMSEP$  для всех примененных методов показаны в таблице 1.

Применение scmwiPLS рассмотрим подробнее для калибровки концентрации Mn. Широкополосная PLS достигает минимума  $RMSEP = 0.12\%$  при использовании 4 латентных структур. Соответствующая величина отклонения оценки в обучении  $RMSEC = 0.14\%$ . При этом остаточное отклонение в обучающей выборке (отношение стандартного отклонения оценки калибруемого параметра в выборке и среднеквадратичного отклонения калибровки)  $RPDC = 4.7$ , а в проверочной –  $RPDP = 1.8$ , что показывает ухудшение этого показателя качества калибровки за счет сужения рассматриваемого диапазона концентрации.

В методе scmwiPLS для выбора спектральных переменных в эмиссионных спектрах при калибровке по 4 латентным переменным используются окна шириной 5 переменных. Изначальное количество переменных 3630 кратно 5 и не нуждается в уменьшении. На рисунке 1 представлена зависимость  $RMSEP$  от количества спектральных окон, учитываемых в модели PLS. Минимум среднеквадратичного отклонения оценки соответствует 19 окнам, т.е. 95 переменным.

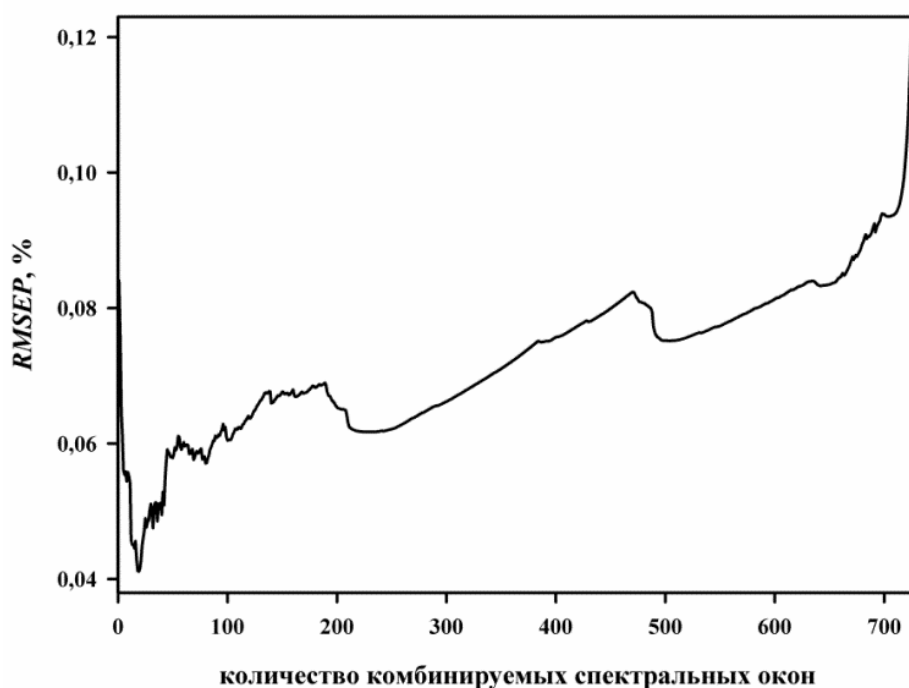


Рис. 1. Зависимость среднеквадратичного отклонения оценки концентрации Mn в низколегированных сталях по эмиссионным спектрам с применением модели частичных наименьших квадратов с выбором спектральных переменных с помощью поиска комбинации движущихся окон.

Положение выбранных спектральных переменных на эмиссионном спектре эталона 123 показано на рисунке 2. Видно, что большинство выбранных спектральных переменных находится в области интенсивных эмиссионных линий. Такая же зависимость наблюдается и для остальных калибруемых химических элементов за исключением C, для которого метод scmwiPLS также как и два примененных ранее метода выбирает спектральные переменные за пределами области наблюдаемых интенсивных эмиссионных линий.

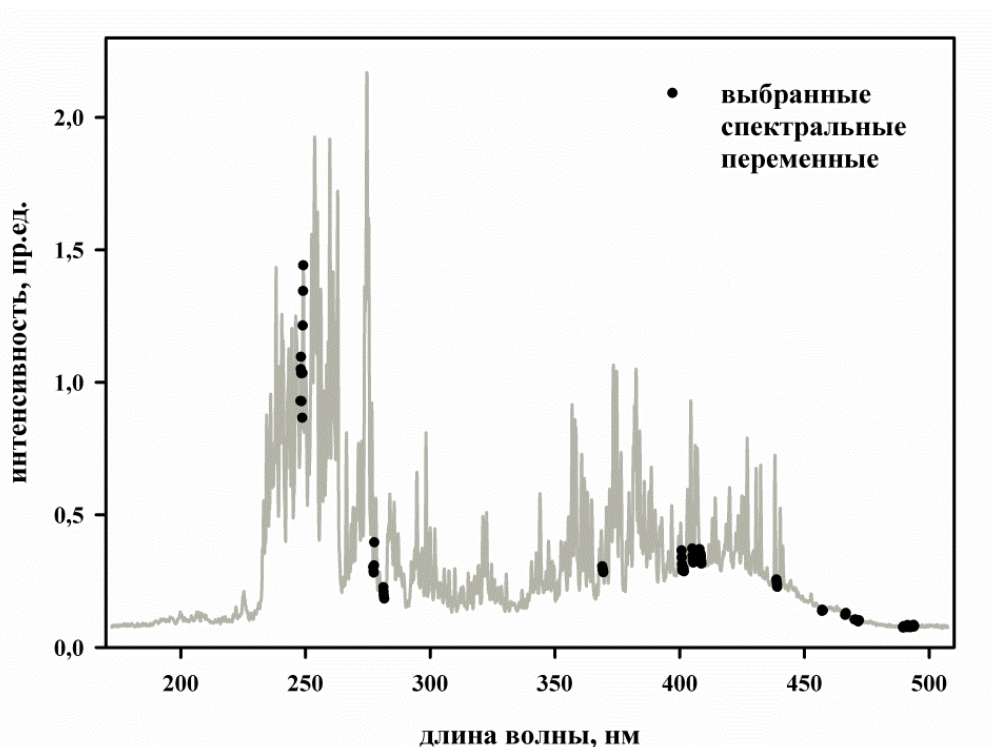


Рис. 2. Эмиссионный спектр эталона 123, на котором выделены спектральные переменные, используемые для калибровки концентрации Mn методом scmwiPLS.

Таблица 1. Характеристики многопараметрических моделей калибровок концентрации шести химических элементов в низколегированных сталях по эмиссионным спектрам.

Элемент	Кол-во образцов			RMSE в проверке в широкополосной PLS, %	Кол-во выбранных спектральных переменных для метода RSV	RMSE в проверке, % для метода RSV	Кол-во выбранных спектральных переменных для метода SPA	RMSE в проверке, % для метода SPA	Кол-во выбранных спектральных переменных в scmwiPLS	RMSEP в проверке, % для метода scmwiPLS
	всего	в обучении	в проверке							
C	33	18	15	0.06	757	0.04	1229	0.05	208	0.004
Mn	39	24	15	0.12	3458	0.09	278	0.08	95	0.04
Si	34	22	12	0.07	426	0.05	11	0.03	208	0.003
Cr	33	18	15	0.13	3629	0.13	2628	0.12	153	0.04
Ni	31	18	13	0.08	3486	0.05	2696	0.05	240	0.01
Cu	38	22	16	0.08	3625	0.08	11	0.07	325	0.04

Калибровка концентрации Mn методом scmwiPLS характеризуется следующими показателями качества:  $RMSEC = 0.15\%$ ,  $RMSEP = 0.04\%$ ,  $RPDC = 4.4$  и  $RPDP = 5.2$ . Таким образом, разработанная многопараметрическая модель является количественной для обеих выборок.

**Заключение.** Применение методов выбора спектральных переменных позволило улучшить качество многопараметрических моделей калибровки концентраций основных технологических примесей и легирующих добавок в низколегированных сталях по данным, полученным с помощью лазерно-искровой эмиссионной спектроскопии. Модель частичных наименьших квадратов с выбором спектральных переменных методом поиска комбинации движущихся окон для С является количественной:  $RMSEP = 0.004 \%$ , остаточное отклонение в проверочной выборке  $RPDP = 23.4 > 3$  в диапазоне концентраций от 0.13 до 0.43 %. Количественными являются также модели калибровки концентраций Mn (0.04 % и 5.2 в диапазоне 0.47 – 1.15 %), Si (0.003 % и 20.7 в диапазоне 0.15 – 0.33 %), Cr (0.04 % и 3.1 в диапазоне 0.09 – 0.43 %) и Ni (0.01 % и 4.8 в диапазоне 0.05 – 0.25 %). Для Cu в диапазоне концентраций 0.06 – 0.26 % созданная калибровка является качественной ( $RMSEP = 0.04 \%$ ,  $RPDP = 1.4$ ).

### Литература.

1. Quackatz L., Griesche A., Kannengiesser T./ In situ investigation of chemical composition during TIG welding in duplex stainless steels using Laser-Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS) // Forces in Mechanics – 2022. – Vol. 6. DOI: 10.1016/j.finmec.2021.100063
2. Huang W., Guo L., Kou W., Zhang D., Hu Z., Chen F., Chu Y., Cheng W. / Identification of adulterated milk powder based on convolutional neural network and laser-induced breakdown spectroscopy // Microchemical Journal – 2022. – Vol. 176. DOI: 10.1016/j.microc.2022.107190
3. Cui M., Guo H., Chi Y., Tan L., Yao C., Zhang D., Deguchi Y./ Quantitative analysis of trace carbon in steel samples using collinear long-short double-pulse laser-induced breakdown spectroscopy // Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy – 2022. – Vol. 191. DOI: 10.1016/j.sab.2022.106398
4. Бельков М.В., Борисевич Д.А., Кацалап К.Ю., Ходасевич М.А. Многопараметрическая калибровка концентраций С, Mn, Si, Cr, Ni и Cu в низколегированных сталях методами лазерно-искровой эмиссионной спектроскопии по необработанным спектрам с низким разрешением // ЖПС. – 2021. – Т. 88. – С. 737–742.
5. Kennard R.W., Stone L.A. / Computer aided design of experiments // Technometrics. – 1969. – V. 11. – P. 137–148.
6. Geladi P., Kowalski B.R. / Partial Least-Squares Regression: A Tutorial // Analytica Chimica Acta. – 1986. – Vol. 185. – P. 1–17.
7. Xiaobo Z., Jiewena Z., Povey M.J.W., Holmes M., Hanpina M. / Variables selection methods in near-infrared spectroscopy // Analytica Chimica Acta. – 2010. – Vol. 667. – P. 14–32.
8. Soares S.F.C., Gomes A. A., Araujo M. C. U., Filho A. R. G., Galvão R. K. H. /The successive projections algorithm // Trends in Analytical Chemistry. – 2013. – V. 42. – P. 84–98.
9. Ходасевич М.А., Асеев В.А. / Выбор спектральных переменных и повышение точности калибровки температуры методом проекции на латентные структуры по спектрам флуоресценции  $Yb^{3+}:CaF_2$  // Оптика и спектроскопия. – 2018 – Т. 124, № 5. – С. 713–717.
10. Du Y.P., Liang Y. Z., Jiang J. H., Berry R. J., Ozaki, Y. / Spectral regions selection to improve prediction ability of PLS models by changeable size moving window partial least squares and searching combination moving window partial least squares // Analytica Chimica Acta. – 2004. – V. 501. – P. 183–191.



## Дифференциация свекловичного и тростникового сахара с помощью применения многопараметрического спектрального анализа.

Д. А. Борисевич <sup>a</sup>, М. А. Ходасевич <sup>a</sup>, Н. Eriklioğlu <sup>b</sup>, Е. İlhan <sup>b</sup>, Mecit H. Oztop <sup>b</sup>

<sup>a</sup> Институт физики НАН Беларуси, Минск, Беларусь,

<sup>b</sup> Ближневосточный технический университет, Анкара, Турция  
E-mail: d.borisevich@ifanbel.bas-net.by

**Введение.** Сахароза является одним из основных ингредиентов продукции сахарной промышленности. Во всем мире сахароза производится в основном из двух источников: сахарной свеклы и сахарного тростника. Дифференциация сахарозы методами молекулярной химии может быть затруднена, поскольку молекулярная структура сахарозы разного происхождения одинакова. Разработка более практичных и доступных методов дифференциации сахарозы является важной задачей для производителей сахара из различных стран [1].

**Эксперимент.** В данной работе были исследованы образцы сахарозы, произведенные из тростника или свеклы в девяти странах. Спектры оптической плотности их 25% водных растворов были зарегистрированы в ультрафиолетовом, видимом и ближнем инфракрасном диапазонах с разрешением в 1 нм. Различия в спектральных характеристиках образцов, представленных на рисунке 1, наблюдаются в диапазоне 200–400 нм, который и был использован для построения многопараметрических моделей.

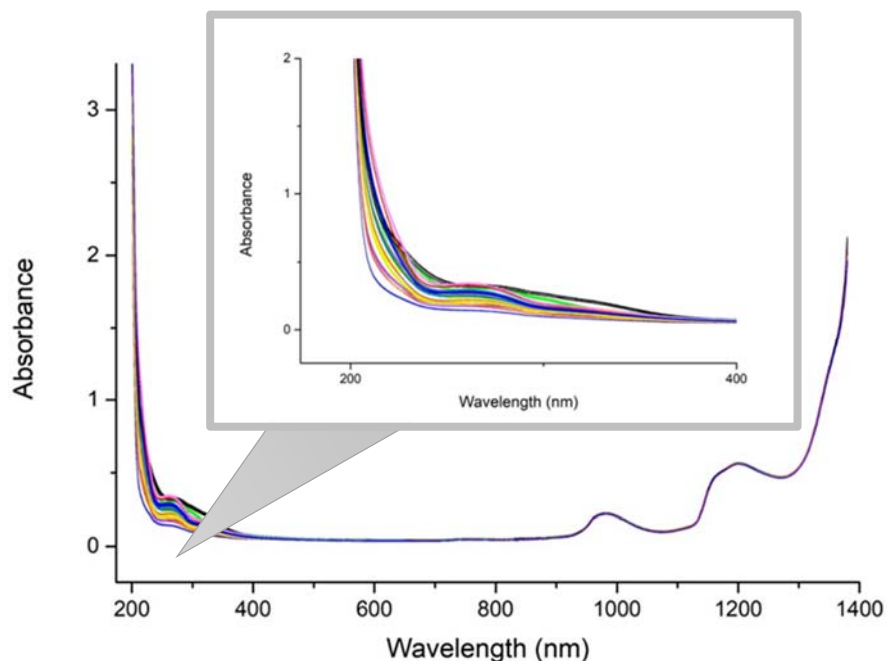


Рис.1. Спектры оптической плотности 25% водных растворов сахаров.

**Методы и результаты.** С помощью метода главных компонент (PCA – principal component analysis) [2] двухсотмерное пространство спектральных переменных было редуцировано до двухмерного пространства главных компонент. В этом пространстве наблюдается кластеризация образцов известного происхождения, позволившая дифференцировать тростниковый и свекловичный сахар методом линейного дискриминантного анализа (LDA - linear discriminant analysis) [3], а также определить принадлежность образцов неизвестного происхождения к тростниковым.

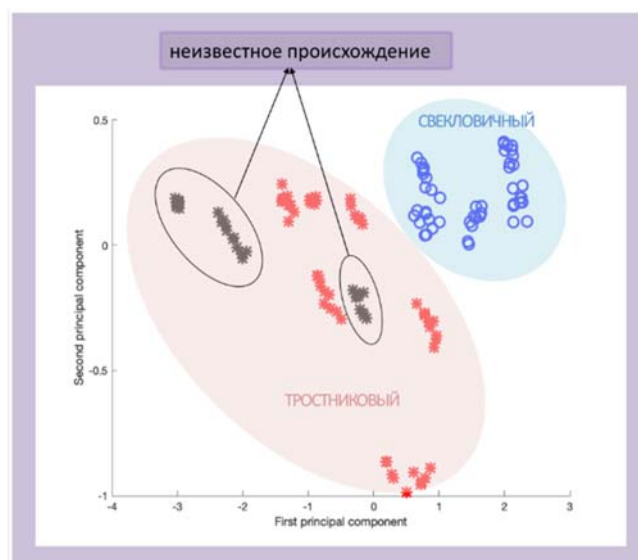


Рис.2. Счета в первые две главные компоненты 15 образцов сахаров.

Для проведения количественного анализа были приготовлены бинарные смеси свекловичного и тростникового сахаров с изменением концентрации от 0 до 100%. Метод частичных наименьших квадратов с выбором спектральных переменных путем поиска комбинации сдвигающихся окон (scmwiPLS – searching combination moving window interval PLS) [4] характеризуется среднеквадратичным отклонением (RMSEP=1,8 %) и остаточным отклонением (RPD=17,2) содержания свекловичной сахарозы.

**Заключение.** Полученные результаты показывают, что представление измеренных спектров водных растворов сахарозы в двухмерном пространстве главных компонент позволяет дифференцировать ее источники. Спектроскопия УФ и видимого диапазона с применением многопараметрических методов является перспективной для идентификации растительного источника сахарозы с использованием как в лабораторных условиях, так и в производственном процессе. Многопараметрическая модель калибровки с выбором спектральных переменных методом поиска комбинации сдвигающихся окон является количественной со среднеквадратичным отклонением (RMSEP=1,8 %) и остаточным отклонением (RPD=17,2) содержания свекловичной сахарозы.

### Литература.

1. Morellos, A. *et al.* / Machine learning based prediction of soil total nitrogen, organic carbon and moisture content by using VIS-NIR spectroscopy // *Biosystems Engineering* - 2016.- Vol. 152. - P. 104–116.
2. Esbensen, K. H., Geladi, P. / *Principal Component Analysis: Concept, Geometrical Interpretation, Mathematical Background, Algorithms, History, Practice.* // *Comprehensive Chemometrics.* – 2009. – Vol. 2. – P. 211–226.
3. Manfredi M., Robotti E., Quasso F., Mazzucco E., Calabrese G., Marengo E., / Fast classification of hazelnut cultivars through portable infrared spectroscopy and chemometrics // *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy.* - 2018. - Vol. 189. - P. 427-435
4. Du Y.P., Liang Y.Z., Jiang J.H., Berry R.J. / Spectral regions selection to improve prediction ability of PLS models by changeable size moving window partial least squares and searching combination moving window partial least squares // *Analytica Chimica Acta.* – 2004. – Vol. 501. – P. 183–191.

## Применение ацилгидразона родамина Б в качестве оптического сенсора ионов железа (III)

А. Г. Тимошенко <sup>a</sup>, Н. В. Лабода <sup>a</sup>, А. М. Мальтанова <sup>b</sup>, Н. В. Белько <sup>c</sup>

<sup>a</sup> Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь

<sup>b</sup> Научно-исследовательский институт физико-химических проблем БГУ,  
Минск, Беларусь

<sup>c</sup> Институт прикладных физических проблем им А. Н. Севченко БГУ,  
Минск, Беларусь

E-mail: che.timoshenag@bsu.by

**Введение.** При обнаружении ранних стадий коррозии металлов большое значение имеет детектирование их ионов. Высокую избирательность и чувствительность их обнаружения могут обеспечить вещества, чьи спектрально-люминесцентные свойства изменяются в присутствии ионов металлов [1]. Одним из таких сенсоров является производное родамина Б, краситель FD1 [2, 3]. В данной работе исследуются поведение красителя FD1 в присутствии ионов  $Fe^{3+}$  в таких растворителях как ацетон, ацетонитрил и этанол.

**Материалы и методы.** Краситель FD1, ацилгидразон родамина Б, был синтезирован в НИИПФП им. А. Н. Севченко БГУ (структурная формула представлена на рисунке 1). Его растворы концентрации 25 мкмоль/л приготавливали в смеси вода-ацетонитрил, вода-ацетон и вода-этанол в соотношении жидкостей 1:1. В них добавляли ионы  $Fe^{3+}$  в виде водного раствора  $FeCl_3 \cdot 6H_2O$ . Концентрацию ионов железа в растворах FD1 варьировали от 25 до 250 мкмоль/л. Спектры поглощения растворов регистрировали в сантиметровых кварцевых кюветах при помощи спектрофотометра SOLAR PV1251. Стабильность определялась путем записи спектров концентрации 250 мкмоль/л с интервалом 5 мин.

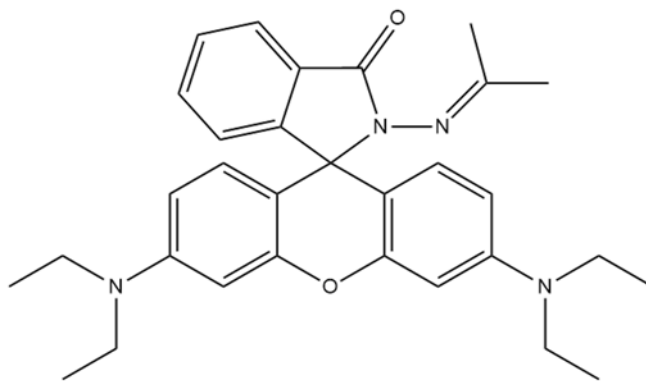


Рис. 1. Структурная формула исследуемого красителя.

**Результаты и их обсуждение.** В видимой области спектров поглощения растворов FD1 без добавления ионов  $Fe^{3+}$  отсутствуют полосы поглощения. При добавлении ионов железа растворы FD1 приобретают малиновую окраску, а в спектрах поглощения проявляется полоса при 565 нм для водно-ацетонных растворов (рисунок 2а). Эта полоса отчетливо видна даже при концентрации ионов  $Fe^{3+}$  равной 25 мкмоль/л. С увеличением концентрации ионов интенсивность полосы при 565 нм возрастает во всех использованных растворителях. Интенсивность полосы возрастает с увеличением концентрации  $Fe^{3+}$  и далее, при концентрации 150 мкмоль/л, выходит на плато насыщения (рисунок 2б).

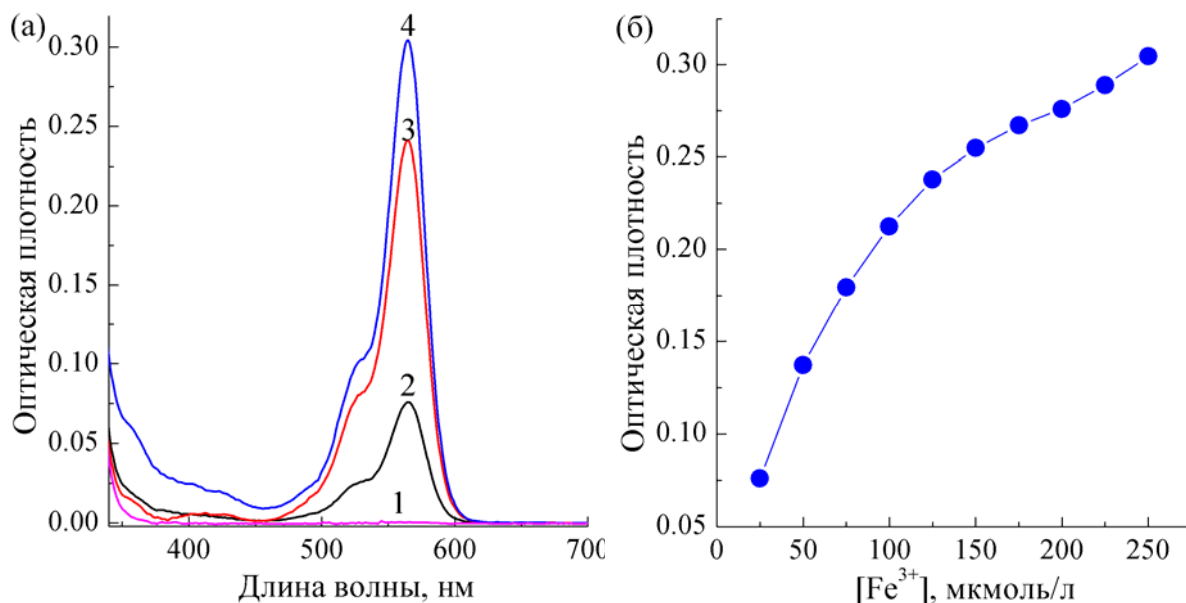


Рис. 2. Спектры поглощения водно-ацетонного раствора FD1 концентрации 25  $\mu\text{mol/L}$  в присутствии 0  $\mu\text{mol/L}$  (1), 25  $\mu\text{mol/L}$  (2), 150  $\mu\text{mol/L}$  (3) и 250  $\mu\text{mol/L}$  (4)  $Fe^{3+}$  (а) и зависимость оптической плотности при 565 нм от концентрации  $Fe^{3+}$  в водно-ацетонном растворе FD1 концентрации 25  $\mu\text{mol/L}$  (б).

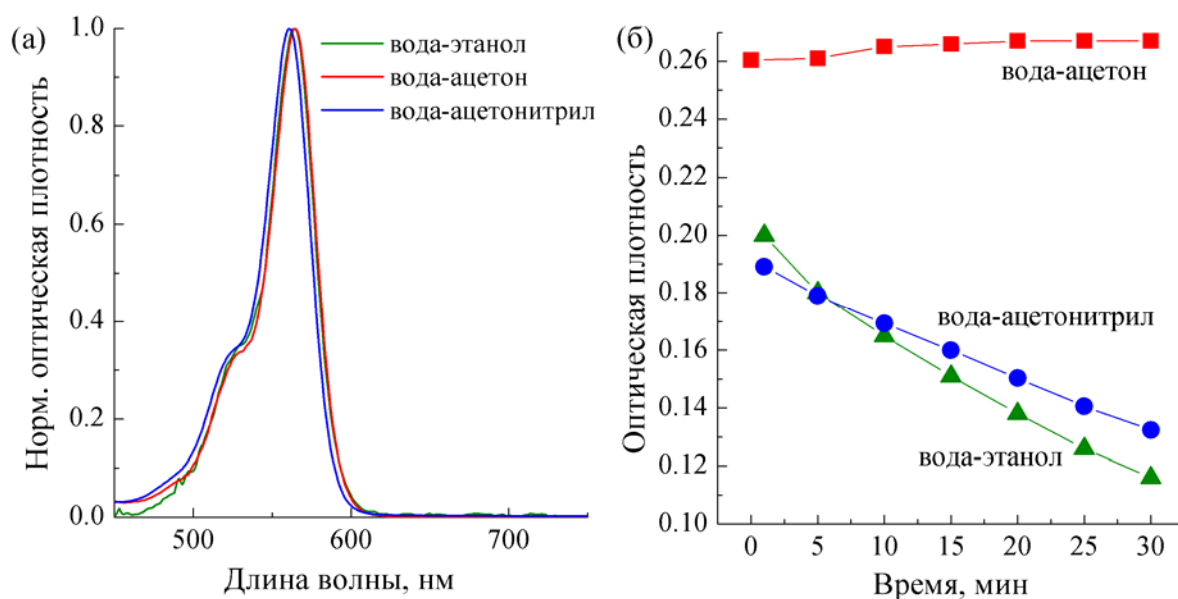


Рис. 3. Нормированные спектры поглощения водно-этанольного, водно-ацетонного и водно-ацетонитрильного растворов FD1 концентрации 25  $\mu\text{mol/L}$  в присутствии 250  $\mu\text{mol/L}$   $Fe^{3+}$  (а) и зависимость оптической плотности при 565 нм от времени после добавления 250  $\mu\text{mol/L}$   $Fe^{3+}$  в водно-этанольный, водно-ацетонный и водно-ацетонитрильный растворы FD1 концентрации 25  $\mu\text{mol/L}$  (б).

При сравнении спектров поглощения FD1 в присутствии железа можно видеть, что форма спектров практически не зависит от выбора растворителя (рисунок 3а). В смеси вода-ацетонитрил проявляется гипсохромный сдвиг, причиной которого является значительно более высокая полярность ацетонитрила в сравнении с ацетоном. Однако, величина сдвига не велика (1 нм), следовательно, на сольватацию молекул красителя

большее влияние оказывает именно вода. Зависимости оптической плотности при 565 нм от времени после добавления 250 мкмоль/л  $\text{Fe}^{3+}$  в исследуемых растворах (рисунок 3б) свидетельствуют о том, что только в водно-ацетонных растворах краситель проявляет стабильность. В водно-ацетонитрильных и водно-этанольных растворах поглощение красителя в видимой области убывает с течением времени.

Рассмотрим механизм реакции, протекающей при взаимодействии красителя FD1 с ионами  $\text{Fe}^{3+}$ . Возникновение полосы поглощения в видимой области поглощения связано с раскрытием спиролактамового цикла в результате протонирования (рисунок 4) [4]. По всей видимости, ионы железа катализируют данный процесс за счет понижения рН. В дальнейшем причина нестабильности спектральных свойств будет исследована более подробно.

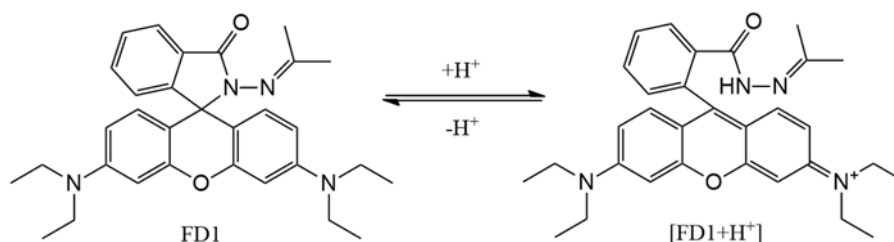


Рис. 4. Механизм изменения спектральных свойств FD1 в результате протонирования в присутствии  $\text{Fe}^{3+}$ .

**Заключение.** Изучено поведение красителя FD1 в присутствии ионов  $\text{Fe}^{3+}$  в водно-ацетонитрильных, водно-ацетонных и водно-этанольных растворах. Во всех рассмотренных растворителях краситель образует комплексы с ионами металла с последующим проявлением в спектрах поглощения полосы при 565 нм. Во всех использованных растворителях полоса четко наблюдается уже при концентрации ионов  $\text{Fe}^{3+}$ , равной 25 мкмоль/л. Стабильностью комплексы обладают только в водно-ацетонных растворах, в водно-ацетонитрильных и водно-этанольных растворах с течением времени комплексы распадаются и оптическая плотность при 560–565 нм убывает. Краситель FD1 может рассматриваться в качестве сенсора ионов металлов и, следовательно, использоваться для детектирования коррозии. В дальнейшем будет установлена причины нестабильности комплексов, исследовано поведение красителя FD1 в других растворителях.

#### Литература.

1. Czoik R. [et al.] / Luminescence investigation of Fe (III)–rhodamine B complexes obtained by solvent extraction // J. Lumin. – 2013. – Vol. 139. – P. 35–39.
2. Augustyniak A., Tsavalas J., Ming W. / Early detection of steel corrosion via “turn-on” fluorescence in smart epoxy coatings // ACS Appl. Mater. Interfaces. – 2009. – Vol. 1, №. 11. – P. 2618–2623.
3. Lv J. [et al.] / Intelligent anti-corrosion and corrosion detection coatings based on layered supramolecules intercalated by fluorescent off-on probes // J. Taiwan Inst. Chem. Eng. – 2021. – Vol. 118. – P. 309–324.
4. Augustyniak A., Ming W. / Early detection of aluminum corrosion via “turn-on” fluorescence in smart coatings // Prog. Org. Coat. – 2011. – Vol. 71, №. 4. – P. 406–412.

# Luminescence Dissolved Oxygen sensor of the underwater measuring system

A. D. Borisovets

*National Ozone Monitoring Research and Education Center, Minsk, Republic of Belarus*

*E-mail: borisovets.alexey@gmail.com*

**Introduction.** Oxygen is one of the most important dissolved gases constantly present in surface waters. The concentration of dissolved oxygen determines the value of redox potential and significantly the direction and rate of chemical and biochemical oxidation processes of organic and inorganic compounds. Measurement of dissolved oxygen concentration levels in surface water is part of various research programs aimed to assess habitat conditions for hydrobionts, indirectly characterize water quality, intensity of organic matter production and decomposition processes, and self-purification of water bodies. The dissolved oxygen level in surface water can vary from 0 to 14 mg/l.

Recently, Luminescence Dissolved Oxygen (LDO) sensors have become increasingly common. LDO sensors are based on the molecular oxygen quenching mechanism. An oxygen-sensitive substance is stimulated and then emits light with an intensity, decay time or wavelength depending on the oxygen concentration. Optical oxygen sensors are also more attractive than conventional amperometric devices due to their: faster response time, high sensitivity and selectivity, no oxygen consumption and no surface poisoning. Usually, the optical film of an optical sensor (optode) consists of an analyte-sensitive dye and a support matrix in which the dye is dispersed or dissolved. The most commonly-used are polycyclic aromatic dyes or metal complexes dispersed within an oxygen permeable polymer [1, 2].

At the NOMREC BSU, its own LDO sensor was developed. The optical sensor operates by quenching the luminescence of the organometallic complexes with oxygen. The sensor was developed as one of the modules of the PION-AQUA underwater system for measuring the parameters of aquatic environments. PION-AQUA is a submersible optoelectronic device in a compact, hermetically sealed case and is designed to measure UV irradiance at depths up to 80 m. [3].

**Construction.** The oxygen sensor includes the following main elements, as presented in figure 1: excitation LED, photodiode, optical filter for suppressing the excitation light and transmitting the useful light signal in the luminescence wavelength range of the active substance, focusing lens for optical circuitry optimization, active substance.

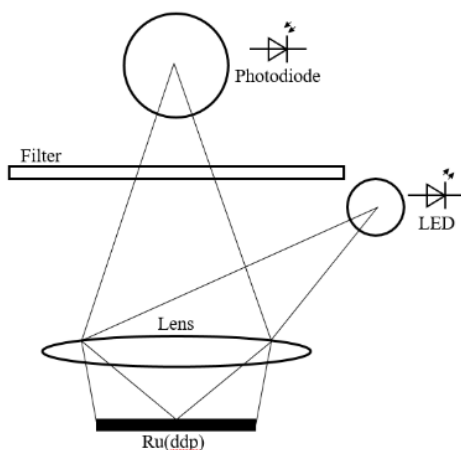


Fig. 1. Optical scheme of the oxygen sensor.



Structurally, the sensor is made in the form of two detachable parts, as presented in figure 2: the upper part, which contains a photodiode, LED and a light filter; lower part, which includes a lens and a glass plate with applied film of active substance.

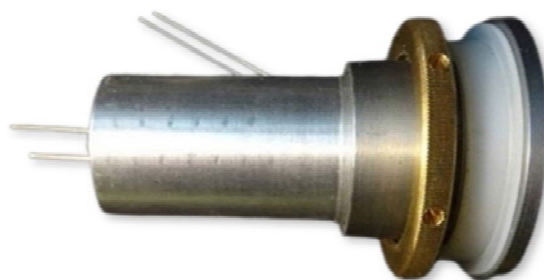


Fig. 2. Sensor design.

**Working principle.** The measurement process is implemented as follows, figure 3:

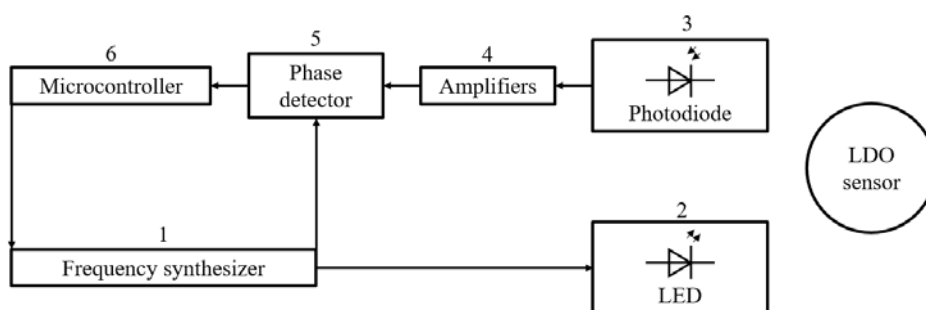


Fig. 3 Measurement process.

Generator 1 produces a signal, the parameters of which are set via microcontroller 6. Then the signal goes to the LED 2 and the phase detector 5. Photodiode 3 with preamplifier 4 converts the optical luminescence signal into an electrical signal to feed it into the phase detector 5. The signal will come with a phase shift proportional to the concentration of dissolved oxygen. The phase detector 5 is used to generate a voltage whose value is proportional to the phase shift. Analog-to-digital conversion of the received signal is performed by the ADC channel of the microcontroller 6. Microcontroller 6 controls the process of data transfer.

**Components.** Ruthenium complex with phenanthroline – Tris (4,7-Diphenyl-1,10-Phenanthroline) Ruthenium(II) Dichloride (Ru(dpp)) was chosen as the active substance of the sensor.

Ruthenium (II) complexes are by far the most widely-used oxygen dyes within optical oxygen sensors. In general, they have efficient luminescences, relatively long-life metal-ligand charge-transfer excited states, fast response times, broad absorption bands located most often in the blue region (400 – 480 nm) of the visible spectrum, large Stokes shifts, nontoxicity and high-photochemical stability. The absorption band maximum in the visible spectral region for Ru(dpp) is 455 nm, and the luminescence band maximum is 613 nm [1, 2].

The solution used to obtain the active layer was 1 g. Silicone / 40 mg. Ru(dpp) / 1 ml. Toluene. Poly (methyl methacrylate) (PMMA) was chosen as the matrix for the active element. Then the solution was applied to the glass substrate and incubated for 24 hours.

A silicon photodiode HAMAMATSU S1223 was chosen as a photodetector for our LDO sensor. In order to reduce the sensitivity of the photodiode in uninformative ranges the OS11 filter with Cut-On Wavelength equal to 519 nm was installed.

The NICHIA NCSC119B-V1 LED was chosen as the excitation source. Dominant wavelength for this LED is 447-453 nm.

The 8 bit AVR Microcontroller ATmega328P was installed to set the desired frequency of the oscillator and to transmit the data. As an generator the AD9851 microcircuit is used. Two AD8852 amplifiers are used to amplify the signal from the photodiode. The gain and phase detector AD8302 is used to produce a voltage proportional to the phase shift.

**Conclusion.** The paper presents a description of a compact LDO sensor developed at NOMREC BSU based on the Ru(dpp) complex for measuring the concentration of dissolved oxygen. The sensor is currently being calibrated and field tested.

### References.

1. Polonca Brglez, Andrej Holobar, Aleksandra Pivec, Natasa Belsak and Mitja Kolar: Determination of oxygen by means of a biogas and gas – interference study using an optical tris (4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline) ruthenium(ii) dichloride complex sensor, *Acta Chim. Slov.* 2012, 59, 50–58.
2. Zike Jiang, Xincheng Yu, Shikui Zhai and Yingyan Hao: Ratiometric dissolved oxygen sensors based on ruthenium complex doped with silver nanoparticles, *Sensors* 2017, 17, 548; doi:10.3390/s17030548.
3. Борисовец А.Д., Дёмин В.С.: Прибор для подводных измерений УФ-облученности водных сред pioneer, *Приборостроение — 2020: материалы 13-й Международной научно-технической конференции*, 18—20 ноября 2020 г., Минск.



# Ускоренные испытания на надежность ультрафиолетовых светодиодов с использованием стохастического моделирования деградации оптической мощности

А. Е. Челяпин

*Государственное предприятие «ЦСОТ НАН Беларуси», Минск, Беларусь  
E-mail: alex.gif@rambler.ru*

**Введение.** Ультрафиолетовые (УФ) светодиоды широко применяются при очистке воздуха и воды, фотолитографии, фотоактивации лекарственных препаратов, отверждении полимеров и фототерапии. УФ-излучение привлекло внимание общественности как один из наиболее эффективных методов дезинфекции вирусов из-за вспышки и распространения нового коронавируса COVID-19. УФ-светодиоды – это перспективные и быстро развивающиеся фотоэлектронные устройства, которые широко применяются из-за их преимуществ, которые заключаются в длительном сроке службы, низком энергопотреблении, безвредности для окружающей среды и широкой адаптируемости при создании различных устройств. Светильники с использованием УФ-светодиодов становятся многообещающими устройствами для замены традиционных источников УФ-излучения, таких как ртутные лампы.

Мощность оптического излучения является критической важной физической величиной, отражающей интенсивность оптического излучения фотоэлектронного устройства. Следовательно, мощность излучения можно использовать в качестве показателя, отражающего ухудшение оптических характеристик УФ-светодиодов. На снижение мощности излучения УФ-светодиодов влияет несколько эффектов, таких как деградация кристаллов УФ-светодиодов, пожелтение корпусных материалов, растрескивание и расслоение межсоединений или выводов. Хотя теоретический срок службы УФ-светодиодов в 5 – 10 раз больше, чем у традиционной ртутной лампы, прогнозирование срока его службы осложняется различными факторами. Эти проблемы возникают из-за неясных принципов и механизмов отказа УФ-светодиодов, что приводит к несоответствиям в методах оценки надежности и срока службы. Поскольку традиционный метод оценки надежности и срока службы основан на эмпирических данных об отказах, для обеспечения высокой надежности УФ-светодиодов требуется очень длительное время испытаний, что малоприспособно в условиях промышленного производства. Обычно для оценки срока службы светодиодов широко используются ускоренные методы оценки, в которых ускоренное время наработки на отказ может быть получено путем тестирования изделия при более высоких уровнях нагрузки (таких как высокая температура, напряжение или давление). Однако ускоренные методы для УФ-светодиодов по-прежнему требуют длительного времени для сбора данных об отказах. Поэтому, чтобы сократить время тестирования, обрабатываются и моделируются данные о деградации, а не данные об отказах, чтобы прогнозировать срок службы в светодиодной промышленности. Однако в настоящее время проводится мало исследований по ускоренному тестированию УФ-светодиодов, и относительно больше внимания уделяется белым светодиодам. По сравнению с другими тестами на деградацию светодиодов, в которых основное внимание уделяется световому потоку, при исследовании УФ-светодиодов выбирается мощность излучения УФ-светодиодов, которая более точно связана с излучением УФ-диапазона.

В настоящее время для анализа данных оптической деградации часто рекомендуют методы нелинейной регрессии, такие как стандарты ТМ-21 и ТМ-28, рекомендованные IESNA [1]. Но точность их прогнозирования сильно осложняется

использованием детерминированной модели без учета динамики измерений и неопределенностей. В последние годы методы слияния и методы машинного обучения, такие как рекуррентная нейронная сеть и фильтрация частиц, были признаны эффективными подходами, которые в состоянии моделировать деградацию и прогнозировать оставшийся срок службы [2]. Кроме того, стохастическое моделирование оптической деградации является альтернативным методом оценки надежности и срока службы изделий, требующих высокой надежности. В отличие от эмпирической модели, рекомендованной стандартом IESNA, динамическая стохастическая модель деградации описывает процесс деградации с точки зрения методов, основанных на данных. Наиболее часто используемыми методами стохастического моделирования оптической деградации с использованием функции частоты отказов являются Винеровский процесс и Гамма-распределение. В целом, гамма-процесс больше подходит для описания монотонных и постепенных путей роста/деградации определенных параметров, например, в случае растрескивания корпуса прибора. По сравнению с другими стохастическими процессами важным преимуществом моделирования Гамма-распределения является то, что его математический расчет относительно прост [3]. В течении некоторых исследований было предложено использовать модель процесса Винера, основанную на принципе ускоренной наработки на отказ, и с её помощью было подтверждено ускоренное старение светодиодов. Процесс Винера также был использован для моделирования деградации белых светодиодов средней мощности [4].

Оценка срока службы УФ-светодиодов крайне важна в областях специального освещения, таких как биомедицинские устройства, и хотя на данный момент существует ряд методов прогнозирования срока службы УФ светодиодов, однако они не могут быть выполнены в краткие сроки и недостаточно изучены.

**Экспериментальная часть.** В соответствии с упомянутой выше уникальностью УФ-светодиодов, проведены тесты на ускоренную деградацию для группы УФ-светодиодов, а данные о снижении мощности излучения выбраны для прогнозирования срока службы. Две модели стохастической обработки, т. е. гамма-процесс и процесс Винера, сравниваются с отраслевым стандартом IESNA TM-21. Ошибки прогнозирования и доверительные интервалы среднего времени наработки на отказ при различных испытаниях на ускоренную деградацию используются для проверки точности и надежности предлагаемых методов.

Для оценки срока службы УФ светодиодов проводятся исследования деградации их оптических и электрических характеристик в ускоренном режиме с использованием одновременно двух ускоряющих факторов (повышенной температуры кристалла и повышенного тока, протекающего через кристалл). Перед началом исследований измеряются исходные светотехнические параметры образцов: оптическая мощность, спектр, доминантная длина волны и падение напряжения при рабочем токе, указанном производителем УФ светодиода как номинальный (типичный). Измерения проводятся с помощью спектрометрического комплекса оборудования. Результаты измерений приведены в таблице 1.

Таблица 1. Характеристики УФ-светодиодов.

Номер	Комментарий	Оптическая мощность / Вт	Пиковая длина волны / nm
1	UV #1 700 mA 3.5382 V	1,46	368,53
2	UV #2 700 mA 3.7518 V	1,47	368,54
3	UV #3 700 mA 3.5834 V	1,46	367,76
4	UV #4 700 mA 3.5353 V	1,44	368,74
5	UV #5 700 mA 3.6055 V	1,48	368,48

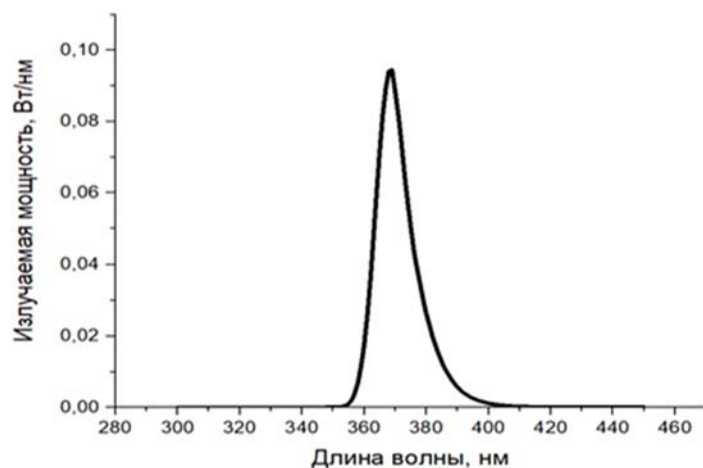


Рис. 1. Спектр излучения изучаемых светодиодов.

Образцы УФ светодиодов устанавливаются на нагревательный элемент внутри специального термостенда, фиксируются специальными креплениями и подключаются к электрическому питанию.

На светодиоды подается максимально допустимый рабочий ток (в соответствии с рекомендациями производителя). Образцы выдерживаются во включенном состоянии в течение 840 ч при температуре нагревательного элемента стенда соответствующей максимальной допустимой рабочей температуре светодиода. Через каждые 84 часа проводятся замеры оптической мощности, спектра, доминантной длины волны и падения напряжения при номинальном рабочем токе, указанном производителем. Диапазон данных для прогнозирования срока службы составляет 420 ч.

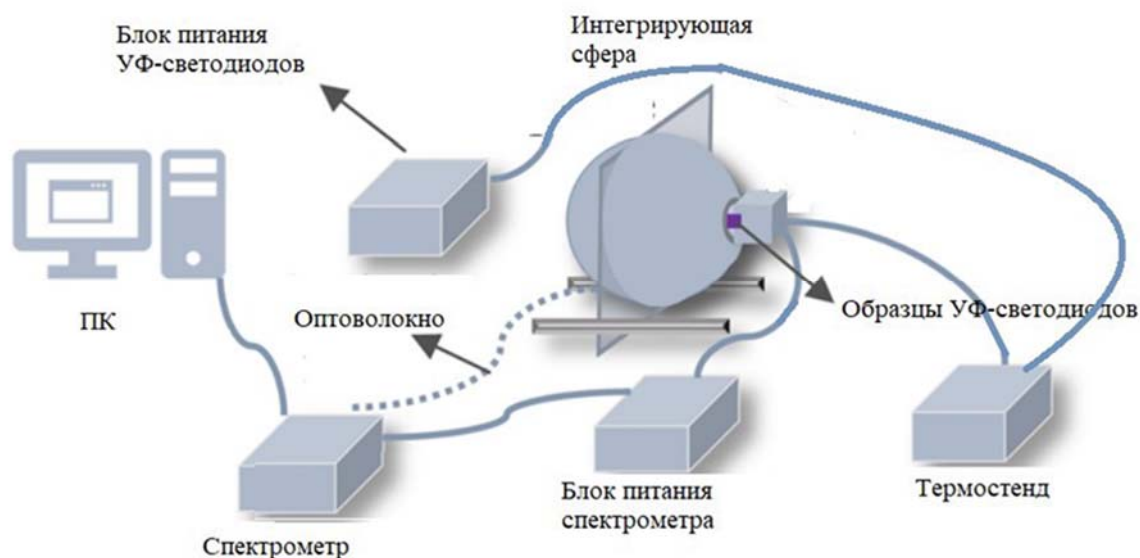


Рис. 2. Блок схема проведенного эксперимента по деградации.

Температуру корпуса УФ светодиода во время испытаний на долговечность необходимо контролировать в пределах  $2\text{ }^{\circ}\text{C}$  от заданной при испытании. Для правильного запуска и эксплуатации светодиода воздушный поток должен быть сведен к минимуму, для исключения его влияния на характеристики теплового потока.

При проведении ускоренных испытаний УФ светодиодов на долговечность температура кристалла светодиода поддерживалась равной  $+85\text{ }^{\circ}\text{C}$  при прямом токе 700 мА. График изменения светового потока исследуемой группы светодиодов марки LEUVA33U70 от времени испытаний представлен на рисунке.

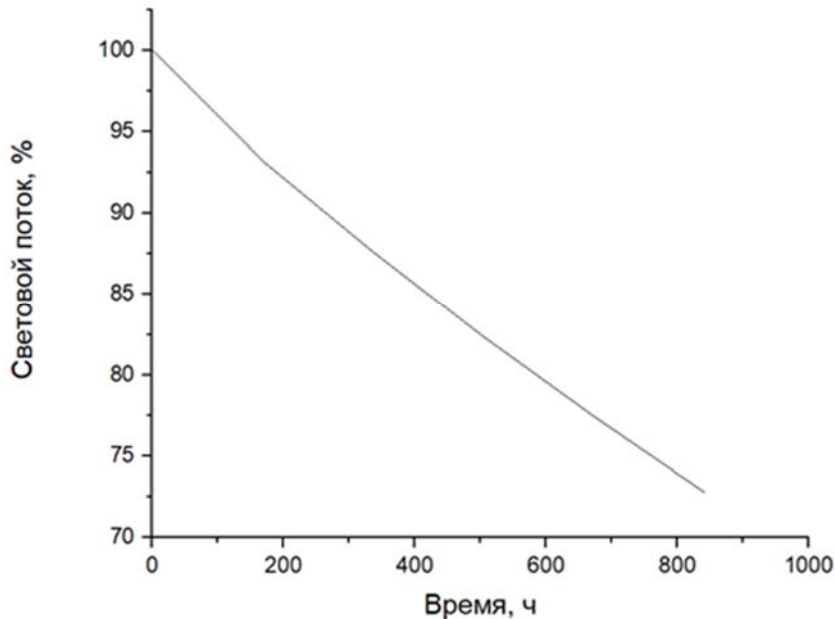


Рис. 3. График изменения светового потока группы исследуемых светодиодов.

Учитывая отраслевой стандарт IESNA TM-21 [1], предположим, что снижение мощности излучения УФ-светодиода соответствует модели экспоненциального снижения, как показано в уравнении (1):

$$P(t) = B_0 \cdot \exp(-at), \quad (1)$$

где  $t$  – время испытаний в часах,  $P(t)$  – нормированная оптическая мощность излучения в момент времени  $t$  в процессе деградации,  $B_0$  – прогнозируемая начальная константа мощности излучения,  $a$  – константа скорости затухания. В этом исследовании отраслевой стандарт IESNA TM-21 использовался для оценки срока службы путем замены светового потока, рекомендованного для обычных источников света. В отличие от подгонки образцов УФ-светодиодов с уравнением (1) для получения псевдофактических сроков службы, мощность излучения группы образцов в каждый момент времени испытаний необходимо усреднить. Затем к усредненным данным мощности излучения применяется метод нелинейной регрессии наименьших квадратов для подбора кривой [1].

Срок службы при снижении номинальной мощности излучения можно спрогнозировать по уравнению следующим образом:

$$L_p = \frac{\ln(100 \cdot \frac{B_0}{P})}{a}, \quad (2)$$

где  $L_p$  — время снижения номинальной мощности излучения в часах, а  $p$  — процент сохраняемой мощности излучения по сравнению с исходной выходной мощностью излучения (принято значение 70 %).

Падение совокупной мощности излучения УФ-светодиодов можно рассматривать как зависящий от времени стохастический процесс  $\{X(t), t \geq 0\}$ . Модель стационарного гамма-распределения со свойствами, описанными в работе [5] может быть использована для моделирования этого процесса деградации.

Приближенная формула для оценки средней наработки на отказ по модели  $X(t) \sim \text{Ga}(\alpha(t), \beta)$  была предложена Парком и Пэдджеттом [6] и представлена следующим образом:

$$M = \frac{\rho}{\beta} + \frac{1}{2c}. \quad (3)$$

Чтобы применить модель гамма-распределения к практическим данным, требуются статистические методы для оценки параметров гамма-распределения. В данном исследовании параметры  $c$  и  $\beta$  оценивались методом моментов [7] следующим образом:

$$c \cdot \beta = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - x_{i-1})}{\sum_{i=1}^n (t_i - t_{i-1})} = \frac{x_n}{t_n} = \delta, \quad (4)$$

$$x_n = \beta \left( 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (t_i - t_{i-1})^2}{\left[ \sum_{i=1}^n (t_i - t_{i-1}) \right]^2} \right). \quad (5)$$

В дополнение к Гамма-процессу Винеровский процесс также является методом вероятностного моделирования, который широко используется для описания процессов деградации. Обычно Винеровский процесс со сносом можно представить в следующем виде [8]

$$X(t) = \mu t + \sigma B(t), \quad (6)$$

где  $\mu$  – параметр дрейфа,  $\sigma$  – параметр диффузии, а  $B(t)$  – стандартный Винеровский процесс или стандартное броуновское движение.

Процесс деградации излучаемой оптической мощности УФ-светодиодов подчиняется описанному выше Винеровскому процессу, и соответствующий порог отказа может быть обозначен как  $\rho$  ( $\rho > 0$ ). Параметры  $\mu$  и  $\sigma$  оценивались путем подгонки нормального распределения приращений в процессе деградации производительности. Суммарная функция распределения и функция плотности вероятности срока службы УФ-светодиодов могут быть дополнительно получены следующим образом:

$$F_T(t) = \Phi\left(\frac{\mu t - \rho}{\sigma \sqrt{t}}\right) + \exp\left(\frac{2\mu\rho}{\sigma^2}\right) \Phi\left(\frac{-\mu t - \rho}{\sigma \sqrt{t}}\right), \quad (7)$$

$$f_T(t) = \frac{\rho}{\sqrt{2\pi\sigma^2 t^3}} + \exp\left(-\frac{(\rho - \mu t)^2}{2\sigma^2 t}\right). \quad (8)$$

На рисунке 4 показано построение нормированных данных о средней кумулятивной деградации оптической мощности излучения  $X(t)$  с первыми временными диапазонами группы исследуемых светодиодов.

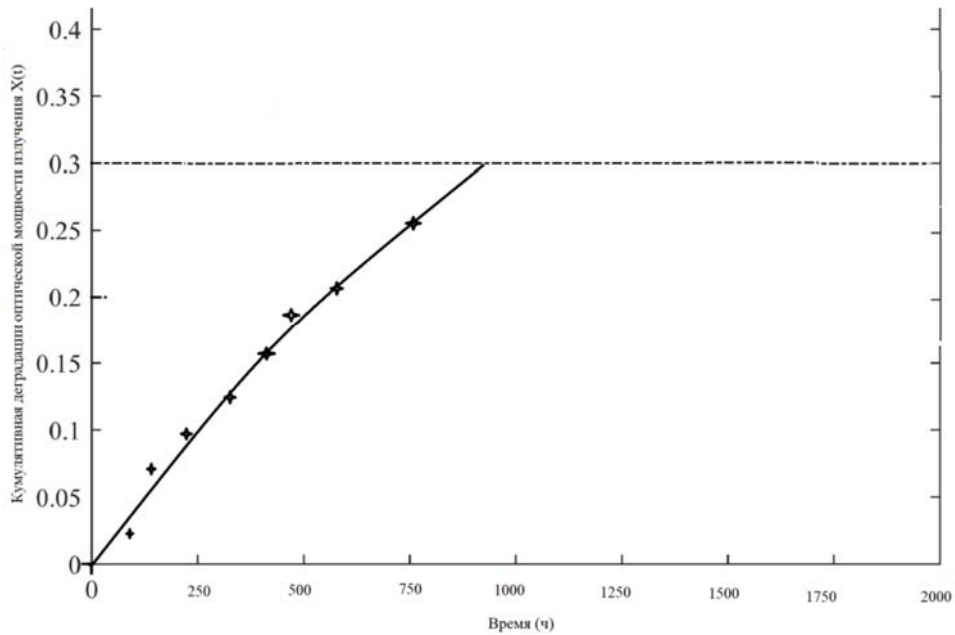


Рис. 4. График изменения кумулятивной деградации оптической мощности.

**Заключение.** На основе полученных данных реализуются стохастические прогнозы с использованием методов Гамма-распределения и Винеровского процесса. Результаты показывают, что по сравнению с регрессионным методом наименьших квадратов применяемым в отраслевом стандарте IESNA TM-21, рекомендованном Североамериканским обществом инженеров по светотехнике (IESNA), предлагаемые стохастические методы могут прогнозировать срок службы с достаточно высокой точностью и узкими доверительными интервалами, что подтверждает, что они предоставляют более надежную информацию, чем стандарт IESNA TM-21.

#### Литература.

1. IESNA TM-21-11, Projecting Long Term Lumen Maintenance of LED Light Sources Illuminating Engineering Society New York (NY), 2011.
2. C. Lyu, Q. Lai, T. Ge, H. Yu, L. Wang, N. Ma. A lead-acid battery's remaining useful life prediction by using electrochemical model in the Particle Filtering framework Energy, 120 (2017), pp. 975-984.
3. Q. Zhai, P. Chen, L. Hong, L. Shen. A random-effects Wiener degradation model based on accelerated failure time. Reliab Eng Syst Saf, 180 (2018).
4. H. Jianlin, et al. Degradation modeling of mid-power white-light LEDs by using Wiener process Opt Express, 23 (15) (2015), pp. 966-978.
5. N. Singpurwalla, "Gamma processes and their generalizations: an overview," in Engineering probabilistic design and maintenance for flood protection, R. Cooke, M. Mendel, and H. Vrijling, Eds. Boston, MA: Springer US, 1997, pp. 67-75.
6. C.-C. Tsai, S.-T. Tseng, N. Balakrishnan. Mis-specification analyses of Gamma and Wiener degradation processes. J Stat Plan Inference, 141 (2011), pp. 3725-3735.
7. J. M. van Noortwijk and M. D. Pandey. A stochastic deterioration process for time-dependent reliability analysis.
8. Z. Jing, M.S. Ibrahim, J. Fan, X. Fan, G. Zhang Lifetime prediction of ultraviolet light-emitting diodes with accelerated Wiener degradation process.

## Генераторы Аркадьева-Маркса с вложенными коаксиальными формирующими линиями

П. В. Молчанов <sup>a</sup>, Е. А. Гурневич <sup>a</sup>, К. Ю. Чертков <sup>b</sup>

<sup>a</sup>НИУ «Институт ядерных проблем», Минск, Беларусь

<sup>b</sup>Белорусский Государственный университет, Минск, Беларусь

E-mail: molchanov@inp.bsu.by

**Введение.** Генерация сильноточных релятивистских электронных пучков со стабильными выходными параметрами является актуальной задачей исследований в области релятивистской СВЧ электроники, физики плазмы и физики высоких плотностей энергии. Подобные пучки применяются для генерации мощного излучения в различных диапазонах, от СВЧ до рентгеновского, исследований в области термоядерного синтеза, для создания систем накачки оптических лазеров, решения технологических задач, связанных с обработкой и модификацией материалов и т. д. [1-3]. Подобные исследования и разработки сопровождаются повышением требований к качеству таких пучков [2-3]; в особенности актуальной является проблема получения высоковольтных импульсов (питающих пучок) амплитудой более 500 кВ, «квазипрямоугольной» формы со стабильными выходными параметрами, в первую очередь длительностью 100 нс и более, фронтом нарастания менее 10 нс.

Одним из наиболее широко используемых и эффективных способов получения импульсов является использование длинных коаксиальных формирующих линий (ФЛ) [3]. Суть метода заключается в относительно медленной зарядке ФЛ до высокого напряжения с помощью импульсных генераторов Аркадьева-Маркса либо трансформатора Тесла, и последующим более быстрым разрядом линии на нагрузку через коммутирующий разрядник.

Необходимо отметить, что обычные коаксиальные формирующие линии обладают рядом ограничивающих их дальнейшее развитие недостатков. В первую очередь, это большие габариты, а именно необходимость существенного увеличения длины для формирования требуемой длительности импульса на нагрузке. Действительно, как известно из теории длинных линий [4], длительность импульса на нагрузке  $\tau$  равна удвоенному времени пробега волны вдоль линии  $\tau = 2T$ , где  $T = l\sqrt{\epsilon}/c$ ,  $l$  – длина линии,  $c$  – скорость света,  $\epsilon$  – диэлектрическая проницаемость заполнения линии. Таким образом, если в качестве изолирующей жидкости используется деионизованная вода с  $\epsilon \sim 80$ , то для линии длиной 1 м получаем  $T = 30$  нс. Генерация высоковольтных импульсов питания с длительностью порядка 100 нс и более с помощью однородных ФЛ требует значительного увеличения размеров установки.

Вторая существенная особенность традиционно применяемых ФЛ – низкое волновое сопротивление  $\rho$ , характерное для ФЛ с диэлектриками с большим  $\epsilon$ . Так, для линии, заполненной деионизованной водой, типичное значение  $\rho$  составляет единицы Ом. Режим разряда линии на относительно высокоомную нагрузку (например, релятивистский СВЧ-генератор типа лампы обратной волны с характерным импедансом 80–120 Ом) в данном случае становится несогласованным: форма импульса на нагрузке становится «ступенчатой» (состоящей из серии импульсов со снижающейся амплитудой); эффективность передачи энергии из линии в первый импульс на нагрузке существенно падает.

Для преодоления указанных недостатков в работах [5,6] впервые было предложено использовать вложенные коаксиальные формирующие линии, позволяющие при сохранении общих габаритов системы существенно (в разы) увеличить длительность

импульса на нагрузке, а также увеличить эффективное волновое сопротивление линии. В работах исследуются режимы зарядки комбинированных линий от встроенного трансформатора Тесла, а расчеты были приведены только для процесса разряда линии. Приведены результаты экспериментов, включающие в себя генерацию мощных импульсов СВЧ излучения в 2.2 ГВт длительностью  $\sim 100$  нс с использованием двукратно вложенной ФЛ и системой питания на основе генератора Тесла [5].

В данном докладе, в отличие от указанных работ, рассмотрена работа трехкратно вложенной формирующей линии от генератора Аркадьева-Маркса, представлены результаты расчетов полного цикла работы (зарядка и разряд) системы на высокоомную нагрузку, имитирующую импеданс вакуумного диода электронного ускорителя.

**Схема установки.** На рисунке 1 приведена анализируемая схема генерации высоковольтных импульсов со вложенными формирующими линиями. Для сравнения рядом на том же рисунке приведена схема, использующая обычную коаксиальную линию. На рисунке 2 приведена конструкция трехкратно вложенной коаксиальной линии.

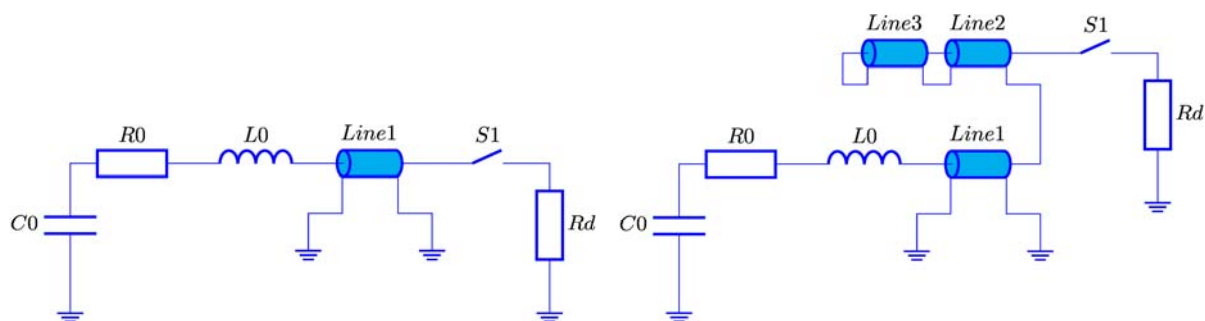


Рис. 1. Принципиальная электрическая схема генерации высоковольтных импульсов с использованием генератора Аркадьева-Маркса (ГИН) и длинных формирующих линий.

Слева: обычная коаксиальная формирующая линия, справа: трехкратно вложенная линия.  $C0$  – емкость ГИН в ударе,  $R0$  – сопротивление разрядной цепи ГИН,  $L0$  – зарядная индуктивность (сумма индуктивности разрядной цепи ГИН и индуктивности подключения линии),  $S1$  – коммутирующий разрядник,  $Rd$  – эффективное сопротивление нагрузки (вакуумного диода).

Отметим принцип работы предложенной схемы генерации высоковольтных импульсов квазипрямоугольной формы. Заряженная до начального напряжения  $U0$  емкость  $C0$  начинает разряжаться на линию через сопротивление  $R0$  и индуктивность  $L0$ . При этом ключ  $S1$  (разрядник) разомкнут. Емкость  $C0$  представляет собой совокупную «ударную» емкость генератора импульсных напряжений - генератора Аркадьева-Маркса (ГИН) [3],  $R0$  – сопротивление разрядной цепи ГИН. Зарядная индуктивность  $L0$  является суммой индуктивности ГИН и зарядной индуктивности подключения линии. Величина  $L0$  подбирается таким образом, чтобы время зарядки было много больше времени пробега волны по линиям; в этом случае на этапе зарядки линию можно приблизительно заменить эквивалентной сосредоточенной емкостью. После завершения процесса зарядки линии до некоторого заранее заданного напряжения  $U1$  замыкается ключ  $S1$  и происходит быстрый разряд линии на нагрузку, при этом, если индуктивность  $L0$  достаточно велика, одновременным разрядом линии на емкость  $C0$  можно в первом приближении пренебречь. Если геометрическая длина  $l$  всех вложенных линий приблизительно одинакова (как это имеет место на рисунке 2), а диаметры проводников выбраны так, что волновые сопротивления линий  $\rho_1 = \rho$ ,  $\rho_2 = 2\rho$ ,  $\rho_3 = 2\rho/3$ , то в соответствии с анализом [6] на нагрузке с сопротивлением  $Rd = 3\rho$  получится



квазипрямоугольный импульс напряжения с амплитудой  $U/2$  и длительностью  $6T$ , где  $T = l\sqrt{\epsilon}/c$ . Эффективное волновое сопротивление трехкратно вложенной линии, таким образом, составляет  $3r$ .

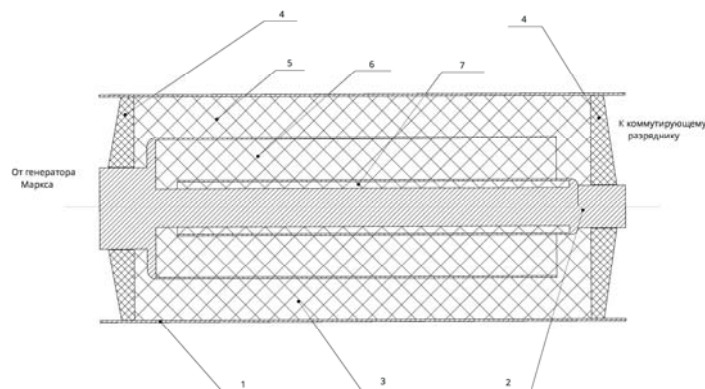


Рис. 2. Конструкция трехкратно вложенной коаксиальной формирующей линии: 1 – наружный проводник (корпус), 2 – внутренний проводник, состоящий из трех коаксиальных цилиндров, 3 – изолирующая жидкость, 4 – проходные твердотельные изоляторы (диафрагмы), 5 – первая линия (соответствует Line 1 на рис. 1), 6 – вторая линия (Line 2), 7 – третья линия (Line 3).

**Результаты расчетов.** Для расчета процесса генерации импульсов напряжения в рассматриваемой системе были созданы упрощенная электротехническая модель схемы на рисунке 1 в программном пакете *ngspice* [7], а также полная 3D модель расчета системы, позволяющая совместно решать уравнения Максвелла методами конечных разностей и уравнения цепи. Для расчетных целей использовались несколько значений параметров  $C0$ ,  $R0$ ,  $L0$  и  $U0$ , соответствующих различным вариантам ГИН:

1) Вариант 1 –  $C0 = 3.125$  нФ,  $R0 = 3.5$  Ом,  $L0 = 10$  мкГн,  $U0 = 500$  кВ, соответствует параметрам компактного ГИН с газовой изоляцией и емкостью ступени  $37.5$  нФ [8];

2) Вариант 2 –  $C0 = 5$  нФ,  $R0 = 3.5$  Ом,  $L0 = 10$  мкГн,  $U0 = 600$  кВ, – параметры ГИН с емкостью ступени  $60$  нФ.

Индуктивность подключения нагрузки во всех расчетах принималась одинаковой ( $250$  нГн). В упрощенных расчетах *ngspice* использовалась модель линий LTRA, а длина всех трех линий в точности совпадала. Внутренний диаметр наружного проводника ФЛ во всех расчетах составлял  $520$  мм. Сопротивление нагрузки в расчетах составляло  $90$  Ом (соответствует импедансу диода релятивистской ЛОВ).

Для обеспечения максимально плоской формы вершины импульса напряжения подбирался момент срабатывания разрядника  $SI$  до достижения максимального зарядного напряжения на линии. Проведены расчеты для различных значений длины комбинированной ФЛ на основе масляной изоляции ( $\epsilon = 2.25$ ), специальных жидких сред MIDEЛ 7131 ( $\epsilon = 3.1$ ), THESO ( $\epsilon = 16$ ) и водяной изоляции ( $\epsilon = 80$ ), обеспечивающие напряжение на нагрузке более  $500$  кВ и максимизирующие длительность полки импульса питания.

В результате проведенного моделирования оказалось возможным подобрать варианты геометрии линий, обеспечивающие параметры питания на обоих рассмотренных вариантах ГИН с одинаковой длиной ФЛ. В качестве примера на рисунке 3 приведены результаты расчета напряжения на нагрузке для линии длиной  $1$  м на основе жидкости THESO (диаметр внутреннего проводника первой линии  $330$  мм).

Из рассмотрения и анализа рисунка 3 следует, что длительность плоской вершины импульса при использовании трехкратно вложенной линии в три раза выше,

чем для одинарной линии той же длины. Амплитуда напряжения на нагрузке в 90 Ом зависит от емкости ГИН в ударе и для варианта 1 составляет ~500 кВ. Полный 3D расчет демонстрирует наличие небольших скачков напряжения, обусловленных неточным равенством длин трех вложенных линий в реальной геометрии (см. рисунок 2).

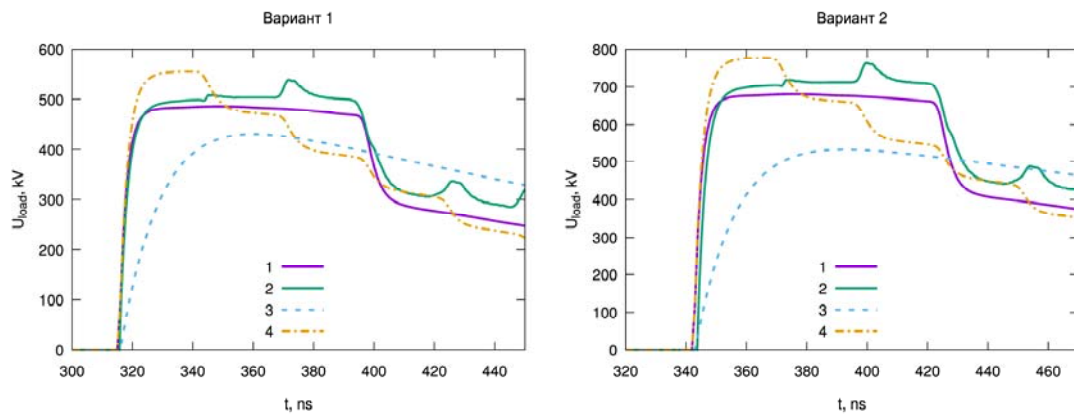


Рис. 3. Результаты расчета напряжения на нагрузке 90 Ом для двух вариантов ГИН с трехкратно вложенной формирующей линией длиной 1 м на основе изолирующей жидкости THESO: 1 – результаты электротехнического расчета ngspice; 2 – результаты полного 3D расчета с использованием метода конечных разностей; 3 – результаты расчета работы ГИН на нагрузку без линии, 4 – результаты расчета ngspice для одинарной (невложенной) линии такой же длины.

**Заключение.** В работе представлена возможность использования многократно вложенных коаксиальных линий в качестве дополнительного формирующего элемента для высоковольтных генераторов Аркадьева-Маркса. Приведенные результаты расчетов для трехкратно вложенной линии показывают, что такая схема позволяет существенно улучшить форму импульса генератора, а именно, позволяет получить квазипрямоугольные импульсы напряжения амплитудой ~500 кВ и выше на эквиваленте нагрузки (90 Ом). При этом существенно (в 3 раза) увеличивается длительность импульса по сравнению с обычной коаксиальной линией той же длины. Полученные результаты могут быть использованы при разработке и создании компактных сильноточных ускорителей мультигигаваттного уровня мощности.

### Литература.

1. Месяц Г. А. Импульсная энергетика и электроника. – М.: Наука, 2004.
2. Rostov V.V., [et al.] / Repetitive production of nanosecond gigawatt microwave pulses // IEEE Trans. Plasma Sci. – 2008. – Vol. 36. – №. 3. – P. 655-660.
3. Korovin S.D. [et al.] / Pulsed power-driven high-power microwave sources // Proceedings of the IEEE. – 2004. – Vol. 92. – №. 7. – P. 1082-1095.
4. Шимони К. Теоретическая электротехника. – М.: Мир, 1964.
5. Liu S. [et al.] A Tesla-type long-pulse generator with wide flat-top width based on a double-width pulse-forming line // Laser Part. Beams. – 2018. – Vol. 36. – №. 1. – P. 115-120.
6. Rostov V.V. [et al.] High-Voltage Drivers Based on Forming Lines with Extended Quasi-Rectangular Pulses for High-Power Microwave Oscillators // Electronics. – 2022. – Vol. 11. – №. 3. – P. 406.
7. <http://ngspice.sourceforge.net>
8. Е.П. Большаков [и др.] / Компактный частотный ГИН с элегазовой изоляцией на 600 кВ, 585 Дж, 10 Гц // ВАНТ. Серия электрофиз. Аппарат. – 2010. – № 5. – С. 137-147.

## **SERS-подложки с пучками нанопроволок для детектирования внутриклеточных процессов**

О. Г. Чечёкина <sup>a</sup>, Е. П. Кожина <sup>b,c</sup>, С. А. Бедин <sup>b,c,d</sup>, А. А. Пирязев <sup>e</sup>,  
Р. А. Акасов <sup>d,f</sup>, Д. Б. Трушина <sup>d,f</sup>

<sup>a</sup> *Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»,  
Москва, Россия*

<sup>b</sup> *ФГБОУ ВО «Московский педагогический государственный университет,  
Москва, Россия*

<sup>c</sup> *ФГБУН Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук,  
Москва, Россия*

<sup>d</sup> *ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия*

<sup>e</sup> *Центр Генетики и Наук о Жизни, НГУ «Сириус», пгт. Сириус, Россия*

<sup>f</sup> *Первый Московский государственный медицинский университет им. И.М Сеченова  
Министерства здравоохранения РФ (Сеченовский университет), Москва, Россия  
E-mail: ogchechyokina@edu.hse.ru*

Одним из важных направлений исследования органических соединений и клеточных культур является изучение их состава, получение информации об углах и деформациях связей. Такую информацию можно получить методами спектроскопии, в частности, методом комбинационного рассеяния света (КР), крайне слабого по своей природе. В настоящее время, благодаря развитию технологий синтеза наноструктурированных поверхностей, спектроскопия усиленного поверхностью комбинационного рассеяния света (ГКР, SERS – англ.) открывает перспективы не только в ряде научных задач, но и на практике - в области криминалистики, фармакологии и медицины. Одной из важных задач фармакологии является изучение механизмов воздействия препаратов, включая изучение распространения лекарственного вещества внутри клетки и его локализацию в процессе метаболизма. Методика Рамановской микроскопии способна решать подобные задачи.

Стоит отметить, что при снятии спектров важна статичность клеточных культур. Так как клетки потенциально могут крепиться на наноструктурированных поверхностях, это может обеспечить их неподвижность при снятии спектра и минимизировать размытие фокуса. Эффективность SERS-подложек определяется наличием участков с высокоинтенсивными локальными электрическими полями (“hot spots”), возникающими в основном на остриях наноструктур. Поэтому при культивировании клеток на поверхности таких подложек существует опасность нарушения целостности клеточной мембраны, что повлечет за собой невозможность изучения динамики изменения спектров.

В данной работе предлагается изучение SERS спектров, полученных на мышинных макрофагах RAW264.7, как без внесения препарата, так и после воздействия порфиразина и большой концентрации раствора сахара. Известно, что порфиразин может использоваться в фотодинамической терапии, он аккумулируется в раковых клетках и, в частности, концентрируется в пренуклеарной зоне и ядерной мембране. Высокий уровень глюкозы связывают с увеличенным ростом множества раковых клеточных линий, поэтому таргетирование метаболизма глюкозы может стать обещающей стратегией для терапии определенных типов рака. И, несмотря на массу исследований, роль глюкозы в росте клеток на уровне метаболитов всё ещё остается не до конца понятной. В данной работе изучаются перспективы использования метода SERS спектроскопии для развития данного направления.

В качестве усиливающих SERS подложек использовались серебряные нанопроволоки (НП) на металлической основе [1]. В результате отработки методики нанесения клеточных культур на такую SERS-подложку удалось добиться сохранения целостности клеточной мембраны благодаря высокой площади ее контакта с пучками слипающихся НП. Успешное прикрепление клеток к SERS подложке продемонстрировано методами оптической и электронной микроскопии (рисунок 1). Для получения оптических изображений использовали оптический инспекционный микроскоп Nikon LV100 (Япония) (рисунок 1а), для получения SEM-изображений использовали сканирующий электронный микроскоп Hitachi TM4000Plus (рисунок 1б).

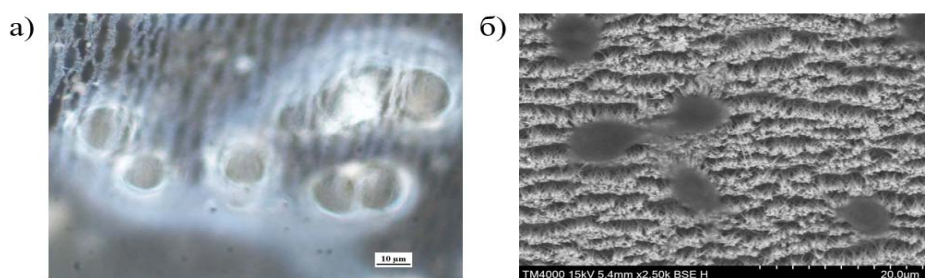


Рис. 1. Оптическое изображение клеток RAW264.7 на SERS подложке с серебряными НП (а), SEM-изображение клеток RAW264.7 на SERS подложке (б).

Регистрацию SERS-спектров клеток, прикрепленных к подложке с массивом серебряных НП, осуществляли на рамановском спектрометре Horiba LabRam Evolution (Франция) (рисунок 2). Спектры КР возбуждали лазером с длиной волны 633 нм и мощности 0.17 мВт. При регистрации спектров использовали объектив с увеличением 50х. Время экспозиции составляло 50 секунд. Анализировали культуру RAW 264.7, после инкубации в 1мМ растворе сахара или 1мМ растворе порфиразина в культуральной среде в течении 10 минут. Также были получены спектры клеток, не инкубированных с малыми молекулами, и спектры 1мМ растворов сахара и порфиразина, нанесенных на подложки в качестве растворов индивидуальных соединений. На спектрах клеток без препарата мы наблюдали: C-C twist Tyr/Phe (648), O-P-O str DNA (924), C-C/C-N str, lipids/proteins(1150), Amide III (1202), CH rocking, lipids/proteins (1395), CH<sub>2</sub> interactions (1447), C-C, C-O (1616). Была обнаружена высокая стабильность сигнала и хорошая повторяемость при снятии спектров большого числа клеток на поверхности SERS подложки, что продемонстрировано на рисунке 2.

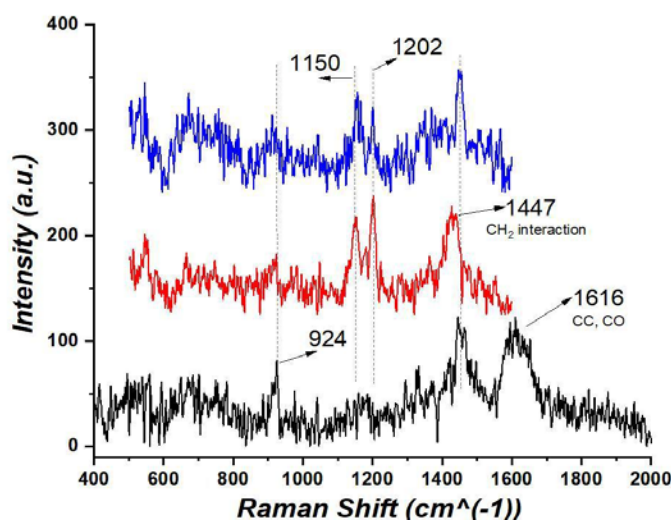


Рис. 2. SERS спектры RAW264.7.

В ходе данной работы была разработана методика культивирования мышинных макрофагов на SERS подложках с пучками серебряных НП. При помощи оптической и SEM-микроскопии была проведена диагностика успешной инкубации клеток на подложку. Методом SERS спектроскопии были получены спектры клеток, проинкубированных с растворами сахара и порфиразина, был проведен анализ и сравнение полученных данных со спектрами клеток в нативном состоянии. Следующим этапом исследования станет изучение временной динамики изменения SERS спектров, в том числе и спектров люминесценции.

**Благодарности.** Работа в части синтеза SERS подложек выполнена в рамках государственного задания ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН при поддержке Минобрнауки России, отработка методики нанесения клеток на SERS подложки выполнена при поддержке гранта РФ (21-74-10058). Кожина Е.П. и Бедин С.А. являются членами ведущей научной школы РФ «Опτικο-спектральная наноскопия квантовых объектов и диагностика перспективных материалов» (проект НШ-776.2022.1.2)

#### **Литература.**

1. Kozhina E.P., Bedin S.A., et. all. / Ag-Nanowire Bundles with Gap Hot Spots Synthesized in Track-Etched Membranes as Effective SERS-Substrates // Applied Sciences. - 2021. - V. 11, № 4. - P. 1375.



## Влияние плазменных потоков и высокотемпературного отжига на механические свойства меди

Н. О. Деменчук

*Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь*

*e-mail: natalia.demenchuk@yandex.by*

В настоящее время медь является одним из главных промышленных металлов. Сплавы на ее основе широко используются, благодаря их высокими электро- и теплопроводности, достаточной коррозионной стойкости, относительно легкости изготовления вместе с высокой прочностью и сопротивлением усталости [1]. Перечисленные выше свойства позволяют использовать медные сплавы для изготовления широкого класса деталей радиоаппаратуры, электронной и авиационной техники, элементов теплообменных устройств.

При взаимодействии меди с кислородом образуются такие оксиды, как  $\text{CuO}$  и  $\text{Cu}_2\text{O}$ , которые обладают большим магнетосопротивлением и являются основой для формирования структур с высокотемпературной сверхпроводимостью, а также высокой электрохимической активностью [2]. Применяются в качестве электродов в литиевых источниках тока, в материалах электродов и чувствительных элементах, являются перспективными материалами для преобразования солнечной энергии. Помимо этого, оксиды меди являются продуктом коррозионных процессов при повышенных температурах, которые приводят к деградации механических свойств изделий. В этой связи актуальным является изучение влияния структурного состояния приповерхностного слоя на кинетику его окисления. С целью модифицирования структуры медного сплава использовался метод воздействия компрессионными плазменными потоками. После чего обработанные образцы подвергались серии изохронных отжигов при температурах от 100 до 500 °С в воздушной атмосфере.

Объектом исследования являлись образцы технической чистой меди, размерами 1×2 см и толщиной 1 мм.

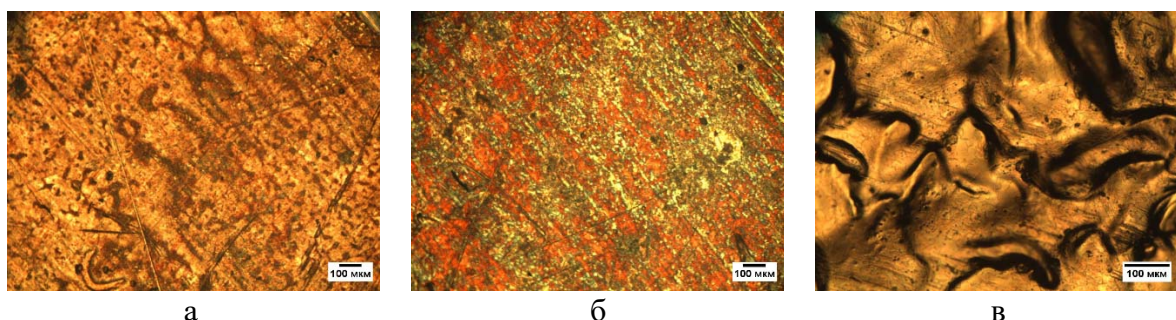


Рис. 1. Оптические фотографии поверхности меди:

а – исходная медь, б – после отжига, в – после воздействия плазмы и отжига.

В работе исследовался фазовый состав модифицированных слоев с помощью рентгеноструктурного анализа на дифрактометре Ultima IV Rigaku в геометрии параллельных пучков с использованием медного излучения (длина волны 0,154178 нм), который показал, что при отжиге в 20 мин., от 200 °С происходит образование оксидов  $\text{CuO}$  и  $\text{Cu}_2\text{O}$ . Из анализа дифрактограммы (рисунок 2(а)) видно, что интенсивность дифракционных максимумов, соответствующих  $\text{CuO}$  и  $\text{Cu}_2\text{O}$ , растет с повышением температуры отжига. Кроме того, при температуре 500 °С, происходит быстрое

образование оксида CuO. После отжига в течение 40 минут при температуре 500 °С, наблюдается значительный рост интенсивности дифракционных максимумов, соответствующих CuO. Кроме того, можно заметить, что повышение времени отжига приводит к более интенсивному окислению исследуемых образцов.

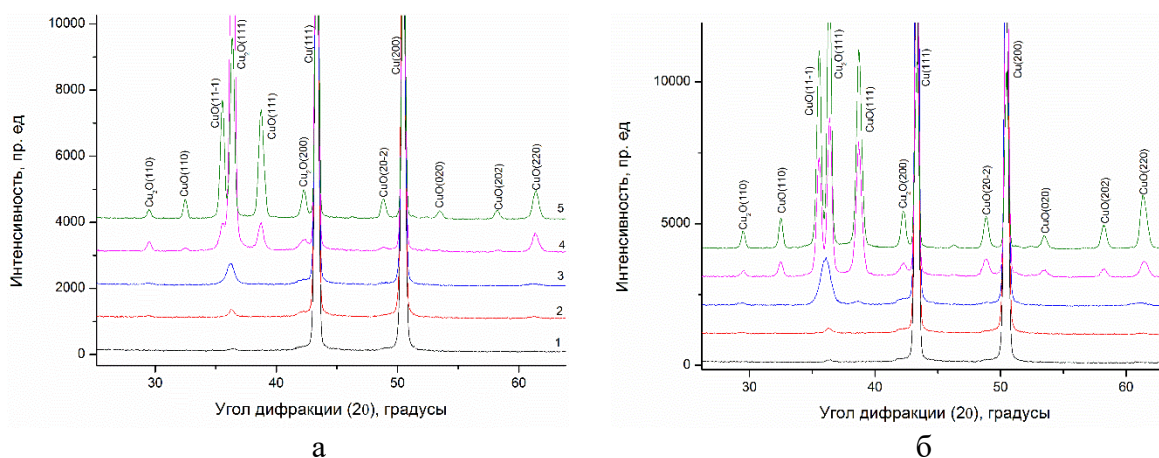


Рис. 2. Рентгеновские дифрактограммы меди после отжига в течение 20 минут (а) и 40 минут (б) при температурах 100°C(1), 200°C (2), 300°C (3), 400°C (4) и 500°C (5).

Следовательно, при проведении двух последовательных отжигов, было установлено, что первым оксидом, который образуется на поверхности образца (в диапазоне от 100 до 300 °С) является Cu<sub>2</sub>O, т.к содержание Cu в нем больше, чем в CuO, а начиная от температуры 300 °С выше, происходит интенсивное образование CuO.

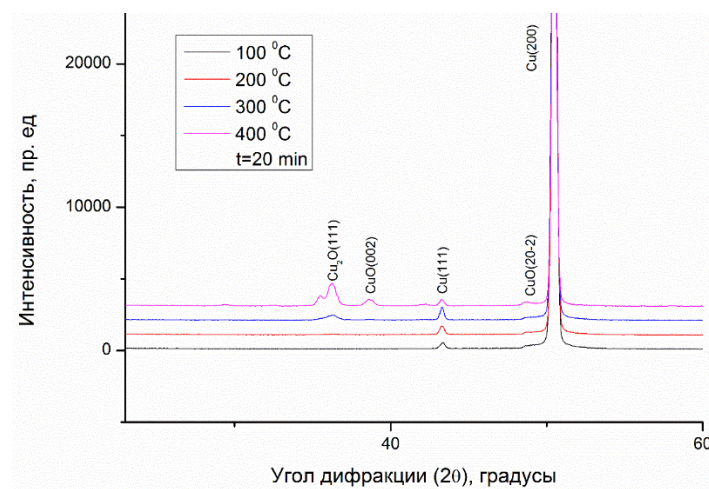


Рис. 3. Дифрактограммы образцов меди после воздействия плазмы и отжига (20 мин).

После отжига образцов меди, которые предварительно были подвергнуты воздействию плазмы, интенсивность линий, соответствующих оксидам меди, намного меньше по сравнению с линиями на рисунке 3. Следовательно, можно сделать вывод, что толщина окисленного слоя становится меньше.

С помощью метода индентирования измерялась микротвердость поверхностного слоя. Измерения проводились по методике Виккерса на микротвердомере Wilson Instruments MVD 402 при нагрузке 10 г. Результаты измерения микротвердости исследуемых образцов, обработанных КПП (рисунок 4), снижаются по сравнению с исходной пластиной (начальный образец). Это может быть связано со снижением уровня

остаточных механических напряжений в приповерхностном слое и его дефектности. Следовательно, формирование оксидных фаз  $\text{CuO}$  и  $\text{Cu}_2\text{O}$  происходит на поверхности с меньшей степенью деформации.

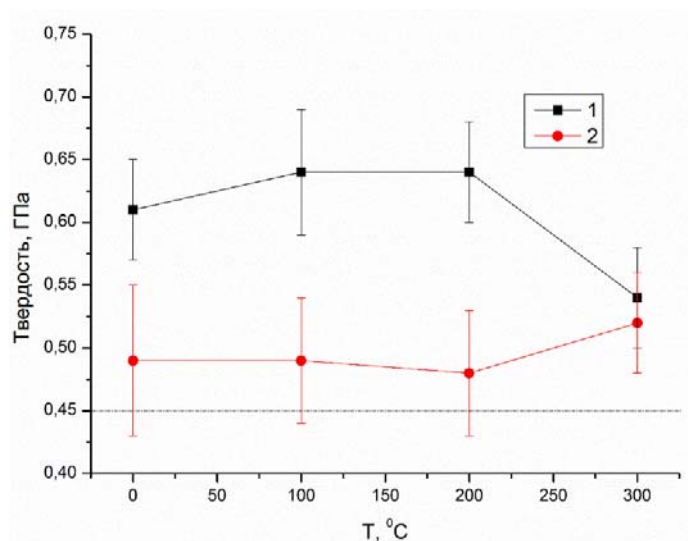


Рис. 4. Зависимость микротвердости от температуры отжига (2 – образцы предварительно обработанные плазмой).

При помощи трибометра изучались трибологические свойства материала. При температуре 100 °C происходит заметный рост установившегося коэффициента трения, что связано с наличием тонкой оксидной пленки на поверхности образца, которая разрушается в результате действия нагрузки на индентер. Затем от 100 °C - 300 °C толщина оксидной пленки увеличивается, вследствие чего разрешение происходит в меньшей степени. При 300 °C - 400 °C происходит формирование  $\text{CuO}$ , который выступает в качестве абразива тем самым повышая установившийся коэффициент трения.

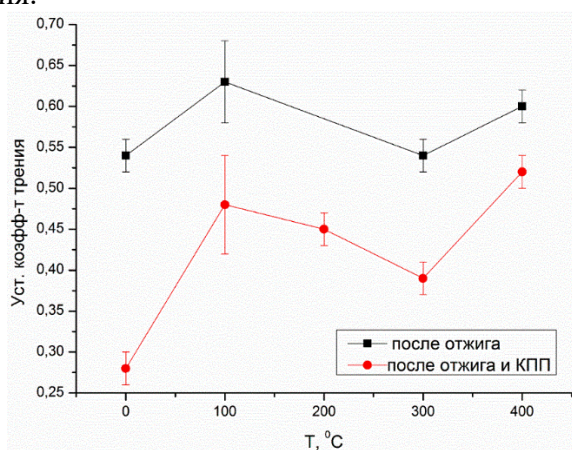


Рис. 5. Зависимость уст. коэфф. трения от температуры отжига.

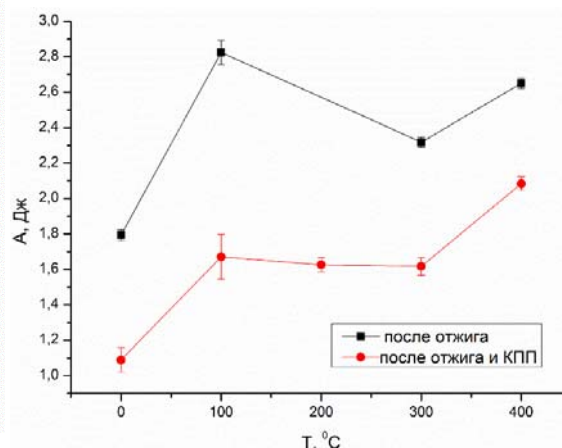


Рис. 6. Зависимость работы, совершаемой силой трения, от температуры отжига.

Также в работе изучалась износостойкость исследуемых образцов, подверженных плазменному воздействию. На износостойкость материала влияет множество параметров (установившийся коэффициент трения, путь приработки, коэффициент



трения на пути приработки). Для учета данных параметров вводилась работа, совершаемая силой трения:

$$A = \int F_{\text{тр}} ds = \int_0^{n_{\text{max}}} \mu N l dn = Nl \int_0^{n_{\text{max}}} \mu dn \quad (1)$$

где  $N$  – нагрузка (0,02 Н),  $l$  – длина цикла (0,005 м),  $\mu$  – коэфф. трения,  $n$  – кол-во циклов.

Данные на рисунке 6 показывают, что образцы, которые были подвержены воздействию плазменными потоками характеризуются меньшей работой силой трения, следовательно, меньшим износом.

Таким образом в работе показано, что при температурах ниже 300°C происходит образование преимущественно  $\text{Cu}_2\text{O}$ , а при температурах выше чем 300°C, происходит образование  $\text{CuO}$ , что обусловлено увеличением содержания кислорода в кристаллической решетке меди. Также экспериментально установлено, что воздействие плазмы резко сокращает толщину оксидного слоя, следовательно, предварительная обработка образцов плазменными потоками препятствует окислению. Установлено, что воздействие КПП позволяет повысить термическую стабильность трибологических свойств.

#### Литература.

1. Шкатуляк Н. М. Влияние знакопеременного изгиба на текстуру, структуру и механические свойства листовой меди / Физика металлов и металловедение 2012, т. 113, №8, с. 853 – 859.
2. А.Е. Тюрнина, В.Я. Шур, Р.В. Козин, Д.К. Кузнецов, В.И. Пряхина, Г.В. Бурбан. Синтез и исследование стабильных коллоидных растворов наночастиц меди / Физика твердого тела, 2014, т. 56, № 7, с. 1379 – 1385.

## Получение и люминесцентные характеристики нанокристаллов CsPbBr<sub>3</sub> в растворах и полимерной матрице

В. В. Крюков <sup>a,b</sup>, А. А. Романенко <sup>a</sup>, С. В. Ващенко <sup>b</sup>, О. С. Кулакович <sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Институт физики НАН Беларуси, Минск, Беларусь*

<sup>b</sup> *Белорусский Государственный Университет, Минск, Беларусь*

*E-mail: vitalyakrukov2000@gmail.com*

**Введение.** Квантовые точки полностью неорганических галогенидных перовскитов демонстрируют узкую полосу фотолюминесценции и высокие квантовые выходы фотолюминесценции [1,2]. Также они обладают лучшей термостабильностью, чем гибридные органико-неорганические перовскиты [2]. Меняя лишь галоген-анионы и их соотношение в составе перовскитов, можно легко управлять положением спектра люминесценции в широком диапазоне 410–700 нм [1,3]. Все эти особенности квантовых точек перовскитов (PeQDs) позволяют их применять в качестве новых материалов в оптоэлектронике [2,4].

Препятствием для широкого применения PeQDs является их стабильность при использовании в атмосферных условиях. Нанокристаллы перовскитов могут терять свои оптические характеристики при контакте с кислородом и, особенно, с влагой из воздуха, поэтому важным этапом при получении является защита их поверхности с помощью лигандов [3].

В данной работе исследуются люминесцентные характеристики и их стабильность во времени для квантовых точек перовскита в растворах и полимерных плёнках при хранении в атмосферных условиях. Для получения полимерных плёнок был выбран коммерчески доступный силиконовый компаунд ЭТМ, который широко применяется в производстве электроники и оптоэлектроники как изолирующий и теплоотводящий состав.

**Методика эксперимента.** Квантовые точки перовскита состава CsPbBr<sub>3</sub> были получены коллоидно-химическим методом горячего впрыска по методике [1] с некоторыми модификациями. Синтез проводился в инертной атмосфере аргона, последующие стадии отмывки и концентрирования осуществлялись в атмосфере окружающей среды. Для осаждения и отмывки квантовых точек от остаточных реагентов и избытка лигандов к свежему раствору перовскитов в октадецене добавляли полярный растворитель этилацетат 1:1 по объёму. Осаждённые нанокристаллы редиспергировали в толуоле, центрифугировали для осаждения крупных частиц и агрегатов и собирали надосадочный раствор для дальнейшего исследования.

Для исследования люминесцентных характеристик PeQDs в составе полимерных плёнок коллоидный раствор квантовых точек смешивали с ЭТМ. Для получения большей гомогенности смесь подвергали ультразвуковой обработке, затем к ней добавляли затвердитель и полученный состав наносили на стекло.

Спектрально-люминесцентные и кинетические характеристики PeQDs в растворах и композитных плёнках измерялись на спектрофлуориметре Fluorolog-3 (HORIBA Scientific, США). Спектр поглощения измерялся на спектрофотометре UV-VIS РВ 2201 (SOLAR, Беларусь). ПЭМ-снимок PeQDs получен на просвечивающем электронном микроскопе (ПЭМ) LEO-906E (Carl Zeiss, Германия).

**Результаты и их обсуждение.** Коллоидный раствор PeQDs характеризуется выраженным экситонным пиком поглощения [5] с максимумом 500 нм, а также узким пиком фотолюминесценции (ФЛ) с максимумом 516 нм и значением полуширины 18 нм (рисунок 1а), что является минимальным значением для перовскитов данного состава

[1,5]. Квантовый выход фотолюминесценции PeQDs, измеренный относительным методом, составил 16 %. На рисунке 1б представлен снимок просвечивающей электронной микроскопии, демонстрирующий кубическую фазу синтезированных нанокристаллов перовскита.

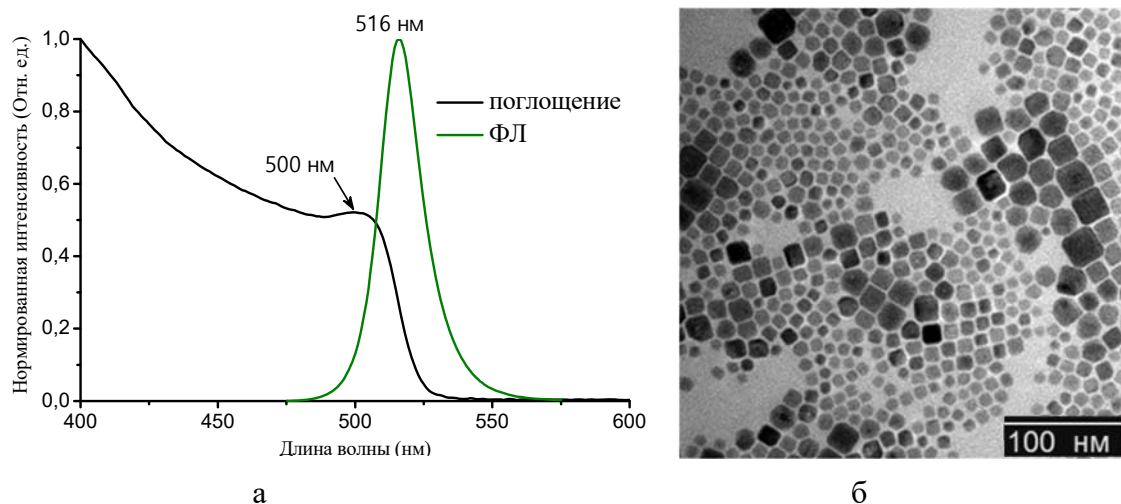


Рис. 1. Спектры поглощения и фотолюминесценции ( $\lambda_{exc} = 455$  нм) PeQDs CsPbBr<sub>3</sub> в толуоле (а) и их снимок просвечивающей электронной микроскопии (б).

На рисунке 2а представлены кинетики затухания флуоресценции нанокристаллов CsPbBr<sub>3</sub>. Кинетика затухания флуоресценции PeQDs в составе плёнки на основе компаунда ЭТМ ускорилась по сравнению с раствором в толуоле. Это может быть связано с ростом вероятности безызлучательной рекомбинации при помещении перовскитов в полимерную матрицу, что соотносится с изменением вклада наиболее быстрой компоненты (вставка на рисунке 2а) [6]. Среднее время жизни возбужденного состояния составило 23.4 нс для коллоидного раствора PeQDs в толуоле и 16.3 нс для плёнки на основе ЭТМ и было рассчитано по формуле (1):

$$\tau_{ave} = \frac{\sum a_i \tau_i^2}{\sum a_i \tau_i}, \quad (1)$$

где  $a_i$  – вклад  $i$ -той компоненты,  $\tau_i$  –  $i$ -тая компонента кинетики затухания флуоресценции (нс).

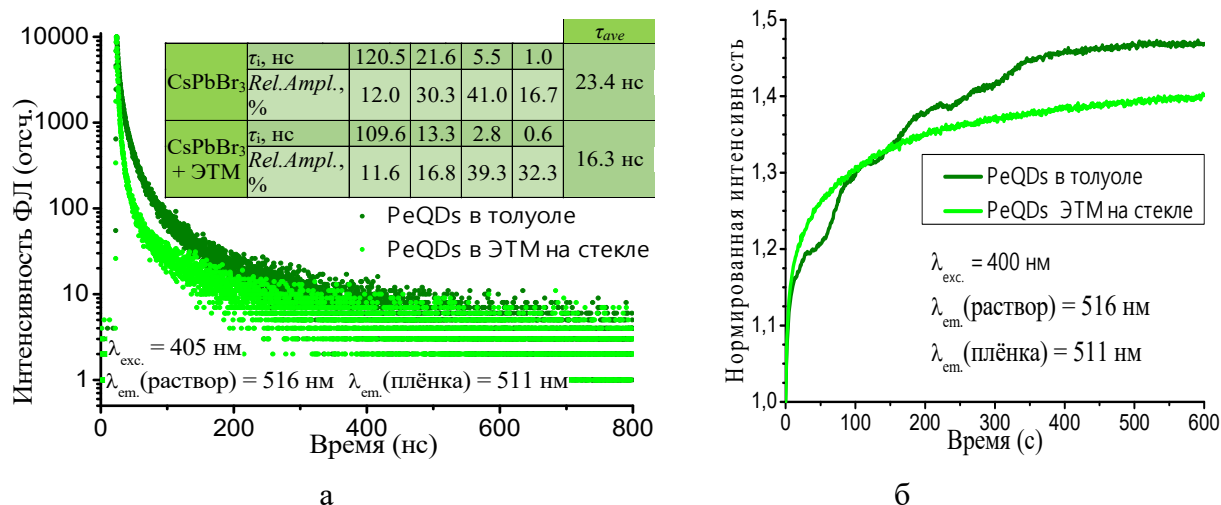


Рис. 2. Кинетики затухания фотолюминесценции (а) и фотостабильность PeQDs CsPbBr<sub>3</sub> в растворе и полимерной пленке (б).

При облучении квантовых точек состава CsPbBr<sub>3</sub> в растворе и композитной плёнке на длине волны 400 нм в течение 10 минут установлено, что они имеют тенденцию к фоторазгоранию (рисунок 26). Интенсивность люминесценции стремительно увеличивается в 1.5 раза и выходит на плато через 10 минут облучения. Такое явление может быть связано с отжигом дефектов [7,8].

Также исследована стабильность люминесцентных характеристик при хранении в атмосферных условиях нанокристаллов перовскита CsPbBr<sub>3</sub> в растворах и полимерной плёнке (рисунок 3). Разбавленный раствор PeQDs продемонстрировал наименьшую седиментационную устойчивость с быстрым падением интенсивности люминесценции. Такая тенденция связана с динамическим равновесием между свободными лигандами и лигандами на поверхности нанокристаллов, которые, переходя в раствор, снижают их агрегативную и седиментационную устойчивость [3]. Показано, что концентрированный раствор PeQDs состава CsPbBr<sub>3</sub> при хранении в атмосферных условиях проявляет достаточную стабильность – 10 дней сохранения спектральных характеристик (спектры поглощения, интенсивность и полуширина пика люминесценции). Квантовые точки перовскита в растворах и композитных плёнках сохраняют около 50 % первоначальной интенсивности люминесценции при хранении в течении месяца на воздухе без доступа света.

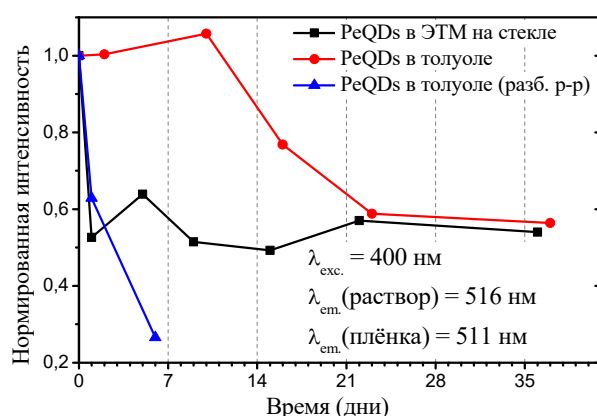


Рис. 3. Зависимости интенсивности фотолюминесценции PeQDs CsPbBr<sub>3</sub> в растворе и полимерной пленке от времени хранения

**Заключение.** В данной работе исследованы люминесцентные характеристики и их стабильность во времени для квантовых точек перовскита состава CsPbBr<sub>3</sub> при хранении в атмосферных условиях. Синтезированные квантовые точки имеют узкий пик люминесценции с максимумом 516 нм и значением полуширины 18 нм. Установлено, что перовскиты как в растворах, так и в составе композита на основе ЭТМ имеют тенденцию к фоторазгоранию: интенсивность люминесценции увеличивается в 1.5 раза при облучении в течение 10 минут. Квантовые точки, помещённые в ЭТМ, продемонстрировали ускорение кинетики фотолюминесценции по сравнению с раствором. Показано, что перовскиты состава CsPbBr<sub>3</sub> в концентрированных растворах и композитных плёнках сохраняют около 50 % первоначальной интенсивности люминесценции при хранении в течении месяца в атмосферных условиях. При этом спектральные характеристики концентрированного раствора перовскитов остаются без изменений первые 10 дней.

**Благодарности.** Работа выполнена при поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований, проект № Ф22ТУРЦ-002.

### Литература.

1. Protesescu L., Yakunin S., Bodnarchuk M. I., Krieg F., Caputo R., Hendon C. H., Yang R. X., Walsh A., Kovalenko M. V. / Nanocrystals of Cesium Lead Halide Perovskites ( $\text{CsPbX}_3$ , X = Cl, Br, and I): Novel Optoelectronic Materials Showing Bright Emission with Wide Color Gamut // *Nano Lett.* - 2015. - Vol. 15, № 6. - P. 3692–3696.
2. Sadhu A. S., Huang Y. M., Chen L. Y., Kuo H. C., Lin C. C. / Recent Advances in Colloidal Quantum Dots or Perovskite Quantum Dots as a Luminescent Downshifting Layer Embedded on Solar Cells // *Nanomaterials.* - 2022. - Vol. 12, № 6. - P. 985.
3. Dey A. [et al.] / State of the Art and Prospects for Halide Perovskite Nanocrystals // *ACS Nano.* - 2021. - Vol. 15, № 7. - P. 10775–10981.
4. Yang S., Bi C., Dong W., Zhang X., Zheng W., Choy W. C. H., Tian J. / Electron Delocalization in  $\text{CsPbI}_3$  Quantum Dots Enables Efficient Light-Emitting Diodes with Improved Efficiency Roll-Off // *Adv. Optical Mater.* – 2022. - № 2200189.
5. Ravi V. K., Swarnkar A., Chakraborty R., Nag A. / Excellent green but less impressive blue luminescence from  $\text{CsPbBr}_3$  perovskite nanocubes and nanoplatelets // *Nanotechnology.* - 2016. - Vol. 27, № 32. - P. 325708.
6. Yongqiang J., Wang M., Yang Z., Qiu H., Padhiar M. H., Zhou Y., Wang H., Dang J., Gaponenko N. V., Bhatti A. S. / Trioctylphosphine-Assisted Pre-protection Low-Temperature Solvothermal Synthesis of Highly Stable  $\text{CsPbBr}_3/\text{TiO}_2$  Nanocomposites // *J. Phys. Chem. Lett.* - 2021. - Vol. 12, № 15. - P. 3786–3794.
7. deQuilettes D. W., Zhang W., Burlakov V. M., Graham D. J., Leijtens T., Osherov A., Bulović V., Snaith H. J., Ginger D. S., Stranks S. D. / Photo-induced halide redistribution in organic-inorganic perovskite films // *Nat Commun.* - 2016. - Vol. 7, № 11683.
8. Huang L., Ge Z., Zhang X., Zhu Y. / Oxygen-induced defect-healing and photo-brightening of halide perovskite semiconductors: science and application // *J. Mater. Chem. A.* - 2021. - Vol. 9, № 8. - P. 4379–4414.

## Синтез и спектроскопические исследования покрытий на основе оксида цинка и полианилина

А. М. Михалко <sup>а</sup>, Е.В. Шараев <sup>б</sup>

<sup>а</sup> УО «ГГУ им. Ф. Скорины», Гомель, Беларусь

<sup>б</sup> ГНУ «Институт химии новых материалов», Минск, Беларусь  
E-mail: mihalko.97@mail.ru

**Введение.** В настоящее время продолжается бурный рост полупроводниковых микро- и нанoeлектронных покрытий и устройств. Важным направлением является синтез и изучение покрытий и тонких пленок с управляемыми структурой и свойствами. Перспективными являются покрытия на основе гетерогенных материалов, включающие в себя полупроводники и проводящие полимеры. Благодаря сочетанию разнородных материалов, а также при помощи их модификации можно получить управляемую тонкопленочную систему. Подобные системы могут применяться в антикоррозионных, сенсорных, оптоэлектронных приборах и др. [1, 2].

**Оборудование и материалы.** В качестве материалов мишени использовали ацетат цинка дигидрат, порошок полианилина (ПАНИ), порошок оксида фосфора ( $P_2O_5$ ). Для измерения электрофизических характеристик подложка представляла собой встречно-штыревой конденсатор с графитовыми электродами, для УФ-ВИД спектров – кварцевые пластины, для ИК – подложки из NaCl, для КР – монокристалл кремния.

УФ-ВИД спектрофотометр Varian Cary 50, оптический диапазон длин волн 190 – 1100 нм, спектральное разрешение  $< 1,5$  нм. ИК с помощью ИК-Фурье спектрофотометра Vertex-70 (Bruker) с использованием стандартной ячейки на пропускание. Рамановский спектрометр SENTERRA II, используемый лазер с длиной волны 532 нм. Измеритель иммитанса МНИПИ Е7-20, диапазоны измерений которого для частоты ( $f$ ) 25 Гц ÷ 1 МГц, для сопротивления ( $Z$ ) 10 мкОм ÷ 1 ГОм.

Источник УФ излучения был изготовлен на основе лампы высокого давления ДРЛ-250 без люминофора. Для лампы характерны резонансы в диапазоне 313÷579 нм.

**Синтез и исследования.** Покрытия были получены методом плазмохимического вакуумного синтеза. Энергия электронов пучка электронной пушки составляла 800÷1600 эВ, плотность потока электронов 0,01÷0,03 А/см<sup>2</sup>. Начальное давление остаточных газов в камере непосредственно перед нанесением покрытия составляло  $\approx 4 \cdot 10^{-3}$  Па. Толщина формируемых слоев контролировались в процессе нанесения с помощью кварцевого измерителя толщины (КИТ) и не превышала 200 нм.

Были синтезированы покрытия: 1) ZnO – диспергированием ацетата цинка и последующим отжигом при атм.д. и  $T=200$  °С (выдержка 60 минут); 2) двухслойные – на отожженные покрытия было нанесено покрытие ПАНИ+ $P_2O_5$  диспергированием механической смеси ПАНИ и  $P_2O_5$  (соотношение 1:1 по массе); 3) композиционные покрытия ZnO+ПАНИ+ $P_2O_5$  получены из механической смеси (соотношение 1:1:1).

Для изучения свойств и структурных особенностей покрытий была использована методика спектроскопии импеданса, ИК и УФ-ВИД спектроскопии.

Электрофизические свойства покрытий и влияние УФ обработки изучались методами спектроскопии импеданса [3]. Установлено, что покрытие ZnO-ПАНИ+ $P_2O_5$  до обработки УФ излучением (рисунок 1а) на частотах  $25 \div 10^3$  Гц имеет сопротивление порядка 0,8÷4 МОм, причем с ростом температуры от 20 до 100 °С полное сопротивление падает не равномерно. Расчет удельной проводимости указывает на значения порядка 61÷100 мСм/см, которые, соответственно, с повышением температуры растут. Это может быть обусловлено увеличением подвижности электронов и переходу их в зону

проводимости. Пики на кривых мнимой части сопротивления сдвинуты в область более низких частот, что свидетельствует о наличии релаксационных процессов протекающих в более крупных структурных составляющих. Годографы на рисунке 1б представляют собой суперпозицию минимум двух полуокружностей, что свидетельствует о сложной структурной организации исследуемых тонкопленочных систем. С ростом температуры радиусы окружностей уменьшаются, особенно после 80 °С.

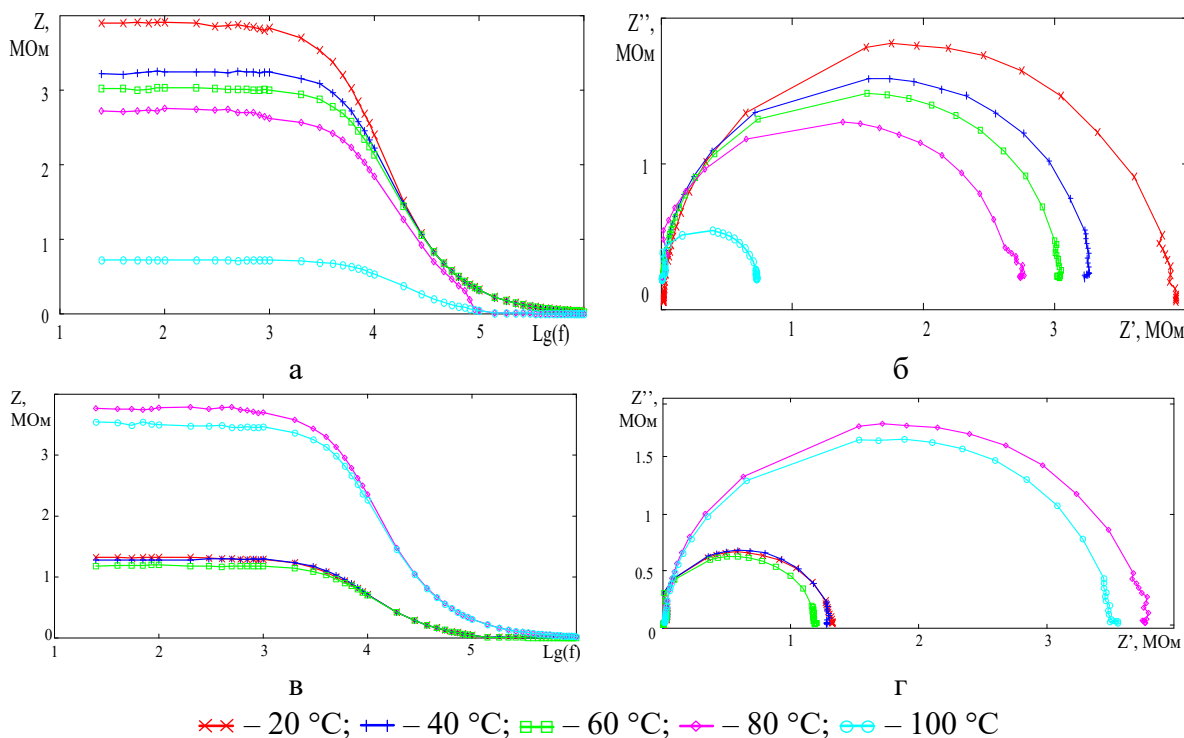


Рис. 1. Импедансная спектроскопия двухслойного покрытия ZnO-PANI+P<sub>2</sub>O<sub>5</sub> с толщами 80 и 100 нм соответственно при температуре от 20 до 100 °С: а – зависимость полного импеданса Z от логарифма частоты f до УФ обработки; б – годограф до УФ обработки; в – зависимость полного импеданса Z от логарифма частоты f после УФ обработки; г – годограф после УФ обработки.

Форма графика годографа импеданса (рисунок 1г) после УФ обработки для температур покрытия 20 - 60 °С включительно внешне не изменяется и имеет сложную форму, особенно в высокочастотной области. Также при температурах 20 - 60 °С радиус большой окружности годографа незначительно уменьшается, а затем, при достижении 80 °С, возрастает приблизительно в 3 раза. При температуре 80 °С и 100 °С высокочастотной области вид годографа значительно изменяется и можно наблюдать на графике лишь одну полуокружность. Также полуокружность смещена вдоль оси абсцисс, что свидетельствует о добавочном сопротивлении в схеме замещения [4]. После УФ обработки с ростом температуры свыше 60 °С проводимость значительно падает. Данные изменения говорят о сложном типе проводимости системы.

Сравнительный анализ ИК-спектров (рисунок 2) тонкопленочных систем позволил установить ряд различий. Установлено наличие у слоев, формируемых из ацетата цинка, пиков поглощения в диапазоне 1100 – 1600 см<sup>-1</sup>, соответствующих колебаниям Zn-ОН групп. Эти полосы уменьшаются у композиционных слоев, присутствуют также полосы поглощения, характерные для карбоксилатов ( $\nu_{as}(\text{COO}^-) \approx 1560 \text{ см}^{-1}$ ,  $\nu_{s}(\text{COO}^-) \approx 1420 \text{ см}^{-1}$ ,  $\delta(\text{OCO}) \approx (1050-1026) \text{ см}^{-1}$ ,  $665 \text{ см}^{-1}$ ) [5]. Кроме того в ИК-спектрах покрытий присутствуют широкая полоса в области 2900 – 3700 см<sup>-1</sup>, которую можно объяснить как

результат перекрывающихся мод валентных колебаний O-H и C-N около  $2900\text{ см}^{-1}$  [6]. При сравнении цинксодержащих слоев с ПАНИ можно отметить, что у исходного порошка ПАНИ и покрытий на его основе наблюдается поглощение в области частот  $1100 \div 1160\text{ см}^{-1}$ , которое характеризует степень делокализации электронов, полоса поглощения около  $1300\text{ см}^{-1}$ , ответственная за плоскостные колебания C-N групп в дизамещенных аминоструктурах, а также колебания хиноидных групп (Q) при  $1595\text{ см}^{-1}$  и полос бензоидных групп (B) активных при  $1501\text{ см}^{-1}$ . Данные полосы, определяющие степень делокализации электронов частично перекрываются с Zn-содержащими группами и карбоксилатами, что затрудняет количественный анализ.

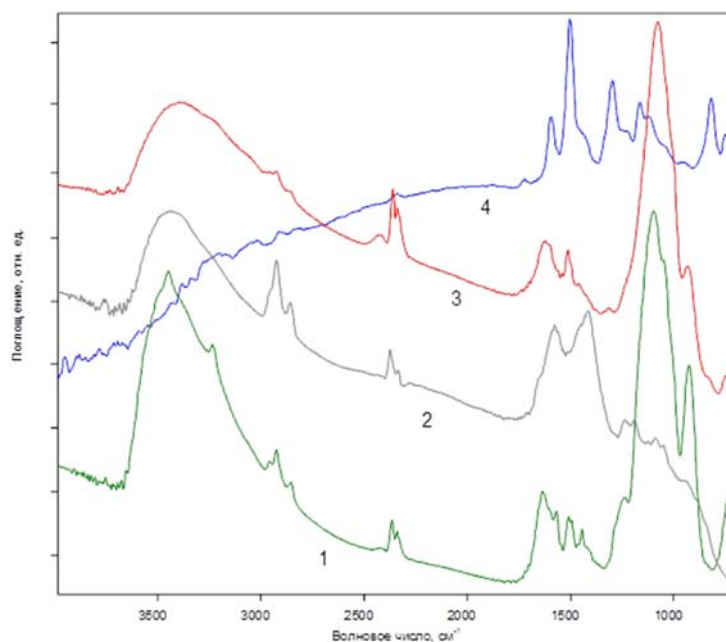


Рис. 2. Обзорный ИК спектр покрытий ZnO-PANI+P<sub>2</sub>O<sub>5</sub> (1), ZnO (2), ZnO+PANI+P<sub>2</sub>O<sub>5</sub>(3), исходный порошок ПАНИ (4).

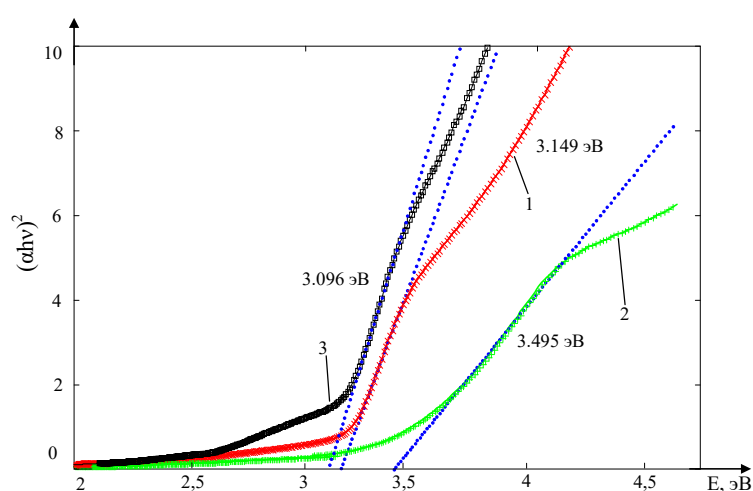


Рис. 3. График зависимости энергии  $E$  от квадрата произведения энергии  $h\nu$  на величину поглощения  $\alpha$  для: ZnO (1), ZnO+PANI+P<sub>2</sub>O<sub>5</sub> (2), ZnO-PANI+P<sub>2</sub>O<sub>5</sub>(3).



На основании данных оптического поглощения в УФ-видимом диапазоне была определена ширина запрещенной зоны  $E_g$  (рисунок 3) для покрытий ZnO ( $E_g=3,149$  эВ), ZnO+PANI+P<sub>2</sub>O<sub>5</sub> ( $E_g=3,495$  эВ), ZnO-PANI+P<sub>2</sub>O<sub>5</sub> ( $E_g=3,096$  эВ), в то время как для блочного ZnO ( $E_g=3,27$  эВ) и наночастиц ZnO ( $E_g=3,37$  эВ) [4, 6].

По данным КР спектроскопии была установлена высокая степень допирования композиционных покрытий и наличие делокализованных поляронных структур. Об этом свидетельствуют пик при  $1368\text{ см}^{-1}$ , а также пик около  $1600\text{ см}^{-1}$  [7,8].

**Заключения.** Синтезированы покрытия на основе ZnO и ПАНИ. Определены структурные особенности, высокая степень допирования для композиционных покрытий. Установлен сложный характер проводимости. Ширина запрещенной зоны полученных покрытий составила:  $E_g=3,149$  эВ для ZnO;  $E_g=3,495$  эВ для ZnO+PANI+P<sub>2</sub>O<sub>5</sub>;  $E_g=3,37$  эВ для ZnO-PANI+P<sub>2</sub>O<sub>5</sub>.

**Благодарности.** Работа выполнена при поддержке ГПНИ «Материаловедение, новые материалы и технологии» 2021-2025 г., подпрограмма «Многофункциональные и композиционные материалы» НИР 4: «Синтез и свойства (оптические, магнитные и электрические) новых тонкопленочных композиционных материалов на основе токопроводящих полимеров с органическими и неорганическими нанодобавками»; ГПНИ «Химические процессы, реагенты и технологии, биорегуляторы и биоорхимия» НИР: «Разработка научных основ технологии формирования методом диспергирования наноконпозиционных полимерных покрытий, содержащих растительные полифенолы, изучение их структуры и биохимических свойств».

### Литература.

1. Li X., Castaneda H. (2018) Application of electrochemical techniques on study of effect of nano-ZnO in conductive polyaniline containing Zinc-rich primer. *Hindawi International Journal of Spectroscopy*, 15 pages.
2. Kaitsuka, Y. and Goto, H. (2016) Preparation of Polyaniline/ZnO Films by Electrochemical Polymerization. *Open Journal of Polymer Chemistry*, 6, P 1-7.
3. Импедансная спектроскопия: теория и применение : учеб. пособие / Ю. В. Емельянова, М. В. Морозова, З. А. Михайловская, Е. С. Буянова ; под общ. ред. Е. С. Буяновой] ; М-во образования и науки Рос. Федерации, урал. федер. ун-т. — Екатеринбург : издво урал. ун-та, 2017. — 156 с.
4. Maensiri, S. Synthesis and optical properties of nanocrystalline ZnO powders by a simple method using zinc acetate dihydrate and poly (vinyl pyrrolidone) / S. Maensiri, P. Laokul, V. Promarak // *Journal of Crystal Growth*. – 2006. –Vol. 289.– P. 102 – 106.
5. Синтез наноконпозиционных покрытий на основе ZnO и ПММА методом электронно-лучевого диспергирования / Zhibo Liu, А. А. Рогочев, Бин Чжоу, М. А. Ярмоленко, А. В. Рогачев, Д. Л. Горбачев, Х. Н. Джанг // Свиридовские чтения: сб. ст. / Белорус. гос. ун-т; редкол.: О.А. Ивашкевич (пред.) [и др.]. – Минск, 2012. – Вып. 8. – С. 80–85.
6. Djaja, N.F. The Effect of Co Incorporation into ZnO Nanoparticles / N. F. Djaja, D. A. Montja, R. Saleh // *Advances in Materials Physics and Chemistry*. – 2013. – Vol.3. – P. 291 – 230.
7. Raman characterization of polyaniline induced conformational changes / J.E. Pereira da Silva [et al.] // *Synthetic Metals*. – 1999. – Vol. 101. – P.834 – 835.
8. Conducting Polyaniline Filaments in a Mesoporous Channel Host / Chun-Guey Wu, T. Bein // *Science*. – 1994. – Vol. 264. – P.1757 – 1758.

# Комплексное изучение микро- и макронеоднородностей плотности, а также адсорбции из газовой фазы на наночастицах с учетом пространственной релаксации параметров решетки вблизи их границы

А. А. Рогач, А. А. Кулеш

*Белорусский государственный технологический университет, Минск, Беларусь  
E-mail: inarkevich@mail.ru*

**Введение.** Из научной литературы известно, что новые современные материалы, обладающие уникальными свойствами, могут разрабатываться с использованием наночастиц разной природы. Структура и характеристики систем, содержащих наноразмерные частицы, интенсивно исследуются экспериментально и теоретически.

Для комплексного описания структуры, а также термодинамических характеристик неоднородных конденсированных систем разработан двухуровневый статистический метод [1], который является симбиозом метода коррелятивных функций Боголюбова – Борна – Грина – Кирквуда – Ивона (ББГКИ), метода условных коррелятивных функций Ротта [2] и метода функционалов плотности. Их совместное использование позволило эффективно оборвать бесконечную цепочку интегро-дифференциальных уравнений для коррелятивных функций и решить вопрос о способе нормировки этих функций с учетом неоднородного поля плотности в макроскопической системе.

В разработанном подходе микроячейки, на которые мысленно разделен весь объем макроскопической системы имеют внутреннюю микроструктуру, которая описывается с помощью соответствующих коррелятивных функций распределения атомов или молекул внутри этих микроячеек. Это первый, т. е. микроскопический уровень статистического описания системы многих частиц. Второй, т. е. макроскопический уровень используется для описания их коррелированного распределения по совокупности всех микроячеек неоднородной макроскопической системы с некоторым искомым равновесным полем плотности.

В результате ранее было получено статистическое выражение для большого термодинамического потенциала  $\Omega = F - \mu N$ , как функционала искомого поля плотности. Это создало условия для варьирования потенциала  $\Omega$  с целью изучения микро- и микроструктуру гетерогенной системы «сферическая наночастица в газовой фазе». Проведенные расчеты позволили изучить адсорбцию из газа на наночастицах разных размеров и проследить за пространственной релаксацией узлов гранецентрированной кубической ГЦК решетки вблизи их границ.

**Расчет поля плотности в окрестности сферической кристаллической наночастицы.** В случае сферической наночастицы поле плотности зависит только от радиусов  $r_p$  координационных сфер с номерами  $p$  относительно центра наночастицы ( $p = 1, 2, \dots, P$ ). Следовательно, нужно определить радиальный профиль чисел заполнения  $n(r_p)$ , который для молекулярной системы аппроксимируем с помощью двухпараметрической функции, содержащей гиперболический тангенс [2], т. е.

$$n(r_p) = n_x - (n_x - n_\infty) \text{th} \{ \kappa (r - r_{\text{nano}}) \}. \quad (1)$$

Здесь  $n_x$  и  $\kappa$  – параметры теории; третий параметр  $n_\infty$  определяет значения чисел заполнения для однородной жидкой либо газовой среды, находящейся в равновесии с исследуемой кристаллической наночастицей;  $r_{\text{nano}}$  – радиус наночастицы.

В выполненных численных расчетах значения радиусов  $r_p$  координационных сфер приведены в единицах линейного параметра  $\sigma$  потенциала Леннард-Джонса.

Формула (1) в виде гиперболического тангенса была ранее получена при статистическом описании профиля плотности на плоской границе раздела жидкость – газ [2]. Поэтому для сферической поверхности раздела фаз параметры  $n_x$  и  $\kappa$  здесь рассматриваются в качестве вариационных параметров при решении вариационной задачи по отысканию минимума большого термодинамического потенциала  $\Omega$  наночастицы как функционала от искомого радиального профиля чисел заполнения  $n_p$  и двух вспомогательных профилей. Один из них описывает радиальное смещение узлов  $\Delta r_p$  ГЦК решетки кристаллической наночастицы (пространственная релаксация решетки), а второй – изменение формы функций распределений в ячейках разных координационных сфер с номерами  $p$ , описываемое среднеквадратичным отклонением  $\sigma_p$  молекулы от узлов решетки.

Минимум потенциала  $\Omega$  определялся численно для разных наборов значений параметров  $n_x$  и  $\kappa$ . На рисунке 1 приведены зависимости большого термодинамического потенциала  $\Omega$  от параметра  $n_x$  при заданных разных значениях параметра  $\kappa$  и температуре  $\theta = 0,6$ , которая несколько ниже, чем температура тройной точки простых молекулярных систем.

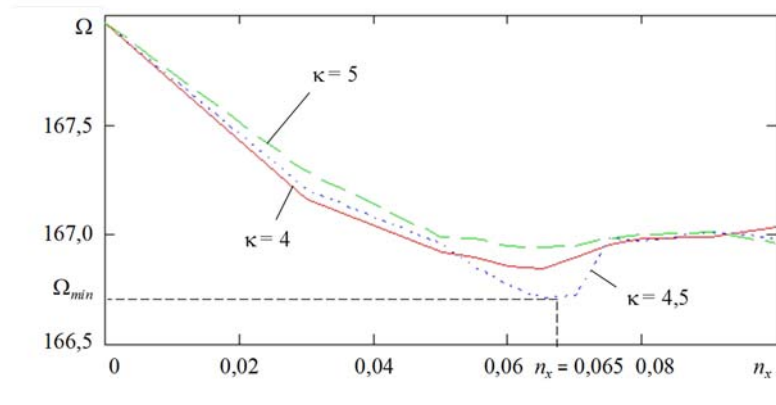


Рис. 1. Зависимости большого термодинамического потенциала  $\Omega$  от вариационного параметра  $n_x$  при разных значениях параметра  $\kappa$  и  $\theta = 0,6$ .

Из рисунка 1 видно, что абсолютный минимум большого термодинамического потенциала  $\Omega_{min}$  реализуется при значении  $\kappa \approx 4,5$  и соответствующего ему параметра  $n_x \approx 0,065$ .

На рисунке 2 представлены результаты расчетов изотермических профилей характеристик структуры сферической кристаллической наночастицы, находящейся в равновесии с окружающей ее газовой средой при температуре  $\theta = 0,6$ . Полученные зависимости соответствуют минимуму потенциала  $\Omega$ . Из рисунка 2 видно, что в случае кристаллической наночастицы с числами заполнения  $n \approx 0,999$  на ее границе ( $p = 5$ ) образуется адсорбционный газообразный слой с повышенными значениями плотности. В объеме кристаллической наночастицы наблюдается постепенное увеличение среднеквадратичных отклонений  $\sigma$  от значения  $\sigma_0 = 0,20$  в центре наночастицы до значения  $\sigma = 0,35$  на ее границе. Одновременно с этим происходит сдвиг узлов ГЦК решетки в радиальном направлении, который описывается зависимостью  $\Delta r_p$ .

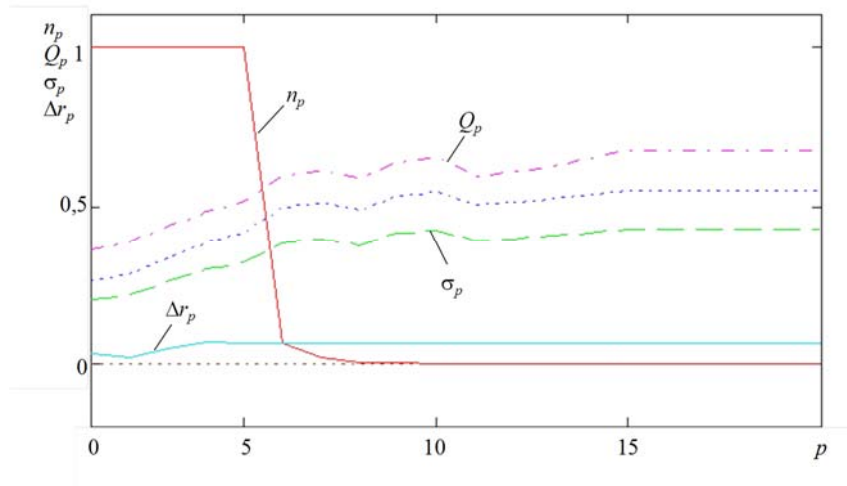


Рис. 2. Радиальный профиль чисел заполнения  $n_p$  гетерогенной системы и графики зависимостей нормировки  $Q_p$  функции распределения атомов или молекул вблизи узлов решетки, средноквадратичных отклонений  $\sigma_p$  и радиальных смещений  $\Delta r_p$  узлов от номеров  $p$  координационных сфер в объеме наночастицы и окружающей среды

На рисунке 3 представлены радиальные профили микрораспределения атомов или молекул вблизи смещенных узлов деформированной ГЦК решетки для разных значений номеров  $p$  координационных сфер. Первые три профиля ( $p = 0, 3, 5$ ) описывают распределения молекул, образующих кристаллическую наночастицу ( $p = 5$  – ее граница), а четвертый и пятый профили ( $p = 6, 7$ ) описывают распределение молекул в микроячейках, относящихся к координационным сферам адсорбционного слоя. Видно, что в адсорбционном слое наблюдается размытое распределение молекул по всему объему микроячеек. При  $p = 15$  функция распределения имеет уже практически постоянное значение, что соответствует однородной газовой фазе.

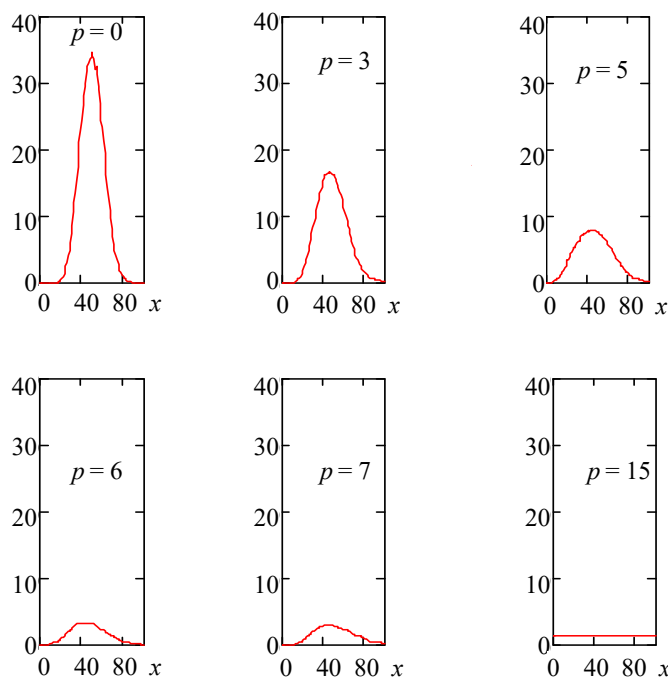


Рис. 3. Радиальные профили функций распределений при разных номерах  $p$  координационных сфер

**Исследование адсорбции из газовой фазы на наночастицах с учетом пространственной релаксации параметров кристаллической решетки.** Рассчитанное равновесное поле плотности гетерогенной системы «сферическая наночастица в газовой фазе» при температуре ниже тройной точки ( $\theta = 0,6$ ) позволило определить поверхностную плотность  $\rho_s = m_a/S$  адсорбированных молекул на поверхности наночастицы ( $m_a$  – число адсорбированных молекул,  $S$  – площадь сферической поверхности наночастицы с радиусом  $R$ ).

На рисунке 4 приведены графики зависимостей поверхностной плотности  $\rho_s$  адсорбированных молекул и числа  $N_p$  молекул в наночастицах от их радиуса  $R$ .

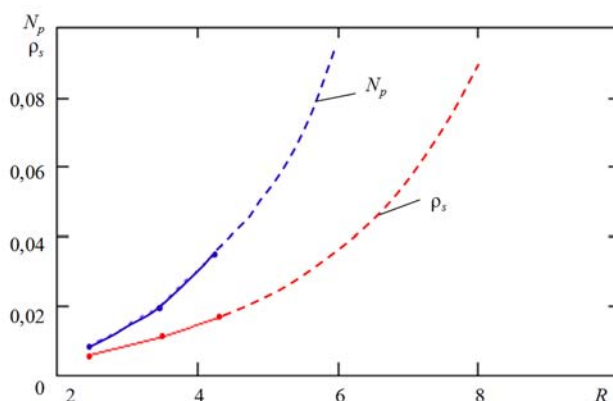


Рис. 4. Графики зависимости поверхностной плотности  $\rho_s$  адсорбированных молекул и числа  $N_p$  молекул в наночастицах разных радиусов  $R$

Из рисунка 4 видно, что с увеличением радиуса  $R$  наночастицы поверхностная плотность  $\rho_s$  адсорбированных молекул, а следовательно и число частиц в адсорбционном слое монотонно увеличиваются.

**Закключение.** С помощью компьютерной программы по определению профиля плотности кристаллических сферических наночастиц в газовой среде с учетом пространственной релаксации параметров ГЦК решетки в объеме наночастицы рассчитано равновесное поле плотности в межфазной области гетерогенной системы при температуре ниже тройной точки. Это позволило приступить к статистическому исследованию адсорбции на кристаллических наночастицах.

### Литература.

1. Наркевич И. И. Двухуровневый статистический метод описания неоднородных систем. Ч. 1. Симбиоз методов коррелятивных функций и термодинамических функционалов плотности: монография. Нордерштедт: LAP LAMBERT Academic Publishing RU, 2019. 114 с.
2. Ротт Л. А. Статистическая теория молекулярных систем. – М.: Наука. 1979. – 280 с.

## Наноструктуры на основе аэрозольных наночастиц золота, серебра и алюминия для ГКР-спектроскопии

А. А. Романенко <sup>a</sup>, А. А. Лизунова <sup>b</sup>, С. С. Тихонов <sup>b</sup>

<sup>a</sup> *Институт физики НАН Беларуси, Минск, Беларусь*

<sup>b</sup> *Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия*

*E-mail: a.ramanenka@ifanbel.bas-net.by*

**Введение.** Спектроскопия гигантского комбинационного рассеяния света (ГКР) является высокочувствительным аналитическим методом, позволяя детектировать сигналы вплоть до одиночных молекул. Тем не менее, несмотря на уже почти 50 лет научных исследований с момента открытия эффекта, ГКР-спектроскопия до сих пор не нашла полноценной коммерческой реализации. Одной из причин этого является необходимость наличия недорогого метода формирования ГКР-активных наноструктур с заданными и воспроизводимыми размерными и морфологическими характеристиками. Нанолитографические и другие сложные технологические методы обеспечивают превосходные характеристики изготавливаемых плазмонных наноструктур, однако достаточно дороги для массового коммерческого применения. С другой стороны, простые методы коллоидной химии позволяют изготавливать недорогие в производстве ГКР-активные наноструктуры, однако воспроизводимость и возможности управления характеристиками подобных наноструктур весьма ограничены. Таким образом, поиск новых методов формирования ГКР-наноструктур с воспроизводимыми размерными и морфологическими характеристиками остаётся весьма актуальной задачей.

В данной работе предложен аэрозольный метод синтеза и осаждения наночастиц золота, серебра и алюминия на подложки для создания ГКР-наноструктур, исследованы их размерные, морфологические, оптические свойства и ГКР-эффективность.

**Методика эксперимента.** Аэрозоли наночастиц золота, серебра и алюминия формировались в импульсно-периодическом газовом разряде с помощью многоазорного газоразрядного генератора оригинальной конструкции [1,2]. Синтез проводился при 25 °С (ПНЧ 25 °С – первичные наночастицы). Также проводилось последующее спекание наночастиц в газовом потоке в трубчатой печи с целью укрупнения наночастиц (УНЧ – укрупненные наночастицы) [2]. Осаждение наночастиц на подложки проводилось методом сухой струйной аэрозольной печати с применением аэродинамической фокусировки [3] через сопло по растру, с повторением картины несколько раз для получения однородной плёнки.

Исследование морфологии и размерных характеристик аэрозольных наночастиц проводилось методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) на микроскопе JEM-2100 (JEOL, Япония). Исследование морфологии наноструктур, формирующихся на подложке при осаждении аэрозольных наночастиц, проводилось методом сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) на микроскопе JSM-7001F (JEOL, Япония). Размеры агрегатов наночастиц в аэрозоле измерялись на аэрозольном спектрометре SMPS 3936 (TSI, США). Спектры оптической плотности плёночных наноструктур регистрировались на спектрофотометре Cary 500 (Varian, США).

КР/ГКР-спектры регистрировались с помощью дифракционного спектрометра S-3801 (Solar ТП, Беларусь) с охлаждаемой жидким азотом кремниевой ПЗС-матрицей в качестве детектора. Использовалась 180° схема регистрации КР/ГКР-спектров через объектив LMPlanFl N 50x/0.5 (Olympus, Япония). Возбуждение образцов проводилось He-Ne лазером с  $\lambda_{\text{exc}} = 632.8$  нм и мощностью на образце ~0.2 мВт. Время накопления сигнала составляло 30 с (образцы золота и алюминия) или 60 с (образцы серебра).

В качестве тестового анализата для ГКР-эксперимента был выбран органический краситель малахитовый зеленый. Раствор малахитового зеленого (водный с концентрацией  $1 \cdot 10^{-6}$  М – для образцов с наночастицами серебра, раствор в хлороформе с концентрацией  $2 \cdot 10^{-5}$  М – для образцов с наночастицами золота и алюминия) наносился на ГКР-подложки капельным путем и высушивался.

**Результаты и их обсуждение.** Для серебра были получены аэрозоли первичных и укрупненных наночастиц, Ag ПНЧ 25 °С и Ag УНЧ 750 °С, соответственно. По ПЭМ-данным для Ag ПНЧ 25 °С наблюдаются агломераты округлых наночастиц серебра диаметром 5–40 нм, для Ag УНЧ 750 °С – индивидуальные крупные наночастицы серебра размером около 120 нм. При осаждении на подложку по СЭМ-данным в случае Ag ПНЧ 25 °С формируются дендритоподобные наноструктуры из крепко сцепленных наночастиц, а для Ag УНЧ 750 °С – преимущественно многочастичные трёхмерные островковые агрегаты наночастиц размером до 10 мкм. В спектрах оптической плотности обоих типов наноструктур (рисунок 1а) проявляется плазмонный резонанс серебра – широкая полоса с максимумом в области 470 нм для Ag ПНЧ 25 °С и максимум на 365 нм с плечом на 390 нм для Ag УНЧ 750 °С. Однако качественно оба спектра разнятся, что может быть связано с различной формой агрегации.

Для обоих типов наноструктур серебра были получены резонансные ГКР-спектры (рисунок 1б) малахитового зеленого, причём сигнал для Ag УНЧ 750 °С (по полосе  $1614 \text{ см}^{-1}$ ) примерно в 14 раз сильнее, чем для Ag ПНЧ 25 °С. Частично это может быть объяснено возросшей в 4.8 раз оптической плотностью плёночной наноструктуры Ag УНЧ 750 °С, однако более точное сопоставление затруднительно из-за различной формы агрегации наночастиц и того, что в формировании ГКР-сигнала принимает участие лишь поверхностный слой наночастиц. Можно предположить на основании литературных данных, что основным фактором увеличения ГКР-сигнала всё же является увеличение диаметра наночастиц серебра при переходе от Ag ПНЧ 25 °С к Ag УНЧ 750 °С.

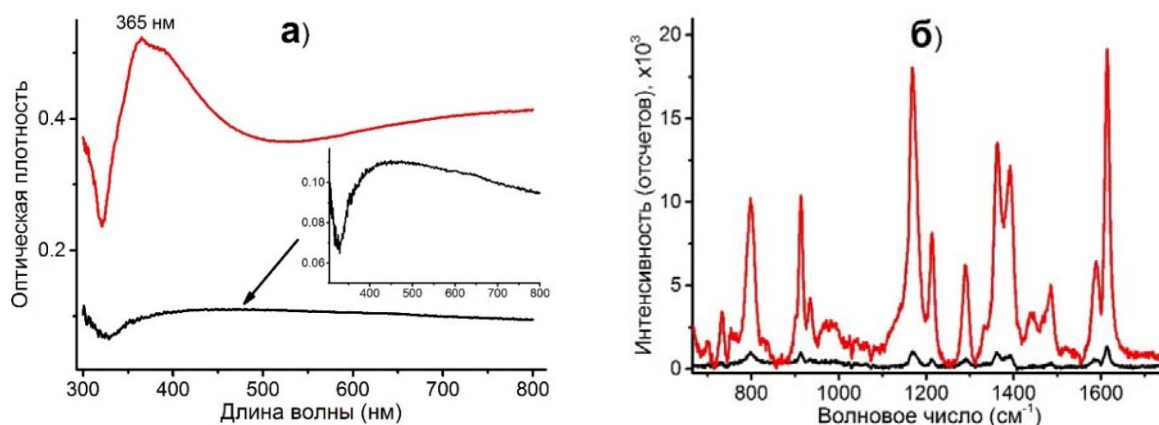


Рис. 1. Спектры оптической плотности ГКР-наноструктур серебра на стекле (а) и ГКР-спектры малахитового зеленого на подложках (б): — Ag ПНЧ 25 °С, — Ag УНЧ 750 °С.

Для оценки коэффициента ГКР-усиления раствор малахитового зеленого с концентрацией  $1 \cdot 10^{-2}$  М наносился на стеклянную подложку. Для Ag УНЧ 750 °С подложек коэффициент усиления составил около  $10^6$  раз.

В процессе ГКР-исследований для наноструктур аэрозольного серебра также были выявлены выраженные гидрофобные свойства плёночных слоёв, обусловленные отсутствием лигандов на поверхности наночастиц. В связи с этим в дальнейших экспериментах с наноструктурами золота и алюминия использовался не водный раствор малахитового зеленого, а раствор в хлороформе. Также отмечалась достаточно низкая



механическая прочность плёночных слоёв наночастиц серебра, что было обусловлено только физисорбционным механизмом осаждения наночастиц на подложки.

Для золота были получены аэрозоли первичных и укрупненных наночастиц, Au ПНЧ 25 °С и Au УНЧ 950 °С, соответственно. Как и в случае серебра, для золота при комнатной температуре аэрозоль состоит из крепко сцепленных наночастиц, а при увеличении температуры спекания наночастицы укрупняются и аэрозоль уже представляет собой изолированные наночастицы золота сферической формы. По ПЭМ-данным средний диаметр наночастиц золота для Au ПНЧ 25 °С составил  $8.9 \pm 4.6$  нм, для Au УНЧ 950 °С –  $56 \pm 23$  нм. Для Au ПНЧ 25 °С в спектре оптической плотности (рисунок 2а) не наблюдается плазмонного резонанса в видимой области спектра и спектр похож на спектр, характерный для нанокластеров золота, но размер данных нанокластеров обычно составляет 1-4 нм, что заметно ниже, чем в нашем случае. Для Au УНЧ 950 °С в спектре проявляется широкая полоса плазмонного резонанса с максимумом на 565 нм, характерная для случая многочастичной трехмерной агрегации наночастиц золота при осаждении на подложку.

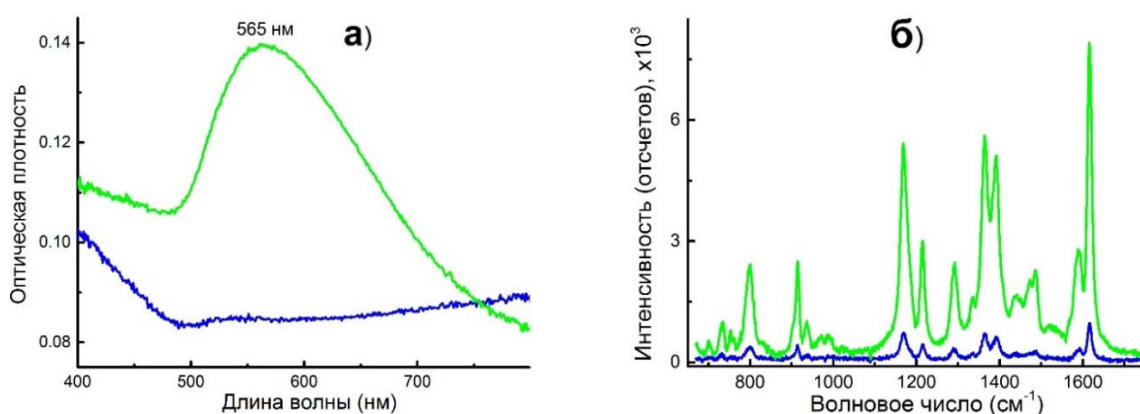


Рис. 2. Спектры оптической плотности ГКР-наноструктур золота на стекле (а) и ГКР-спектры малахитового зеленого на подложках (б): — Au ПНЧ 25 °С, — Au УНЧ 950 °С.

Характерный ГКР-сигнал малахитового зеленого наблюдался для обоих типов наноструктур золота (рисунок 2б). При этом ГКР-сигнал увеличился в 8 раз при росте оптической плотности в 1.75 раз при переходе от Au ПНЧ 25 °С к Au УНЧ 950 °С.

Для алюминия были получены аэрозоли первичных и укрупненных наночастиц, Al ПНЧ 25 °С и Al УНЧ 600 °С, соответственно. При спекании первичные наночастицы алюминия укрупняются, доля неагломерированных наночастиц увеличивается, но существенного уменьшения среднего диаметра агломератов наночастиц не происходит и аэрозоль по-прежнему представляет собой преимущественно агломераты наночастиц. По ПЭМ-данным средний диаметр наночастиц алюминия для Al ПНЧ 25 °С составил 13 нм, для Al УНЧ 600 °С – 18 нм. Во всех случаях наночастицы алюминия имеют естественную оболочку аморфного оксида алюминия толщиной около 3 нм.

Спектры оптической плотности обоих типов наноструктур (рисунок 3а) имеют характерный для ансамбля изолированных наночастиц алюминия с логарифмически нормальным распределением вид с одиночным максимумом в области 220 нм.

Характерный ГКР-сигнал аналита наблюдался для Al ПНЧ 25 °С и Al УНЧ 600 °С (рисунок 3б), однако тенденция к росту ГКР-сигнала с увеличением среднего диаметра наночастиц в данном случае не была выявлена: сигнал для Al ПНЧ 25 °С сильнее сигнала для Al УНЧ 600 °С в 3.9 раз.



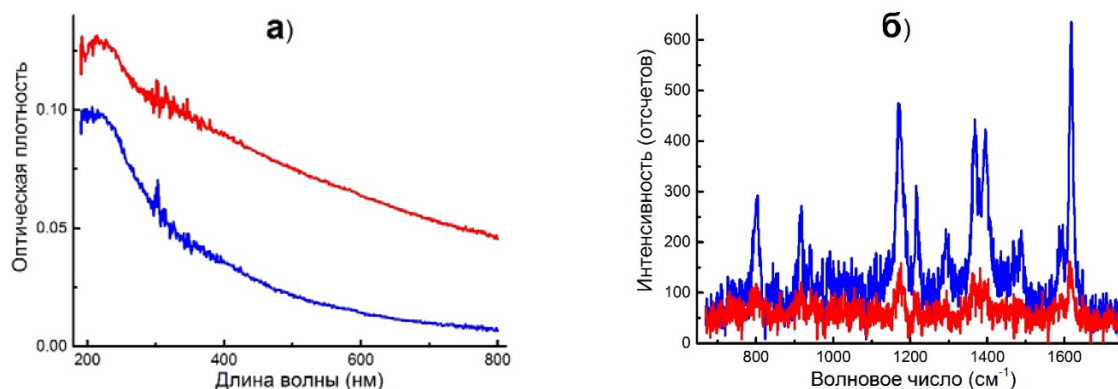


Рис. 3. Спектры оптической плотности ГКР-наноструктур алюминия на кварце (а) и ГКР-спектры анализата на подложках (б): — Al ПНЧ 25 °С, — Al УНЧ 600 °С.

**Заключение.** В работе исследованы размерные, морфологические и оптические свойства плёночных наноструктур, сформированных из аэрозольных наночастиц серебра, золота и алюминия квазисферической формы методом сухой аэрозольной печати. Установлено, что в условиях синтеза при комнатной температуре в аэрозоле преобладают агломераты крепко сцепленных наночастиц со средним диаметром около 10 нм, формирующие при осаждении на поверхность дендритоподобные структуры. Показано, что путём температурного спекания наночастиц в трубчатой печи, начиная с некоей пороговой температуры, можно получать аэрозоли укрупнённых изолированных наночастиц со средним диаметром до 50-120 нм и широким распределением по размерам, которые формируют при осаждении на поверхность трехмерные многочастичные островковые агрегаты размером до 10 мкм. Исключение составляют наночастицы алюминия, для которых не удаётся получить изолированных укрупнённых наночастиц при спекании.

Выявлены выраженные гидрофобные свойства плёночных наноструктур аэрозольных наночастиц серебра, золота и алюминия, при этом отмечается низкая механическая прочность подобных наноструктур.

Продемонстрирована ГКР-эффективность плёночных наноструктур аэрозольных наночастиц серебра, золота и алюминия для тестового анализата малахитового зеленого и возбуждения лазером 632.8 нм. Для наночастиц серебра максимальный коэффициент усиления составил около  $10^6$  раз. Показано, что максимальный ГКР-сигнал для наноструктур аэрозольного алюминия в 15 раз слабее полученного в тех же условиях максимального сигнала для аэрозольного золота. Показано, что для наноструктур золота и серебра с ростом среднего диаметра наночастиц ГКР-сигнал возрастает.

**Благодарности.** Работа выполнена при финансовой поддержке БРФФИ (проект № Т20Р-140) и РФФИ (проект № 20-53-00042 Бел\_а).

### Литература.

1. Ефимов А.А., Иванов В.В., Багазеев А.В., Бекетов И.В., Волков И.А., Щербинин С.В. / Получение аэрозольных наночастиц в многоззорном газоразрядном генераторе // Письма в ЖТФ. - 2013. - Т. 39, № 23. - С. 51–57.
2. Lizunova A.A., Efimov A.A., Arsenov P.V., Ivanov V.V. / Influence of the sintering temperature on morphology and particle size of silver synthesized by spark discharge // IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. - 2018. - Vol. 307. - P. 012081.
3. Efimov A.A., Potapov G.N., Nisan A.V., Ivanov V.V. / Controlled focusing of silver nanoparticles beam to form the microstructures on substrates // Res. Phys. - 2017. - Vol. 7. - P. 440-443.

## Синтез и исследование оксида висмута на наноструктурированных матрицах

В. С. Федосенко, М. М. Иджи, А. А. Лозовенко, Г. Г. Горох

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,  
Минск, Беларусь,  
E-mail: gorokh@bsuir.by*

**Введение.** Разработке электронных и оптоэлектронных устройств, построенных на композиционных материалах и гетеропереходах уделяется с каждым годом все большее внимание, в том числе, созданию гетеропереходов на оксидах титана и висмута. Оксид титана обладает высокой химической стабильностью, коррозионной стойкостью и фотокаталитической активностью, а  $\text{Bi}_2\text{O}_3$  - высоким показателем преломления, диэлектрической проницаемостью и хорошей фотопроводимостью. Сочетание этих двух оксидов с пористыми матрицами анодного оксида алюминия (АОА) позволит формировать пространственно упорядоченные композитные пленки  $\text{TiO}_2/\text{Bi}_2\text{O}_3$ , которые могут быть перспективны в фотоактивируемых и оптических устройствах.

В работе были изготовлены и исследованы две системы: первая система на основе матрицы ПАОА, заполненная оксидом висмута, вторая - наноструктурированная матрица  $\text{TiO}_2$  с нанесенным на поверхность слоем оксида висмута.

Для создания наноструктурированной матрицы  $\text{TiO}_2$  использовали двухслойную тонкопленочную систему  $\text{Ti}/\text{Al}$  ( $\text{Ti}$  – 200 нм,  $\text{Al}$  – 1 мкм), нанесенную на кремниевую подложку. Анодирование двухслойной композиции  $\text{Ti}/\text{Al}$  проводили в 0,4 М  $\text{H}_3\text{PO}_4$  в комбинированном режиме: сначала формировали слой пористого АОА при постоянной плотности тока 6  $\text{A}/\text{cm}^2$ ; когда фронт анодирования достигал подслоя титана, напряжение стабилизировали на уровне 120 В. В этот период завершали формирование АОА, а через ее поры происходило локальное окисление титанового подслоя и образование наноразмерных островков  $\text{TiO}_2$ , сопровождающееся снижением тока. Процесс анодирования останавливали при достижении анодного тока до 60  $\text{мкА}/\text{cm}^2$ . Затем образовавшийся АОА удаляли в 50% растворе ортофосфорной кислоты при 50 °С. В результате на кремниевой пластине образовалась структура - наноструктурированный слой титана с массивом наноструктур  $\text{TiO}_2$ .

Процесс послойного осаждения оксида висмута на островковые наноструктуры оксида титана, как и в случае ионного осаждения на матрицы АОА, включал подготовку поверхности, заключающуюся в кипячении исходной заготовки в дистиллированной воде в течение 30 минут при температуре 100 °С. В качестве катионного раствора использовали водный раствор 0.1 М  $\text{Bi}(\text{NO}_3)_3 \times 5\text{H}_2\text{O}$ , а анионного раствора - подогретая до 30 °С дистиллированная вода. Композиционные пленки получали методом ионного послойного циклического осаждения путем последовательной обработки исходных образцов в катионных и анионных растворах в течение 10 с при температуре 30 °С. Один цикл осаждения включал обработку в катионных и анионных растворах с промежуточными промывками в дистиллированной воде в течение 5 с для удаления ионов, слабо связанных с поверхностью. Всего было выполнено 150 циклов. После нанесения оксида висмута методом ионного наслаивания образцы были подвергнуты отжигу при температуре 150 и 300 °С. На рисунке 1 приведены микрофотографии поверхности и скола сформированных композитов  $\text{TiO}_2/\text{Bi}_2\text{O}_3$  и ПАОА/ $\text{Bi}_2\text{O}_3$ , соответственно.

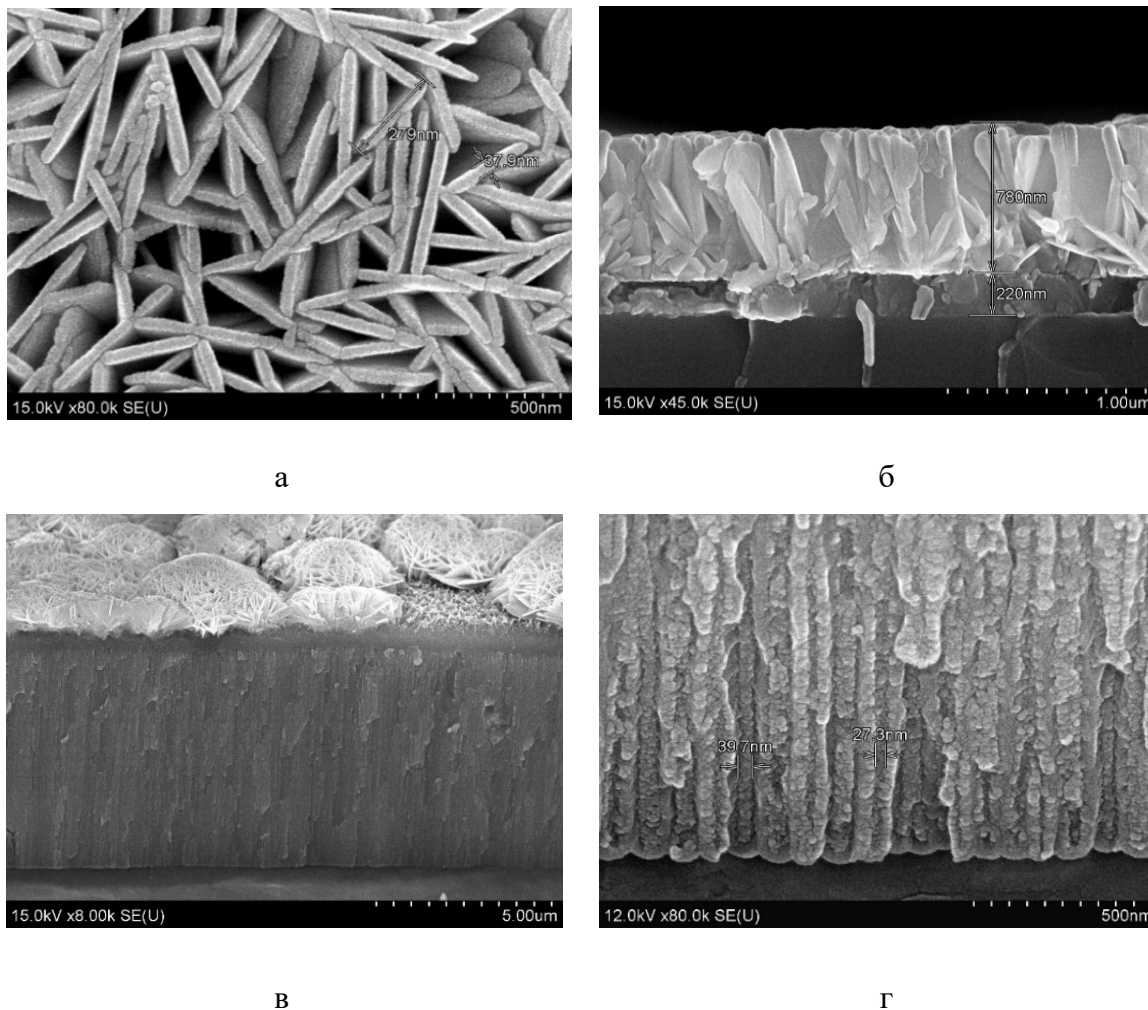


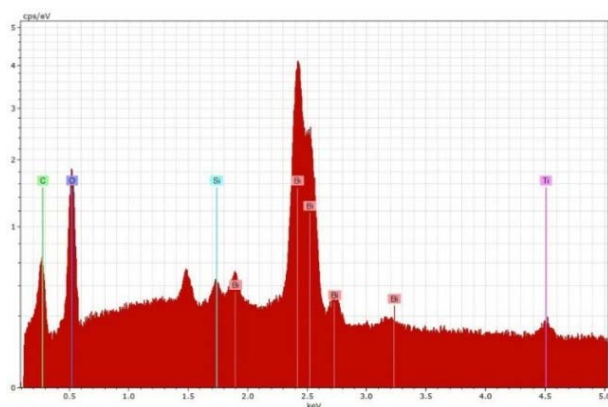
Рис. 1. СЭМ изображения композита  $\text{TiO}_2/\text{Bi}_2\text{O}_3$  (а,б) и ПАОА/ $\text{Bi}_2\text{O}_3$  (в,г)

Оксид висмута, обладающий зернистой структурой, полностью заполнил всю глубину пор оксида алюминия. Диаметр пор составил 40 нм, толщина слоя ПАОА - 6,18 мкм. В другом образце осаждение пленок  $\text{Bi}_2\text{O}_3$  происходило равномерно по всей поверхности матрицы  $\text{TiO}_2$ , заполняя пространство между окисленными областями титана. Пленка оксида висмута толщиной около 780 нм представляла собой скопление зерен в виде пластинок. Длина зерен составляла около 280 нм, а ширина - до 40 нм.

Результаты электронно-зондового рентгеновского спектрального микроанализа представлены на рисунке 2. В EDX-спектре присутствуют все элементы исследуемой системы с преобладанием Bi. Атомарное соотношение Bi, Ti и O с учетом всех элементов, входящих в состав пленок, составило 31,46% Bi: 3,78% Ti: 51,05% O.

Исследован фазовый состав трех образцов с осажденной на них пленкой оксида висмута и последующем отжигом 150, 200 и 250 градусов соответственно. Результаты показаны на рисунке 3.

На дифрактограмме присутствуют пики от кристаллических фаз  $\text{Ti}_2\text{O}_3$ , в частности, (0,1,2), (1,0,4), (1,1,0), (0,2,4), (1,1,6), (2,1,4), (1,0,10). Также на графике расположены пики  $\text{Bi}_2\text{O}_3$  (2,0,1) и (4,0,1) и пики от трехкомпонентного соединения  $\text{Bi}_4\text{Ti}_3\text{O}_{12}$ : (1,14,0), (0,12,2), (1,13,3) и (1,19,3).



El	AN	Series	unn. C [wt.%]	norm. C [wt.%]	Atom. C [at.%]	Error [wt.%]
O	8	K-series	8.81	10.49	51.05	1.2
Bi	83	M-series	70.91	84.40	31.46	2.5
C	6	K-series	1.35	1.61	10.42	0.2
Ti	22	K-series	1.95	2.33	3.78	0.1
Si	14	K-series	0.99	1.18	3.28	0.1
Total:			84.02	100.00	100.00	

а

б

Рис. 2. Результаты рентгеновского энергодисперсионного микроанализа наноструктурированной плёнки  $TiO_2$  с осадченной на нее пленкой  $Bi_2O_3$ : EDX спектр (а) и Таблица данных (б).

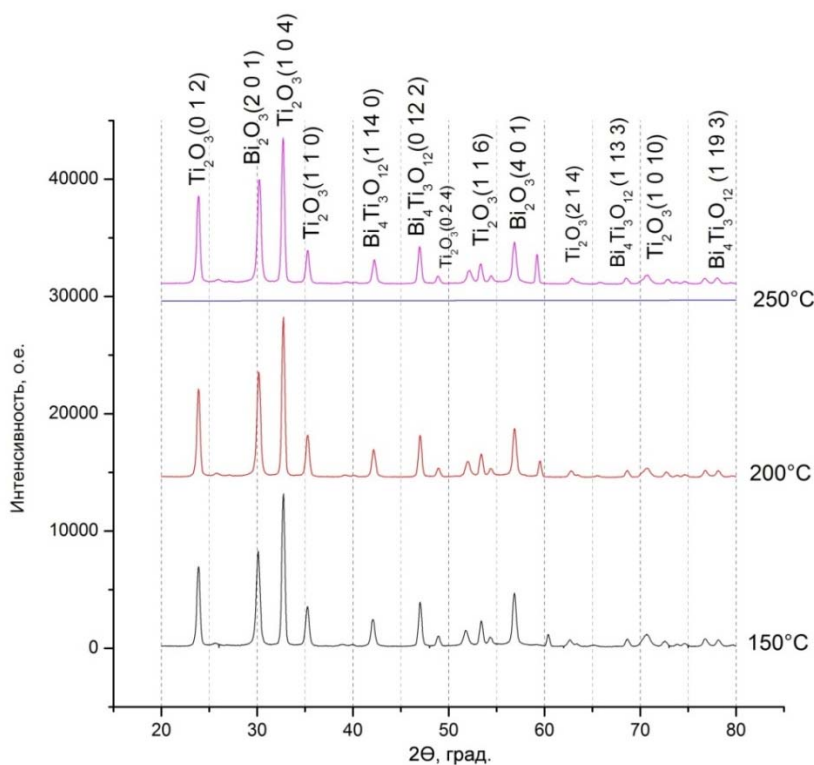


Рис. 3. Дифрактограмма полученных пленок.

При росте температуры отжига наблюдаются рост и смещение некоторых пиков. Повышение интенсивности пика  $Bi_4Ti_3O_{12}$  при росте температуре отжига свидетельствует об увеличении концентрации данной фазы в пленке. Как правило, смещение пика рентгеновского излучения происходит по трем причинам: изменение параметра решетки, наличие остаточных напряжений и изменения концентрации дефектов. Сдвиг пиков Брэгга к более высоким значениям угла дифракции означает уменьшения параметра решетки. Возможны несколько причин: устранение дефектов, структурная релаксация. Повышение интенсивности пиков при росте температуры отжига свидетельствует о росте уровня кристаллизации пленок.

Таким образом, технология получения композита  $\text{TiO}_2/\text{Bi}_2\text{O}_3$ , описанная в данной работе, помимо простых оксидных соединений висмута и титана, позволяет получить тройное соединение  $\text{Bi}_4\text{Ti}_3\text{O}_{12}$ . Данное соединение интересно своими пьезоэлектрическими свойствами, а также своей фотокаталитической активностью при модификации такой структуры примесными атомами [1,2].

Для возбуждения фотолюминесценции структуры ПАОА/ $\text{Bi}_2\text{O}_3$  использовалась ксеноновая лампа мощностью 1 кВт. Монохроматические линии из спектра лампы выделялись при помощи двойного монохроматора SOLAR DM 160. Детектором излучения служила цифровая фотокамера Proscan HS101H, оснащенная кремниевой ПЗС матрицей Hamamatsu S7031. Облучали образец электромагнитным излучением с длиной волны 345 нм. Спектр фотолюминесценции структуры АОА/ $\text{Bi}_2\text{O}_3$  показан на рисунке 4.

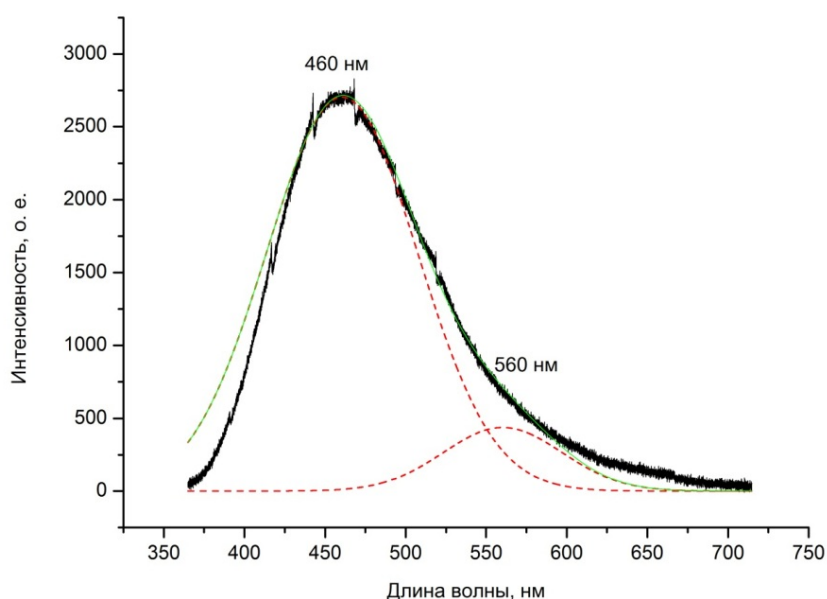


Рис. 4. Спектр фотолюминесценции структуры ПАОА/ $\text{Bi}_2\text{O}_3$ .

Раскладывая спектр с помощью функции Гаусса, можно заметить два пика фотолюминесценции с центрами на 460 и 560 нм соответственно. Из анализа полученных данных можно сделать вывод, что пик с центром 460 нм относится к свечению АОА и связан с одно- и двухзарядными кислородными вакансиями (F-центры) которые располагаются в стенах пор и барьерном слое. Пик с центром 560 нм относится к оксиду висмута и обусловлен кислородными вакансиями в  $\text{Bi}_2\text{O}_3$ .

#### Литература.

1. Maček Kržmanc, M., Daneu, N., Čontala, A., Santra, S., Kamal, K. M., Likozar, B., & Spreitzer, M. / *SrTiO<sub>3</sub>/Bi<sub>4</sub>Ti<sub>3</sub>O<sub>12</sub> nanoheterostructural platelets synthesized by topotactic epitaxy as effective noble-metal-free photocatalysts for pH-neutral hydrogen evolution* // *ACS Applied Materials & Interfaces*. – 2020. - Vol. 13, №. 1. – P. 370-381.
2. Jardiel T., Caballero A. C., Villegas M. / *Aurivillius ceramics: Bi<sub>4</sub>Ti<sub>3</sub>O<sub>12</sub>-based piezoelectrics* // *Journal of the Ceramic Society of Japan*. – 2008. - Vol. 116, №. 1352. – P. 511-518.

## Оптические свойства пористых анодных пленок вентильных металлов на стеклянных подложках

А. С. Шастин, Л. С. Хорошко

*Белорусский Государственный Университет, 220030 Минск, Беларусь*

*E-mail: Khoroshko@bsu.by*

**Введение.** Формирование наноструктурированных материалов на оптически прозрачных подложках в настоящее время активно исследуется для задач оптики и микроэлектроники в качестве интерференционных фильтров, для управления коэффициентами поглощения и отражения таких структур, а также для формирования на них оптически активных материалов, в частности, золь-гель методом [1]. Для оптических приложений важным параметром является степень пропускания и показатель преломления оптического покрытия, как монооксидного, так и комбинированного. В настоящей работе рассмотрена модификация степени пропускания и показателя преломления стекол формированием микронных слоев пористого анодного оксида алюминия (ПАОА) на субмикронных слоях оксидов ванадия и тантала.

**Эксперимент.** Для получения пористых анодных пленок на прозрачных подложках на предметные стекла с размерами  $26 \times 76 \times 1$  мм напыляли слои высокочистого (99,99%) алюминия термическим методом при температуре подложки  $270\text{--}300$  °С. Для формирования слоев ванадия и тантала проводили напыление пленок  $300$  Å магнетронным методом при температуре подложки  $250\text{--}300$  °С. Для получения слоев алюминия с подслоем ванадия или тантала проводили совмещение термического и магнетронного методов в рамках одного процесса: вначале проводили напыление магнетронным методом, а затем термическим.

Электрохимическое окисление металлических слоев проводили в растворе щавелевой кислоты (0,3 моль/л) при температуре  $6\text{--}7$  °С, напряжениях 20 и 60 В, а также в растворе, содержащем 1,2 моль/л серной и 0,6 моль/л щавелевой кислоты, при температуре  $12$  °С и напряжении 20 В в потенциостатическом режиме. Электрохимическое окисление проводили по всей толщине напыленного слоя. После анодирования образцы отжигали при температуре  $450$  °С на воздухе в течение часа для окончательного удаления воды и доокисления тантала и ванадия.

Морфология пленок исследована методом растровой электронной микроскопии (РЭМ). Спектры пропускания пленок измерялись на спектрофотометре МС 122 при комнатной температуре.

**Результаты и их обсуждение.** Анализ морфологии оксидных слоев показывает, что ПАОА формируется в виде упорядоченной структуры, представляющей собой массивы пор с диаметром  $20\text{--}30$  нм, природа полупроводникового подслоя не оказывает влияния на степень упорядоченности ПАОА. Без подслоя пленка ПАОА формируется в виде однородной квазиупорядоченной структуры (аномирование в  $\text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4$ , 60 В), либо разупорядоченной структуры разветвленных пор (аномирование в смеси серной и щавелевой кислот, 20 В). На рисунке 1 представлена фотография, полученная с помощью РЭМ, структур ПАОА/ $\text{Ta}_x\text{O}_y$ /стекло (рисунок 1а) и ПАОА/стекло (аномирование в смеси серной и щавелевой кислот, 20 В, рисунок 1б). Подслой оксида тантала формируется в виде зернистой пленки, пленка оксид алюминия/оксид тантала визуально прозрачна.

В спектрах пропускания стекол со сформированными пористыми анодными пленками наблюдаются чередования минимумов и максимумов, обусловленное интерференцией света в квазипериодической структуре полученных анодных оксидов

(рисунок 1в), при этом для квазиупорядоченной структуры ПАОА стекло наблюдается минимальное интегральное значение пропускания.

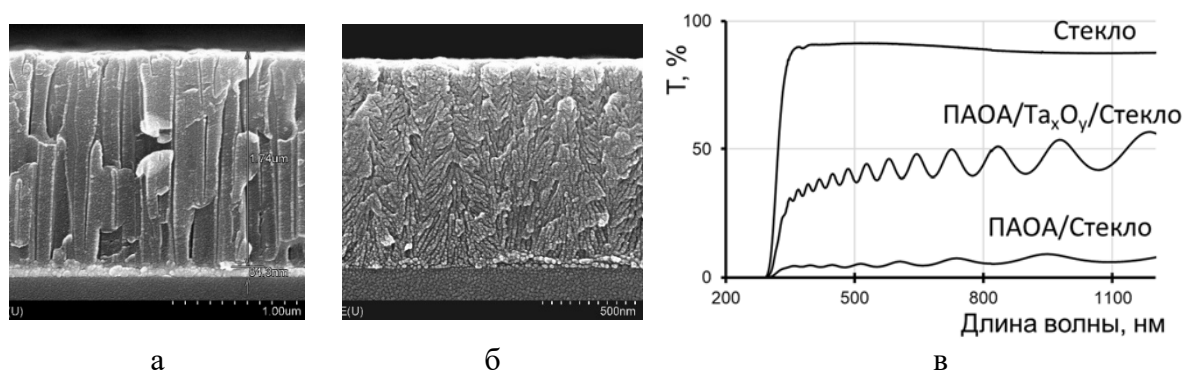


Рис. 1. Фотографии (а, б) и спектры пропускания (в) пористых анодных пленок на стекле.

В среднем, ослабление пропускания для всех полученных оксидных пленок составляет 40 % в оптическом диапазоне длин волн. В спектрах пропускания пленок наблюдаются чередования минимумов и максимумов, обусловленное интерференцией света в квазипериодической структуре полученных анодных оксидов, что позволяет применить конвертный метод для определения показателя преломления, а также толщины комбинированной оксидной пленки [2]. Показатель преломления анодных пленок по результатам расчета равен 1,57 для структуры оксид алюминия на оксиде тантала, 1,57 – для аналогичной структуры после отжига при 450 °С, 1,56 и 1,56 – для структур оксид алюминия на оксиде ванадия и оксида алюминия на стекле, соответственно. Он практически постоянен в диапазоне длин волн 380–780 нм. Расхождение при расчете толщины, по сравнению с РЭМ, составила в среднем 12 % (ошибка не более 0,3 мкм), что ставит под вопрос возможность применения метода конвертных кривых для оценки толщин комбинированных покрытий.

**Заключение.** Модификация пропускания стекол с нанесением анодных покрытий перспективна для затемняющих полос верхней части лобового стекла автомобиля и дополнительного ослабления излучения ИК-диапазона. Получаемые пористые оксиды также могут служить адгезионным подслоем для формирования покрытий, придания поверхности гидрофильных или гидрофобных свойств. Высокие значения удельной поверхности пористых оксидов позволяют использовать их в каталитических процессах, в том числе фотокаталитических ячейках с облучением через тыльную сторону.

### Литература.

1. Two-dimensional porous anodic alumina for optoelectronics and photocatalytic application / L.S. Khoroshko // Journal of Physics: Conference Series. – 2015. – Vol. 643. – P. 012110-1–012110-5.
2. Управление электрическими и оптическими параметрами активных элементов датчиков влажности на основе пленок оксидов олова переменного состава / Д.В. Адамчук, В.К. Ксенович // Приборы и методы измерений. – 2019. – Т. 10, № 2. – С. 138–150.



## Влияние плазмонных эффектов наночастиц платины на фотопроцессы ароматических аминокислот

Е. А. Демишкевич <sup>a,b</sup>, А. Ю. Зюбин <sup>a</sup>, А. О. Евтифеев <sup>a</sup>

<sup>a</sup> Балтийский Федеральный Университет им. И. Канта, Калининград, Россия

<sup>b</sup> Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского, Саратов, Россия

E-mail: [ldemishkevich@gmail.com](mailto:ldemishkevich@gmail.com)

Явление усиления флуоресценции вблизи металлических наноструктур при размерах, значительно меньших ее длины волны, используется во многих научных областях, таких как медицина [1], оптическая связь [2], спектроскопия [3], химическое зондирование [4].

Развитие науки и необходимость работать с разнообразными биологическими соединениями, которые имеют спектры поглощения в ультрафиолетовой области, указывают на важность изучения не только видимого и инфракрасного, но также и УФ-диапазона. Ультрафиолетовая плазмоника стала активной темой исследований в связи с новыми проблемами, возникающими в таких областях, как биосенсинг, химия и спектроскопия.

В рамках данной работы были исследованы фотопроцессы в комплексах ароматическая аминокислота, в частности тирозин и триптофан концентрации  $10^{-5}$  и  $10^{-6}$  М, и оптически активные наночастицы (НЧ) платины. Максимум плазмонного поглощения этого металла находится на  $\lambda = 260$  нм. Платина не окисляется, у нее практически отсутствует оксидная пленка, поэтому ее можно использовать с органическими веществами.

Первым этапом исследования было осуществление полиольного синтеза наночастиц с использованием соли хлорида платины  $H_2PtCl_6$  [5]. Морфологические и оптические свойства полученных наночастиц, исследовались с помощью многоуглового анализатора размеров частиц Photocor Complex и спектрофотометра UV-2600/UV-2600i. Для определения влияния платиновых наночастиц на фотопроцессы тирозина и триптофана были выполнены спектральные измерения флуоресценции комплексов платина-аминокислота, с помощью исследовательского оборудования Fluorolog-3 и интегрирующей сферы Quanta – ф.

В результате синтеза были получены наночастицы платины. Как видно из рисунка 1, размер НЧ варьируется от 0,120 до 13, 89 нм, в растворе также присутствуют и миллиметровые частицы, которые образовались в результате агломерации.

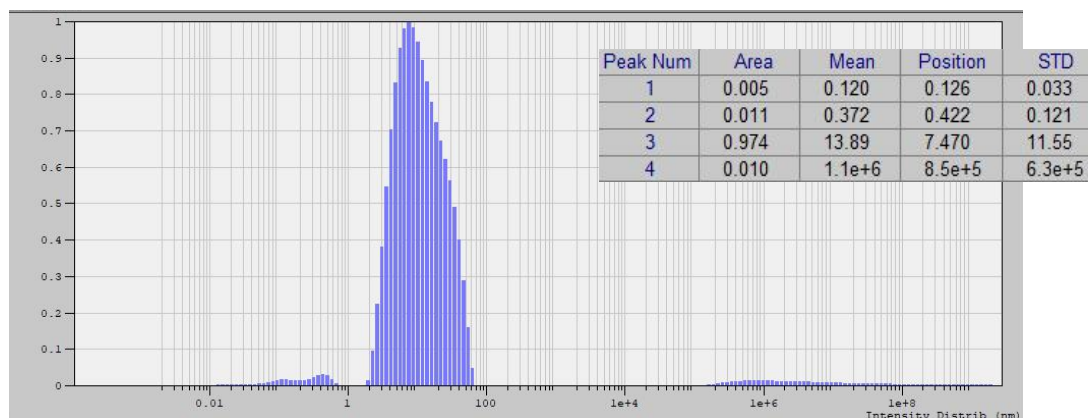


Рис. 1. Распределение по размерам для химически синтезированных НЧ платины.



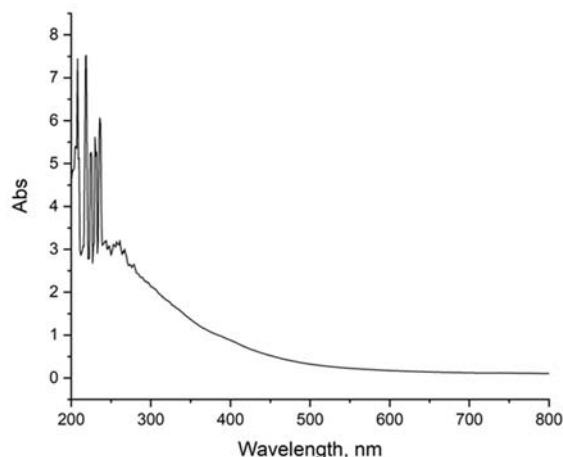


Рис. 2. Спектр плазмонного поглощения для химически синтезированных наночастиц платины.

Спектр наночастиц находится в УФ – диапазоне, выраженный максимум плазмонного резонанса которого наблюдается при длине волны близкой к  $\lambda=260$  нм (рисунок 2). В процессе работы были определены зависимости интенсивности флуоресценции триптофана и тирозина в зависимости от концентрации наночастиц в растворе. Для начала в кювету наливали 3 мл ароматической аминокислоты и затем постепенно добавляли НЧ платины, для каждого спектра регистрировался максимум интенсивности флуоресценции. Для контроля, в новую кювету с 3 мл ароматической аминокислоты добавляли в таких же объемах дистиллированную воду. Аналогично, для каждого спектра регистрировался максимум интенсивности флуоресценции. В ходе эксперимента было задетектировано увеличение флуоресценции у тирозина концентрацией  $10^{-6}$  М (рисунок 3).

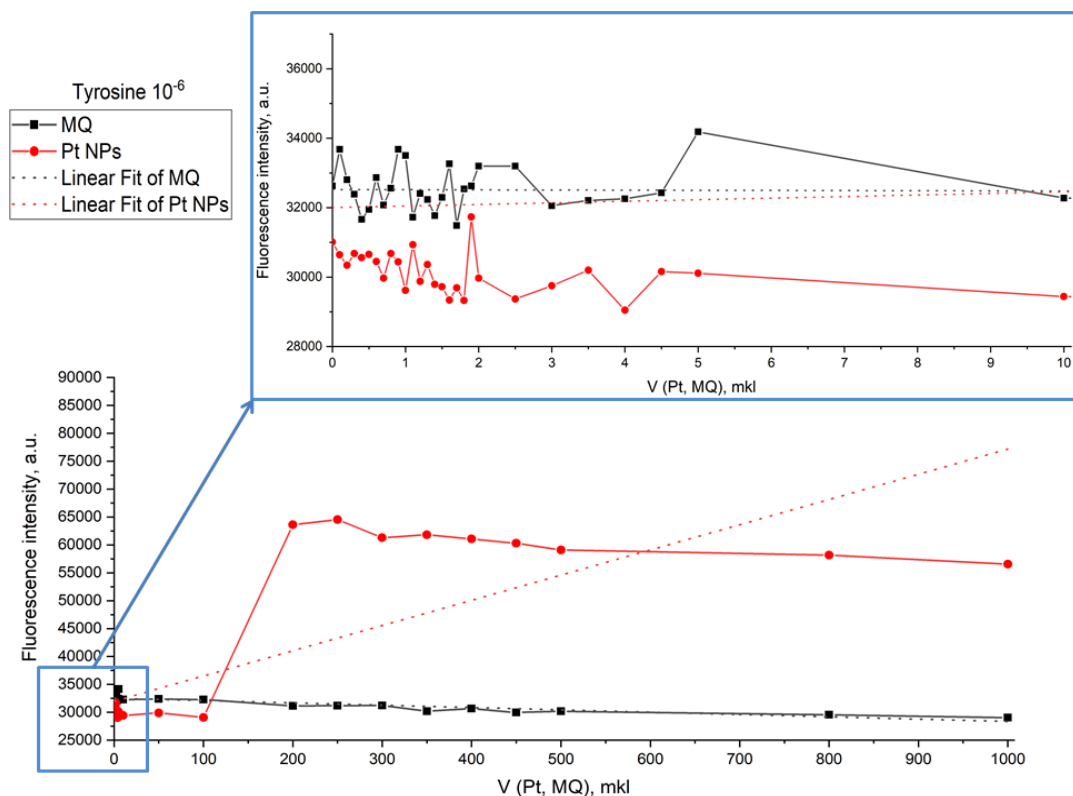


Рисунок 3. Зависимость флуоресценции тирозина  $10^{-6}$  М от кол-ва НЧ платины.

Практическим применением данной работы является использование полученных результатов для создания фундаментальных основ оптического сенсора для диагностики тромбоцитарных изменений, на основе усиления и тушения флуоресценции ароматических аминокислот.

**Благодарности.** Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования, проект № 075-02-2021-1748.

#### **Литература.**

1. Aslan K., Lakowicz J. R., Geddes C. D. Plasmon light scattering in biology and medicine: new sensing approaches, visions and perspectives //Current opinion in chemical biology. – 2005. – Т. 9. – №. 5. – С. 538-544.
2. Ozbay E. Plasmonics: merging photonics and electronics at nanoscale dimensions //science. – 2006. – Т. 311. – №. 5758. – С. 189-193.
3. Sharma B. et al. SERS: Materials, applications, and the future //Materials today. – 2012. – Т. 15. – №. 1-2. – С. 16-25.
4. Anker J. N. et al. Biosensing with plasmonic nanosensors //Nanoscience and Technology: A Collection of Reviews from Nature Journals. – 2010. – С. 308-319.
5. Herricks T., Chen J., Xia Y. Polyol synthesis of platinum nanoparticles: control of morphology with sodium nitrate //Nano Letters. – 2004. – Т. 4. – №. 12. – С. 2367-2371.

## Оптические свойства кварцевых стёкол с модифицированной золотыми наностержнями поверхностью

Д. О. Евтифеев <sup>a</sup>, А. С. Зозуля <sup>a</sup>, Е. А. Демишкевич <sup>a,b</sup>, А. А. Кундалевич <sup>a,b</sup>,  
А. Ю. Зюбин <sup>a</sup>, И. Г. Самусев <sup>a</sup>

<sup>a</sup> Балтийский Федеральный Университет им. И.Канта, Калининград, Россия,

<sup>b</sup> Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского, Саратов, Россия

E-mail: [d.o.evtifeev@mail.ru](mailto:d.o.evtifeev@mail.ru)

Золотые наностержни имеют широкое применение в биомедицинских технологиях, спектроскопии с плазмонным усилением, а также в оптических и оптоэлектронных устройствах благодаря их способности не только усиливать сигнал, но и быть безвредными (не токсичными) для биологических объектов. Поэтому методы выращивания и плазмонные свойства наностержней (НС) Au интенсивно изучаются [1].

В рамках проведения данного исследования были получены результаты спектроскопии гигантского комбинационного рассеяния света (ГКРС) с помощью золотых наностержней на APTES-модифицированных стёклах, для чего использовался спектрометр Centaur U (ООО «НаноСканТехнология», Россия). Поскольку приготовленные наностержни имеют широкий максимум плазмонного поглощения, начинающийся в районе 500 нм и заканчивающийся в ближнем инфракрасном диапазоне, в ходе эксперимента был использован лазер с длиной волны  $\lambda = 632$  нм, соотносящийся с максимумом плазмонного поглощения ГКРС. В качестве экспериментального детектируемого вещества был выбран флуороновый краситель родамина 6Ж (Р6Ж).

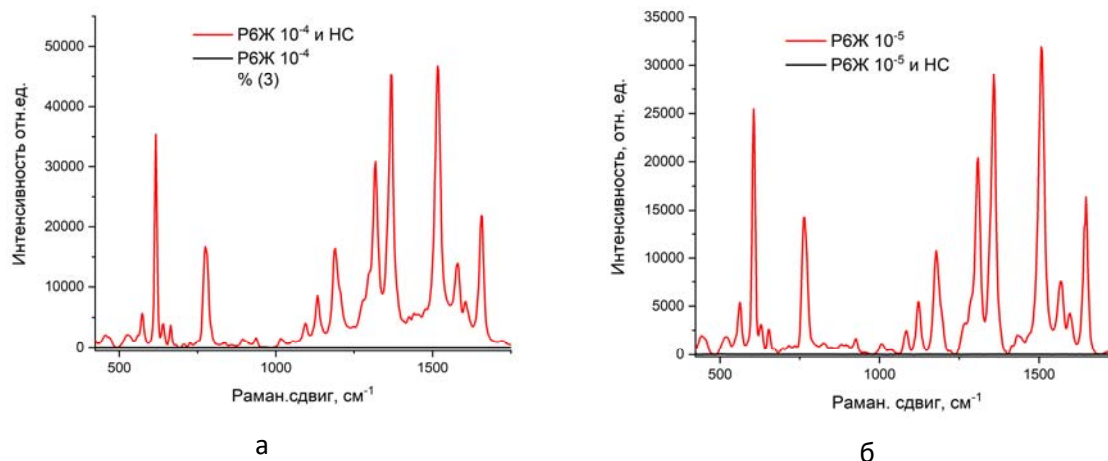


Рис. 1. Спектры ГКРС родамина 6Ж концентрации  $10^{-4}$  моль/л (а) и  $10^{-5}$  моль/л (б) с использованием наностержней Au и спектры КРС родамина 6Ж на чистом кварце.

Для оценки усиления сигнала комбинационного рассеяния света красителя Р6Ж, зарегистрированного на исследуемых поверхностях, покрытых золотыми стержнями без оболочек, были рассчитаны коэффициенты усиления гигантского комбинационного рассеяния света по формуле:

$$EF = \frac{I_{\text{ГКРС}} \cdot C_{\text{КРС}}}{I_{\text{КРС}} \cdot C_{\text{ГКРС}}}$$

где  $I_{ГКРС}$  и  $I_{КРС}$  - интенсивность ГКР и КР на выбранной частоте соответственно,  $C_{ГКРС}$  и  $C_{КРС}$  – концентрация веществ в эксперименте с ГКР и КР соответственно. Полученные результаты эксперимента представлены в таблице 1.

Таблица 1. Рассчитанные коэффициенты усиления сигнала комбинационного рассеяния света красителя Р6Ж с наностержнями Au.

Концентрация красителя, моль/л	Кол-во слоев НС	Положение максимума, см <sup>-1</sup>	Интенсивность ГКРС, отн.ед.	Интенсивность КРС, отн.ед.	Коэффициент усиления
10 <sup>-4</sup>	3	1516	46788	4	1,17·10 <sup>4</sup>
10 <sup>-5</sup>	3	1507	31912	20	1,6·10 <sup>3</sup>
10 <sup>-6</sup>	1	1507	6846	7	9,78·10 <sup>2</sup>
10 <sup>-7</sup>	3	1510	27194	8	3,11·10 <sup>3</sup>
10 <sup>-8</sup>	3	1512	1740	14	1,24·10 <sup>2</sup>
10 <sup>-9</sup>	3	1512	1763	8	2,2·10 <sup>2</sup>
10 <sup>-10</sup>	2	1514	1263	9	1,4·10 <sup>2</sup>
10 <sup>-11</sup>	3	1445	181	2,8	64,6
10 <sup>-12</sup>	2	1521	388	3,3	1,16·10 <sup>2</sup>
10 <sup>-13</sup>	2	1360	232	10	23,2

Как видно из представленных данных, лучше всего краситель высоких концентраций детектировался на трех слоях НС, а для более низких лучше использовать два слоя НС.

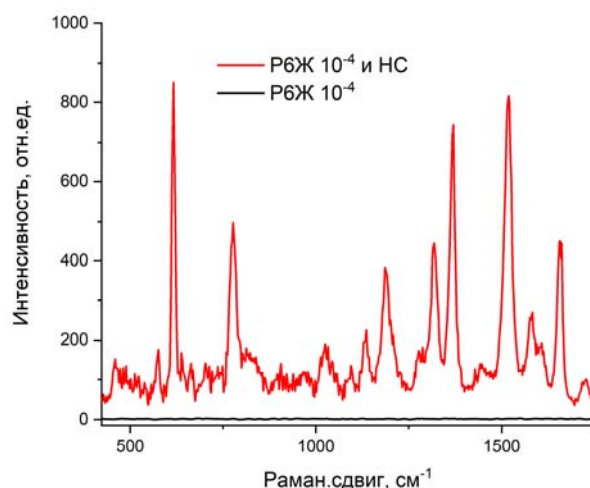


Рис. 2. Спектр ГКРС родамина 6Ж концентрации 10<sup>-4</sup> моль/л с использованием наностержней Au@SiO<sub>2</sub> (красный) и спектр КРС родамина 6Ж концентрации 10<sup>-4</sup> моль/л на чистом кварце (черный).

Для оценки усиления сигнала комбинационного рассеяния света красителя Р6Ж, коэффициенты усиления гигантского комбинационного рассеяния света были

рассчитаны аналогично, как и для наностержней без оболочки. Результаты представлены в таблице 2.

Таблица 2. Рассчитанные коэффициенты усиления сигнала комбинационного рассеяния света красителя Р6Ж с наностержнями Au@SiO<sub>2</sub>.

Концентрация красителя, моль/л	Кол-во слоев НС	Положение максимума, см <sup>-1</sup>	Интенсивность ГКРС, отн. ед.	Интенсивность КРС, отн. ед.	Коэффициент усиления
10 <sup>-4</sup>	1	617	849	1,45	5,85·10 <sup>2</sup>
10 <sup>-5</sup>	3	1368	1048	16	65,5
10 <sup>-6</sup>	3	1367	317	4	79,25
10 <sup>-7</sup>	1	1400	95	10	9,5
10 <sup>-8</sup>	3	1365	901	16	56,3

**Заключение.** Как видно из представленных данных, самые большие коэффициенты усиления удалось получить для красителя концентраций 10<sup>-4</sup> моль/л на одном слое и 10<sup>-6</sup> моль/л на трех слоях НС. Однако стоит отметить, что зависимость значения коэффициента усиления от слоев НС или концентрации красителя не наблюдается.

Принимая во внимание вышеизложенные факты, можно сделать вывод, для получения большего усиления ГКРС необходимо подбирать условия, основываясь на интенсивности пика плазмонного поглощения. Поскольку максимум плазмонного поглощения исследуемых наностержней без оболочки находится при значении длины волны возбуждения 728 нм и 749 нм для наностержней с оболочкой, то для более эффективного усиления сигнала ГКРС следует использовать лазер с длиной волны 632 нм.

**Благодарности.** Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (FZWM-2020-0003).

#### Литература.

1. Chen H. et al. Gold nanorods and their plasmonic properties //Chemical Society Reviews. – 2013. – Т. 42. – №. 7. – С. 2679-2724.

## Оптические свойства кварцевых стёкол с модифицированной золотыми нанозвездами поверхностью

А. А. Кундалевич <sup>a,b</sup>, А. С. Зозуля <sup>a</sup>, Е. А. Демишкевич <sup>a,b</sup>, Д. О. Евтифеев <sup>a</sup>,  
А. Ю. Зюбин <sup>a</sup>, И. Г. Самусев <sup>a</sup>

<sup>a</sup> Балтийский Федеральный Университет им. И.Канта, Калининград, Россия

<sup>b</sup> Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени  
Н.Г. Чернышевского, Саратов, Россия  
E-mail: [kundalevich3@mail.ru](mailto:kundalevich3@mail.ru)

Наночастицы (НЧ) благородных металлов широко распространены и используются во многих сферах человеческой деятельности, в том числе в биомедицине, оптоэлектронике, нанофотонике и исследованиях окружающей среды [1]. Такие частицы способны усиливать флуоресценцию образца, так как индуцируют явление поверхностного плазмонного резонанса, что позволяет исследовать молекулярную структуру и производить детекцию малоконцентрированных веществ в фундаментальной и прикладной науке [2].

В рамках проведения данного исследования были получены результаты спектроскопии гигантского комбинационного рассеяния света с помощью нанозвёзд на АPTES-модифицированных стёклах, для чего использовался спектрометр Centaur U (ООО «НаноСканТехнология», Россия). Поскольку приготовленные нанозвёзды имеют широкий максимум плазмонного поглощения, начинающийся в районе 500 нм и заканчивающийся в ближнем инфракрасном диапазоне, в ходе эксперимента были использованы лазеры с длинами волн  $\lambda = 532$  нм и  $\lambda = 632$  нм, соотносящиеся с максимумами плазмонного поглощения ГКРС. В качестве экспериментального детектируемого вещества был выбран флуороновый краситель родамина 6Ж (Р6Ж).

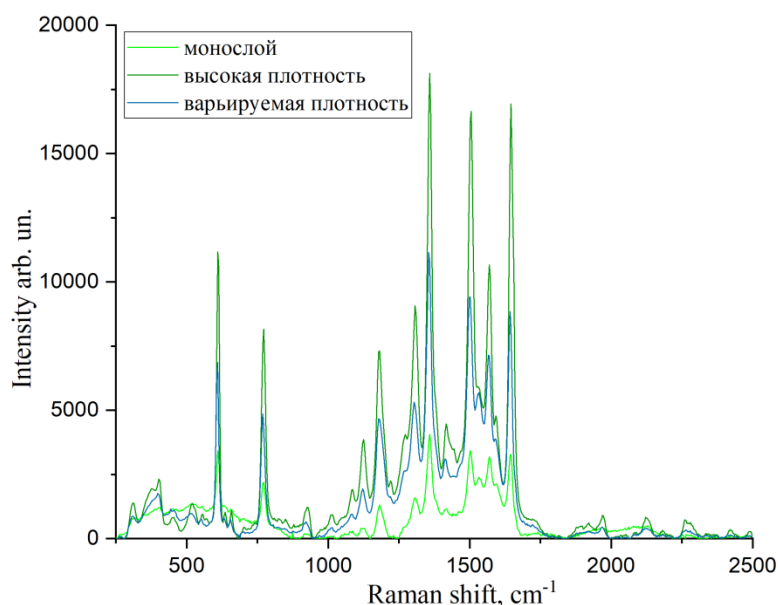


Рис.1. Спектры ГКРС Р6Ж с концентрацией  $10^{-4}$  моль/л, полученные на разных областях анализируемого стекла: участки высокой плотности НЗ, участок варьируемой плотности НЗ, монослой нанозвёзд.

На графиках, представленных на рисунке 1, видно, что интенсивность рассеяния света Р6Ж зависит от концентрации нанозвёзд на поверхности стекла: при большой

концентрации частиц наблюдается большая интенсивность рассеяния. Следует отметить, что при попадании лазерного луча в области малой концентрации нанозвёзд сигнал сильно зашумлён, что усложняет анализ полученных спектров.

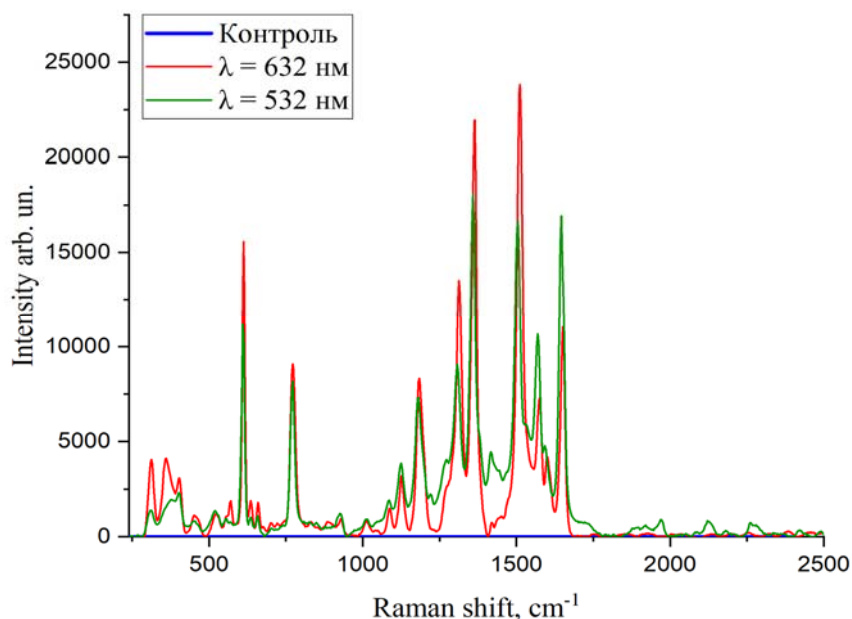


Рисунок 2. Спектры ГКРС Р6Ж с концентрацией  $10^{-4}$  моль/л, полученные при разных длинах волн возбуждения (красная и зелёная линии) и спектр контроля (синяя линия).

Для графического отражения эффекта ГКРС, на рисунке 2 добавлен график контроля - капля родамина 6Ж, снятая на простом кварцевом стекле при тех же условиях, что и спектр ГКРС родамина 6Ж. Анализируя полученные графики, можно заметить, что интенсивность спектра комбинационного рассеяния света родамина 6Ж имеет малую величину (максимальная интенсивность сигнала не превышает 4 отн. ед.), поэтому можно наблюдать значительное усиление интенсивности рассеяния красителя. Максимальное значение интенсивности (23817 отн. ед) наблюдается для максимума в области  $1512 \text{ см}^{-1}$  при использовании длины волны возбуждения 632 нм. Несложно заметить, что при использовании данной длины волны общая интенсивность анализируемого красителя выше, чем при использовании лазера с длиной волны 532 нм.

Стоит отметить, что мощность лазера с длиной волны 632 нм меньше, чем мощность лазера с длиной волны излучения 532 нм (17 мВт и 50 мВт соответственно), а длина волны красного лазера находится ближе к максимуму плазмонного поглощения, чем длина волны зелёного лазера. Из рисунка 2 можно сделать вывод, что полученные нанозвёзды более эффективны при использовании лазера с длиной волны излучения 632 нм, поскольку при меньшей мощности лазерного излучения наблюдается более интенсивный сигнал.

Для оценки усиления сигнала комбинационного рассеяния света красителя Р6Ж, задетектированного на исследуемых поверхностях, покрытых нанозвёздами методом АРТЕС, были рассчитаны коэффициенты усиления гигантского комбинационного рассеяния света по формуле:

$$EF = \frac{I_{\text{ГКРС}} \cdot C_{\text{КРС}}}{I_{\text{КРС}} \cdot C_{\text{ГКРС}}}, \quad (1)$$

где  $I_{\text{ГКРС}}$  и  $I_{\text{КРС}}$  – интенсивность ГКРС и КРС на выбранной частоте соответственно,  $C_{\text{ГКРС}}$  и  $C_{\text{КРС}}$  – концентрация веществ в эксперименте с ГКРС и КРС, соответственно.

Полученные результаты для разных условий эксперимента представлены в таблице 1.

Таблица 1. Рассчитанные коэффициенты усиления сигнала комбинационного рассеяния света красителя Р6Ж.

Длина волны излучения, нм	Место детекции	Область детекции, см <sup>-1</sup>	Коэффициент усиления
632	монослой	1512	$1,12 \cdot 10^4$
632	монослой	1359	$9,2 \cdot 10^3$
532	варьируемая плотность	1355	$5,16 \cdot 10^3$
532	высокая плотность	1512	$5,4 \cdot 10^3$
532	высокая плотность	1359	$2,69 \cdot 10^4$
532	монослой	1358	$6,50 \cdot 10^2$

Как видно из расчётов наибольшее усиление интенсивного рассеянного света было зарегистрировано в двух случаях: при анализе монослоя с длиной волны излучения 632 нм и при анализе мест с большой концентрации нанозвёзд на поверхности стекла (мутные участки). При соблюдении данных условий можно получить усиление сигнала порядка  $10^4$ .

**Заключение.** Полученные результаты показывают, что интенсивность рассеяния света Р6Ж зависит от концентрации нанозвёзд на поверхности стекла: при большой концентрации частиц наблюдается большая интенсивность рассеяния. Сравнение спектров, полученных при разных длинах волн излучения  $\lambda = 532$  нм и  $\lambda = 632$  нм, показывает, что при использовании длины волны  $\lambda = 632$  нм общая интенсивность анализируемого красителя выше, чем при использовании лазера с длиной волны  $\lambda = 532$  нм. Для оценки усиления сигнала комбинационного рассеяния света красителя Р6Ж, задетектированного на исследуемых поверхностях, покрытых нанозвёздами методом АРТЕС, были рассчитаны коэффициенты усиления гигантского комбинационного рассеяния света. При соблюдении оптимальных условий можно получить усиление сигнала порядка  $10^4$ . В работе показана перспектива использования АРТЕС-модифицированных стекол для целей сенсорики.

**Благодарности.** Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (FZWM-2020-0003).

#### Литература.

1. Rinaudo MJ. Prog. Polym. Sci. 2006, 31, 603–632
2. Koningstein J. A. In Raman Spectroscopy. Theory and Practice. Ed. H. A. Szymansky. (1967) – P. 82.



## Спектроскопия гигантского комбинационного рассеяния света в вопросах диагностики эффективности антитромбоцитарной терапии

А. Ю. Зюбин <sup>a</sup>, В. В. Рафальский <sup>a</sup>, Е. М. Моисеева <sup>a</sup>, К. И. Матвеева <sup>a</sup>,  
А. В. Цибульникова <sup>a</sup>, И. Г. Самусев <sup>a</sup>, А. А. Кундалевич <sup>a,b</sup>, Е. А. Демишкевич <sup>a,b</sup>,  
Д. О. Евтифеев <sup>a</sup>

<sup>a</sup> Балтийский Федеральный Университет им. И.Канта, Калининград, Россия

<sup>b</sup> Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского, Саратов, Россия  
E-mail: azubin@mail.ru

В настоящее время предпринимаются отдельные попытки использования спектроскопии гигантского комбинационного рассеяния света (ГКР) для исследования тромбоцитов. Так, ГКР используется в изучении болезни Альцгеймера [1]. Авторами [2] было предложено оптофлюидное устройство для ГКР диагностики компонентов периферической крови человека основе использования золотых наночастиц. В настоящей работе представлены первичные результаты по использованию оптических сенсоров Au/Ti и их апробация их для целей исследований эффективности антитромбоцитарной терапии. В частности, в работе были получены новые фундаментальные результаты о фотопроцессах и закономерностях, характеризующих изменения структуры тромбоцита человека, на основе анализа его спектральных данных *in vitro*, при его активации так и без нее. С применением наночастиц золота, полученных методом фемтосекундной лазерной абляции и адсорбированных на анодированную титановую поверхность и последующих оптических измерений были оценены спектральные характеристики тромбоцитов до и после действия антитромбоцитарного препарата – клопидогреля.

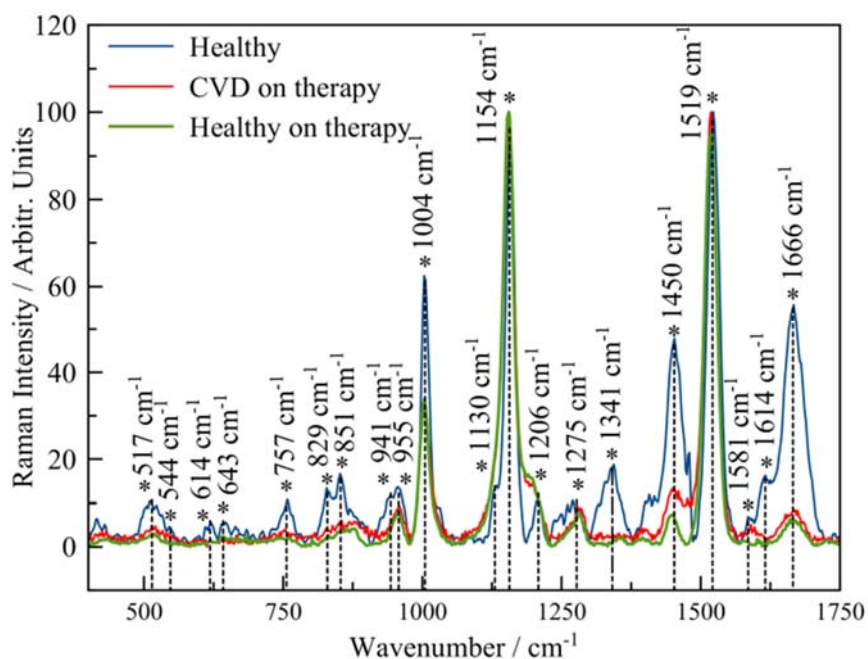


Рисунок 1. Спектры ГКРС Р6Ж с концентрацией  $10^{-4}$  моль/л, полученные на разных участках анализируемого стекла: участки высокой плотности НЗ, участок варьируемой плотности НЗ, монослой нанозвезд.

Спектры гигантского комбинационного рассеяния тромбоцитов в спектральной области  $400\text{-}1750\text{ см}^{-1}$  для здоровых добро-вольцев (голубая линия), здоровых добро-вольцев на антитромбоцитарной терапии (зеленая линия), здоровых добровольцев на антитромбоцитарной терапии (зеленая линия) и пациентов на терапии с сердечно-сосудистой патологией (красная линия).

**Заключение.** В результате выполнения исследования были успешно идентифицированы и сравнены характеристики колебательных полос тромбоцитов, включая колебательные полосы аминокислот: Cys, Phe, Tyr, Trp, дисульфидные мостики, белки, липиды и другие компоненты. Были показаны различия между спектрами тромбоцитов, которые были обусловлены антиагрегантной терапией и ее действием на структуру тромбоцитов. Эта информация может быть использована в качестве характерных маркеров для оценки эффективности антиагрегантной терапии.

**Благодарности.** Академическая мобильность для представления данной работы была осуществлена в рамках программы стратегического академического лидерства "Приоритет 2030" БФУ им. И.Канта.

#### **Литература.**

1. Chen, P., Tian, Q., Baek, S. J., Shang, X. L., Park, A., Liu, Z. C., Peng, J. *Laser Physics Letters*, 8(7), 547-552 (2011).
2. Coté, G. L., Kameoka, J., Marks, H., *Translational Biophotonics*, 9155, 91550E (2011).

## Взаимодействие графеновых и борнитридных квантовых точек с эритроцитами

В. В. Екимчик <sup>a</sup>, Е. И. Коваленко <sup>a</sup>, Е. Н. Голубева <sup>b</sup>, А. В. Богданова <sup>b</sup>,  
М. И. Демиденко <sup>b</sup>, Т. А. Кулагова <sup>b</sup>

<sup>a</sup> Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь

<sup>b</sup> Институт ядерных проблем БГУ, Минск, Беларусь

E-mail: yekimchikvadim@gmail.com

**Введение.** Перспективным направлением развития нанотехнологий является разработка материалов для направленной доставки лекарственных средств, биовизуализации, тераностики и тканевой инженерии. Благодаря яркой фотолюминесценции, графеновые (ГКТ) и борнитридные квантовые точки (БНКТ) используются для биовизуализации клеточных органелл, а другие перспективы использования данных наноматериалов изучаются [1]. Успешное применение наноматериалов, а также их практическая и клиническая польза в значительной степени зависят от тщательного понимания их нанотоксикологического профиля [2].

Целью нашей работы стало изучение взаимодействия ГКТ и БНКТ с эритроцитами крови человека.

**Материалы и методы.** Эритроциты изолировали из консервированной с гепарином донорской крови путем трехкратного отмывания в 0,15 М NaCl с применением центрифугирования при 3000 об/мин в течение 5 мин.

Препараты ГКТ и БНКТ добавляли к суспензии эритроцитов в концентрациях 1-50 мкг/мл. Инкубирование проводили при комнатной температуре в течение 1-24 ч. Влияние ГКТ и БНКТ на целостность эритроцитов оценивалось по спектрам поглощения образцов. Измерения проводились на спектрофлуориметре Solar CM2203.

Расчёт содержания различных форм гемоглобина был проведён с помощью формул, учитывающих величину поглощения на различных длинах волн [3]:

$$[\text{HbO}_2] = 0,17 D_{577} - 0,13 D_{569} - 0,015 D_{500} \quad (1)$$

$$[\text{Hb}] = -0,16 D_{577} + 0,25 D_{569} - 0,033 D_{500}, \quad (2)$$

$$[\text{MetHb}] = 0,02 D_{577} - 0,04 D_{569} - 0,033 D_{500}, \quad (3)$$

$D_{577}$ ,  $D_{569}$ ,  $D_{500}$  — поглощение образцов при длинах волн 577, 569, 500 нм, соответственно;  $[\text{HbO}_2]$ ,  $[\text{Hb}]$ ,  $[\text{MetHb}]$  — концентрация различных форм гемоглобина (мкМ).

Определение структурных и геометрических параметров клеток, накопление ГКТ и БНКТ проводили с использованием флуоресцентного микроскопа Nikon Eclipse Ti2, получая изображения клеток при возбуждении излучением с различными длинами волн возбуждения (470 нм — для образцов с ГКТ, 365 нм — для образцов с БНКТ).

Для изучения влияния ГКТ и БНКТ на структурные характеристики мембран эритроцитов были выделены «тени» эритроцитов. Для этого в суспензии эритроцитов проводили лизис с помощью воды, и центрифугировали разрушенные клетки 15 мин при 6000 об/мин. Затем проводили повторную отмывку и лизис, полученные тени эритроцитов переводили в HEPES-буфер.

Микровязкость мембран эритроцитов изучали с применением липофильного флуоресцентного зонда 1,6-дифенил-1,3,5-гексатриена (ДФГТ), анализируя степень поляризации люминесценции этого зонда в мембранах.

Образцы «теней» эритроцитов загружали ДФГТ, инкубировали 2 ч, а затем добавляли ГКТ и БНКТ в различных концентрациях и инкубировали еще 1 ч. Спектры

флуоресценции регистрировали с помощью спектрофлуориметра SM2203 в диапазоне длин волн  $\lambda_{em}$  420-500 нм при возбуждении  $\lambda_{ex}=360$  нм. Для получения линейно поляризованного света для возбуждения образца, а также разделения испускаемого излучения на перпендикулярную и параллельную составляющие, использовали поляризаторы. Степень поляризации флуоресценции рассчитывали по формуле:

$$P = \frac{I_{VV} \cdot I_{HH} - I_{VH} \cdot I_{HV}}{I_{VV} \cdot I_{HH} + I_{VH} \cdot I_{HV}}, \quad (4)$$

где  $I$  — интенсивность флуоресценции зонда ДФГТ на длине волны испускания 460 нм, индексы «V» и «H» соответствуют вертикальной и горизонтальной ориентации поляризаторов.

**Результаты и обсуждение.** Установлено, что ГКТ и БНКТ влияют на морфологию эритроцитов и приводят к образованию эхиноцитов (рисунок 1). Формирование эхиноцитов наблюдалось при инкубировании в течение 1 и 24 ч с ГКТ в различных концентрациях (1 мкг/мл, 50 мкг/мл) и БНКТ (50 мкг/мл).

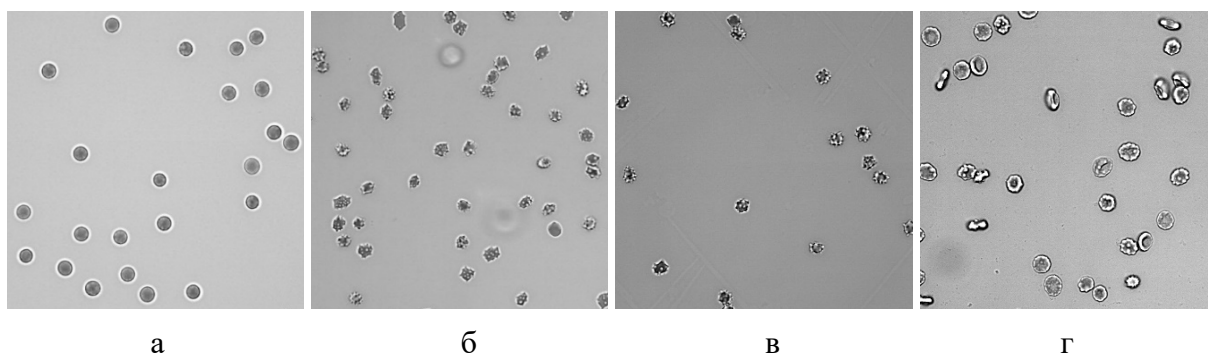


Рис. 1. Изображения контрольного образца эритроцитов (а), а также эритроцитов, инкубированных с ГКТ (б – 1 мкг/мл, в – 50 мкг/мл) и с 50 мкг/мл БНКТ (г).

Для исследования влияния ГКТ и БНКТ на целостность эритроцитов, изучали супернатанты после инкубирования клеток с наноматериалами. Анализ спектров поглощения супернатантов образцов показал, что интенсивность полосы Сорс ( $\lambda = 415$  нм) как косвенного показателя концентрации гемоглобина в образцах с ГКТ и БНКТ не превышает контрольных значений. Следовательно, исследуемые наноматериалы не приводят к разрушению эритроцитов. Кроме того, расчёт содержания различных форм гемоглобина свидетельствует о том, что ГКТ и БНКТ в данных концентрациях не приводят к образованию метгемоглобина.

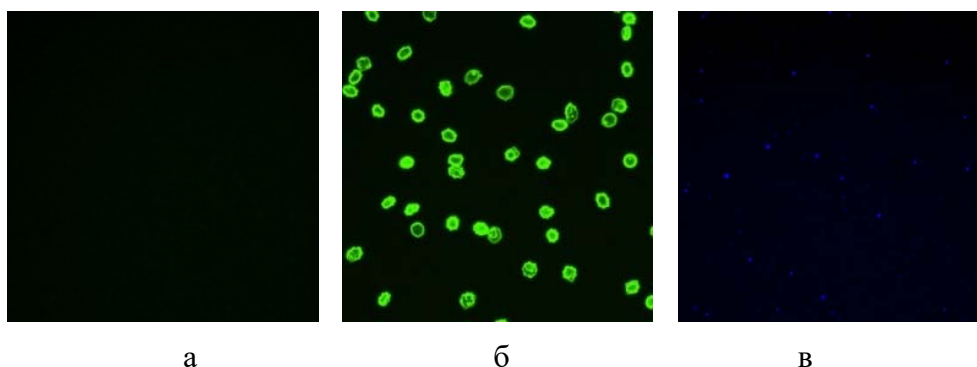


Рис. 2. Флуоресцентные изображения контрольного образца эритроцитов (а), образца с 50 мкг/мл ГКТ (б) и 50 мкг/мл БНКТ (с).

Анализ флуоресцентных изображений (рисунок 2) показал, что ГКТ в концентрации 50 мкг/мл склонны к адсорбции на поверхности эритроцитов. БНКТ на мембране клеток не были зарегистрированы, они агрегируют в среде и визуализируются в растворе с помощью флуоресцентной микроскопии, как показано на рисунке 2в.

Полученные изображения «теней» эритроцитов (рисунок 3) подтверждают, что ГКТ накапливаются на мембране эритроцитов, а значит, могут взаимодействовать с белками и/или липидами на её поверхности и влиять на структуру.

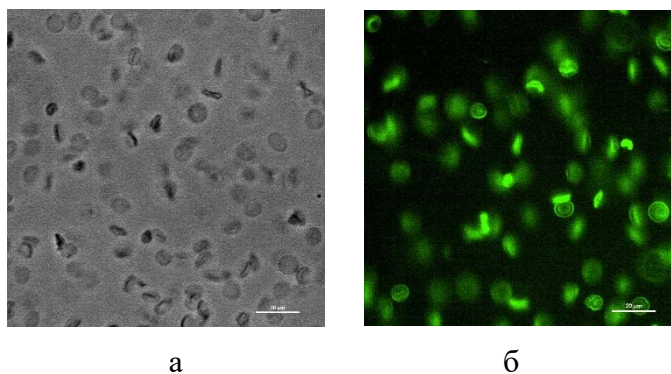


Рис. 3. Изображения «теней» эритроцитов: а – оптическое изображение, б – флуоресцентное изображение при  $\lambda_{ex} = 470$  нм.

Поляризация люминесценции ДФГТ непосредственно связана с ориентацией молекулы в липидном бислое, а, следовательно, с микровязкостью мембран клеток. При добавлении ГКТ в концентрации 50 мкг/мл поляризация люминесценции флуоресцентного зонда ДФГТ изменяется с 0,24 до 0,26. Таким образом, ГКТ в данной концентрации взаимодействуют с клетками, увеличивают микровязкость мембран, вероятно, за счет образования сшивок между белками и/или липидами.

Поляризация люминесценции ДФГТ в образцах с БНКТ оставалась постоянной и не зависела от концентрации БНКТ.

**Заключение.** В ходе исследования было изучено влияние ГКТ и БНКТ на эритроциты. Установлено, что данные наноматериалы взаимодействуют с мембранами клеток и меняют морфологию их поверхности, не нарушая целостности эритроцитов. Также показано, что ГКТ склонны к накоплению на поверхности эритроцитов и изменяют вязкость мембран.

### Литература.

1. Unravelling the Potential of Graphene Quantum Dots in Biomedicine and Neuroscience / G.Perini [et al.] // International Journal of Molecular Sciences. — 2020. — Vol. 21(10), P. 3712.
2. Schroeder K.L. Graphene Quantum Dots for Theranostics and Bioimaging / K.L. Schroeder, R.V. Goreham, T. Nann. — Pharmaceutical Research. — 2016. — Vol. 33(10), P. 2337-2357.
3. Артюхов, В.Г. Модификация структурно функциональных свойств гемоглобина человека, индуцированная нитроглицерином, в условиях различного кислородного режима / В.Г. Артюхов, Е.А. Калаева [и др.]. — Биомедицинская химия. — 2016. — Т. 62, №3. — с. 251-258.

## Моделирование радиационного повреждения опухолевых клеток при нейтронной терапии с использованием препаратов на основе бора

В. К. Кулик <sup>a</sup>, Т. А. Кулагова <sup>a</sup>, Е. Н. Голубева <sup>a,b</sup>, М. И. Демиденко <sup>a</sup>

<sup>a</sup> Национальный Институт Полупроводников, Варшава, Польша

<sup>b</sup> Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси, Минск, Беларусь

<sup>c</sup> Центральный Университет, Лондон, Англия

E-mail: denysan@phys.cu.org.uk

**Введение.** Бор-нейтронная терапия (БНТ) – это перспективный нехирургический радиотерапевтический метод лечения инвазивных злокачественных опухолей, который включает в себя две стадии: 1) пациенту вводят лекарство, определяющее локализацию опухоли, содержащее нерадиоактивный изотоп  $^{10}\text{B}$ ; 2) пациента облучают эпитепловыми нейтронами [1, 2]. Проникая в ткань, такие нейтроны теряют часть энергии до уровня тепловых и захватываются  $^{10}\text{B}$ , имеющим поперечное сечение захвата 3840 барн, с образованием  $^{11}\text{B}^*$  в возбужденном состоянии, который распадается на альфа-частицы ( $^4\text{He}$ ), ядра  $^7\text{Li}$  и гамма-квант. Возможны два типа реакций:

1)  $n + ^{10}\text{B} = ^{11}\text{B}^* = ^7\text{Li} (1,47 \text{ МэВ}) + ^4\text{He} (0,84 \text{ МэВ}) + \gamma (0,48 \text{ МэВ})$  (вероятность протекания реакции 94%);

2)  $n + ^{10}\text{B} = ^{11}\text{B}^* = ^7\text{Li} (1,78 \text{ МэВ}) + ^4\text{He} (1,01 \text{ МэВ})$  (вероятность протекания реакции 6%).

Эффективность БНТ зависит от концентрации бора, его накопления и распределения именно в опухолевых клетках-мишенях. В клинической практике используют боркапнат и борфенилаланин. В качестве эффективных «носителей» изотопа  $^{10}\text{B}$  в настоящее время рассматривают различные бор-нитридные наноматериалы (бор-нитридные нанотрубки [3], наноструктурированный нитрид бора [3], бор-нитридные наночастицы [4] и др).

Целью данной работы являлось провести теоретическую оценку нейтронной терапии по эффективности воздействия конечных продуктов реакции при использовании бор-нитридных квантовых точек (БНКТ) на примерах модели унифицированной клетки, клетки меланомы и однородной мышечной ткани с помощью программы «Транспорт ионов в веществе» (TRIM) кода SRIM [2].

**Результаты и обсуждение.** Согласно стандартному протоколу терапии бор-нейтронного захвата используют борфенилаланин (100 мг/кг массы тела) и боркапнат (700 мг/кг массы тела). Для успешного разрушения опухоли концентрация  $^{10}\text{B}$  должна составлять приблизительно  $10^9$  атомов  $^{10}\text{B}$  на клетку [5]. Если в качестве «носителя» изотопа  $^{10}\text{B}$  рассматривать БНКТ (двухслойные, диаметром 7 нм), то для достижения необходимой концентрации  $^{10}\text{B}$  БНКТ необходимо ввести 20 мкг/г опухоли.

При моделировании распространяющиеся в веществе ионы принимаются образованными в результате распада ядра  $^{11}\text{B}^*$  (в возбужденном состоянии) после захвата ядром  $^{10}\text{B}$  тепловых нейтронов. Это допущение вызвано тем, что программный пакет позволяет моделировать распространение лишь ионов в веществе без учёта предшествующего взаимодействия нейтронов с ядрами  $^{10}\text{B}$ . Распределение величин и вкладов энергии ионизации в ткани – два важных параметра, используемых для оценки прямого повреждения и побочных эффектов при лучевой терапии.

Для моделирования был использован указанный ICRU (Международной комиссией по радиационным единицам и измерениям) элементный состав мышечной ткани без учета ее сложной структуры. На рисунке 1 представлены полученные данные о взаимодействии альфа-частиц и ионов лития с веществом скелетной мышцы.

Установлено, что на ионизацию вещества ткани скелетной мышцы ионом He затрачено 1771,1 кэВ, ионом Li – 989,2 кэВ. Тем не менее невозможно сделать какие-либо выводы об эффективности повреждения молекул ДНК, локализованных в ядрах клеток.

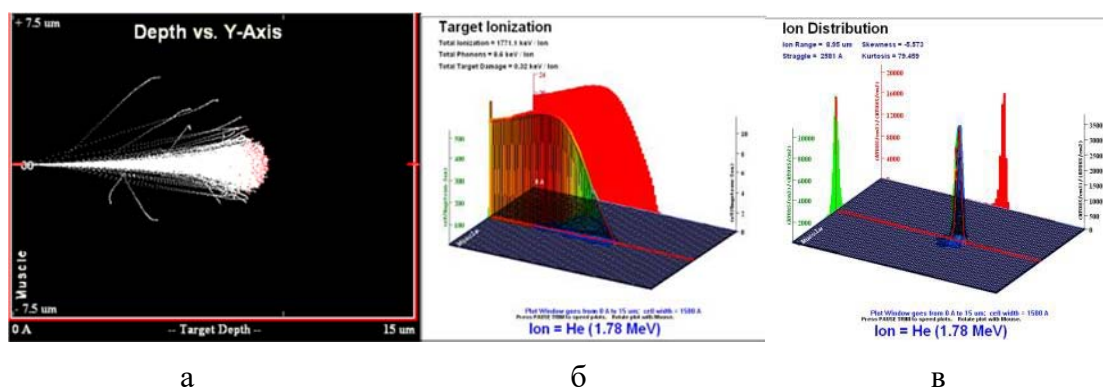


Рис. 1. Взаимодействие  $\alpha$ -частиц (1,780 МэВ) с веществом скелетной мышцы: а – траектории  $\alpha$ -частиц при их распространении в веществе скелетной мышцы, б – ионизация самой мишени при распространении  $\alpha$ -частиц, в – итоговое распределение  $\alpha$ -частиц в мишени.

Было промоделировано взаимодействие ионов He и Li с унифицированной моделью клетки. При этом рассмотрели 4 типичных положения атомов бора: на поверхности клеточной мембраны, внутри цитоплазмы, внутри ядра, в межклеточном пространстве, а также 2 типа реакций деления  $^{11}\text{B}^*$ . Были сформулированы 14 возможных моделей взаимодействия ионов с веществом клетки [6].

Результаты моделирования пробегов ионов приведены в таблице. Видно, что большинство ионов He и Li не выходят за пределы клетки (пробег  $\leq 10$  мкм) в направлении их распространения и теряют свою энергию непосредственно в данной клетке. Т.е. ионы избирательно разрушают локально одну опухолевую клетку, ограничивая при этом воздействие на соседние клетки, что подтверждает эффективность БНТ как внутренней направленной лучевой терапии с высокой ЛПЭ.

Таблица 1. Величина пробега ионов в разных моделях взаимодействия ионов с веществами унифицированной клетки и клетки меланомы.

Унифицированная клетка								
Локализация В-10	1-й тип реакции				2-й тип реакции			
	В мембране	В цитоплазме	В ядре	В межклет. простр.	В мембране	В цитоплазме	В ядре	В межклет. простр.
Пробег $^4\text{He}$ , мкм	8,25	8,235	8,55	8,4	9,9	9,99	10,35	9,94
Пробег $^7\text{Li}$ , мкм	5,1	4,995	5,13	5,46	5,7	5,535	5,58	5,74
Клетка меланомы								
Пробег $^4\text{He}$ , мкм	8,4	8,288	8,262	8,512	9,9	9,856	9,996	10,081
Пробег $^7\text{Li}$ , мкм	5,1	5,152	4,998	5,376	5,7	5,6	5,508	5,824
основные энергетические потери частицы приходятся на область ядра;								
энергетические потери энергии частицы в ядре сопоставимы с потерями в								



Результаты моделирования для всех схем взаимодействия ионов He и Li приведены на рисунке 2. Видно, что наиболее эффективное поражение ядра клетки за счет энерговыделения происходит в случае локализации источника  $^{10}\text{B}$  в цитоплазме клеток для обоих типов возможных реакций (рисунок 2а и 2в).

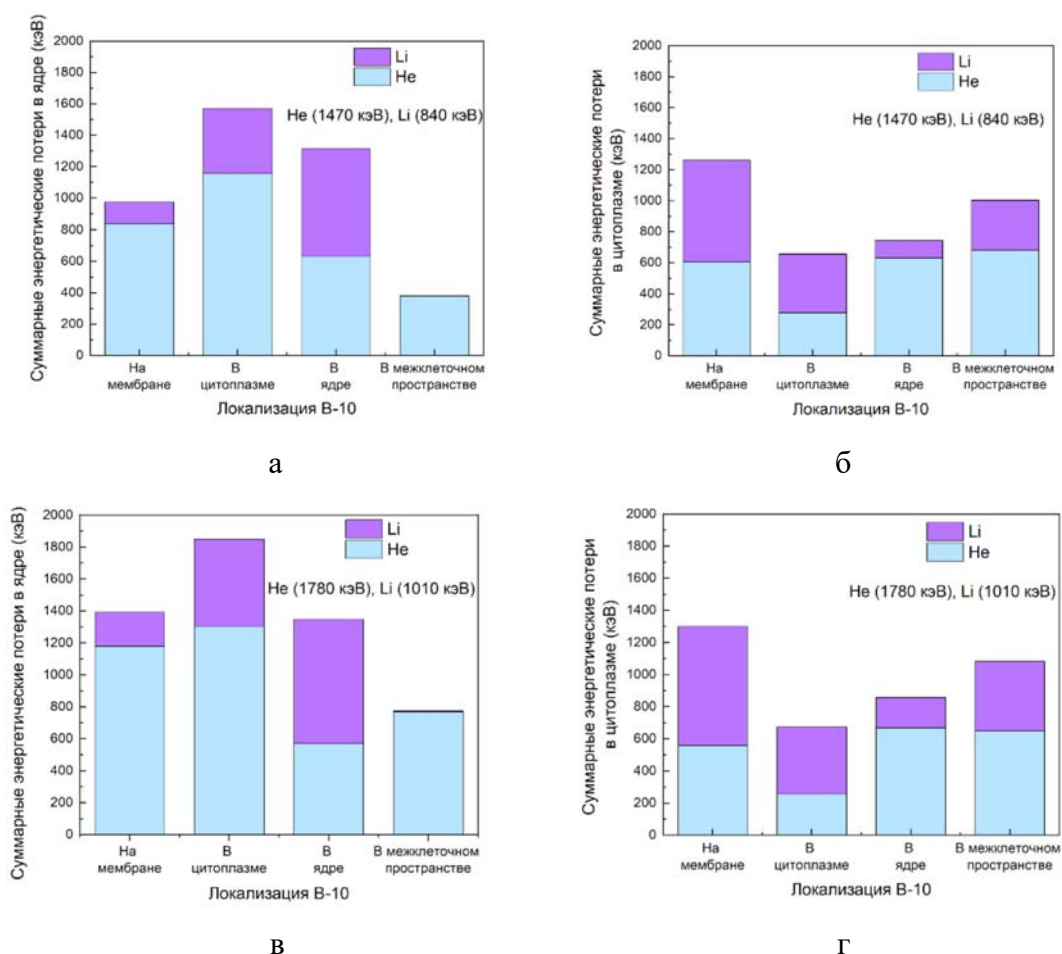


Рис. 2. Сравнение значений суммарной энергии, затраченной на ионизацию ядра (а, в) и цитоплазмы (б, г) в разных моделях взаимодействия ионов с веществом унифицированной клетки. (а, б) — первый тип реакции, (в, г) — второй тип реакции.

По сравнению с унифицированной моделью клетки, клетки меланомы характеризуются большими размерами цитоплазмы и ядра.

Результаты моделирования пробегов ионов позволили сделать вывод, что при определённой локализации ионы He и Li в результате распада  $^{11}\text{B}^*$  не выходят за пределы клетки в направлении их распространения и теряют свою энергию непосредственно в данной клетке. Кроме того, пробеги частиц в различных типах клеток отличаются. На это влияют качественный и количественный составы клеток и их геометрические параметры.

**Заключение.** Проведена теоретическая оценка нейтронной терапии при использовании бор-нитридных квантовых точек по эффективности воздействия конечных продуктов реакции – альфа-частицы и атома лития. Рассмотренный случай с использованием мышечной ткани в качестве мишени показывает, что использование однородной мишени нецелесообразно с точки зрения оценки эффективности бор-нейтронзахватной терапии, т.к. не позволяет точно определить энергетические потери



ионов в ядре и цитоплазме, которые запускают механизмы гибели раковой клетки. Такая мишень подходит лишь для приблизительных оценок эффективности.

Были построены модели опухолевых клеток, различающихся между собой по нуклеоплазматическому соотношению (унифицированная клетка, клетки меланомы). Выявлено, что наиболее эффективное поражение ядра унифицированной клетки за счет энерговыделения происходит в случае локализации источника  $^{10}\text{B}$  в цитоплазме клеток, а для клетки меланомы – в ядре.

Использование модели реальной раковой клетки показало, что унифицированная модель позволяет достаточно точно определить энергетические потери ионов в каждом из слоев клетки. Однако необходимо контролировать предлагаемые в моделях размеры ядер клеток, поскольку именно от эффективности взаимодействия ионов с генетическим материалом зависит результат терапии. При правильно подобранной локализации  $^{10}\text{B}$  большой диаметр ядра позволяет более эффективно поражать клетку.

### **Литература.**

1. Sauerwein W., Wittig A., Moss R., Nakagawa Y. Neutron Capture Therapy: Principles and Applications. – Springer, 2012. 553 p.
2. Ziegler J. James Ziegler - SRIM & TRIM [Electronic resource]. 2017. URL: <http://www.srim.org/>
3. Ferreira T.H. et al. An assessment of the potential use of BNNTs for boron neutron capture therapy // *Nanomaterials*. MDPI AG, 2017. Vol. 7, № 4.
4. Li L. et al. On-Demand Biodegradable Boron Nitride Nanoparticles for Treating Triple Negative Breast Cancer with Boron Neutron Capture Therapy // *ACS Nano*. American Chemical Society, 2019. Vol. 13, № 12. P. 13843–13852.
5. Barth F., Vicente M.G.H., Harling O.K. et al. Current status of boron neutron capture therapy of high grade gliomas and recurrent head and neck cancer. *Radiation Oncology*. 2012; 7: 146.
6. Liu D. et al. Calculation of the radiation damage to a tumor cell based on an improved cell model in boron neutron capture therapy // *New Phys. Sae Mulli*. 2017. Vol. 67, № 2. P. 248–255.

## Регуляция пальмитоксиацетоном редокс-активности фагоцитов крови

И. А. Новицкий, Н. В. Амаэбери, Г. Н. Семенкова, О. И. Шадыро

Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь

E-mail: [ilya.nov42@gmail.com](mailto:ilya.nov42@gmail.com)

**Введение.** Пальмитоксиацетон (ПА) образуется в результате свободнорадикальной фрагментации лизофосфолипидов, которые накапливаются в организме под действием фосфолипаз А<sub>2</sub> (ФЛА<sub>2</sub>). Ферментативные системы, приводящие к накоплению этого соединения, отсутствуют. Известно, что ФЛА<sub>2</sub> активируются при развитии воспалительного процесса, одним из индукторов которого является оксидативный стресс [1]. Мы предположили, что ПА можно рассматривать в качестве нового маркера оксидативного стресса и, как следствие, воспаления. Однако, сведений о биологической активности этого соединения в литературе нет.

Цель работы: изучить влияние ПА на функциональные свойства нейтрофилов и моноцитов крови здоровых людей.

**Материалы и методы.** В работе использовали декстран, гистопак-1077, питательную среду RPMI-1640, иодида пропидиум (PI), бычий сывороточный альбумин (БСА), 2',7'-дихлородигидрофлуоресцеин диацетат (H<sub>2</sub>DCF-DA), Triton X-100, JC-1 (5,5',6,6'-тетрахлоро-1,1',3,3'-тетраэтил-бензамидозолокарбоцианин йодид), FCCP (карбонилцианид р-трифторометоксифенилгидразон), *Micrococcus lysodeikticus* («Sigma», США), набор для определения апоптоза Annexin V-FITC Apoptosis Detection Kit (Trevigen, USA), компоненты для приготовления фосфатного буферного раствора (ФБР) и сбалансированного буферного солевого раствора Эрла (СБСРЭ) («Анализ Х, Беларусь»). ПА был синтезирован на кафедре радиационной химии и химико-фармацевтических технологий.

Нейтрофилы и моноциты выделяли из крови здоровых людей по стандартной методике [2]. Жизнеспособность клеток определяли флуоресцентным методом с использованием иодида пропидиума (PI,  $\lambda_{ex} = 530$  нм,  $\lambda_{em} = 640$  нм) [3]. Секреторную дегрануляцию определяли по выходу лизоцима из нейтрофилов [4]. Активность лизоцима в супернатанте оценивали по скорости лизиса клеточных стенок бактерий *Micrococcus lysodeikticus* спектрофотометрическим методом ( $\lambda = 450$  нм). Генерацию H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> изучали флуоресцентным методом с помощью зонда H<sub>2</sub>DCF-DA ( $\lambda_{ex} = 488$  нм,  $\lambda_{em} = 530$  нм). Продукцию H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> стимулировали добавлением 0,1 мкмоль/л хемотаксического пептида fMLP. Изменение митохондриального потенциала клеток ( $\Delta\Psi_m$ ) оценивали с помощью флуоресцентного зонда JC-1 ( $\lambda_{ex} = 490$  нм,  $\lambda_{em} = 530$  нм и 590 нм) [5]. Отношение интегральных интенсивностей флуоресценции вблизи длин волн 590 нм и 530 нм ( $I_{590}/I_{530}$ ) пропорционально  $\Delta\Psi_m$ . Спектральные исследования выполняли с использованием спектрофлуориметра CM2203 «Солар» (РБ). Апоптоз лейкоцитов изучали с помощью набора для определения апоптоза Annexin V-FITC Apoptosis Detection Kit методом проточной цитометрии на цитофлуориметре BD FACSCanto II (Becton Dickinson, США) [6]. Статистическую обработку результатов проводили с использованием однофакторного дисперсионного анализа (one-way ANOVA). Отличия между контрольной и экспериментальными группами анализировали с помощью теста Даннета. Данные представлены как среднее значение трех и более независимых экспериментов  $\pm$  стандартное отклонение. Результаты считали достоверными при  $P < 0,05$ .

**Результаты и обсуждение.** С целью установления токсичности ПА в отношении лейкоцитов нами изучена выживаемость клеток при действии этого кетона. Показано,

что инкубирование фагоцитов в течение 30 мин и 4 ч с ПА в диапазоне концентраций 0,1 – 100 мкмоль/л не влияет на их выживаемость. Таким образом, ПА не вызывает гибели клеток по механизму некроза.

Нами исследовано влияние ПА на апоптотические процессы в нейтрофилах и моноцитах (рисунок 1). Инкубирование нейтрофилов с ПА в диапазоне концентраций 10 – 100 мкмоль/л в течение 3 ч не оказывает влияния на количество живых клеток и нейтрофилов в стадии некроза. При этом наблюдается перераспределение клеток в стадиях раннего и позднего апоптоза по сравнению с контрольным образцом (рисунок 1а). Выявлено, что исследуемый кетон в концентрациях 10-100 мкмоль/л практически не оказывает влияния на апоптотические процессы в моноцитах (рисунок 1б).

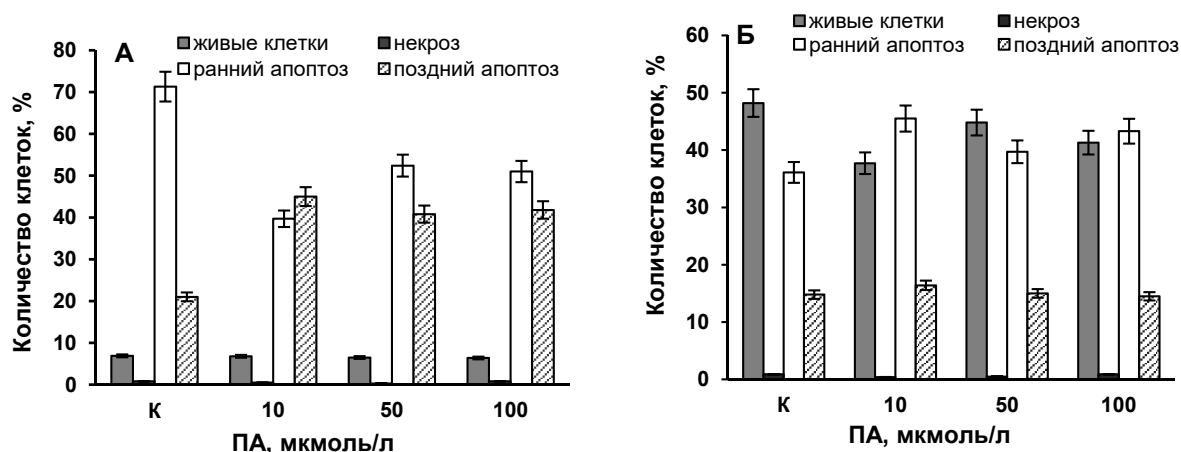


Рис. 1. Влияние пальмитоксиацетона на апоптотические процессы в нейтрофилах (а) и моноцитах (б). Время инкубирования клеток с ПА – 3 ч.

Нами изучено влияние ПА на механизмы генерации активных форм кислорода (АФК) при формировании «респираторного взрыва» в фагоцитах крови человека. Основным источником АФК в нейтрофилах и моноцитах является фермент НАДФН-оксидаза, катализирующий образование  $O_2^-$ , которые далее подвергаются реакции дисмутации, с образованием пероксида водорода [7]. На рисунке 2 представлены результаты влияния ПА на fMLP-стимулированную генерацию  $H_2O_2$  нейтрофилами и моноцитами.

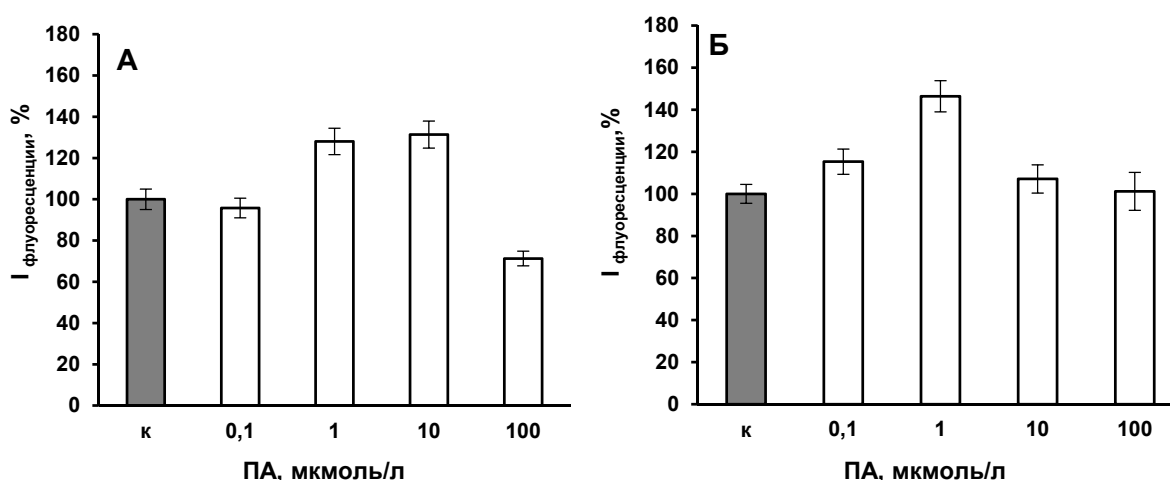


Рис. 2. Влияние пальмитоксиацетона на продукцию  $H_2O_2$  нейтрофилами (А) и моноцитами (Б). Время инкубирования клеток с ПА – 30 мин; [fMLP] = 0,1 мкмоль/л.

Выявлено, что предварительное инкубирование клеток с 0,1 мкмоль/л ПА не оказывает влияния на продукцию  $H_2O_2$  нейтрофилами. При увеличении концентрации этого кетона до 1 мкмоль/л и 10 мкмоль/л наблюдается рост генерации  $H_2O_2$  на 28 % и 31 %, соответственно, по сравнению с контрольными образцами. Инкубирование клеток со 100 мкмоль/л ПА приводит к снижению продукции  $H_2O_2$  на 29 % (рисунок 2а). В то же время, инкубирование моноцитов с 0,1 мкмоль/л и 1 мкмоль/л ПА приводит к усилению генерации  $H_2O_2$  на 15 % и 46 %, соответственно. Дальнейшее увеличение концентрации исследуемого кетона практически не оказывает влияния на генерацию  $H_2O_2$  этими клетками (рисунок 2б).

При активации нейтрофилов и моноцитов, помимо генерации АФК, может наблюдаться секреция фермента миелопероксидазы, основного источника НОС1, во внеклеточную среду. Нами исследовано влияние ПА на этот процесс. Показано, что инкубирование нейтрофилов и моноцитов с 1 – 100 мкмоль/л ПА в течение 30 мин не оказывает влияния на секреторную дегрануляцию клеток.

Ещё одним источником АФК в клетках являются митохондрии [8]. Влияние ПА на состояние митохондрий фагоцитов оценивали по изменению величины митохондриального мембранного потенциала этих клеток. Выявлено, что добавление исследуемого кетона в концентрации 0,1 мкмоль/л и 1 мкмоль/л к суспензии нейтрофилов не оказывает влияния на величину митохондриального мембранного потенциала. При увеличении концентрации ПА до 10 мкмоль/л и 100 мкмоль/л наблюдается снижение  $\Delta\Psi_m$  на 14 % и 23 %, соответственно. В случае моноцитов снижение величины  $\Delta\Psi_m$  происходит только при добавлении 100 мкмоль/л ПА и составляет 38 %.

**Заключение.** ПА не оказывает влияния на процессы гибели моноцитов по механизмам некроза и апоптоза. Этот кетон вызывает перераспределение нейтрофилов в стадиях раннего и позднего апоптоза. ПА в зависимости от концентрации способен регулировать продукцию АФК фагоцитами, а также вызывать деполяризацию митохондриальных мембран. Таким образом, можно заключить, что ПА проявляет биологическую активность в отношении фагоцитов крови.

### Литература.

1. Филькин С. Ю., Липкин А. В., Федоров А. Н. / Суперсемейство фосфолипаз: структура, функции и применение в биотехнологии // *Успехи биологической химии*. – 2020. – Т. 60 – С. 369-410.
2. Böyum A. / Isolation of lymphocytes, granulocytes and macrophages // *Scand. J. Immunol.* – 1976. – Vol. 5. – P. 9–15.
3. Kato F., Tanaka M., Nakamura K. / Rapid fluorometric assay for cell viability and cell growth using nucleic acid staining and cell lysis agents // *Toxicol. in Vitro.* – 1999. – Vol. 13. – P. 923–929.
4. Shugar D. / The measurement of lysozyme activity and the ultra-violet inactivation of lysozyme // *Biochim. Biophys. Acta.* – 1952. – Vol. 8. – P. 302–309.
5. Sivandzade F., Bhalerao A., Cucullo L. / Analysis of the mitochondrial membrane potential using the cationic JC-1 dye as a sensitive fluorescent probe // *Bio Protoc.* – 2019. – Vol. 9.
6. Ishaque, A. / Measurement of apoptosis in cell culture // *Methods in biotechnology, animal cell biotechnology: methods and protocols*, 2nd ed. / A. Ishaque, M. Al-Rubeai; ed. R. Pörtner. – Totowa, 2007. – P. 285–299.
7. Dupré-Crochet S., Erard M., Nüße O. / ROS production in phagocytes: why, when, and where? // *J. Leukoc. Biol.* – 2013. – Vol. 94(4). – P. 657–670.
8. Zorova L. D. / Mitochondrial membrane potential // *Anal Biochem.* – 2018. – Vol. 552 – P. 50-59.

# Спектроскопия электронного поглощения и электронного парамагнитного резонанса радикалов индотрикарбоцианинового красителя для фотодинамической терапии

А. А. Смоляков<sup>a</sup>, Н. В. Белько<sup>b</sup>, А. М. Мальтанова<sup>c</sup>

<sup>a</sup> Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь

<sup>b</sup> Институт прикладных физических проблем им. А.Н. Севченко БГУ, Минск, Беларусь

<sup>c</sup> Научно-исследовательский институт физико-химических проблем БГУ,

Минск, Беларусь

E-mail: smoluakovadam@gmail.com

**Введение.** Метод фотодинамической терапии (ФДТ) злокачественных новообразований активно развивается и находит все более широкое применение в клинической практике. ФДТ является минимально инвазивной и органосохраняющей процедурой, оказывающей селективное цитотоксическое воздействие на неопластические клетки [1, 2]. Ключевым компонентом ФДТ является фотосенсибилизатор (ФС) – вещество, молекулы которого не обладают темновой токсичностью, однако при облучении генерируют цитотоксичные интермедиаты [1-4]. Основным механизмом противоопухолевой активности большинства ФС является их способность к генерации синглетного кислорода.

Полиметиновые красители являются перспективными фотосенсибилизаторами для ФДТ, так как они обладают интенсивным поглощением в области прозрачности биологических тканей и рядом других преимуществ [5]. Механизм фотоактивности полиметиновых красителей не ограничивается образованием синглетного кислорода, поскольку некоторые из них способны сохранять противоопухолевую активность даже в гипоксических условиях [6]. Ранее полученные экспериментальные данные позволяют сделать предположение о том, что фотоактивность некоторых полиметиновых красителей может быть связана со способностью их молекул генерировать при фотовозбуждении не только синглетный кислород, но и реактивные свободно-радикальные продукты [7].

Целью данной работы является исследование дикацион-радикалов индотрикарбоцианинового красителя, являющегося эффективным фотосенсибилизатором для ФДТ [8]. Генерация радикалов осуществляется электрохимическим методом в модельной среде. Свойства радикалов изучаются при помощи спектроскопии электронного поглощения и ЭПР спектроскопии.

**Материалы и методы.** Исследованный индотрикарбоцианиновый краситель является фотосенсибилизатором (структурная формула показана на рисунке 1а) и был синтезирован в НИИПФП им. А.Н. Севченко БГУ согласно ранее описанной методике [8]. Ранее была продемонстрирована высокая противоопухолевая активность красителя *in vivo* [8].

Хроноамперометрический электролиз производили при потенциале +1,1 В относительно насыщенного каломельного электрода (НКЭ) при помощи потенциостата-гальваностата Autolab PGSTAT 302N в стандартной трехэлектродной ячейке. В качестве рабочего и противоелектрода использовались платиновая пластина (площадь 10 см<sup>2</sup>) и платиновая проволока, соответственно. Электрод Ag/Ag<sup>+</sup> (0,01 М AgBF<sub>4</sub>) с потенциалом +0,32 В (относительно НКЭ) служил электродом сравнения. В качестве фонового электролита использовался раствор тетрафторобората тетрабутиламмония (0,1 М) в ацетонитриле. Концентрация красителя составляла 0,1 мМ.

Спектры электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) зарегистрированы при помощи спектрометра SPINSCAN X (LINEV ADANI). Спектры электронного поглощения были получены при помощи спектрофотометра SOLAR PV1251 с использованием кварцевых кювет 1x1 см.

**Результаты и их обсуждение.** Как было показано ранее [9], электроокисление красителя наблюдается при +1,1 В (относительно НКЭ), в результате чего формируются дикатион-радикалы красителя.

Было исследовано изменение спектра электронного поглощения красителя в процессе электролиза (рисунок 1а). Полоса при 714 нм соответствует исходному красителю. В процессе электролиза эта полоса становится менее интенсивной, значит, исходный краситель расходуется. Одновременно с этим образуется новая полоса при 561 нм. Рисунок 1б показывает кинетику изменения оптической плотности в полосе поглощения дикатион-радикала после прекращения электролиза. Данные хорошо аппроксимируются экспоненциальной функцией ( $r^2 > 0,99$ ), что позволяет определить время жизни радикалов –  $(24,5 \pm 1,5)$  мин. Таким образом, электроокисление красителя является обратимым процессом.

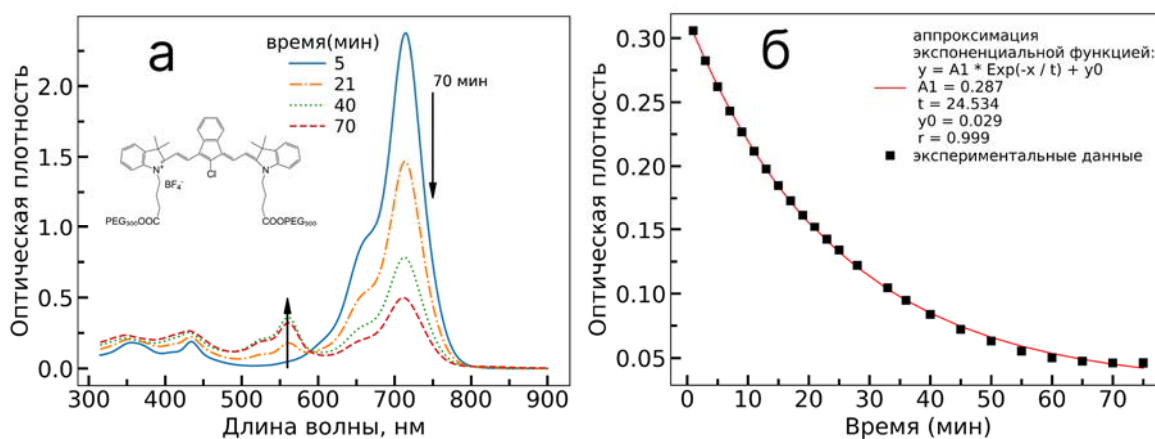


Рис. 1. Изменение спектра поглощения в процессе электролиза при +1,1 В (а) и кривая изменения оптической плотности при 561 нм после окончания электролиза (б) для красителя в фоновом электролите.

В данной работе генерация дикатион-радикалов в процессе электроокисления была подтверждена методом ЭПР спектроскопии (рисунок 2а). ЭПР спектр раствора красителя, зарегистрированный во время электролиза, содержал широкую бесструктурную полосу с g-фактором 2,002. Данное значение g-фактора свидетельствует о высокой степени делокализации электрона на радикале. Для кинетики изменения интенсивности ЭПР сигнала после прекращения электролиза (рисунок 2б) построена аппроксимирующая кривая, которая позволяет определить время жизни радикала –  $(25,1 \pm 1,5)$  мин ( $r^2 > 0,99$ ). Значения, полученные методом оптической и ЭПР спектроскопии, совпадают в пределах погрешности.

Сопоставление данных ЭПР спектроскопии и спектроскопии электронного поглощения позволяет утверждать, что полоса поглощения при 561 нм соответствует дикатион-радикалам красителя [10]. Рисунок 3 показывает процесс образования дикатион-радикала.

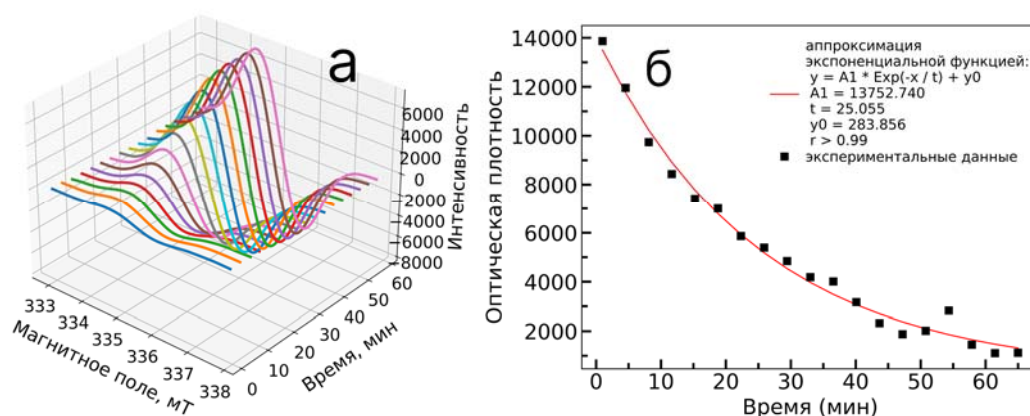


Рис. 2. Изменение ЭПР спектра в процессе электролиза (а) и кривая изменения интенсивности спектра после окончания электролиза (б) для красителя в фоновом электролите.

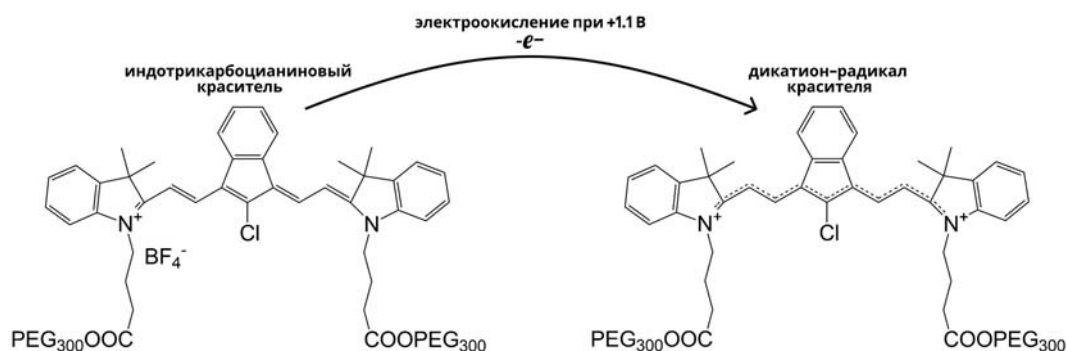


Рис. 3. Схема генерации дикатион-радикала красителя.

**Заключение.** Исследованы дикатион-радикалы индотрикарбоцианинового красителя, образующиеся в процессе электроокисления. Радикалы характеризуются полосой электронного поглощения при 561 нм, временем жизни  $\sim 25$  мин и g-фактором 2,002. Генерация радикалов электрохимическим методом является обратимым процессом.

**Благодарности.** Авторы благодарны LINEV ADANI за предоставленный ЭПР спектрометр для проведения экспериментов, сотрудникам лаборатории ЭПР за плодотворное обсуждение результатов.

### Литература.

1. Gunaydin, G. Photodynamic Therapy for the Treatment and Diagnosis of Cancer—A Review of the Current Clinical Status / G. Gunaydin [et al.] // *Front. Chem.* – 2021. – Vol. 9. – P. 1–26.
2. Tampa, M. Photodynamic therapy: A hot topic in dermato-oncology (Review) / M. Tampa [et al.] // *Oncol. Lett.* – 2019. – Vol. 17. – P. 4085–4093.
3. Bilici, K. Recent Advances in Cyanine-Based Phototherapy Agents / K. Bilici [et al.] // *Front. Chem.* – 2021. – Vol. 9. – P. 1–15.
4. Kwiatkowski, S. Photodynamic therapy – mechanisms, photosensitizers and combinations / S. Kwiatkowski [et al.] // *Biomed. Pharmacother.* – 2018. – Vol. 106. – P. 1098–1107.

5. Shi, C. Review on near-infrared heptamethine cyanine dyes as theranostic agents for tumor imaging, targeting, and photodynamic therapy / C. Shi, J. B. Wu, D. Pan. // *J. Biomed. Opt.* – 2016. – V. 21. – P. 050901.1–050901.11.
6. Lan, M. Photosensitizers for Photodynamic Therapy / M. Lan [et al.] // *Adv. Healthc. Mater.* – 2019. – Vol. 8. – P. 1900132.
7. Istomin, Y.P. The effect of hypoxia on photocytotoxicity of TICS tricarbo-cyanine dye in vitro / Y.P. Istomin [et al.] // *Experimental oncology* – 2006. – Vol. 28, № 1. – P. 80–82.
8. Novel indotricarbocyanine dyes covalently bonded to polyethylene glycol for theranostics / A. A. Lugovski [et al.] // *J. Photochem. Photobiol. A: Chem.* – 2016. – V. 316. – P. 31–36.
9. Optical and electrochemical properties of indotricarbocyanine dyes promising dyes for photodynamic therapy / H. M. Maltanova [et al.] // *J. Appl. Spectr.* – 2021. – V. 88. – P. 489–495.
10. Lenhard, J. R. Electrochemistry and Electronic Spectra of Cyanine Dye Radicals in Acetonitrile / J. R. Lenhard, A. D. Cameron // *J. Phys. Chem.* – 1993. – V. 97. – P. 4916–4925.



## Исследование запрещенных в спорте препаратов методами гигантского комбинационного рассеяния света

М. С. Хецева <sup>a</sup>, Е. П. Кожина <sup>a,b</sup>, С. А. Бедин <sup>a,b</sup>, А. В. Наумов <sup>a,b,c</sup>

<sup>a</sup> ФГБОУ ВО «Московский педагогический государственный университет,  
Москва, Россия

<sup>b</sup> Физический институт имени П.Н.Лебедева Российской академии наук,  
Москва, Россия

<sup>c</sup> Институт спектроскопии Российской академии наук, Москва, Россия  
E-mail: khetseva.mar@gmail.com

Спектральные методы анализа состава веществ широко используются в различных областях физики, химии, медицины, фармацевтики. Одно из прикладных направлений – получение индивидуальных спектров вещества, известных как «fingerprint», методом комбинационного рассеяния света (КР) и гигантского комбинационного рассеяния (ГКР, SERS - англ.), позволяющим работать с низкими концентрациями веществ. На основе результатов этих методик создаются и дополняются базы данных, что помогает идентифицировать вещества в чистом виде или в составе сложных органических соединений. В свете возрастающего интереса к данному направлению проводятся исследования лекарственных средств, в частности, фармакологических активных веществ, запрещенных для употребления спортсменами во время тренировочных циклов и во время соревнований.

В соответствие со Всемирным антидопинговым кодексом, под запретом любое содержание запрещенных субстанций в пище атлетов, а также хранение в личных вещах и получение от третьих лиц. Достоверные результаты анализа проб и иных образцов могут подтвердить факт умышленного нарушения антидопинговых правил, или же выявить ошибку, тем самым предотвратив попытку дискредитации спортсмена перед обществом и спортивными организациями.

Как правило, в лабораториях идентификация веществ в сложных химических соединениях и примесях происходит в основном хроматографическими методами или же масс-спектрометрией. Однако, данные методы являются трудоемкими и дорогостоящими. Оптико-спектральные методы выгодно отличаются более простой методикой пробоподготовки, в том числе, являются более информативными и точными для решения подобных задач. Например, использование методов ИК-спектроскопии и спектроскопии ЯМР уже получили широкое распространение при исследовании лекарственных препаратов и других субстанций.

В данной работе исследовался препарат российского производства – «Милдронат» как в ампулах, так и в желатиновых капсулах. Действующее вещество диоксид мельдония (250 мг). В смеси, помещенной в капсулу, также присутствуют вспомогательные вещества: стеарат кремния, диоксид кальция, крахмал. Эти соединения мало растворимы по своим химическим свойствам, поэтому после смешивания содержимого капсулы с дистиллированной водой вначале наблюдаются заметные взвеси белого цвета. Спустя некоторое время (порядка 1–5 минут) уже можно наблюдать тонкий слой осадка на дне пробирки, а также легкие белые хлопья на поверхности полученного раствора. Белые «хлопья» — это крахмал, осадок образуется из стеарата кремния и диоксида кальция. Далее образуется более заметный осадок, но взвеси в водном растворе остаются в форме суспензии. Таким образом, для получения более однородного раствора использовалась вибрационная мешалка.

Основной проблемой исследования молекул мельдония спектральными методиками является его кристаллизация на наносимой поверхности. Была исследована кристаллизация молекул мельдония, наносимого из раствора для инъекций, помещенного на покровное стекло (рисунок 1а) и SERS подложку (рисунок 1б), в том числе кристаллизация действующего вещества из капсул на SERS подложку (рисунок 1в) [1].

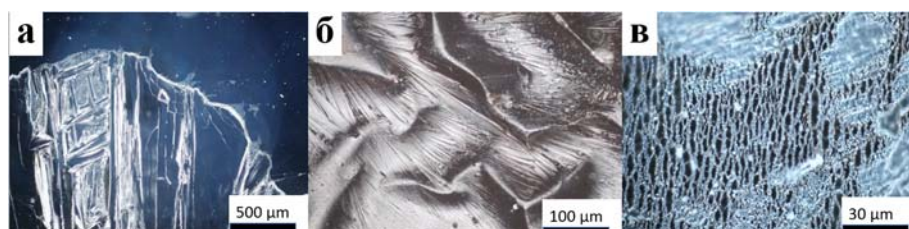


Рис. 1. Микрофотографии мельдония из ампулы на покровном стекле (а), мельдония из ампулы на подложке с массивом серебряных проволок (б) и раствора мельдония из капсулы на подложке с массивом серебряных проволок (в).

При высыхании молекул из ампулы образовывались крупные кристаллы, размеры которых варьируются от нескольких сотен микрон и более, тем самым перекрывая усиливающие нанопроволоки. Различные концентрации также давали эффект образования кристаллов, а полученные от них спектры были значительно зашумлены и имели слабо разрешенную структуру, что мешало их сравнению с уже известными спектрами [2]. Образец, приготовленный путем разбавления капсульной смеси и пропускания её через фильтр [3], дал более четкие спектры. Размер пор фильтровальной бумаги, использованной в эксперименте, позволяет предположить, что именно молекулы мельдония остались в растворе. Такой раствор после высыхания не приводил к образованию кристаллов.

В исследовании отдельное внимание уделялось именно размерам кристаллов, так как это напрямую влияет на качество исследования: большие кристаллы перекрывают нанопроволоки, усиливающие эффект комбинационного рассеяния света. Был сделан вывод, что кристаллизация молекул мельдония наименьшая при нанесении его на подложку при фильтрации из действующего вещества в капсулах.

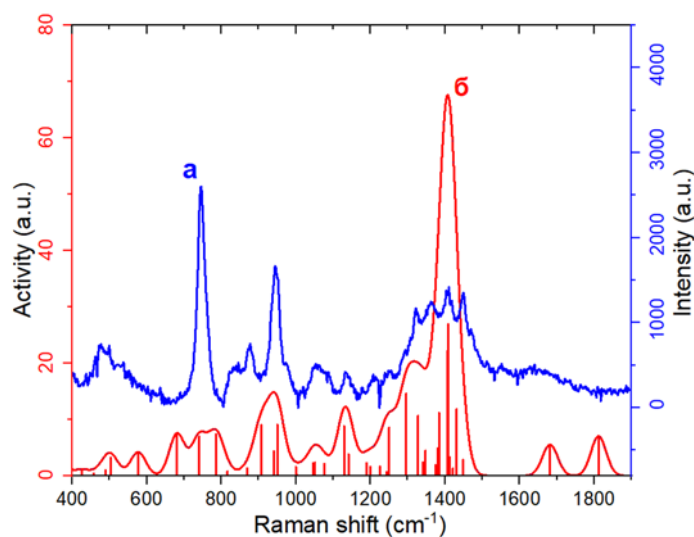


Рис. 2. Спектр КР раствора мельдония из ампулы (а), расчетный спектр КР (б).

В данной работе приготовленные образцы мeldonия были исследованы методами КР и SERS спектроскопии. Данные спектральные методы позволяют получать уникальную информацию о колебательных модах вещества, выявлять его в сложных органических средах на примере слюны и крови человека.

Спектр КР раствора мeldonия в ампуле снимался на портативном спектрометре компании Thermo Fisher при возбуждении лазером с длиной волны 532 нм в течение 5 минут. Было также проведено компьютерное моделирование спектра мeldonия с использованием пакета программного обеспечения ORCA 5 [4]. В полученной смоделированной модели и экспериментальном спектре множество характерных пиков совпадает. Небольшое расхождение может быть связано с неоднородным уширением ансамбля молекул. Наблюдалось совпадение пиков этой модели с полученными в статьях других исследователей, и основные пики, характерные для мeldonия на 744, 876, 944 и 1410 см<sup>-1</sup> присутствовали в полученном экспериментальном спектре [5].

**Заключение.** В работе была исследована кристаллизация раствора мeldonия из ампул и капсул как на покровном стекле, так и на наноструктурированной поверхности на примере массива серебряных нанопроволок на металлической подложке. Был сделан вывод, что кристаллизация молекул мeldonия меньше при нанесении его на подложку при выделении действующего вещества из капсул. Развитие этого направления в дальнейшем поможет перейти к качественному получению и анализу SERS спектров и идентификации данного соединения в биологических жидкостях.

**Благодарности.** Работы по лазерной селективной спектроскопии наноматериалов относятся к теме Государственного задания Московского Педагогического Государственного Университета (МПГУ) «Физика наноструктурированных материалов: фундаментальные исследования и приложения в материаловедении, нанотехнологиях и фотонике» при поддержке Министерства Просвещения РФ (АААА-А20-120061890084-9) совместно с ЦКП «Структурная диагностика материалов» ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН. Авторы статьи являются членами ведущей научной школы РФ «Оптико-спектральная наноскопия квантовых объектов и диагностика перспективных материалов» (проект НШ-776.2022.1.2).

### Литература.

1. Kozhina E. P., Bedin S. A., Nechaeva N. L., Podoynitsyn S. N., Tarakanov V. P., Andreev S. N., Grigoriev Y. V., Naumov A. V. Ag-Nanowire Bundles with Gap Hot Spots Synthesized in Track-Etched Membranes as Effective SERS-Substrates // *Applied Sciences*. – 2021. – Т. 11, № 4. – С. 1375
2. Tastekova E. A., Polyakov A. Y., Goldt A. E., Sidorov A. V., Oshmyanskaya A. A., Sukhorukova I. V., Shtansky D. V., Grunert W., Grigorieva A. V. Facile chemical routes to mesoporous silver substrates for SERS analysis // *Beilstein J Nanotechnol.* – 2018. – Т. 9. – С. 880-889.
3. Детектирование мeldonия в субмолекулярных концентрациях методом спектроскопии гигантского комбинационного рассеяния / Беляцкий В.Н., Галюк Е.Н., Ринейская О.Н., Кирщина А.А., Кутасова А.А., Бондаренко А.В., Завацкий С.А., Хиневич Н.В./ *Инновационные технологии в фармации, Иркутск, 2018, вып.5*
4. Neese F. Software update: The ORCA program system—Version 5.0 // *WIREs Computational Molecular Science*. – 2022.10.1002/wcms.1606, DOI: 10.1002/wcms.1606
5. Khinevich N., Zavatski S., Bandarenka H., Belyatsky V., Galyuk E., Ryneiskaya O. Study of Diluted Meldonium Solutions by Surface Enhanced Raman Scattering Spectroscopy // *International Journal of Nanoscience*. – 2019. – Т. 18, № 03n04.