

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



XI Международная школа-конференция
молодых учёных и специалистов

Современные проблемы физики – 2024

Минск, 24 – 26 апреля 2024

Сборник научных трудов

Минск
«Ковчег»
2024

УДК 53; 615.849.19
С23

Оргкомитет конференции:

Никончук И.С. (председатель), Василевская Д.С. (ученый секретарь)
Анискевич В.Э., Борздова О.М., Жарникова Е.С., Ильин А.Ю.,
Лизурчик А.Д., Славинский И.Ю., Таболич А.А.,
Чернышев А.И., Шабров Д.В., Шершень В.С.

Рецензенты:

Белый В.Н. – академик НАН Беларуси, доктор физ.-мат. наук, доцент;
Куручкин Ю.А. – доктор физ.-мат. наук, профессор;
Симончик Л.В. – доктор физ.-мат. наук, профессор;
Малашкевич Г.Е. – доктор физ.-мат. наук, доцент;
Поведайло В.А. – доктор физ.-мат. наук;
Луценко Е.В. – кандидат физ.-мат. наук;
Новицкий Д.В. – кандидат физ.-мат. наук, доцент;
Чижевский В.Н. – кандидат физ.-мат. наук;
Чайковский А.П. – кандидат физ.-мат. наук;
Леоненя М.С. – кандидат физ.-мат. наук;
Жарникова Е.С. – кандидат физ.-мат. наук;
Шёлковый Д.В. – кандидат физ.-мат. наук.

С23 **Современные** проблемы физики – 2024. XI Международной школы-конференции молодых учёных и специалистов : сборник научных трудов (Минск, 24 – 26 апреля 2024) / под ред. Д.С. Василевской, Е.С. Жарниковой. – Минск : Ковчег, 2024. – 212 с.

ISBN 978-985-884-353-3.

Сборник трудов составлен по материалам докладов, представленных на XI Международной школе-конференции молодых учёных и специалистов «Современные проблемы физики – 2024» 24 – 26 апреля 2024 г. в Институте физики НАН Беларуси. Тематика конференции охватывает следующие разделы физической науки: оптика, лазерная физика и оптические технологии; теоретическая физика и физика фундаментальных взаимодействий; физика конденсированного состояния, наноструктур и материалов; физика плазмы и тепломассопереноса; физика в биологии и медицине; информационные технологии в физике; приборы и методы измерений.

УДК 53; 615.849.19

ISBN 978-985-884-353-3

© Институт физики НАН Беларуси, 2024
© Оформление. ООО «Ковчег», 2024



ОПТИКА, ЛАЗЕРНАЯ ФИЗИКА И ОПТИЧЕСКИЕ ТЕХНОЛОГИИ

Твердотельный лазер с поперечной накачкой для систем лазерной очистки

В.Э. Анискевич, А.Д. Лизурчик

*Институт физики им. Б.И. Степанова НАН Беларуси, 220072 Минск, Беларусь
E-mail: v.aniskevich@ifanbel.bas-net.by*

Введение. Технология лазерной очистки находит свое применение при обработке поверхности металлов с целью удаления продуктов коррозионного износа, а также лакокрасочных, оксидных и других покрытий. Промышленные системы лазерной очистки используют в своей основе уже широко распространенные волоконные лазеры с модуляцией добротности и выходной мощностью более 50 Вт при длительности импульсов излучения более 100 нс [1, 2]. Однако, даже при столь коротких по длительности импульсах излучения могут пагубно проявляться процессы термической деформации металла при очистке его поверхности, что особо заметно при его малой толщине. Вследствие этого возникает задача поиска оптимальных режимов воздействия лазерного излучения на металлы с целью достижения максимальной эффективности и скорости очистки без внесения различного рода деформаций в слой металла без признаков коррозионного износа. Близкие волоконным лазерам характеристики лазерного излучения но с меньшей длительностью импульсов вплоть до единиц нс достижимы в твердотельных лазерах на основе кристаллов Nd:YAG с активной модуляцией добротности при использовании акусто- или электрооптических затворов. В данной работе представлены результаты разработки и исследования твердотельного лазера на основе кристалла Nd:YAG с поперечной накачкой и модуляцией добротности для применения в системах лазерной очистки.

1 Экспериментальная установка и методика измерений. Оптическая схема макета твердотельного источника лазерного излучения представлена на Рис. 1. Лазер построен на базе квантрона с активным элементом Nd:YAG с поперечной диодной накачкой и жидкостным охлаждением (NRS-H0075-3140, Newraysing), акустооптического (АО) затвор (I-QS041-1.8C10G-4-GH21, Gooch & Housego), компенсирующей линзы F1 с фокусным расстоянием – 300 мм, глухого зеркала M1 и выходного зеркала M2 с коэффициентом отражения 50 % на длине волны 1064 нм. Квантрон содержит активный элемент Nd:YAG диаметром 3 мм и длиной 67 мм и линейки лазерных диодов общей выходной мощностью около 200 Вт на длине волны 808 нм. Для генерации излучения в режиме модуляции добротности использовался АО затвор на основе кристалла кварца с акустическим полем на частоте 40,68 МГц мощностью 40 Вт. Общая геометрическая длина резонатора составила около 0,25 м.

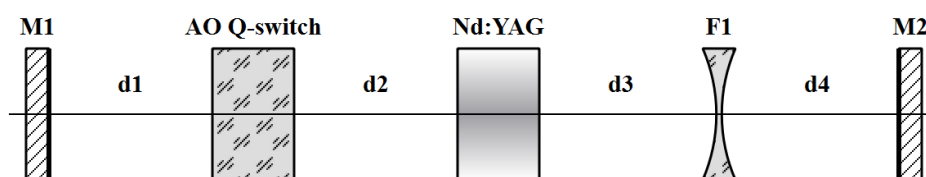


Рис. 1. Оптическая схема лазерного резонатора.

Для осуществления модуляции добротности лазерного резонатора на управляющий контроллер АО затвора подавался TTL-сигнал, сформированный из последовательности прямоугольных импульсов с амплитудой 3 В на частоте от 2 до 150 кГц. На время подачи TTL-сигнала акустическое поле в кристалле выключается, добротность резонатора резко возрастает и происходит генерация импульса излучения.

Значения средней выходной мощности излучения измерялись с помощью теплового измерителя оптической мощности (L50(150)A, Ophir Photonics Group). Временной профиль импульсов лазерного излучения детектировался с помощью цифрового осциллографа с полосой пропускания 500 МГц и фотодетектора (DET08CFC/M, Thorlabs Inc.).

2 Результаты и обсуждение. Экспериментально установленное фокусное расстояние термолинзы составило 165 мм при токе накачки в 19 А, протекающего через линейки лазерных диодов. Компенсация термолинзы выполнена путем добавления в схему плоско-вогнутой линзы F1 с фокусным расстоянием –300 мм. На Рис. 2 показана зависимость средней мощности лазерного излучения $P_{\text{вых}}$ от величины тока $I_{\text{нак}}$, протекающего через линейки лазерных диодов, при генерации излучения в непрерывном режиме без АО затвора и в режиме модуляции добротности при частотах следования импульсов излучения от 4 до 10 кГц.

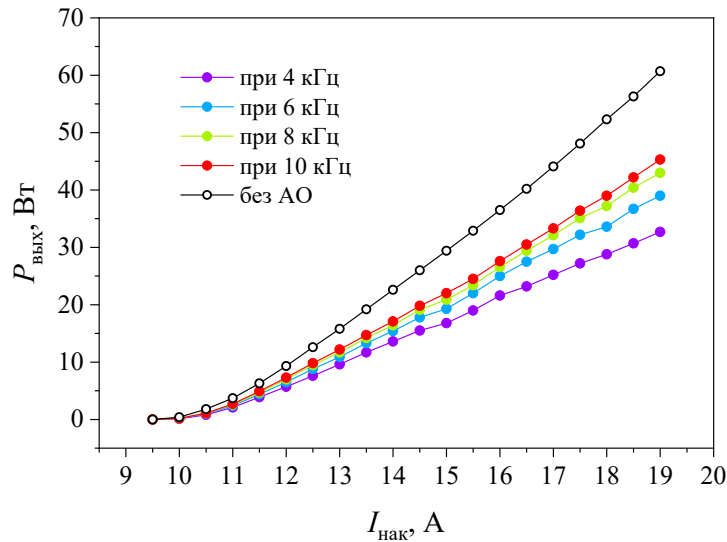


Рис. 2. Зависимости средней мощности выходного лазерного излучения от силы тока накачки при 4 кГц, 6 кГц, 8 кГц, 10 кГц и без добавления АО в резонатор.

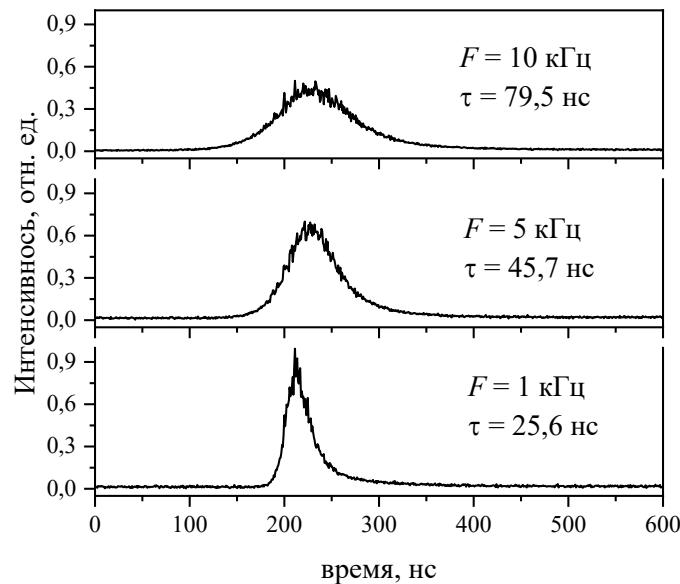


Рис. 3. Временные профили импульсов лазерного излучения на частотах 1 кГц, 5 и 10 кГц.

Из зависимостей на Рис. 2 видно, что при повышении частоты следования импульсов лазерного излучения F , что соответствует увеличению частоты TTL-сигнала на акустооптическом затворе, средняя выходная мощность излучения возрастает. Максимальное значение мощности при 10 кГц достигает 45,3 Вт, в то время как при 4 кГц это значение равно 32,7 Вт при величине тока накачки 19 А. Временные профили импульсов лазерного излучения

и соответствующие значения их длительностей, определенные по ширине на полувысоте, при частотах 1 кГц, 5 кГц и 10 кГц показаны на Рис. 3.

Экспериментальные зависимости средней выходной мощности $P_{\text{вых}}$ и длительности импульсов τ лазерного излучения при величине тока накачки 19,5 А от частоты следования импульсов в диапазоне от 2 до 100 кГц представлены на Рис. 4.

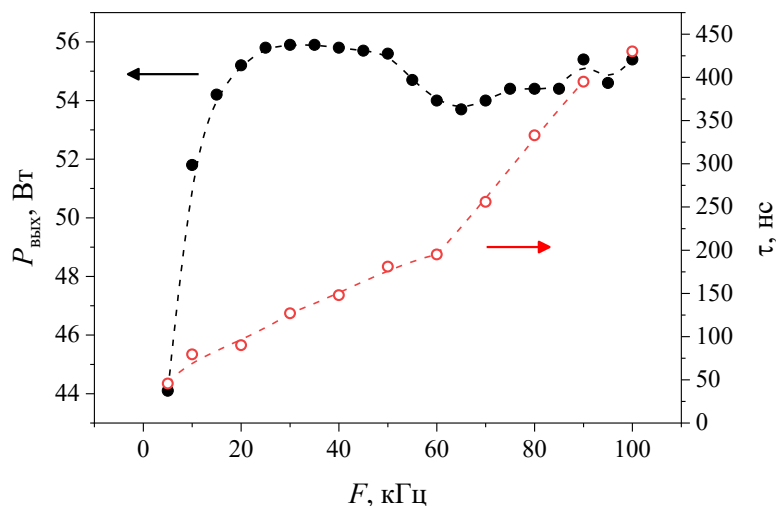


Рис. 4. Зависимости средней мощности выходного излучения и длительности импульсов от частоты подаваемого TTL-сигнала.

Из полученной зависимости видно, что в диапазоне от 20 до 50 кГц средняя выходная мощность изменяется незначительно и примерно достигает 56 Вт. На частотах следования 55 – 100 кГц наблюдается незначительный спад до 53,5 Вт. Минимальная длительность импульса равная 25,6 нс наблюдается на частотах от 1 до 10 кГц (на частоте 10 кГц $\tau = 79,5$ нс). На частотах до 60 кГц наблюдается линейный рост τ до 195 нс при 60 кГц, а на частотах выше 60 кГц скорость роста длительности импульсов резко возрастает (при частоте 100 кГц $\tau = 430$ нс). При этом расходимость выходного излучения лазера при максимальной средней выходной мощности более 50 Вт, составила 27,4 мкрад при значении параметра M^2 равного 2,7.

Заключение. В результате выполнения работы разработан макет твердотельного лазера на основе кристалла Nd:YAG с поперечной диодной накачкой и измерены выходные характеристики его излучения. При максимальной оптической накачке в 200 Вт достигнуто значение средней выходной мощности лазерного излучения более 50 Вт в диапазоне частот следования импульсов от 10 до 100 кГц. Значения длительности импульсов излучения в диапазоне частот от 1 до 100 кГц увеличиваются от 25,6 до 430 нс. Созданный источник лазерного излучения будет использован при оптимизации технологического процесса лазерной очистки продуктов коррозионного износа, а также лакокрасочных, оксидных и других покрытий с поверхностей металлов.

Литература.

1. Fiber Coupled High Power Nd:YAG Laser for Nondestructive Laser Cleaning / X. Wang [et al.] // Photonics. – 2023. – Vol. 10 – 901. – <https://doi.org/10.3390/photonics10080901>
2. The Fundamental Mechanisms of Laser Cleaning Technology and Its Typical Applications in Industry / Z. Zhou [et al.] // Processes. – 2023. – Vol. 11. – 1445. – <https://doi.org/10.3390/pr11051445>

Методы улучшения качества цифровых изображений для проведения экспертных исследований

И.К. Бакей

Институт физики имени Б. И. Степанова НАН Беларуси, Минск, Беларусь
E-mail: ilyayabakei@gmail.com

Введение. В современном мире цифровые изображения играют все более важную роль в медицине, науке, промышленности, искусстве и других областях деятельности. Однако, качество цифровых изображений может быть недостаточным для проведения экспертных оценок или диагностических исследований [1,2]. Недостатками цифровых изображений могут шум, нечеткость, низкое разрешение, недостаточная контрастность и прочие искажения, которые могут снижать их качество и визуальную привлекательность. В связи с этим, существует необходимость разработки методов улучшения качества цифровых изображений. Целями работы являлись реализация на практике и анализ методов улучшения качества цифровых изображений для проведения экспертных исследований.

1 Математическая модель. Задачей методов улучшения качества цифровых изображений является восстановление и улучшение визуальной информации, которая может быть потеряна или искажена в процессе захвата, хранения или передачи изображений. Эти методы включают в себя широкий спектр техник, начиная от классических подходов, таких как фильтрация и увеличение резкости, до более сложных методов, основанных на машинном обучении и искусственных нейронных сетях. Вот несколько примеров: фильтрация изображений, изменение размера и масштабирование, размытие, преобразование цветовой модели, улучшение контрастности и яркости, сегментация изображений, изменение геометрии изображений. Это лишь некоторые из множества методов обработки изображений, и выбор конкретного метода зависит от конкретной задачи и требований [1].

Для обработки и улучшения изображений, имеющих квазипериодическую структуру, возможно использование фильтра Габора [3]. В пространственной области он представляет собой гауссову ядерную функцию, модулированную синусоидальной плоской волной. С математической точки зрения принцип работы фильтра может быть описан следующим образом: прямое преобразование Фурье функции двух переменных $f(x, y)$ (двухмерное преобразование Фурье) имеет вид:

$$G(\omega_x, \omega_y) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x, y) e^{-i\omega_x x - i\omega_y y} dx dy \quad (1)$$

где $G(\omega_x, \omega_y)$ – спектральная плотность, зависящая от двух пространственных частот ω_x и ω_y . Зная спектральную плотность $G(\omega_x, \omega_y)$, можно найти исходную функцию $f(x, y)$, применяя обратное преобразование Фурье:

$$f(x, y) = \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} G(\omega_x, \omega_y) f^{i\omega_x x + i\omega_y y} d\omega_x d\omega_y \quad (2)$$

Предположим, что установлен пространственный фильтр с частотной характеристикой $A(\omega_x, \omega_y)$. Тогда спектр оптического сигнала на выходе этого фильтра будет иметь следующий вид:

$$S(\omega_x, \omega_y) = G(\omega_x, \omega_y) A(\omega_x, \omega_y) \quad (3)$$

В этом случае для пространственного распределения амплитуды светового потока на выходе будем иметь:

$$f^*(x^*, y^*) = \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} G(\omega_x, \omega_y) A(\omega_x, \omega_y) e^{-i\omega_x x - i\omega_y y} d\omega_x d\omega_y \quad (4)$$

Импульсная переходная характеристика фильтра Габора определяется в виде гармонической функции, умноженной на гауссиан. Обработка изображения фильтром Габора достигается путём усреднения значений обрабатываемого изображения по некоторой области в каждой точке в соответствии с выражением:

$$G(x, y) = \exp\left(-\frac{1}{2} \left[\frac{x_\varphi^2}{\sigma_x^2} + \frac{y_\varphi^2}{\sigma_y^2} \right]\right) \cos(2\pi\theta x_\varphi) \quad (5)$$

где σ_x, σ_y – стандартные отклонения гауссова ядра, по осям x и y , определяющие растянутость фильтра по осям; θ – частотная модуляция фильтра; φ – пространственная направленность фильтра, определяющая его ориентацию относительно главных осей:

$$x_\varphi = x \cos(\varphi) + y \sin(\varphi) \quad y_\varphi = -x \sin(\varphi) + y \cos(\varphi) \quad (6)$$

Для применения двумерного направленного фильтра Габора необходимо вычислить поле направлений путем нахождения градиентов изображения. Для этого можно использовать фильтр Собела:

$$G_y = \begin{bmatrix} -1 & -2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \end{bmatrix}, \quad G_x = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 1 \\ -2 & 0 & 2 \\ -1 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (7)$$

Для вычисления поля направлений изображение делится на окна, в которых вычисляются усреднённые квадратурные градиенты:

$$\begin{bmatrix} G_{sx} \\ G_{sy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} G_x^2 - G_y^2 \\ 2G_x G_y \end{bmatrix} \quad (8)$$

Затем вычисляется усреднённое направление градиента для окна:

$$\Phi = \tan^{-1}\left(\frac{G_{sy}}{G_{sx}}\right) \quad (9)$$

Вычисление поля направлений и пространственной направленности фильтра Габора относительно главных осей задача ресурсоёмкая, но выполнимая, однако часто эту задачу упрощают, вычисляя только конкретное количество ядер фильтра Габора. На Рис. 1,а изображён двумерный ненаправленный фильтр Габора и пример поля направлений (Рис. 1,б) [3].

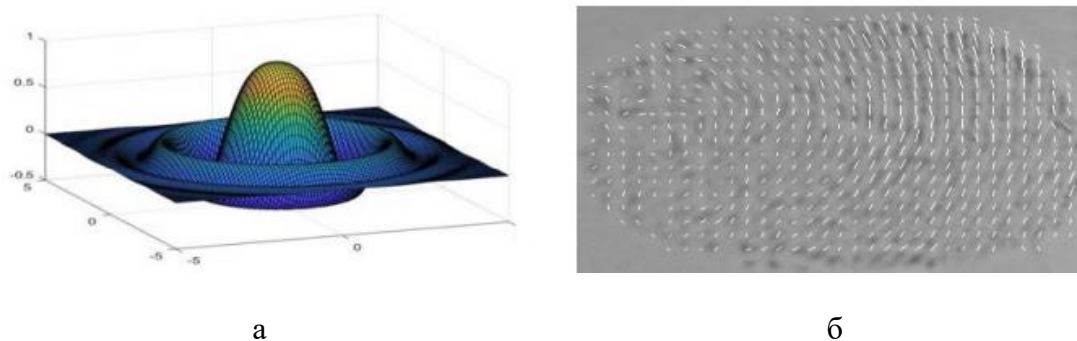


Рис. 1. Ненаправленный фильтр Габора (а); пример поля направлений (б).

Результаты и выводы. Проведен анализ фильтра Габора и его математическая составляющая для улучшения качества цифровых изображений.

Литература

1. Гонсалес Р., Вудс Р. Цифровая обработка изображений. Издание 3-е, исправленное и дополненное. Москва: Техносфера, 2012. 1104 с. ISBN 978-5-94836-331-8
2. Дмитриев Е.Н., Иванов, П.Ю., Зудин, С.И. Исследование объектов криминалистических экспертиз методами цифровой обработки изображений: учебное пособие. М., 2000. 80 с.
3. Козлов В.Л., Шмигирёв Е.Ф. Методика улучшения качества изображений для проведения экспертных исследований. Материалы III Международной научно-практической конференции. Минск, 2022. Издательство: ГУО «Республиканский институт высшей школы». С. 121-124.

Влияние имитатора атмосферы на положение оси бесселева светового пучка, сформированного из гауссова пучка, прошедшего через имитатор

И.В. Балыкин, А.А. Рыжевич

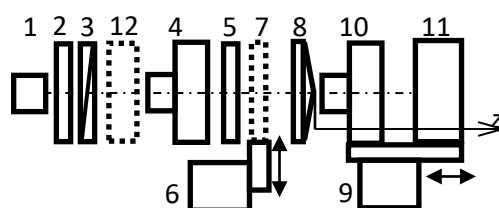
*Институт физики НАН Беларуси, Минск, Беларусь
E-mail: tol@dragon.bas-net.by*

Введение. Бесселевы световые пучки (БСП) 0-го и 1-го порядков являются аксиально симметричными интерференционными световыми полями, радиальное распределение интенсивности в которых описывается квадратом функций Бесселя 1-го рода 0-го и 1-го порядков соответственно. Известно, что качество исходного светового пучка, падающего на аксикон, влияет на параметры формируемого им БСП [1-2]. После прохождения лазерного пучка через среду с турбулентностью он не только претерпевает изменения в поперечных распределениях фазы и амплитуды, но при некоторых условиях также отклоняется от прежнего направления распространения, поэтому в данной работе было исследовано влияние имитатора турбулентности атмосферы на положение оси БСП, сформированного из гауссова пучка, прошедшего через имитатор.

1 Экспериментальная установка. Нами была собрана экспериментальная установка для исследования влияния среды с неоднородностями на качество БСП, сформированного из исходного гауссова светового пучка, прошедшего через эту среду. Конструкция экспериментальной установки схематически изображена на Рис. 1. Установка включает в себя гелий-неоновый лазер 1, формирующий гауссов световой пучок, поляризационный attenuator для плавной регулировки интенсивности света в исходном пучке, состоящий из полуволновой пластины 2 и поляризатора 3, 20/10/5/2-кратный расширитель/коллиматор 4, attenuator 5 на основе нейтральных стеклянных светофильтров, моторизованный для

поперечного перемещения держатель 6 опционального имитатора 7 неоднородности атмосферы, аксикон 8 для формирования бесселева светового пучка, а также объединенные на одной отдельно моторизованной платформе 9 для продольного перемещения: микроскоп 10, и CCD-камера 11 для регистрации поперечного распределения интенсивности в формируемом БСП. На оси светового пучка опционально присутствует преобразователь 12 на основе двуосного кристалла для формирования дислокации волнового фронта с целью получения после аксикона БСП первого порядка.

Моторизованный держатель 6 использовался нами для имитации поперечного ветра в соответствии с моделью «замороженной» атмосферы. Внесение такой имитации необходимо в контексте анализа статистических свойств наблюдаемых параметров качества при анализе реальной атмосферы. Это может быть полезно, например, для оценки случайной ошибки при измерении параметров БСП.



1 – лазер; 2 – полуволновая пластина; 3 – поляризатор; 4 – 20/10/5/2-кратный расширитель пучка/коллиматор; 5 – аттенюатор; 6 – моторизованный держатель; 7 – имитатор неоднородности атмосферы; 8 – аксикон; 9 – моторизованная платформа; 10 – микроскоп; 11 – CCD-камера, 12 – преобразователь

Рис. 1. Состав экспериментальной установки для исследования влияния среды с неоднородностями на качество бесселева светового пучка.

2 Положение оси БСП. Анализ параметров сформированного БСП производился после регистрации поперечных распределений интенсивности, формируемых на различных расстояниях z от аксикона, в процессе поперечного перемещения имитатора атмосферы моторизованным держателем. Для последующей обработки нами были выбраны распределения при значениях продольной координаты от 40 до 640 мм с шагом 50 мм. Для определения положения оси на каждом кадре в силу особенностей распределения интенсивности в БСП использовался метод моментов с учетом только пикселей, с интенсивностью большей, чем 0,8 от максимальной интенсивности на кадре. На Рис. 2 показано, как изменяется с течением времени при линейном перемещении имитатора отклонение положения оси БСП от её положения при отсутствии имитатора на разных расстояниях z от аксикона.

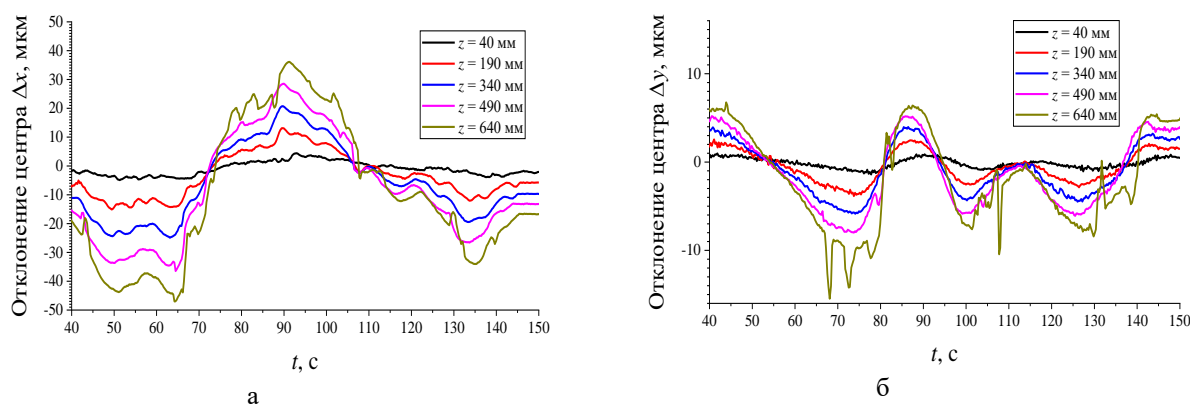


Рис. 2. Зависимость отклонения оси БСП₀ от времени сканирования при различных значениях продольной координаты z по оси: а – x , б – y .

Из Рис.2 следует, что при наличии имитатора турбулентности ось сформированного БСП изменяет свое положение, причем отклонение оси при прохождении пучка через одну и ту же область имитатора увеличивается с ростом продольной координаты z .

Заключение. Наличие имитатора атмосферы на пути гауссова лазерного пучка приводит к отклонению оси БСП, сформированного аксиконом из гауссова пучка, которое можно измерять с большой точностью. Это дает возможность отслеживать турбулентность прозрачной среды, причем чувствительность данного метода возрастает при регистрации БСП на большем расстоянии от аксикона.

Благодарности. Работа выполнена в рамках задания 1.1 «Разработка методов и устройств диагностики материалов, процессов и изделий в оптическом и терагерцовом диапазонах спектра и их применение для оптической связи, микроскопии и определения характеристик различных объектов» (№ гос. рег. 20210300) ГПНИ «Фотоника и электроника для инноваций» (2021-2025 гг.).

Литература.

1. Ryzhevich, A.A. Simple method of laser beam quality analysis / A.A.Ryzhevich, N.S.Kazak, N.A.Khilo, A.N.Khilo // Lightmetry: Proc. SPIE, Pultusk, Poland, 5-9 June 2000 / Ed. by M. Pluta. – SPIE, 2000. – Vol. 4517. – P. 16-21.
2. Ryzhevich, A.A. Quality Parameters of Zero-Order Bessel Light Beams /A. A. Ryzhevich, I. V. Balykin, T. A. Zheleznyakova // Journal of Applied Spectroscopy. – 2018. – Vol. 85, № 1. – P. 134-142.

Программа для расчета траекторий микрочастиц в переменном четырехлучевом световом поле

И.В. Балыкин^a, А.А. Рыжевич^a, О.А. Смехович^b, М.С. Яроцкая^b,
А.П. Визгин^b, Т.Д. Циркун^b

^a Институт физики НАН Беларуси, Минск, Беларусь
^b ГУО "Средняя школа № 4 г. Минска", Минск, Беларусь
E-mail: tol@dragon.bas-net.by

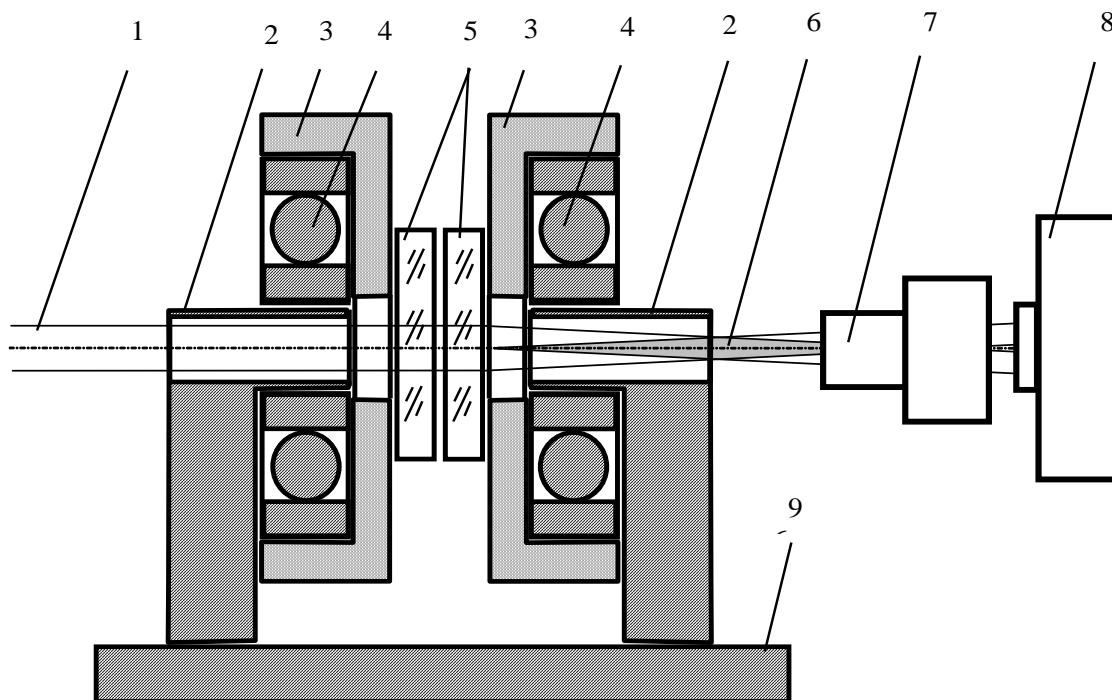
Введение. Начиная с 1970 г. [1], лазерные световые пучки используются для воздействия градиентными силами светового поля на частицы различных размеров: от десятков микрометров до долей нанометра. В [2] были впервые выделены как отдельный класс многолучевые световые поля интерференционного типа. Данные пучки формируются при интерференции нескольких взаимно когерентных световых пучков, распространяющихся под некоторым углом к общей оси. Также в [2] было впервые показано, что многолучевые интерференционные поля в поперечном сечении содержат большое количество локальных максимумов интенсивности малых размеров, благодаря чему могут обеспечивать воздействие на объекты не только за счет высокой интенсивности, но и за счет градиентных сил. В данной работе продемонстрирована разработанная нами компьютерная программа для расчета траекторий микрочастиц, движущихся в переменном четырехлучевом градиентном световом поле (ЧПГСП) интерференционного типа.

1 Формирование переменного четырёхлучевого светового поля. В [3] был предложен метод формирования динамического поля с ячеистым распределением интенсивности на основе двух бипризм, расположенных почти вплотную друг к другу и при этом независимо вращающихся с различными угловыми скоростями в плоскости, перпендикулярной оптической оси входного пучка. Для экспериментальной реализации данного метода изготовлен специальный узел, показанный на Рис. 1.



Рис. 1. Узел, обеспечивающий крепление, юстировку и независимое вращение двух расположенных последовательно вплотную друг к другу бипризм.

Схема оптической установки для формирования и регистрации ЧПГСП показана на Рис. 2.



1 – исходный коллимированный лазерный световой пучок с аксиально симметричным распределением интенсивности; 2 – кронштейны для крепления шарикоподшипников на основании; 3 – крышка для плотной посадки на шарикоподшипник; 4 – шарикоподшипники; 5 – бипризмы Френеля, 6 – зона существования динамического интерференционного поля, 7 – микроскоп, 8 – CCD –камера для регистрации формируемого поля; 9 – основание

Рис. 2. Оптическая схема экспериментальной установки для формирования и исследования ЧПГСП.

Подшипники 4 (Рис. 2) обеспечивают вращение бипризм 5 без биений. На наружной цилиндрической поверхности крышек 3 проточены пазы для пассивов, передающих вращение через редуктор от электродвигателя. Редуктор обеспечивает различные угловые скорости вращения для бипризм. Кронштейны 2 независимо крепятся к основанию 9 с возможностью юстировки бипризм 5 относительно друг друга. В основании 9 сделаны отверстия для крепления узла для вращения бипризм на юстировочную платформу с целью юстировки узла

относительно исходного пучка 1. Входной линейно поляризованный лазерный пучок 1 направляется на бипризмы 5 параллельно их оси вращения сквозь отверстия в кронштейнах 2. В области 6 формируется ЧПГСП, которое увеличивается микроскопом 7 и регистрируется CCD-камерой 8.

На Рис. 3 показаны результаты расчетов в различные моменты времени поперечного распределения ЧПГСП, формируемого парой бипризм, одна из которых неподвижна, а другая вращается вокруг оси. Первая картинка соответствует моменту, когда линия соприкосновения наклонных граней одной бипризмы перпендикулярна аналогичной линии другой бипризмы. Последняя - моменту, когда указанные линии параллельны друг другу. Выбирая угловую скорость вращения первой призмы так, чтобы она отличалась от скорости другой бипризмы, можно сформировать динамическое градиентное ячеистое световое поле для манипуляции микрочастицами, конфигурация которого будет изменяться со скоростью, соответствующей таким характеристикам микрочастиц, как масса и поляризуемость.

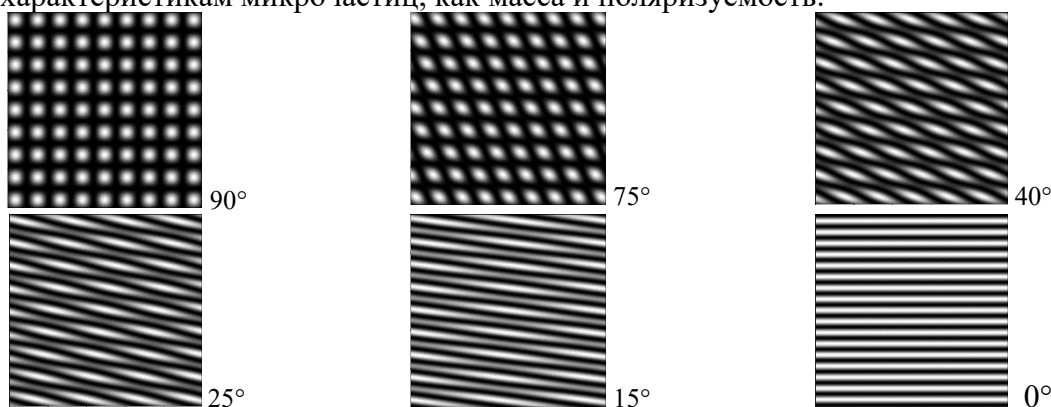


Рис. 3. Расчет ЧПГСП при повороте одной из бипризм на указанный угол.

Экспериментальные данные хорошо соответствуют расчету (Рис. 4).

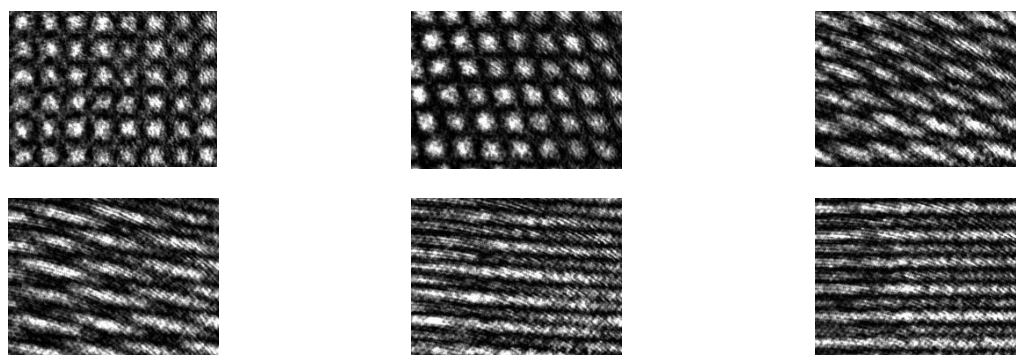


Рис. 4. ЧПГСП в различные моменты времени (эксперимент).

2 Программа для расчёта траекторий микрочастиц. Микрочастицы, помещённые в ЧПГСП, могут втягиваться градиентными силами в движущиеся и изменяющиеся по форме локальные максимумы интенсивности, описывая затем сложные траектории. В связи с этим ЧПГСП вызывает интерес с точки зрения его воздействия на ансамбли микрочастиц, как искусственно созданные, так и естественно существующие в составе биотканей. В среде Python 3.8 разработана программа для расчета и регистрации траекторий микрочастиц, позволяющая задавать параметры лазерного излучения, бипризм, ЧПГСП и частиц в допустимых экспериментальной практикой диапазонах. На Рис. 5 показан интерфейс разработанной программы.

3 Результаты первых численных экспериментов. Серия проведенных с помощью программы численных экспериментов показала, что если угловая скорость вращения одной из бипризм в целое число n раз больше скорости вращения второй бипризмы, в случае выхода движущейся в формируемом световом поле микрочастицы, находящейся от оси вращения

бипризм на расстоянии нескольких десятков микрометров, на неизменную (стационарную) одновитковую траекторию, эта траектория состоит из $2n - 2$ «лепестков». На Рис. 6 продемонстрированы рассчитанные с помощью программы траектории частиц при различных соотношениях угловых скоростей вращения бипризм. При незначительном увеличении начального расстояния между частицей и осью вращения бипризм стационарная траектория практически не изменяется. Траектория частицы, начинающей движение на расстоянии около 100 мкм, может иметь нестационарный характер на протяжении 100 и более витков, причем каждый следующий виток не повторяет ни одного из предыдущих.

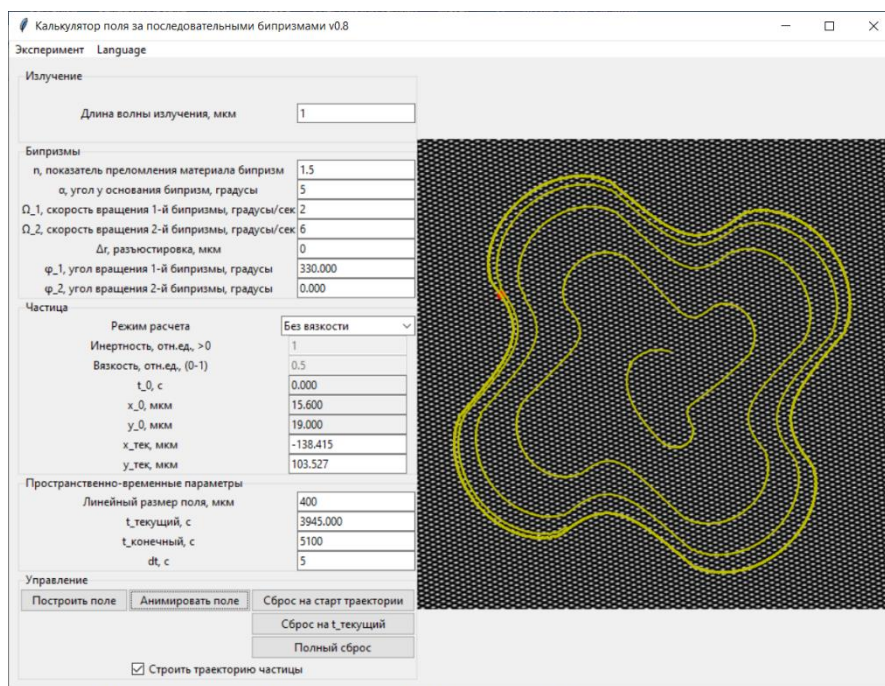


Рис. 5. Интерфейс программы для расчёта траекторий микрочастиц в ЧПГСП.

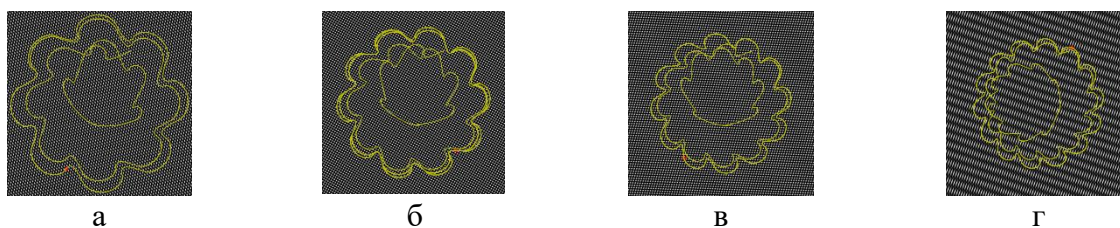


Рис. 6. Траектории микрочастицы в ЧПГСП при соотношении угловых скоростей вращения бипризм: а – $2/10$, б – $2/12$, в – $2/14$, г – $2/16$.

Закключение. Разработанная программа рассчитывает траектории микрочастиц, движущихся под воздействием переменного четырехлучевого светового поля, в широком диапазоне параметров поля и свойств микрочастиц, что позволяет определить перспективы применения полей данного типа.

Благодарности. Авторы благодарят Институт физики НАН Беларуси за предоставленные возможности для проведения научно-поисковых работ в рамках сотрудничества научных организаций НАН Беларуси с учреждениями образования.

Литература.

1. Ashkin, A. Acceleration and Trapping of Particles by Radiation Pressure // Physical Review Letters. – 1970. – Vol. 24, № 4, P. 156 – 159.
2. Kazak, N.S. Methods of formation of gradient light fields / N.S. Kazak, A.A. Ryzhevich, E.G.

Katranji, A.N. Khilo // Seventh International conference on Laser and Laser-Information technologies: Proceedings of SPIE, Suzdal, Russia, 22-26 June 2001. / Ed. by V. Ya. Panchenko, V.S. Golubev. – Suzdal, Russia, 2001. – Vol. 4644. – P. 520–529.

3. Способ формирования переменного градиентного светового поля: пат. на изобр 10393 Респ. Беларусь, МПК G 02F 1/01 / А.А. Рыжевич, Ю.А. Куприянова; заявитель ГНУ «Институт физики Б.И. Степанова НАН Беларуси». – № а 20050993; заявл. 17.10.2005; опублик. 28.02.2008 // Афіцыйны бюл. / Нац. цэнтр інтэлектуал. уласнасці. – 2008. – № 1 (60). – Ч. 1. – С. 146-147.

Исследование фотохромного эффекта в кристаллах силленитов, индуцированного лазерными импульсами на разных длинах волн

И. Г. Даденков

Белорусский государственный университет, 220030 Минск, Беларусь

E-mail: dadenkov.ivan@gmail.com

Введение. Кристаллы семейства силленитов, к которым относятся силикат висмута $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$ (BSO), титанат висмута $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$ (BTO) и германат висмута $\text{Bi}_{12}\text{GeO}_{20}$ (BGO), являются фоторефрактивными кристаллами с широкой запрещенной зоной, что позволяет отнести их к диэлектрическим материалам. Ввиду существования в силленитах многочисленных примесных и дефектных центров, имеющих различную природу возникновения и активно участвующих в процессах перераспределения носителей заряда [1] данные кристаллы, имеют высокую чувствительность к излучению видимой области спектра. Эта особенность позволяет использовать их в устройствах оптической памяти, системах обработки световых полей в реальном времени, системах хранения и передачи информации, при создании управляемых элементов адаптивной и волноводной оптики, а также в голографической интерферометрии, включая измерения амплитуд колебаний в субнанометровом диапазоне [2, 3].

Наличие в запрещенной зоне кристаллов силленитов донорных и акцепторных энергетических уровней [1] приводит к тому, что вследствие поглощения света происходит рекомбинация электронов между этими уровнями и зоной проводимости, что приводит к проявлению фотохромного эффекта, заключающегося во временном изменении коэффициента поглощения кристалла. К основным характеристикам фотохромных материалов можно отнести высокую разрешающую способность, возможность перезаписи и коррекции изображения с помощью теплового или светового воздействия, а также изменение в широких пределах времени хранения записанной информации (от микросекунд до нескольких месяцев и даже лет) [4, 5].

Методика эксперимента и результаты. Для исследования зависимости амплитудных и временных характеристик фотоиндуцированного поглощения в кристаллах BSO и BTO в качестве источника лазерного излучения использовался параметрический генератор, возбуждаемый третьей гармоникой Nd:YAG лазера. Данный параметрический генератор позволяет плавно изменять длину волны генерации в диапазоне от 400 нм до 2 мкм с шириной спектральной линии на уровне 0,1 нм в видимой области спектра. Зондирование освещаемой лазерными импульсами области кристалла проводилось маломощным излучением непрерывного гелий-неонового лазера на длине волны 632,8 нм. Регистрация динамики фотоиндуцированного изменения коэффициента поглощения (фотохромного эффекта) проводилась с помощью PIN фотодиода и цифрового осциллографа. В качестве рабочих длин волн был выбран спектральный диапазон 450 - 580 нм. Коротковолновая граница обусловлена высоким поглощением излучения в кристаллах силленитов при приближении к длине волны,

отвечающей прямым межзонным переходам. Верхняя граница выбранного диапазона обусловлена снижением поглощения.

На Рис. 1 представлены несколько осциллограмм, полученных в результате эксперимента, причем все осциллограммы имеют одинаковый масштаб по времени (5 мс/клетка). При освещении кристалла мощным лазерным импульсом происходит резкое локальное затемнение с последующим просветлением до уровня, который предшествовал освещению. Проводя сравнение осциллограмм, можно сделать вывод о том, что с увеличением длины волны индуцирующего излучения амплитуда фотоиндуцированного изменения коэффициента поглощения уменьшается, причем для кристалла BSO уменьшение значительнее, чем для ВТО, потому как амплитудное разрешение осциллограмм на Рис. 1,а и Рис. 1,б одинаковое, а на Рис. 1,в и Рис. 1,г – отличается в два раза (3 и 6 мВ/клетка, соответственно). Также стоит отметить разную крутизну экспериментальных зависимостей, что позволяет сделать вывод о разных временах релаксации фотоиндуцированного поглощения для кристаллов и общую тенденцию к увеличению этого времени с увеличением длины волны падающего излучения.

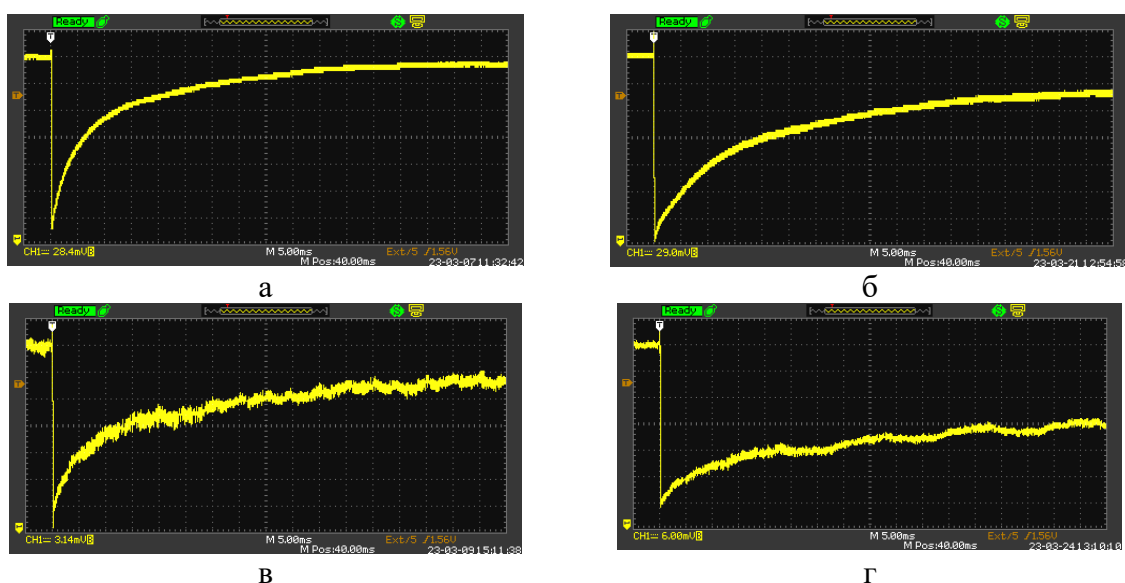


Рис. 1. Осциллограммы зондирующего сигнала после освещения кристалла BSO (а, в) и ВТО (б, г) лазерным импульсом интенсивностью 1 МВт/см^2 и длиной волны 480 нм (а, б) и 550 нм (в, г).

Заключение. Были определены амплитудные и временные характеристики проявления фотохромного эффекта в кристаллах силиката и титаната висмута в условиях воздействия лазерными импульсами в спектральном диапазоне 450÷580 нм с одновременным зондированием непрерывным излучением. Установлено, что кристалл титаната висмута более чувствителен к излучению в красной области спектра, чем кристалл силиката висмута. Также было определено, что кристалл ВТО имеет большее время релаксации фотоиндуцированного изменения коэффициента, чем BSO.

Литература.

1. Каргин Ю.Ф., Бурков В.И., Марьин А.А., Егорышев А.В. / Кристаллы $\text{Bi}_{12}\text{Si}_x\text{O}_{20-8}$ со структурой силленита. Синтез, строение, свойства. - Москва, 2004. – 312 с.
2. Ромашко Р. В. / Адаптивная голографическая интерферометрия: техника, прогресс и приложения. - Вестник Дальневосточного отделения Российской академии наук, 2021, № 4, - с. 40–47.
3. Nazhestkina N.I., Kamsyilin A.A., Kobozev O.V., Prokofiev V.V. / Detection of small phase modulation using two-wave mixing in photorefractive crystals // Appl. Phys. B. 2001. V. 72. № 6. - P. 767–773.

4. Барачевский В. А., Лашков Г. И., Цехомский В. А. / Фотохромизм и его применение - Москва: Химия, 1977. - 278 с.
5. Ханон Х.К., Толстик А.Л / Динамика фотоиндуцированного поглощения в кристаллах титаната висмута / - Вестник БГУ. Серия 1, Физика. Математика. Информатика, 2012, №2. - С. 3-7.

Экспериментальное определение порогов графитизации монокристалла синтетического алмаза под воздействием импульсного лазерного излучения

Е.А. Ерёменко

*Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь
E-mail: egor.eremenko.03@mail.ru*

Введение. Воздействие лазерного излучения выделяется как один из наиболее эффективных методов модификации материалов. С его помощью можно осуществлять микропрофилирование алмазной поверхности, создавая алмазные дифракционные оптические элементы (сферические, цилиндрические линзы Френеля, фокусаторы пучка и др.), проводящие графитовые дорожки и локально повышать концентрацию кристаллических дефектов.

Согласно наиболее авторитетной теории взаимодействия лазерного излучения с алмазом [1] ключевым аспектом является графитизация его поверхности. Есть два важных параметра: одноимпульсный и многоимпульсный порог графитизации. Если плотность энергий ниже многоимпульсного порога, то происходит наноабляция (графитизированный слой тут же подвергается фотоокислению), при плотностях энергии между двумя порогами наблюдается аккумулятивная графитизация (постепенный рост графитовой капли, которая при большом количестве импульсов достигает критического размера, начинает поглощать и нагреваться, вызывая дальнейшую графитизацию), при плотностях энергии больше одноимпульсного порога сразу происходит достаточная графитизация и начинается абляция графитоподобного слоя. Эти два пороговых значения графитизации зависят от длины волны и длительности импульса лазерного излучения, а также от спектральных характеристик используемого алмаза. К настоящему моменту имеется ограниченное количество работ, посвященных определению порогов графитизации алмаза под воздействием лазерного излучения [2,3], причем большинство исследований выполнено для природных алмазов и синтетических алмазных пленок, выращенных методом осаждения из газовой фазы (CVD-метод). Целью настоящей работы является исследование процессов графитизации под воздействием импульсного лазерного излучения монокристаллов синтетического алмаза, выращенных методом температурного градиента (НРНТ-метод).

1 Исследуемый материал. В качестве экспериментального материала использованы пластины из синтетического НРНТ алмаза типа Ib с ориентацией (111) и (100), выращенные в системе Ni-Fe-C. Пластины имеют размеры ~ 2x3 мм и толщину в диапазоне 0.36 ÷ 1.23 мм, массу порядка нескольких десятков миллиграмм, прозрачны. Особенность этого кристалла – большое содержание примеси азота и металлов. Наличие атомов азота в решетке алмаза приводит к возникновению края примесного поглощения вблизи 500 нм, и, соответственно, к окрашиванию кристаллов в желтый цвет. Предварительно образцы были очищены от поверхностных загрязнений путем обработки в хромпике при T=80 °C в течение 5 часов с последующей многократной промывкой деионизованной водой в ультразвуковой ванне.

2 Методы исследования. Для характеристики образцов были сняты спектры поглощения в ИК диапазоне с помощью Фурье-спектрометра Vertex-70 (Германия) и в видимом диапазоне с помощью спектрометра Solar PV 1251 (Беларусь). Примесный состав

образцов определялся при помощи анализа спектров ИК-поглощения в области $800 \div 1400 \text{ см}^{-1}$, в которой находятся несколько перекрывающихся полос, отвечающих за различные азотные кристаллические дефекты. Декомпозиция спектра осуществлялась с помощью подбора линейной комбинации из эталонных спектров каждого дефекта. Полученные линейные коэффициенты переводились с помощью хорошо известных эмпирических формул в концентрацию дефектов [4]

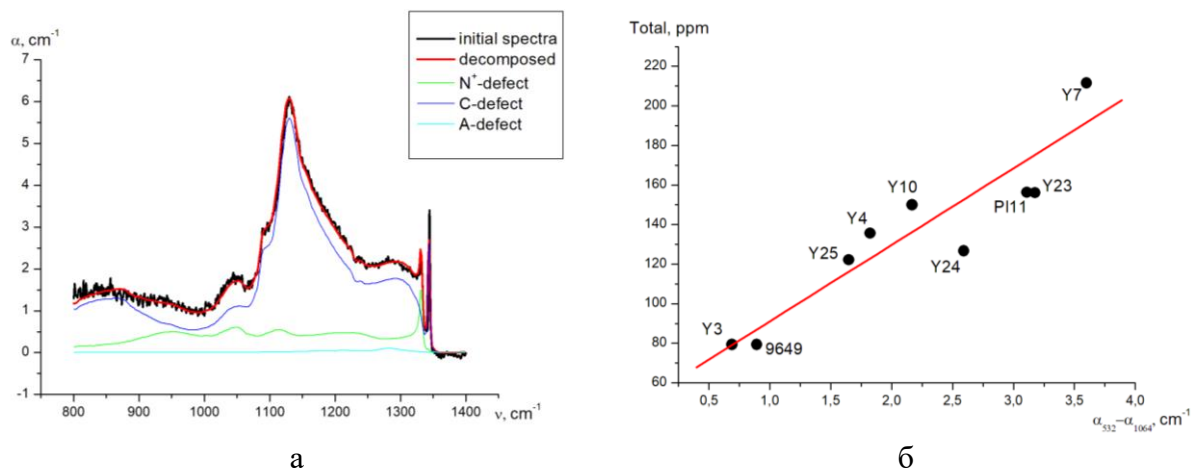


Рис. 1. Пример декомпозиции ИК-спектра образца Y10(а) и зависимость между разностью коэффициентов поглощения на длинах волн 532 и 1064 нм и концентрацией дефектов(б).

Для обработки алмазных пластин использовалось излучение импульсного твердотельного лазера на иттрий-алюминиевом гранате Nd^3 : YAG модели LS2147-N-FF (Lotis ТП, Беларусь-Япония) с длиной волны $\lambda=1064$ и 532 нм и длительностью лазерного импульса ~ 20 нс. Распределение энергии в поперечном сечении лазерного пучка было близко к гауссову. Обработка велась как в режиме одиночных импульсов, так и сериями импульсов с частотой следования 1 Гц. Средняя плотность энергии на поверхности образцов варьировалась в диапазоне от 2 до 14.1 Дж/см^2 как за счет изменения энергии лазерного излучения, так и за счет фокусировки лазерного луча. Состояние поверхности образцов после облучения контролировалось при помощи микроскопа МБС9, снабженного цифровой фотокамерой.

3 Результаты и их обсуждение. Наблюдается зависимость между разностью коэффициентов поглощения на длинах волн 532 и 1064 нм и концентрацией дефектов (см. Рис. 1,б), коэффициент корреляции составляет $R \approx 0.91$. Получить напрямую зависимость от коэффициента поглощения не удалось в силу неидеальной плоскопараллельности образцов и влияния поглощения на металлических дефектах. Параметры экспериментов, приводящих к графитизации образцов в одноимпульсном и многоимпульсном режимах, приведены в Табл.1, где D – диаметр лазерного пятна, E – энергия лазерного излучения, E_s – поверхностная плотности энергии, D – оптическая плотность образца на длине волны облучения, O – кристаллографическая ориентация образца. C_N – общая концентрация азотных примесей.

В работе [1], исследующей CVD алмазы типа Па, утверждается, что поглощение энергии происходит как на алмазной решетке, так и на структурных дефектах, причем основным процессом является многофотонное поглощение на алмазной решетке. Ширина запрещенной зоны у алмаза 5,5 эВ, что соответствует длине волны 225 нм. Таким образом, для лазерного излучения с большими длинами волн поглощение на алмазной решетке возможно только в результате многофотонных процессов. В нашем случае, как видно из Рис. 2, графитизация развивается локально, причем распределение графитовых включений по поверхности образца отличается от гауссова распределения энергии в пучке. Это говорит о том, что графитизация происходит в основном на структурных дефектах и/или области

сегрегации примесей, в местах которых происходит дополнительное поглощение энергии лазерного излучения, нагрев и трансформация углеродных связей. Значительную роль в данных процессах играют примеси азота и металлов (в частности, никелевые дефекты, хорошо описанные в [4]). Так при облучении образца P11 графитизация наступает при $14,1 \text{ Дж/см}^2$, а у Y25 - при $8,0 \text{ Дж/см}^2$, причем содержание азотных дефектов в образцах 156,3 и 122,2 ppm соответственно.

Таблица 1. Результаты исследования графитизации синтетического алмаза

Шифр	D, мм	E, Дж	$E_s, \text{ Дж/см}^2$	D	O	Длина волны, нм	Количество импульсов	$C_N, \text{ ppm}$
Y7	4,1	1,0	7,6	0,26	111	1064	1	156,1
P120	3,1	0,7	9,3	0,27	100	1064	1	-
Y25	3,1	0,6	8,0	0,56	100	532	1	122,2
Y26	3,1	0,6	8,0	0,36	111	532	1	-
9649	3,6	0,5	6,4	0,39	111	532	1	79,4
Y24	3,1	0,5	6,8	0,71	111	532	1	126,7
P111	2,15	0,5	14,1	0,23	100	532	1	156,3
Y10	5,45	0,6	2,6	0,24	111	1064	32	150,0
Y23	5,45	0,6	2,6	0,22	111	1064	20	211,6
P113	5,0	0,4	2,0	0,33	100	532	1300	280,9

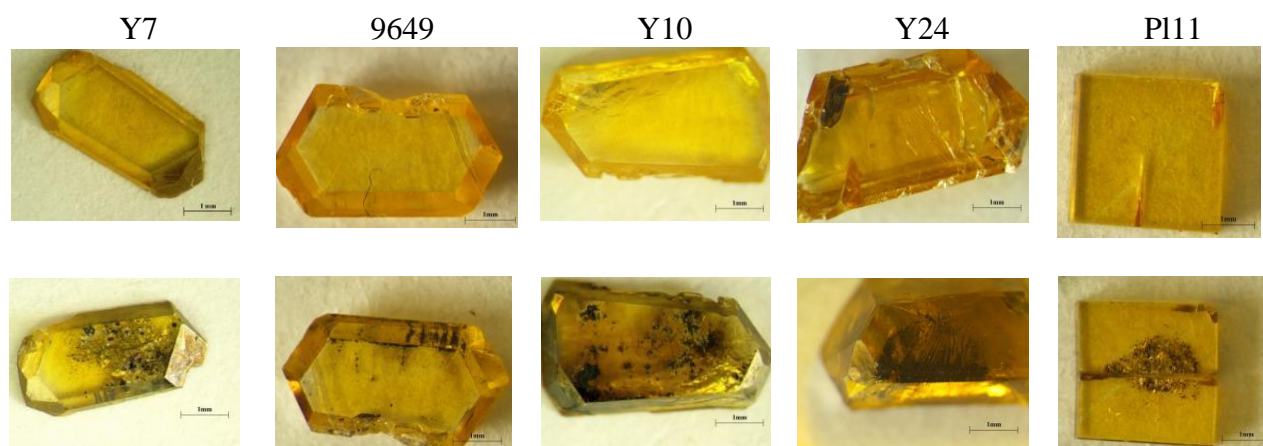


Рис 2. Фотографии образцов до графитизации (сверху) и после (снизу).

Из фотографий образцов и схемы роста кристаллов следует, что все пластины с ориентацией (111) и P120 с ориентацией (100) содержат внешние поверхности. Внешние поверхности сформировались при остывании реакционной зоны в сильно неравновесных условиях и поэтому они содержат большее количество примесей (прежде всего металл-растворителя), чем объем кристалла. В отличие от остальных образцов, Y24 облучался со стороны объема кристалла, однако графитизация развилась на внешней поверхности, что показывает важность примесей металлов в процессе графитизации. Также была построена зависимость одноимпульсного порога от оптической плотности образца на длине волны излучения (Рис.3), где прослеживается четкое разделение на образцы с внешней поверхностью и без. Поскольку в нашем случае поглощение практически полностью вызвано примесями, модель многофотонного поглощения, изложенная в [1], оказывается несостоятельной, на что так же указывает слабая зависимость порогов графитизации от длины волны излучения (см. Табл.1).

Кроме того, у образцов Y7, Y10 и P11 графитизация развивается «точечно», а у Y24 и 9649 - «игольчато», что объясняется дополнительным рассеянием излучения. В частности, у образца Y24 она вызвана множественными трещинами в пластине и прохождением света через

образец (графитизация развивалась с противоположной от облучения стороне), у образца 9649 она происходит на грани (см. Рис.2), у остальных пластин тоже наблюдается такая закономерность, например у P113 «игольчатая» графитизация развивается на трещине, а у Y23 на грани.

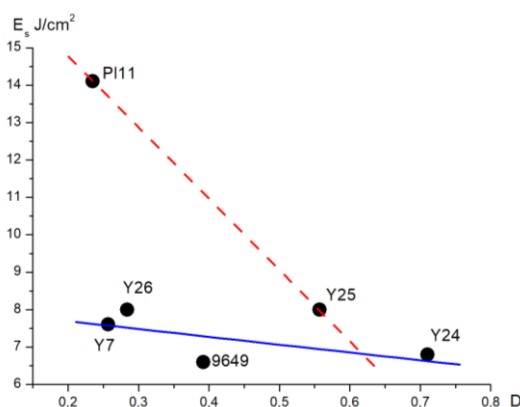


Рис. 3. Зависимость порога одноимпульсной графитизации от оптической плотности для образцов имеющих (синяя линия) и не имеющих (красная линия) внешних поверхностей.

Заключение. Анализ спектров поглощения в ИК и видимой областях показал зависимость коэффициента поглощения от примесного состава образцов (Рис.1,б) Были экспериментально оценены пороги одноимпульсной (для 532 нм – Рис.3 кроме образца Y7; для 1064 нм – образец Y7 и P120, 7,6 и 9,3 Дж/см², соответственно) и многоимпульсной (для 532 нм – образец P113, более 2 Дж/см²; для 1064 нм – образцы Y10 и Y23, 2.6 Дж/см², 32 и 20 импульсов соответственно) графитизации синтетического монокристалла НРНТ алмаза. Графитизация развивается локально, значительную роль в этом процессе играют примеси азота (для образцов без внешних поверхностей) и металлов, в частности никеля (для образцов, имеющих внешние поверхности), о чем свидетельствует Рис.3. Графитизация на дефектах объясняет слабую корреляцию между порогами графитизации и длиной волны излучения. Если лазерное излучение дополнительно рассеивается на трещинах, сколах, гранях или в объеме образцов, то наблюдается «игольчатая» графитизация, в противном случае - «точечная» (см. Рис.2)

Литература.

1. Mildren, R. P. Optical Engineering of Diamond / R. P. Mildren, J. R. Rabeau. — Germany: Wiley-VCH, Wiley, 2013.
2. Aharonovich, I. Diamond photonics / I. Aharonovich, A. D. Greentree, S. Prawer // Nat Photon. – 2011. – Т. 5, № 7. – P. 397 – 405.
3. Ablation of CVD diamond with nanosecond laser pulses of UV–IR range / T. V. Kononenko et al. // Diamond and Related Materials. – 1998. – Т. 7, № 11/12. – P. 1623–1627
4. Zaitsev A.M. Optical Properties of Diamond: A Data Handbook – Berlin: Springer, 2001. – 502 p.

Анализ перспективности применения наночастиц золота и серебра для micro-LED дисплеев

Т.А. Ефимова

*Институт физики им. Б.И. Степанова НАН Беларуси, 220072 Минск, Беларусь
E-mail: t.efimova@ifanbel.bas-net.by*

Введение. В современном мире разработка новых технологий в области дисплеев является одним из ключевых направлений, стремительно развивающихся в науке и промышленности. Особый интерес представляет собой применение наночастиц золота и серебра для усиления излучения в micro-LED дисплеях. Одним из важных аспектов исследования является теоретический расчет коэффициента усиления люминесценции с использованием теории Ми, которая позволяет оценить эффективность использования данных наночастиц [1].

В данной работе рассматривается вопрос оптимизации цветовой схемы для достижения максимального коэффициента усиления люминесценции в присутствии металлических наночастиц. Интересное заключение исследования состоит в том, что при использовании наночастиц золота и серебра оптимальным является усиление люминесценции в зеленой области спектра с возбуждением в синей области, а также усиление люминесценции в красной области с возбуждением в зеленой. Эти результаты имеют важное значение для дальнейшего совершенствования технологий micro-LED дисплеев и повышения их эффективности.

1 Теория. Изменение скорости спонтанного испускания атомов и молекул вблизи металлических наночастиц приводит к увеличению интенсивности люминесценции нанокристалла с низким квантовым выходом – это суть эффекта плазмонного усиления люминесценции. Для аналитического расчета коэффициента усиления люминесценции была использована общая формула из теории Ми [2]:

$$F = \frac{I(\mathbf{r}, \omega)}{I_0(\mathbf{r}, \omega)} = \frac{|E(\mathbf{r}, \omega_0)|^2}{|E_0(\mathbf{r}, \omega_0)|^2} \frac{Q(\mathbf{r}, \omega)}{Q_0(\omega)} = \frac{|E(\mathbf{r}, \omega_0)|^2}{|E_0(\mathbf{r}, \omega_0)|^2} \times \\ \times \frac{(\gamma_{rad}(\mathbf{r}, \omega)/\gamma_0(\omega))/Q_0(\omega)}{\gamma_{rad}(\mathbf{r}, \omega)/\gamma_0(\omega) + \gamma_{nr}(\mathbf{r}, \omega)/\gamma_0(\omega) + (1 - Q_0(\omega))/Q_0(\omega)}$$

где $Q_0(\omega) = \gamma_0(\omega)/(\gamma_0(\omega) + \gamma_{int}(\omega))$ – собственный квантовый выход излучателя; γ_0 – вероятность излучательных переходов в отсутствие наночастицы; γ_{int} – собственная вероятность безызлучательных переходов излучателя, не зависящая от присутствия наночастицы и учитывающая внутренние потери в нанокристалле; $Q(\mathbf{r}, \omega) = \gamma_{rad}(\mathbf{r}, \omega)/(\gamma_{rad}(\mathbf{r}, \omega) + \gamma_{int}(\mathbf{r}, \omega) + \gamma_{nr}(\mathbf{r}, \omega))$ – квантовый выход излучателя, измененный близостью металлической наноструктуры; γ_{rad} – вероятность излучательных переходов вблизи металлической наноструктуры; γ_{nr} – вероятность безызлучательных переходов излучателя, стимулируемая металлической наноструктурой.

В рассматриваемой задаче входными параметрами являются длина волны возбуждения, длина волны излучения, собственный квантовый выход Q_0 , тип металла (т.е. его диэлектрическая проницаемость $\varepsilon(\lambda)$), показатель преломления окружающей среды n (в рассматриваемом случае $n=1$). Излучатель расположен на расстоянии Δr от металлической сферы диаметром d (в рассматриваемом случае $d=50$ нм). Дипольный момент молекулы перпендикулярен поверхности частицы серебра и параллелен электрическому полю E возбуждающего света.

В общем случае фотолюминесценция может быть усилена только в том случае, если усиление падающего поля, способствующее более высокой скорости возбуждения, не

перекрывается усилением безызлучательных переходов, приводящим к тушению люминесценции, что выражается как падение квантового выхода [3]. Квантовый выход всегда падает для идеальных излучателей с собственным выходом $Q_0 = 1$, поскольку вероятность безызлучательных переходов в плазмонных структурах всегда превышает вероятность излучательных. Для «плохих» излучателей с $Q_0 < 1$ одновременное усиление излучательного и безызлучательного переходов приводит либо к незначительному тушению, либо даже к увеличению квантового выхода. При $Q_0 \ll 1$ фотолюминесценция может быть усилена в 10^3 раза, тогда как для идеальных излучателей необходимо приложить особые усилия, чтобы получить более чем десятикратное усиление.

2 Полученные результаты. Рассчитанные значения коэффициента усиления люминесценции F представлены на Рис. 1 и 2. В обоих случаях полученный результат показывает, что с серебряными наночастицами можно получить большее усиление, чем с золотыми. Более того, золото дает тушение люминесценции для зеленой области, т.е. применение золотых наночастиц неэффективно для усиления фотолюминесценции в зеленой области. Чтобы получить усиление необходимо использовать серебряные наночастицы (Рис. 3). Однако золото может быть использовано для усиления люминесценции в красной области (Рис. 4) при возбуждении в зеленой области.

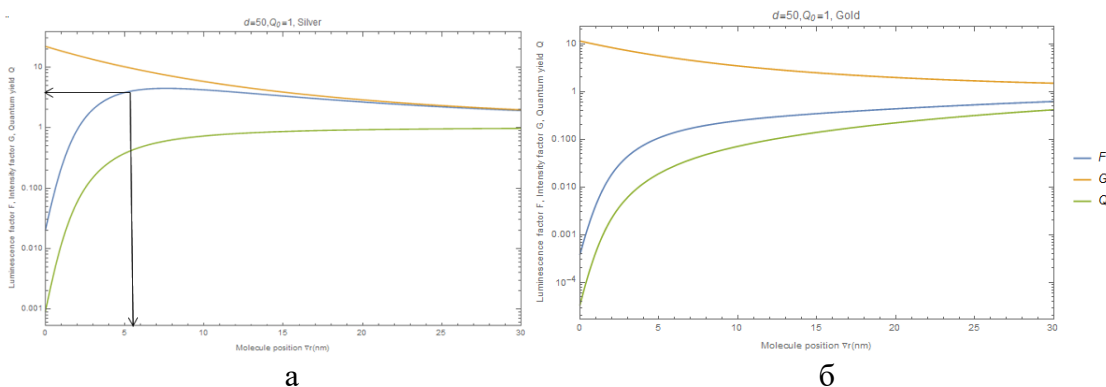


Рис. 1. Зависимости коэффициента изменения интенсивности падающего света G , квантового выхода Q и коэффициента усиления люминесценции F от расстояния молекулы Δr до поверхности наночастицы а) серебра и б) золота диаметром 50 нм. Длина волны возбуждения составляет 460 нм, а испускания – 520 нм.

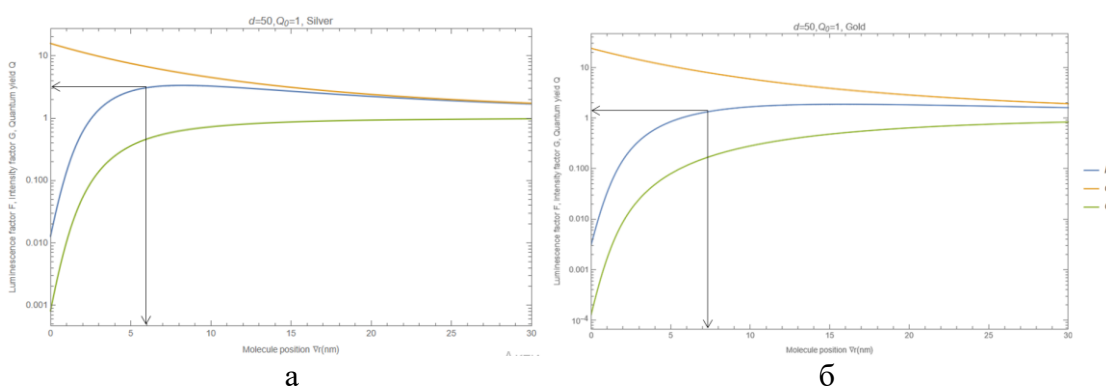


Рис. 2. Зависимости коэффициента изменения интенсивности падающего света G , квантового выхода Q и коэффициента усиления люминесценции F от расстояния молекулы Δr до поверхности наночастицы а) серебра и б) золота диаметром 50 нм. Длина волны возбуждения составляет 520 нм, а испускания – 620 нм.

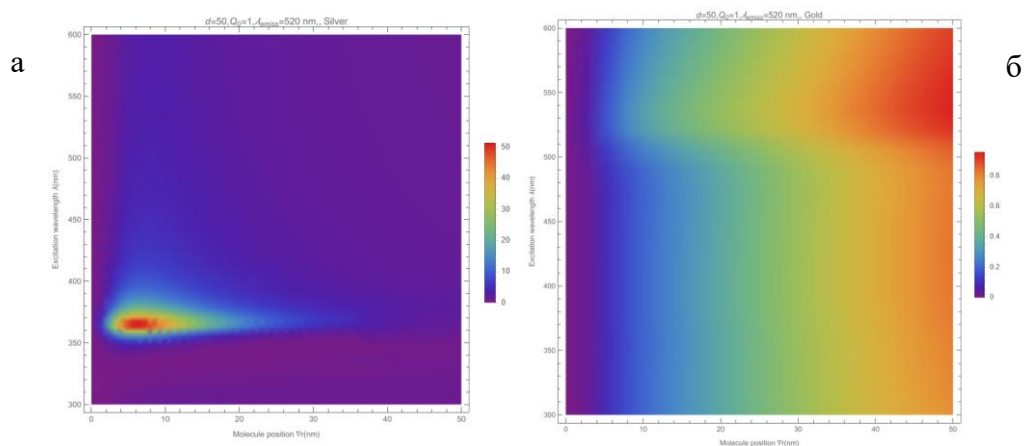


Рис. 3. Коэффициент усиления люминесценции F для длины волны испускания $\lambda=520$ нм как функция длины волны возбуждения λ и расстояния молекулы от поверхности наночастицы Δr а) серебра и б) золота для диаметра наночастицы $d=50$ нм.

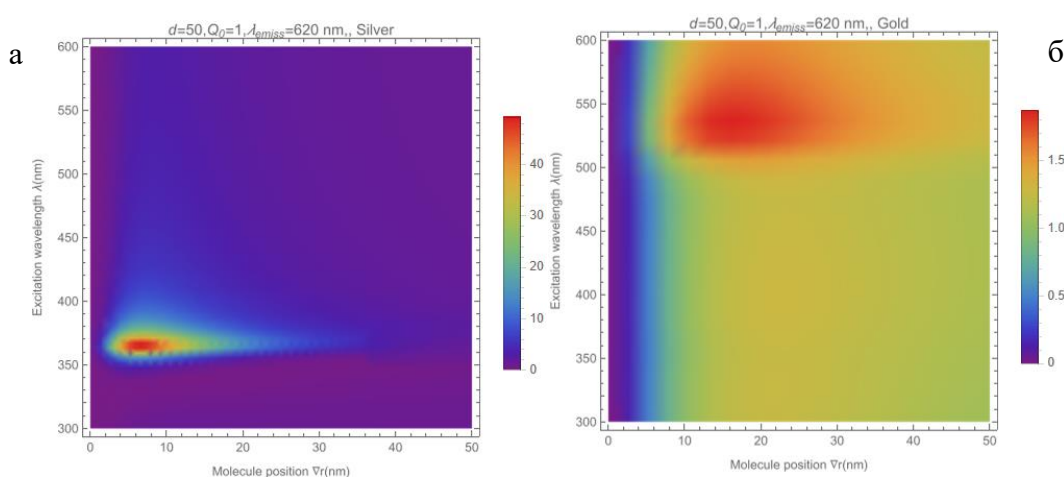


Рис. 4. Коэффициент усиления люминесценции F для длины волны испускания $\lambda=620$ нм как функция длины волны возбуждения λ и расстояния молекулы от поверхности наночастицы Δr а) серебра и б) золота для диаметра наночастицы $d=50$ нм.

Приведенные вычисления являются полностью аналитическими и дают разумное представление о механизмах усиления фотолюминесценции.

Заключение. В представленной работе был проведен сравнительный анализ использования наночастиц золота и серебра для усиления люминесценции для различных длин волн возбуждения и испускания, что может быть применимо при создании и оптимизации micro-LED дисплеев. Таким образом, исследование является актуальным и важным шагом в развитии современных дисплейных технологий, открывающим новые возможности для разработки более качественных и энергоэффективных устройств.

Литература.

1. Introduction to Nanophotonics / S. V. Gaponenko - Cambridge, U.K.: Cambridge Univ. Press, 2010. – 465 p.
2. P. Anger, P. Bharadwaj, L. Novotny / Enhancement and quenching of single molecule fluorescence // Phys. Rev. Lett., vol. 96, no. 11, p. 113002, Mar. 2006.
3. S. V. Gaponenko, D. V. Guzatov / Colloidal plasmonics for active nanophotonics // Proc. IEEE 2020 Vol. 108, no.5, p. 704-720

Апробация возможностей спектроскопии диффузного отражения при исследовании спектральных свойств пищевых продуктов

Е.В. Жигар

*Институт физики имени Б. И. Степанова НАН Беларуси, Минск, Беларусь
E-mail: zzhnk03@mail.ru*

Введение. Спектроскопия диффузного отражения – это метод анализа света, отраженного от поверхности материала. В отличие от обычного, при котором свет отражается от поверхности под углом относительно нормали к поверхности, при диффузном отражении свет рассеивается во все стороны. В спектроскопии диффузного отражения измеряется интенсивность отраженного света в зависимости от его длины волны или энергии. Этот метод широко применяется для анализа химического состава и физических свойств материалов. Он особенно полезен для непрозрачных материалов, которые не позволяют свету сквозь себя. В настоящее время, спектроскопия диффузного отражения привлекает особое внимание исследователей в связи с постоянным совершенствованием инструментальной базы и методологии [1]. Этот метод не только позволяет качественно анализировать поверхностные свойства материалов, но и обеспечивает возможность количественного измерения параметров, таких как коэффициенты отражения и поглощения, оптические константы и другие характеристики, имеющие важное значение для разнообразных научных и практических приложений, включая пищевую промышленность. Целью настоящей работы являлся подбор оптимальной методики для анализа спектрально-пространственных профилей и спектральных зависимостей молочных продуктов.

1 Материалы и методы. В работе использовалась экспериментальная установка, состоящая из спектрометра с галогеновой лампой, подвижного и неподвижного зондов, а также микропроцессорного блока Arduino для управления микрошаговым двигателем и давлением. В качестве образцов использовались такие молочные продукты, как: топленое молоко, сыр монастырский (45%), сливочное масло (82%), сливочное масло (72%).

На Рис. 1 показаны спектрометр с галогенной лампой и держатель двух оптоволоконных зондов, пятка которого с одним неподвижным игольчатым зондом и вторым подвижным установлена на референсный белый эталонный отражатель WS-2 фирмы Avantes.

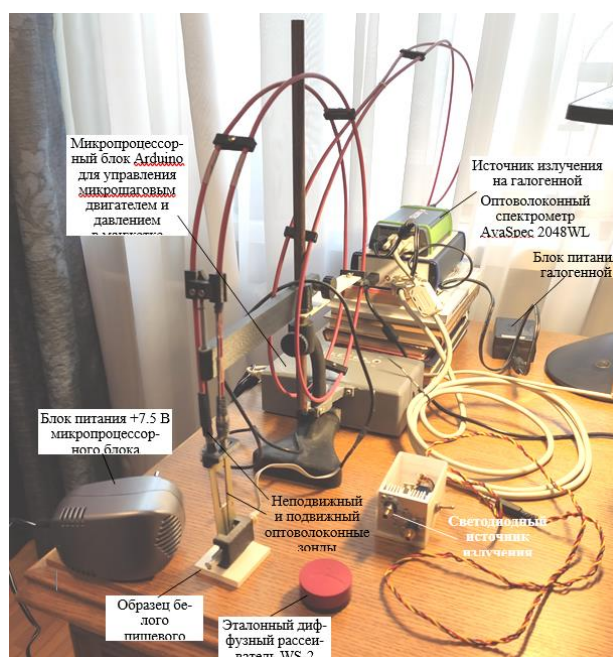


Рис. 1. Экспериментальная установка.

Перемещение подвижного зонда осуществляет микрошаговый двигатель, который управляется микропроцессором Arduino, который в свою очередь, как и спектрометр AvaSpec 2048WL, подключается к ПК или ноутбуку. Спектрометр с галогенной лампой является устройством, используемым для измерения спектральных характеристик материалов или образцов. Он основан на принципе разложения света на его составляющие длины волн, что позволяет получить информацию о спектре поглощения или отражения материала.

Блок управления шаговым двигателем питается от внешнего источника питания +7,5 В, а источник излучения на галогенной лампе – от внешнего источника +12 В с током до 2 А. Блок излучателей на основе светодиодов (содержит 2 светодиода – сверхяркий светодиод с белым цветом свечения и мощный инфракрасный светодиод) запитывается от блока управления шаговым двигателем и управляется программой medSpec.exe.

На Рис. 2 показана схема размещения торцов оптоволоконных наконечников и используемые в экспериментальных измерениях их положения (пунктиром).

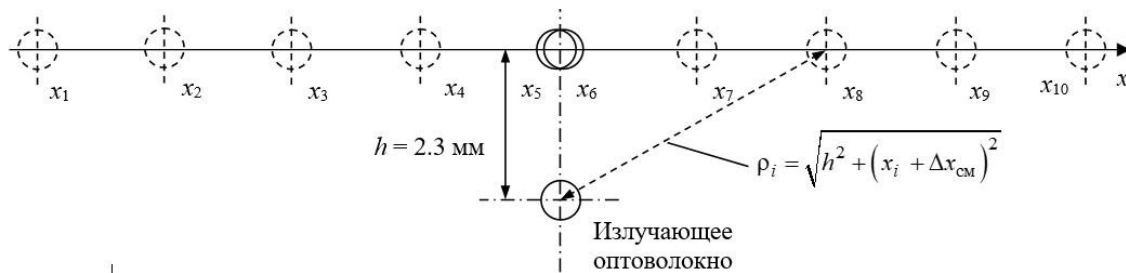


Рис. 2. Схема используемых положений торца подвижного приемного зонда относительно центра торца неподвижного излучающего оптоволоконного наконечника при наблюдении со стороны подвижного зонда.

2 Результаты и обсуждение. В ходе эксперимента было установлено, что необходимо тщательно выбирать набор расстояний, используемых между излучающим и принимающим зондами, чтобы удовлетворять условиям применимости диффузионного приближения. В результате работы были получены графики спектральных зависимостей 4-х образцов молочных продуктов (Рис. 3-6, а) и спектры для оценки применимости диффузионного приближения, на которых каждому положению наконечника подвижного зонда соответствует отдельная линия (Рис. 3-6, б).

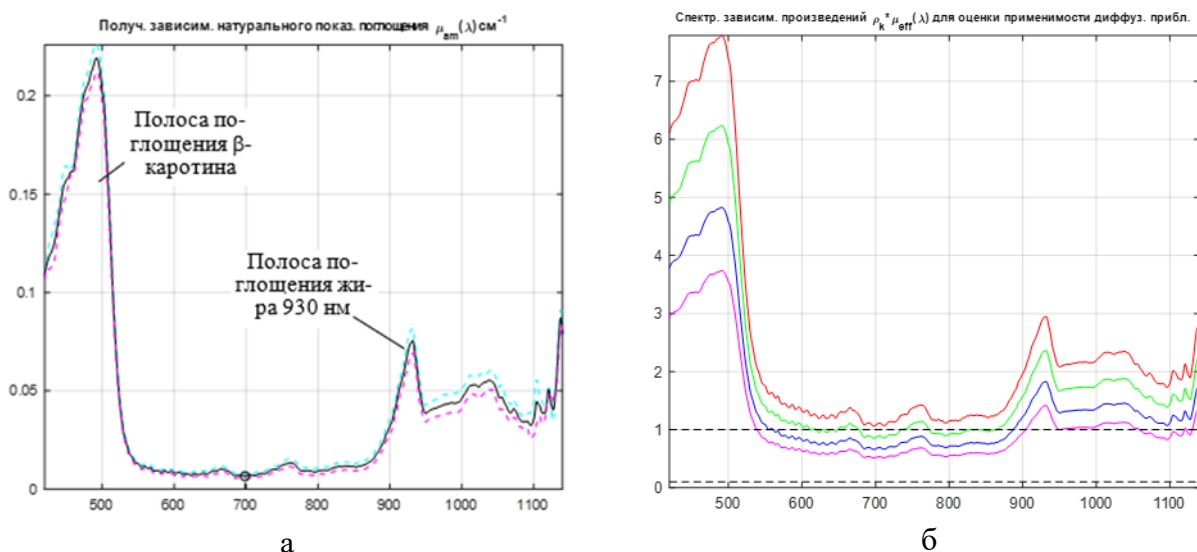


Рис. 3. Сливочное масло, 82% жирности.

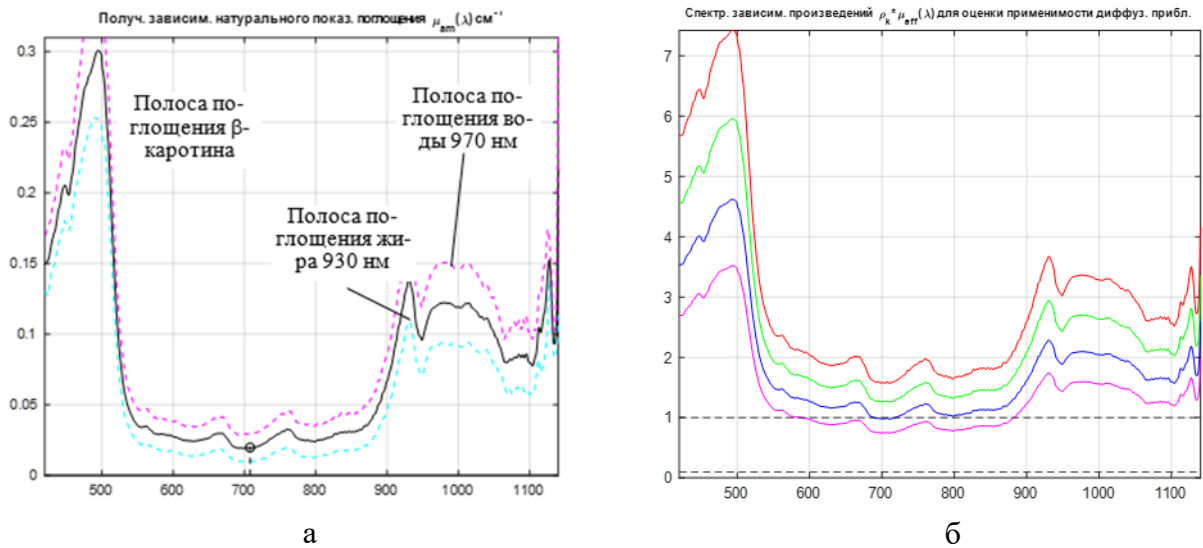


Рис. 4. Сливочное масло, 72% жирности.

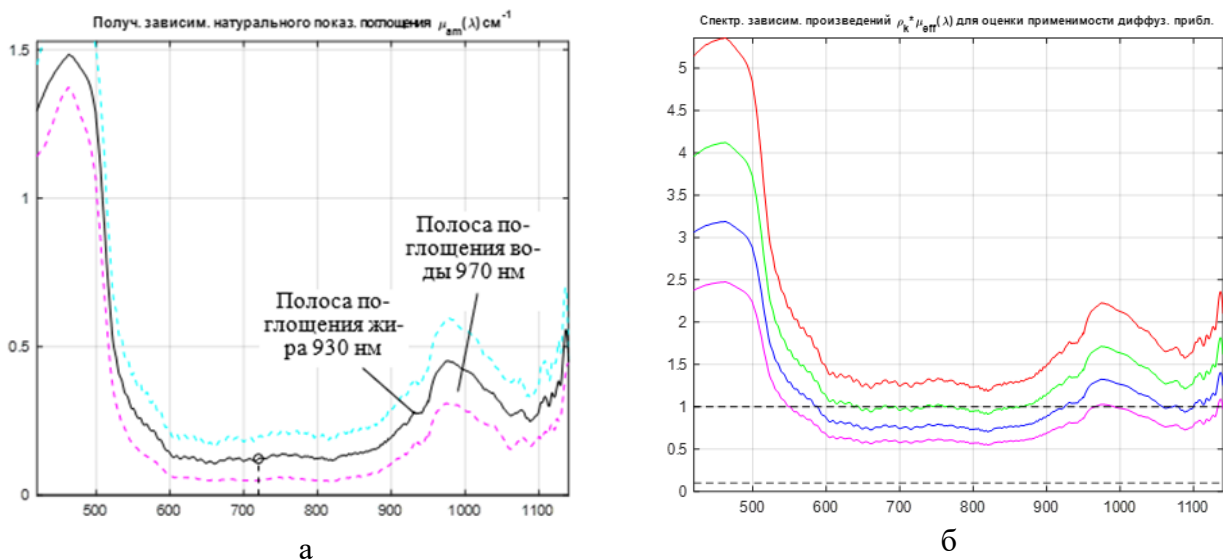


Рис. 5. Сыр Монастырский, 45 % жирности

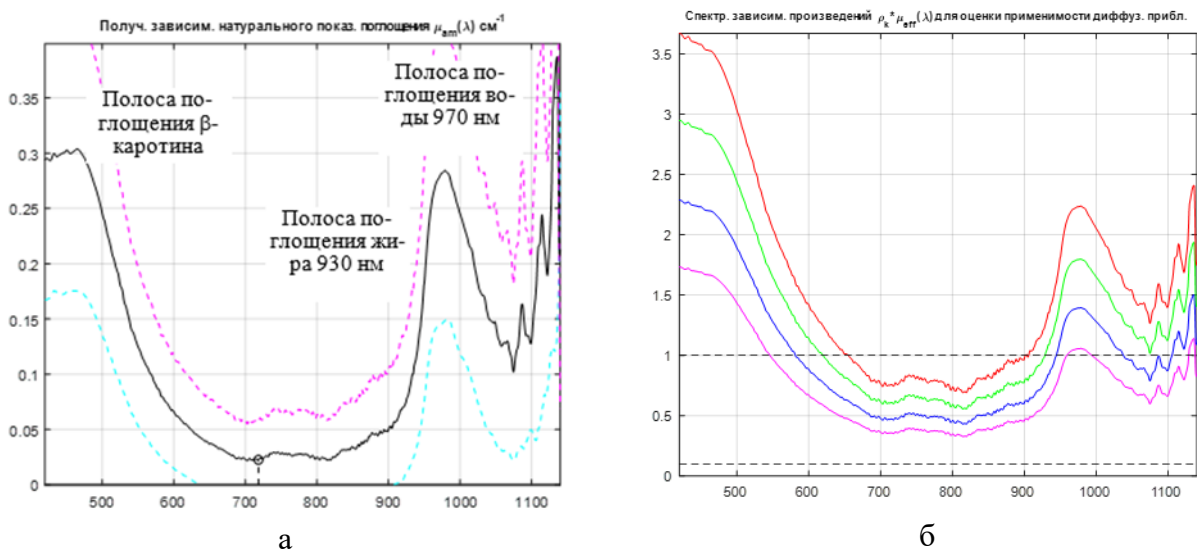


Рис. 6. Топлёное молоко.

Заключение. Проведены экспериментальные измерения спектров диффузного отражения нескольких молочных продуктов при помощи компьютеризированной спектральной установки, что позволяет получить конкретные данные о спектральных свойствах и характеристиках исследуемых образцов. По представленным спектрально-пространственным профилям на примере масла при разной степени жирности (82% и 72%) полоса поглощения сместилась за счёт изменения концентрации воды. Таким образом, по анализу спектров молочных продуктов появляется возможность определения содержания белков и углеводов, и, как следствие, установление свежести исследуемых образцов.

Литература.

1. Бёккер Ю. Спектроскопия. М.: Мир, 2009, 528 с.
2. Firago V., Hotra O., Sakovich I. Radiometric calibration of fiber optic spectrophotometers. In Proceedings of SPIE. Vol. 11045, Optical Fibers and Their Applications 2018; 1104516 (2019), 1-7. <https://doi.org/10.1117/12.2522540>
3. Lisenko S. A., Firago V.A., Kugeiko M.M., Kubarko A. I. Determination of structural and morphological parameters of human bulbar conjunctiva from optical diffusereflectance spectra // Journal of Applied Spectroscopy, 2016, Vol. 83, No. 4. P. 617-626.
4. Лысенко С.А. Методы оптической диагностики биологических объектов / Минск: БГУ, 214. – 231 с.

Поляризационные свойства двумерной дифракционной решетки на основе бинарной ориентации нематического жидкого кристалла

О.С. Кабанова, И.И. Рушнова

*Белорусский государственный университет, 220030 Минск, Беларусь
E-mail: Kabanovaos@bsu.by*

Введение. В последние два десятилетия дифракционные решетки на основе жидкокристаллических (ЖК) материалов демонстрируют большие успехи и привлекают внимание исследователей и инженеров во всем мире благодаря превосходным оптическим и поляризационно-селективным свойствам [1]. Одномерные дифракционные ЖК-структуры были всесторонне исследованы и успешно адаптированы к решению широкого круга задач современной фотоники. Однако развитие методов пространственного, фазового и поляризационного управления оптическими сигналами активно стимулирует разработку и создание многолучевых оптических устройств. В этой связи, переключаемые двумерные (2D) ЖК-решетки [2], обеспечивающие распределение и эффективную модуляцию входного сигнала по нескольким оптическим каналам, являются востребованными и конкурентоспособными на современном рынке. Цель работы – изготовление переключаемых 2D дифракционных решеток на основе пространственно-упорядоченных массивов микроразмерных ЖК-доменов с планарной и закрученной ориентациями директора.

1 Материалы и методы. Дизайн предлагаемых 2D решеток основан на перекрёстной сборке (наложении) двух одномерных ЖК-структур с бинарной ориентацией директора, сформированных на фоточувствительных токопроводящих подложках. В работе были использованы две геометрии бинарной ориентации директора, которые позволили сформировать двумерные массивы планарных и противоположно-закрученных ЖК-доменов с размерами порядка 10 мкм. На Рис. 1 приведены принципиальные схемы 2D ЖК-решеток, стрелками схематично обозначены направления ориентации директора жидкого кристалла в смежных доменах.

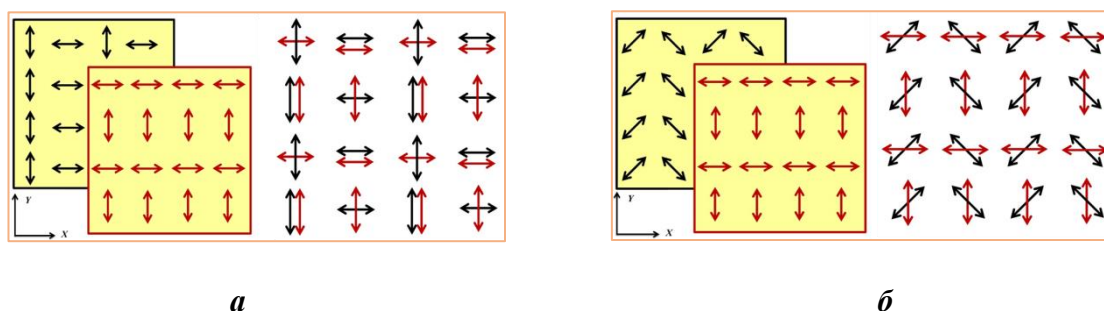


Рис. 1. Дизайн 2D решеток на основе массивов ЖК-доменов с планарной-ортогональной (а) и противоположно-закрученной (б) ориентациями директора.

Для формирования одномерных структур с заданной бинарной ориентацией директора использовалась технология текстурированной фотоориентации [3] азокрасителя AtA-2 [4] (разработка лаборатории «Материалы и технологии ЖК-устройств» ГНУ «Институт химии новых материалов НАНБ»). Методом перекрестной сборки двух текстурированных подложек были изготовлены стеклянные ячейки с толщиной воздушного зазора 20 мкм. Заправка ячеек нематическим жидким кристаллом ЖК 1282 реализовывалась в условиях изотропной фазы.

Методом поляризационной микроскопии были изучены изображения 2D ЖК-решеток, что позволило установить конфигурации директора в объеме слоя и подтвердить формирование упорядоченного двумерного массива ЖК-доменов.

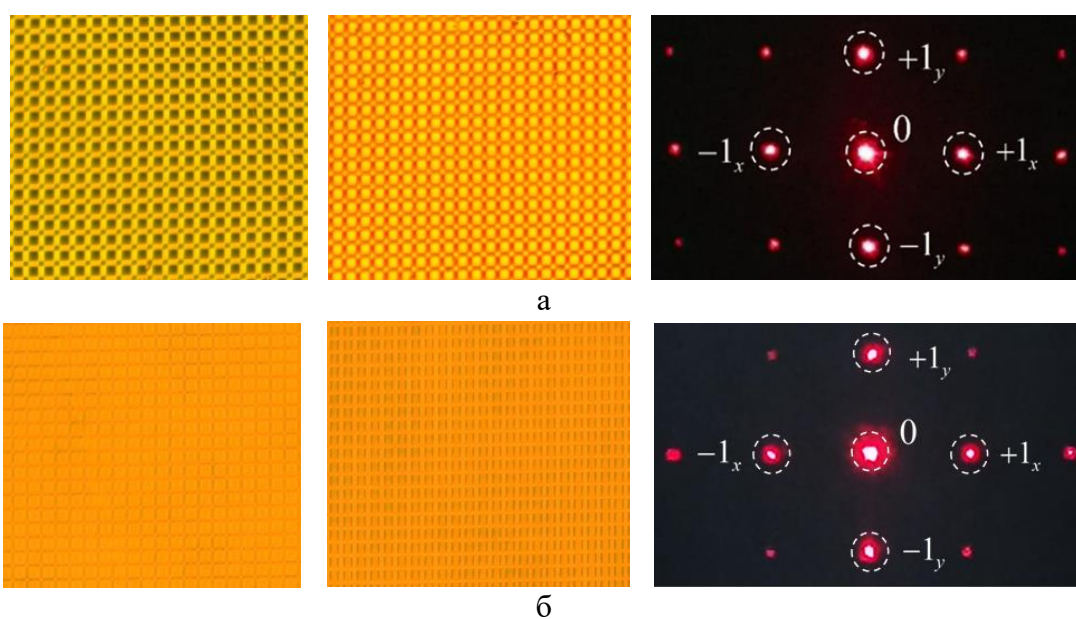


Рис. 2. Поляризационные микрофотографии и дифракционные картины 2D ЖК-решеток с планарной-ортогональной (а) и противоположно-закрученной (б) ориентациями директора в смежных доменах.

Для изучения поляризационных свойств двумерных решеток использовалась экспериментальная установка, включающая *He-Ne*-лазер генерирующий узконаправленный луч линейно поляризованного (вдоль оси OY) света с длиной волны 632,8 нм, ирисовую диафрагму, анализатор и фотодетектор, регистрирующий интенсивность дифрагированного в m -ый порядок излучения. Для определения состояния поляризации световых пучков использовался анализатор, который поворачивался в диапазоне $0^\circ \dots 360^\circ$ с шагом 10° .

2 Результаты. Изготовленные оптические структуры характеризуются бездефектной ориентацией жидкого кристалла и демонстрируют двумерную дифракционную картину с наличием максимумов по осям OX и OY (Рис. 2). На Рис. 3 приведены поляризационные диаграммы прошедшего и дифрагированных в 1-ые порядки вдоль пространственных осей OX

и OY световых пучков для обеих решеток. Линейно поляризованное вдоль оси OY излучение $He-Ne$ лазера направлялось перпендикулярно плоскости решеток. Изготовленные 2D ЖК-решетки реализуют поворот плоскости поляризации на некоторый угол как прошедшего (0-ой порядок), так и дифрагированных в первые порядки световых пучков (Рис. 3). В случае обеих решеток дифрагированные в 1-ый порядок световые пучки характеризуются большей степенью эллиптичности по сравнению с прошедшим световым пучком, что связано с величиной фазового набег в слое нематического жидкого кристалла. Для двумерной решетки на основе планарной-ортогональной бинарной ориентации директора жидкого кристалла прошедший и дифрагированные в 1-ый порядок световые пучки характеризуются ортогональными направлениями поляризации.

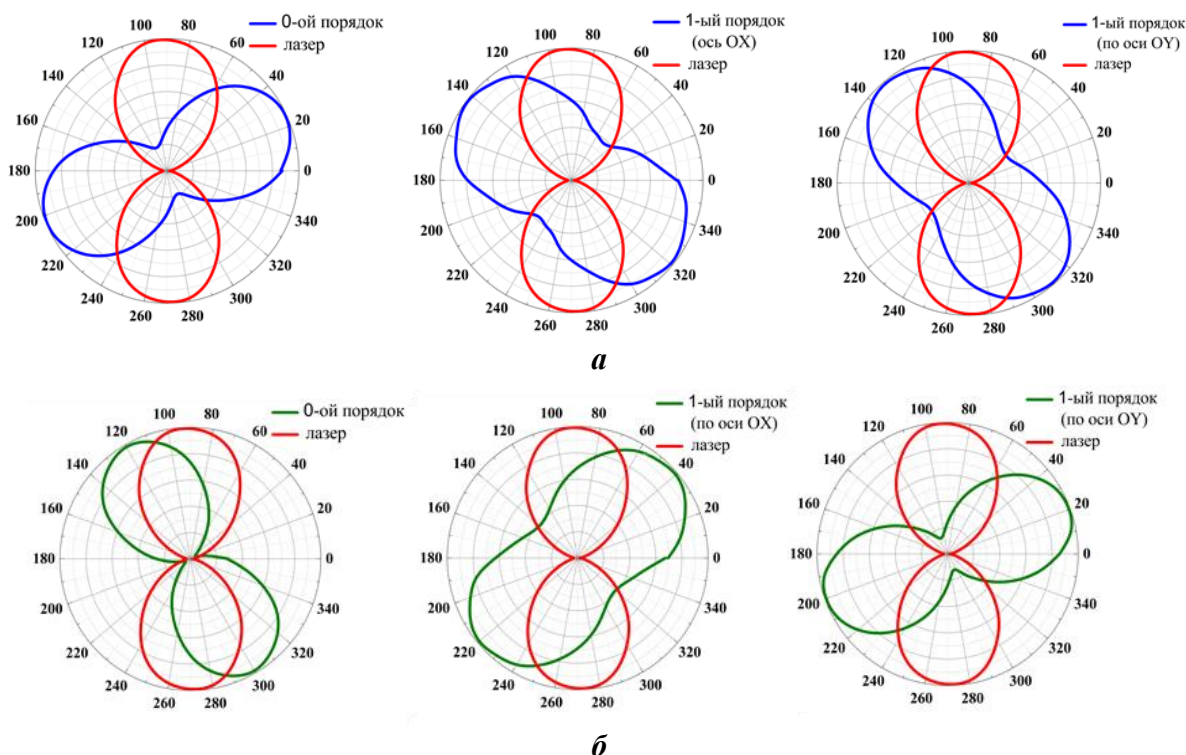


Рис. 3. Полярные поляризационные диаграммы прошедшего (0 порядок) и дифрагированных в первый порядок световых пучков для 2D ЖК решетки с планарной-ортогональной (а) и противоположно-закрученной (б) ориентациями директора в смежных доменах

Заключение. Изготовлены 2D дифракционные решетки на основе массивов ЖК-доменов с бинарной ориентацией директора. Методом поляризационной микроскопии установлено, что структуры характеризуется бездефектной ориентацией н жидкого кристалла, обеспечивающей формирование 2D фазовой решетки.

Величина параметра качества начальной ориентации жидкого кристалла по результатам эксперимента составила $q = 0,998$, что свидетельствует о высоком качестве ориентации и подтверждает оптимальность применения технологии текстурированной фотоориентации азокрасителя для создания дифракционных жидкокристаллических структур. Предлагаемые 2D решетки обеспечивают пространственно-поляризационное управление световыми пучками, что позволяет использовать их для решения современных задач фотоники.

Благодарности. Работа выполнена при поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований, грант БРФФИ №Ф23М-070.

Литература.

1. Huang S-Y, Huang B-Y, Kang C-C, Kuo C-T. / Diffraction and Polarization Properties of

- Electrically-Tunable Nematic Liquid Crystal Grating // *Polymers*. – 2020. – Vol. 12, № 9: 1929.
- Zuo K, Shi Y, Luo D. / A Review of Two-Dimensional Liquid Crystal Polarization Gratings // *Crystals*. – 2021. – Vol. 11, № 9:1015.
 - Chigrinov V, Sun J, Wang X. / Photoaligning and Photopatterning: New LC Technology // *Crystals*. - 2020. Vol. 10, № 4:323.
 - Mikulich V., Murauski A., Muravsky A., Agabekov V., Bezruchenko V. / Waterproof material for liquid crystals photoalignment based on azo dyes // *J. Soc. Inf. Displ.* - 2014.- Vol. 22. № 1. P. 199–203.

Применение методов машинного обучения в волоконно-оптических системах

А.С. Кудрявцев

Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси, 220072 Минск, Беларусь
E-mail: a.kudriavtsev@internet.ru

Введение. За последние несколько десятков лет значительно возросло использование волоконно-оптических систем связи. Они обеспечивают большую скорость и дальность передачи данных, дешевле и легче традиционных медных кабелей, имеют хорошую коррозионную стойкость и механическую прочность. Немаловажным является также отсутствие чувствительности к электрическим помехам и отсутствие помех между соседними линиями. Всё вышперечисленное в совокупности делает из волоконно-оптических систем связи достойного конкурента медным кабелям.

Волоконно-оптические системы связи – это системы коммуникаций, использующие в качестве носителя информационного сигнала электромагнитное излучение оптического (ближнего инфракрасного) диапазона и волоконно-оптические кабели как направляющие системы. Широкие возможности мультиплексирования и большие значения несущей частоты обеспечивают крайне высокую пропускную способность, многократно превышающую пропускную способность иных систем коммуникации. Текущий рекорд по скорости передачи данных через оптическое волокно составляет 22,9 петабит в секунду, что примерно в 20 раз превышает весь интернет-трафик в мире, передаваемый за секунду [1]. Однако, наряду с преимуществами, оптоволоконные системы коммуникаций имеют также ряд недостатков, в частности: относительная хрупкость, потери в изгибах и нелинейные эффекты. Для борьбы с нелинейными искажениями используются различные методы: цифровое обратное распространение (digital back-propagation, DBP) [2], методы, основанные на функциях Вольтерра [3], методы фазового сопряжения [4], методы машинного обучения [5] и другие. В этой работе будет рассмотрено применение метода машинного обучения для устранения нелинейных эффектов в волоконно-оптических системах связи. Машинное обучение – класс методов искусственного интеллекта, подразумевающий обучение некоторой модели на заданных данных для последующего решения определённой задачи. Причём сам алгоритм не запрограммирован непосредственно для решения этой задачи.

1 Математическая модель. Задача классификации состоит в получении категориального ответа на основе набора признаков, то есть отнесения объекта к определённому классу на основе его свойств. Одной из наиболее часто используемых техник машинного обучения для решения такого рода задач являются нейронные сети. В работе будут представлены результаты обучения полносвязной нейронной сети прямого распространения на датасете Ирисы Фишера (Fisher's Iris) пятью вариантами градиентного спуска: классическим, стохастическим, мини-батчами, с импульсом, мини-батчами с импульсом.

2 Результаты и обсуждение. Стохастический градиентный спуск – модификация градиентного спуска, в которой обновление параметров происходит не по сумме градиентов,

рассчитанной для тренировочной выборки, а по градиентам одного, случайно выбранного примера.

Вышеперечисленные варианты градиентного спуска были реализованы на языке программирования C++. Результаты работы градиентного спуска (функция GradientDescent(...)), стохастического градиентного спуска (функция StochasticGradientDescent(...)), градиентного спуска с мини-батчами (функция MiniBatchGradientDescent(...)), импульсного градиентного спуска (функция MomentumGradientDescent(...)) и импульсного градиентного спуска с мини-батчами (функция MomentumMiniBatchGradientDescent(...)) будут представлены ниже в работе в виде графиков ошибок (Рис. 1-4).

Обучаемая модель нейронной сети имела 5 слоёв с 4 нейронами на входном, 3 на выходном и 8 на скрытых слоях. Использовалась ReLU функция активации на скрытых слоях и сигмоидальная функция на выходном слое. Обучалась модель на датасете Ирисы Фишера (Fisher's Iris), где по четырём геометрическим признакам ириса он относится к одному из трёх классов. Датасет размером в 150 примеров был разбит на три набора: тренировочный набор (90 примеров), валидационный набор (45 примеров) и тестовый набор (15 примеров).

Для градиентного спуска были выбраны следующие параметры: скорость обучения 0.01, количество итераций 15000, затухание параметров веса 0.00001 (Рис. 1). Как видно из графика, в районе 4000 итерации модель начинает переобучаться – растёт валидационная ошибка. В результате тестирования модели были получены 14 правильных ответов из 15, что даёт точность 93%.

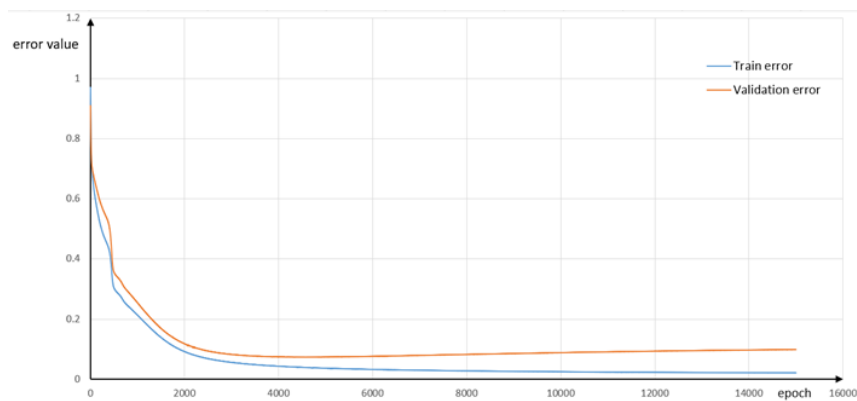


Рис. 1. Значения ошибок при обучении градиентным спуском.

Для стохастического градиентного спуска количество итераций было взято 10000, скорость обучения 0.05 (Рис. 2). График демонстрирует результат случайного выбора примера хаотическими скачками ошибок, что также обуславливает довольно шумное изменение параметров модели. Точность составила те же 93%, что обусловлено малым объёмом тестовой выборки и датасета в целом.

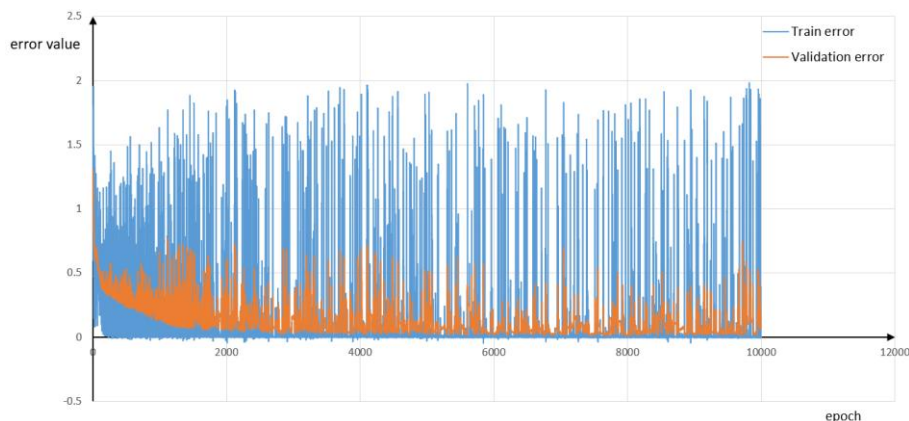


Рис. 2. Значения ошибок при обучении стохастическим градиентным спуском.

Для градиентного спуска мини-батчами размер батча был выбран 16, количество итераций 5000 (Рис. 3). Модель дала правильные ответы на все примеры из тестовой выборки. Также видна заметно меньшая амплитуда скачков ошибок в сравнении с прошлым методом.

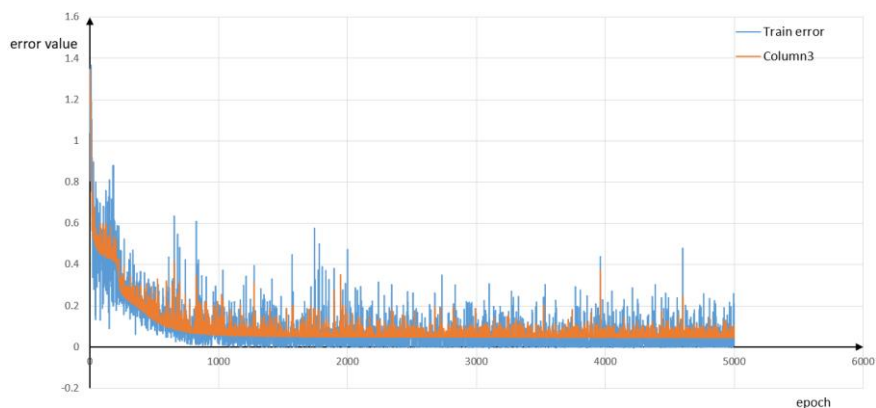


Рис. 3. Значения ошибок при обучении импульсным градиентным спуском.

Обучение импульсным градиентным спуском выполнялось со скоростью 0.01, число итераций 1000, значение импульса 0.95. Значения ошибок приведены на Рис. 4, модель показала точность 93%.

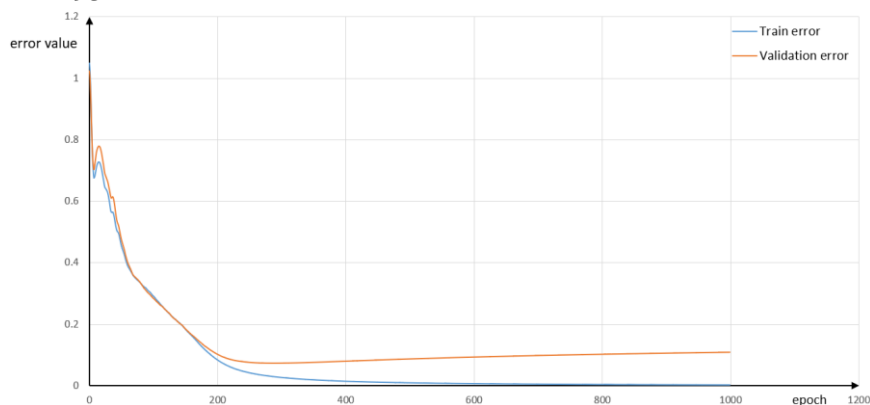


Рис. 4. Значения ошибок при обучении импульсным градиентным спуском.

Последний алгоритм – импульсный градиентный спуск мини-батчами. Размер батча 16, скорость, значение импульса и количество итераций – те же (Рис. 5), точность модели 93%.

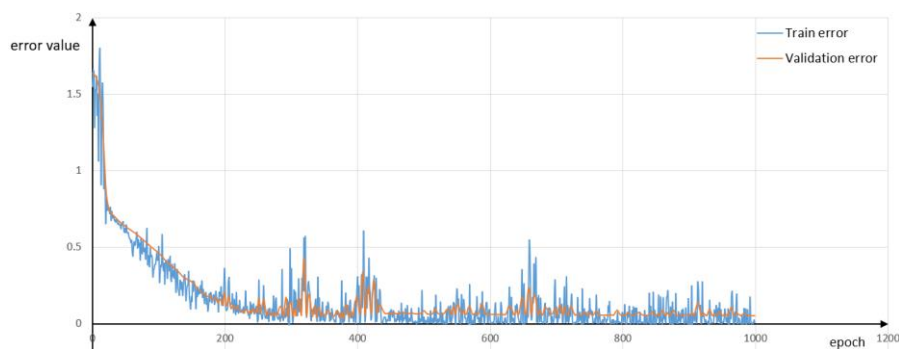


Рис. 5. Значения ошибок при обучении импульсным градиентным спуском мини-батчами.

Анализируя полученные результаты, можно сказать, что они сходятся с теорией: градиентный спуск самый медленный по сходимости (примерно 5000 итераций), далее идут его стохастические вариации (2000 для стохастического и 1500 для мини-батча) и самые лучшие результаты по скорости сходимости демонстрируют инерционные модификации – 300 итераций. Также, даже с учётом малой тестовой выборки, была достигнута высокая точность

классификации модели – более 90%, что доказывает эффективность применения данных методов в задачах классификации.

Заключение. На языке C++ реализована нейронная сеть, при помощи которой решалась задача классификации. Сеть обучалась методом градиентного спуска и несколькими его модификациями на наборе данных Ирисы Фишера. Было представлено наглядное сравнение скорости сходимости используемых методов. Установлено, что градиентный спуск самый медленный по сходимости (примерно 5000 итераций), далее идут его стохастические вариации (2000 для стохастического и 1500 для мини-батча) и самые лучшие результаты по скорости сходимости демонстрируют инерционные модификации – 300 итераций. Во всех случаях получена точность обучения не хуже 93%.

Литература.

1. National Institute of Information and Communications Technology (NICT) [Electronic resource]. – Mode of access: <https://www.nict.go.jp/en/index.html>. Date of access: 14.12.2023.
2. Reduced complexity digital back-propagation methods for optical communication systems / A. Napoli [et al] // Journal of Lightwave Technology. – 2014. – Vol. 32, № 7. – P. 1351–1362.
3. Guiomar, F.P. Simplified volterra series nonlinear equalizer for polarization-multiplexed coherent optical systems / F.P. Guiomar, A.N. Pinto // Journal of Lightwave Technology. – 2013. – Vol. 31, № 23. – P. 3879–3891.
4. Capacity limits of systems employing multiple optical phase conjugators / D. Ellis [et al] // Opt. Express. – 2015. – Vol. 23, № 16. – P. 20381–20393.
5. Machine learning techniques in optical communication / D. Zibar [et al] // Journal of Lightwave Technology. – 2016. – Vol. 34, № 6. – P. 1442–1452.

Электрически управляемая жидкокристаллическая линза Френеля для определения топологического заряда фазового сингулярного пучка

Е.П. Пантелеева, Е.А. Мельникова

Белорусский государственный университет, 220030 Минск, Беларусь

E-mail: pantsialevevakate@gmail.com

Сочетание уникальных физических характеристик и возможности эффективного электрического управления анизотропией предопределило использование нематических жидких кристаллов (НЖК) для создания новых относительно простых, компактных, надёжных и недорогих оптических устройств плоской оптики [1].

В настоящее время одними из актуальных направлений исследований в области фотоники являются разработка жидкокристаллических линз с улучшенными характеристиками [2] и разработка простых в реализации, недорогих методов определения знака и абсолютного значения топологического заряда сингулярного светового пучка [3] в связи с их активным применением в квантовой коммуникации, микроманипулировании и др.

В настоящей работе на основе метода фотоориентации азокрасителя AtA-2 [4] разработана, изготовлена и исследована нематическая твист-планарно ориентированная ЖК линза Френеля. Экспериментально продемонстрирована возможность работы НЖК элемента в качестве электрически управляемой линзы, обеспечивающей фокусировку излучения в видимом и ближнем ИК диапазоне. Предложен новый простой метод определения топологического заряда сингулярного светового пучка.

Бинарная кольцевая топология ориентации директора НЖК, представляющая собой доменную структуру с чередующимися планарно и твист ориентированными кольцевыми зонами Френеля, задавалась посредством двойного экспонирования тонких (порядка 30 нм) плёнок азокрасителя AtA-2 излучением на длине волны 450 нм со взаимно перпендикулярными направлениями плоскости поляризации без и с использованием

амплитудной маски (зонная пластинка Френеля). В созданном элементе слой жидкого кристалла представляет собой анизотропную дифракционную линзу Френеля с чередующимися доменами ориентации директора (Рис. 1).

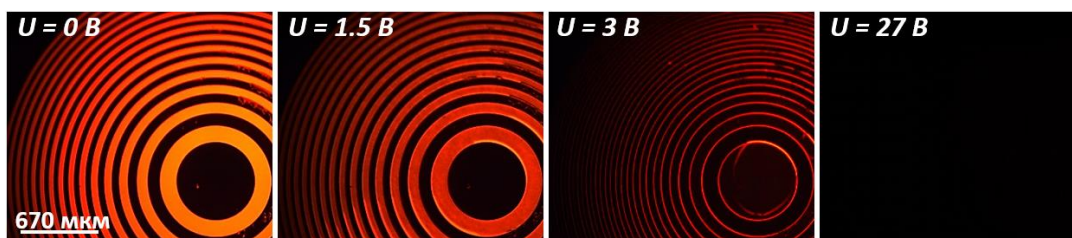


Рис. 1. Микрофотографии твист-планарного элемента в поляризационном микроскопе (поляризаторы скрещены).

Рис. 1 иллюстрирует возможность изменения фокусирующих свойств динамической ЖК линзы посредством подачи низких рабочих напряжений (пороговое напряжение использованного НЖК ВИН-7 $U_t = 1,1$ В, оптический порог $U_{op} = 1,5$ В). При подаче напряжения ниже порогового значения (в диапазоне $0 \div 1,5$ В) структура представляет собой амплитудную тонкую решётку во всём оптическом диапазоне и обладает постоянными фокусирующими свойствами (плотность мощности при использовании НЖК линзы увеличивается в 288 раз). Увеличение управляющего напряжения вызывает стремление директора ЖК переориентироваться гомеотропно (переход Фредерикса), модификацию амплитудной решётки в фазовую структуру с изменением фокусирующих свойств (Рис. 2). Максимальная фокусировка излучения достигается при оптимальном значении внешнего управляющего напряжения порядка 3 В при толщине жидкокристаллического слоя 20 мкм.

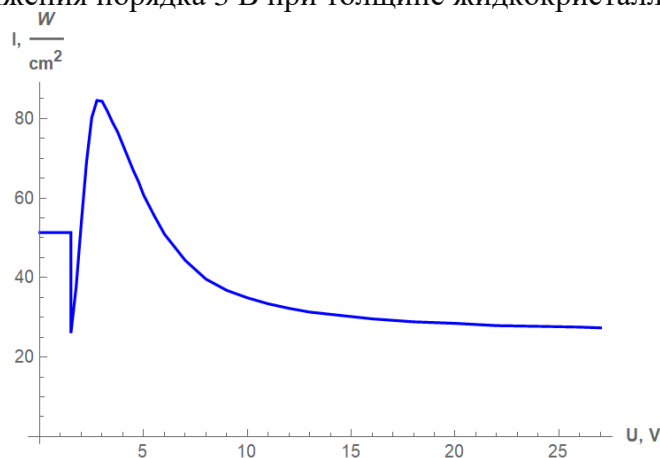


Рис. 2. График зависимости плотности мощности от напряжения.

Картина интерференции излучения, прошедшего в направлениях 0 и -1 порядков дифракции оптического вихря на краю анизотропной структуры, содержит характерную «подкрученную вилку» (Рис. 3), количество разветвлений которой позволяет определить абсолютную величину топологического заряда, а направление закрутки однозначно определяет знак.

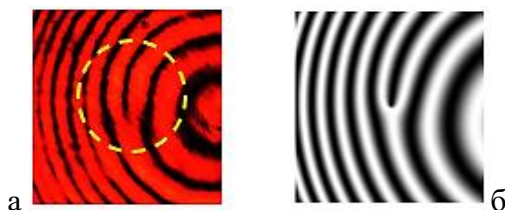


Рис. 3. Экспериментальная (а) и теоретическая (б) картины интерференции 0 и -1 порядков дифракции сингулярного светового пучка с топологическим зарядом $l = +1$.

Теоретически и экспериментально были определены топологические заряды оптических вихрей $l = \pm 1 \dots \pm 8$.

Литература.

1. Liang / Achromatic polymer-dispersed liquid crystal lens with diffractive-refractive hybrid structure // Materials Research Express. – 2023. – Vol. 10, № 4. – P. 1-9.
2. Algorri / Recent Advances in Adaptive Liquid Crystal Lenses // Crystals. – 2019. – Vol. 9, № 5. – P. 272-292.
3. Shengwei / Determining topological charge based on an improved Fizeau interferometer // Optics Express. – 2019. – Vol. 27, № 9. – P. 12774-12779.
4. Mikulich V.S. / Influence of methyl substituents on azodye photoalignment in thin films // Appl. Spectr. – 2016. – Vol. 83, № 1. – P. 115-120.

Численное моделирование процесса плавления тонких металлических пленок в рамках двухтемпературной модели

С.А. Липский, О.Г. Романов

*Белорусский Государственный Университет, Минск, Беларусь
E-mail: LipskiSA@bsu.by*

Теоретическим методом исследования взаимодействия сверхкороткого лазерного излучения с веществом является известная двухтемпературная модель [1]. Лазерный свет поглощается в металлах электронами зоны проводимости в течение нескольких фемтосекунд. После быстрой термализации лазерной энергии в зоне проводимости электроны могут быстро диффундировать и тем самым переносить свою энергию вглубь металла (в течение нескольких фемтосекунд). При этом электроны передают свою энергию ионной решетке. Эта модель описывает эволюцию повышения температуры из-за поглощения лазерного импульса внутри твердого тела и применяется для моделирования физических явлений, таких как передача энергии между электронами и решеткой, происходящая во время взаимодействия мишени с лазером. Однако, когда происходит фазовый переход от твердого тела к жидкости, следует учитывать решеточную теплопроводность. В рамках такого подхода записываются следующие трехмерные уравнения для температур электронного газа и ионной решетки:

$$C_e(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial t} = k_e(T_e) \left(\frac{\partial^2 T_e}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T_e}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T_e}{\partial z^2} \right) + Q_s - G(T_e)(T_e - T_l) \tag{1}$$

$$C_l(T_l) \frac{\partial T_l}{\partial t} = k_l \left(\frac{\partial^2 T_l}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T_l}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T_l}{\partial z^2} \right) + G(T_e)(T_e - T_l) \tag{2}$$

где t – время, (x, y, z) – пространственные координаты, C_e – электронная теплоемкость, C_l – теплоемкость решетки, k_e – электронная теплопроводность, k_l – теплопроводность решетки, T_e – температура электронов, T_l – температура решетки, G – коэффициент электрон-решеточной связи, Q_s – лазерный источник тепла. Величина Q_s определяется источником энерговыделения:

$$Q_s = k_{abs} I_0 \frac{t}{\tau_p} \exp\left(-\frac{t}{\tau_p}\right) \exp(-k_{abs} z) \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{r_0^2}\right),$$

где I_0 – интенсивность светового пучка, κ_{abs} – коэффициент поглощения среды, τ_p – длительность лазерного импульса, r_0 – радиус пучка. Для моделирования плавления металлов все электронные теплофизические свойства должны быть справедливы в широком диапазоне температур. На Рис. 1 приведены температурные зависимости [2] электронной теплоемкости, коэффициента электрон-решеточной связи, теплоемкости решетки и теплопроводности электронного газа для золота. Данные для C_e и G были обработаны методом сплайн-интерполяции для того, чтобы получить значения при температуре от 300 до 50250 Кельвин.

Электронная теплопроводность, предложенная Анисимовым [3,4], имеет вид

$$k_e(T_e) = K g_e \frac{(g_e^2 + 0.16)^{5/4} (g_e^2 + 0.44)}{(g_e^2 + 0.092)^{1/2} (g_e^2 + b g_l)} \quad (3)$$

где $g = k_B T_e / \varepsilon_F$ и $g_l = k_B T_l / \varepsilon_F$, параметры K и b – константы, зависящие от материала и их можно определить с помощью тождеств: $v_F^2 \gamma / 3 = K * 0.147 A * \varepsilon_F / k_B$ и $b = B k_B / A \varepsilon_F$, где k_B – постоянная Больцмана, v_F – скорость Ферми, ε_F – энергия Ферми, A и B – коэффициенты пропорциональности между частотой электрон-электронного и электрон-фононного столкновений, γ – коэффициент пропорциональности между теплоемкостью и температурой электронного газа. Для чистых металлов k_l намного меньше k_e , поскольку свободные электроны проводят большую часть тепла. В данной работе k_l берется равным как 1% от электронной теплопроводности при температуре 300 Кельвин. Чтобы учесть температурную зависимость теплоемкости ионной решетки был использован интеграл [5], который имеет вид:

$$C_l = 9 n_a k_B \left(\frac{T_l}{T_D}\right)^3 \int_0^{\frac{T_D}{T_l}} \frac{x^4 \exp(x)}{[\exp(x) - 1]^2} dx \quad (4)$$

где n_a – число атомов в единицу объема, T_D - температура Дебая. Этот интеграл рассчитывали методом Гаусса-Кристоффеля. Поскольку в данной работе рассматривается процесс плавления металла в рамках двухтемпературной модели, то согласно ей происходит разрыв ионной решетки. В нашем исследовании фазовый переход материала моделируется методом сглаживания фронта плавления. Суть метода заключается в том, что поверхность плавления материала размазывается в пространстве в определенном диапазоне температур ($T_m \pm \Delta T$). Теплоемкость ионной решетки в зависимости от температурного интервала имеет следующий вид:

$$C = \left\{ \begin{array}{l} C_l, T_l < (T_m - \Delta T) \\ C_l + \frac{H_m \rho}{2 \Delta T}, (T_m - \Delta T) \leq T_l \leq (T_m + \Delta T) \\ C_l, T_l > (T_m + \Delta T) \end{array} \right\} \quad (5)$$

где H_m – скрытая теплота плавления, ρ – плотность металла, T_m – температура плавления металла. Отклонение температуры ΔT принималось равным 1 К.

Поставленная задача (1)-(2) была решена с помощью явной конечно-разностной схемой Саульева с использованием температурных зависимостей величин (3)-(5). При расчетах использовалась сетка $100 \times 100 \times 250$. Размерные значения шага по пространству $dx=dy=10$ мкм, $dz=4$ нм, шага по времени $dt=1,2345679$ фс. В качестве источника лазерного излучения был выбран гауссов пучок с радиусом 10^{-4} м, интенсивностью $2,5 * 10^{14}$ Вт/м² и длительностью импульса 1 пс. На Рис. 1а, б представлены рассчитанные пространственные распределения

температур электронного газа (T_e) и ионной решетки (T_i) в Кельвинах в продольном сечении (xz) для золота в трех моментах времени. Как видно за время действия лазерного импульса происходит, нагрев электронной подсистемы и передача энергии в ионную подсистему. Моменты времени $t = 2500$ фс соответствует максимальной температуре электронного газа, $t = 9000$ фс – максимальной температуре ионной решетки, $t = 74000$ фс – моменту кристаллизации решетки.

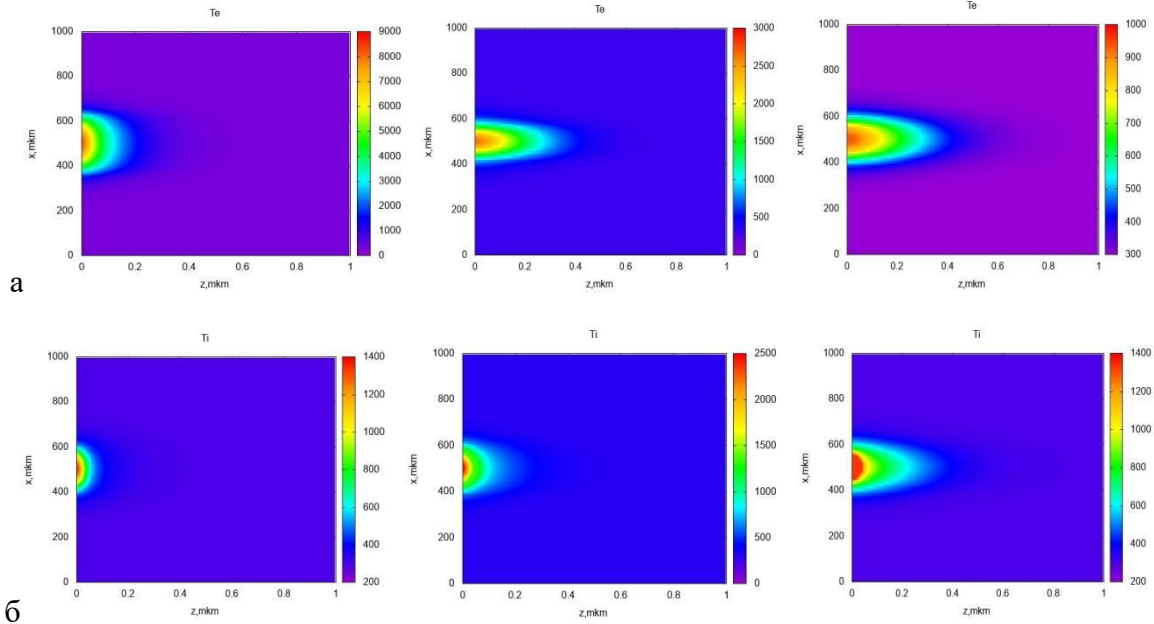


Рис. 1. Пространственное распределение температуры электронного газа (а), температуры ионной решетки (б) в золоте в сечении, содержащем ось распространения гауссового светового пучка, в моменты времени $t = 2500$ фс, 9000 фс, 74000 фс от начала действия лазерного импульса.

На Рис. 2 изображено изменение температур электронов и решетки со временем на поверхности золота в результате облучения одиночным лазерным импульсом.

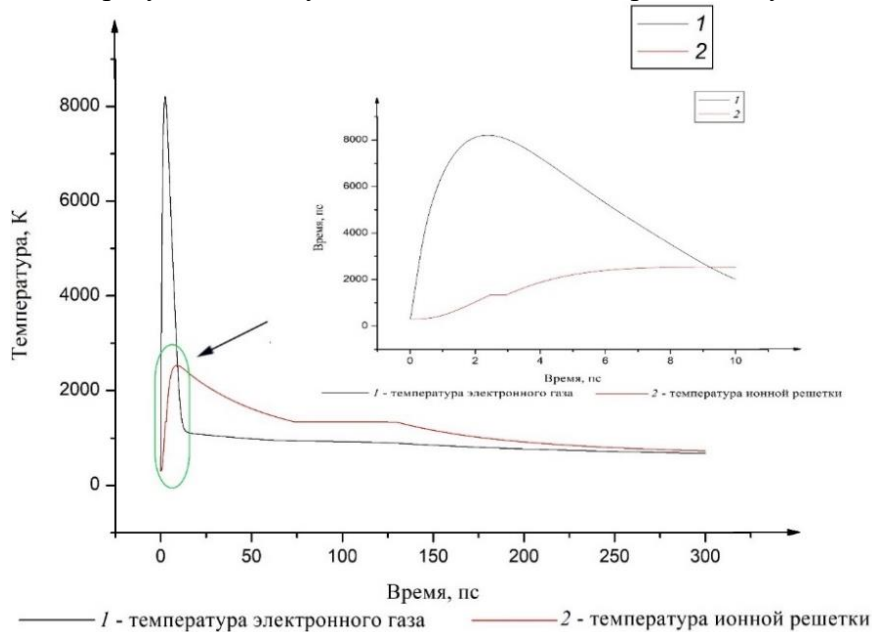


Рис. 2. Временная эволюция температур электронной и решеточной подсистем на поверхности золотой мишени.

Видно, что электронная температура растет гораздо быстрее, чем температура решетки. Наблюдаемое более быстрое изменение температуры электронов по сравнению с решеточной подсистемой обусловлено тем, что теплопроводность электронов гораздо больше, чем решетки. Этот рисунок также показывает, что электронная и решеточная подсистемы достигают теплового равновесия за ~ 300 пс. Температура решетки достигает максимального значения $\sim 2,5 \times 10^3$ К через 9 пс после облучения лазерным импульсом, в то время как максимум температуры электронного газа составляет $\sim 8 \times 10^3$ К через 2,5 пс. Длительность процесса кристаллизации составляет ~ 56 пс.

Литература.

1. С.И. Анисимов, Я.А. Имас, Г.С. Романов, Ю.В. Ходыко. Действие излучения большой мощности на металлы. М.: Наука, 1970. 272 с.
2. Zhibin Lin, Leonid V. Zhigilei. Electron-phonon coupling and electron heat capacity of metals under conditions of strong electron-phonon nonequilibrium. PHYSICAL REVIEW B 77, 2008; 17; 075133
3. S. I. Anisimov and B. Bethred, On the theory of ultrashort laser pulse interaction with a metal. SPIE Vol. 3093, 1997; 192-203
4. B. Rethfeld, D. S Ivanov, M. E Garcia and S. I Anisimov. Modelling ultrafast laser ablation. J. Phys. D: Appl. Phys. 50 (2017) 193001; 39 p.
5. Ewa Majchrzak, Jolanta Poteralska, Two-temperature microscale heat transfer model. Part II: Determination of lattice parameters, Scientific Research of the Institute of Mathematics and Computer Science, 2010, Volume 9, Issue 1, pages 109-119.

Фантомные резонансы в оптоэлектронном искусственном импульсном нейроне

Н.В. Лахмицкий, В.Н. Чижевский,

*Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси, 220072 Минск, Беларусь
E-mail: nikita7828@gmail.com, vnc@dragon.bas-net.by*

Введение. В данной работе представлены результаты экспериментального исследования явления фантомного стохастического и фантомного вибрационного резонансов в искусственном импульсном нейроне (ИИН) на основе вертикально излучающего лазера (ВИЛ) и однофотонного лавинного фотодиода (ОЛФД). ИИН представляет собой нелинейную пороговую систему, имитирующую основные свойства биологического нейрона [1]. Фантомный резонанс - это явление характеризующиеся немонотонной зависимостью отклика системы на фундаментальной частоте отсутствующей во входном сигнале, от дисперсии добавочного шума или амплитуды высокочастотного (ВЧ) сигнала при подаче на вход нелинейной системы подпорогового сигнала, состоящего только из ультра-гармоник фундаментальной частоты. Это явление было обнаружено во многих нелинейных системах [2,3], а также исследовано на математических моделях [4]. Недавно было показано, что в ИИН наблюдается явление стохастического и вибрационного резонансов для периодических сигналов [5,6]. Целью данной работы является исследование основных закономерностей проявления фантомного стохастического и вибрационный резонансов в ИИН.

1 Эксперимент. В эксперименте использовался ИИН, состоящий из ВИЛ, генерирующего на длине волны 850 нм с порогом генерации 1.85 В, оптического ослабителя, детектора одиночных фотонов (ID-100 SMF-20), работающего в автономном режиме с активной системой гашения лавины и защитой от засветки. Детектор имел частоту темновых отсчетов 4 Гц и мертвое время 45 нс. Выходной прямоугольный импульс детектора имел длительность 10 нс и амплитуду около 2 В. На ИИН подавался периодический сигнал, представляющий собой сумму двух синусоидальных сигналов с частотой 200 и 300 кГц,

Суммарный сигнал был нормирован на диапазон значений от 0 до 1, амплитуда которого умножалась на амплитуду A_d . К этому сигналу добавлялся Гауссов шум со среднеквадратичным отклонением σ , либо ВЧ синусоидальный сигнал с частотой 20 МГц и амплитудой A_m . Измерения проводились при помощи USB осциллографа В-321 (Унитехпром БГУ) с частотой выборки 200 МГц, и полосой пропускания 300 МГц, сопряженного с компьютером для последующей обработки сигналов по разработанным программам. Для задания входного сигнала, шума и ВЧ сигнала использовался генератор сигналов произвольной формы Handyscope 5 (TiePie) с частотой ЦАП 200 МГц.

Для количественного описания фантомного резонанса использовался отклик на фантомной частоте, определяемый как модуль Фурье-образа временного выходного сигнала с ИИН. Одновременно вычислялось соотношение сигнал/шум как:

$$SNR = 20 * \lg\left(\frac{R}{R_n}\right), \quad (1)$$

где R – отклик ИИН на фантомной частоте, R_n – интерполированный уровень шума на этой же частоте. Для исследования эффектов синхронизации дополнительно анализировалась плотность вероятности меж-импульсных интервалов последовательности выходных импульсов с ИИН.

2 Результаты и их обсуждение. Вначале рассмотрим результаты исследования стохастического резонанса. При отсутствии добавочного шума ИИН не имеет отклика на фантомной частоте, поскольку детерминированный сигнал (1) не превышает порог генерации. При незначительном добавлении шума, отклик ИИН имеет выраженные серии коротких импульсов (“пачек”) (Рис.1,а). Внутри данных пачек импульсов, последние распределены случайно в пределах времени пересечения порога генерации. На данном рисунке также видно, что период следования серий импульсов равен 10 мкс, что соответствует фантомной частоте 100 кГц. При дальнейшем увеличении дисперсии добавочного шума (Рис.1,б, в) наблюдается появление дополнительных серий импульсов с той же частотой, сдвинутой на треть периода (Рис. 1,б). Это объясняется тем, что 2-й локальный максимум входного сигнала с добавлением шума пересекает порог генерации. Если продолжать увеличивать дисперсию шума, то периодическая структура станет исчезать (Рис.1,г).

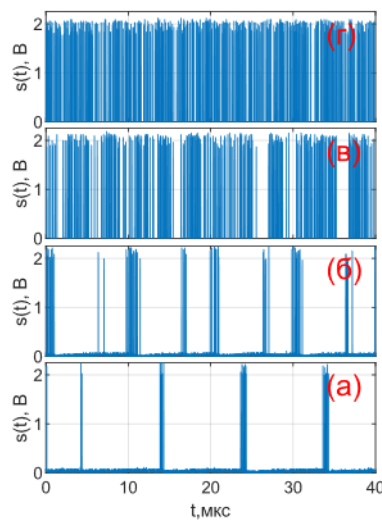


Рис. 1. Временная динамика выходных импульсов с ИИН в зависимости от дисперсии добавленного шума при амплитуде входного сигнала $A_d = 1,8$ В при пороге генерации 1,85 В, (а) $\sigma^2=0,04$ В², (б) $\sigma^2=0,16$ В², (в) $\sigma^2=1,96$ В², (г) $\sigma^2=8,41$ В²

Спектр выходного сигнала имеет 3 явно выраженных пика на частотах 100, 200, 300 кГц, амплитуда которых увеличивается с ростом дисперсии шума. Также с увеличением дисперсии шума увеличивается значение спектральной плотности выходного сигнала на 3-х частотах. Это объясняется большим числом импульсов внутри “пакета” импульсов. При

дальнейшем увеличении дисперсии шума видно (Рис. 2, в-г), что спектральная компонента на фантомной частоте уменьшается. При этом спектральные компоненты входящие во входной сигнал остаются неизменными.

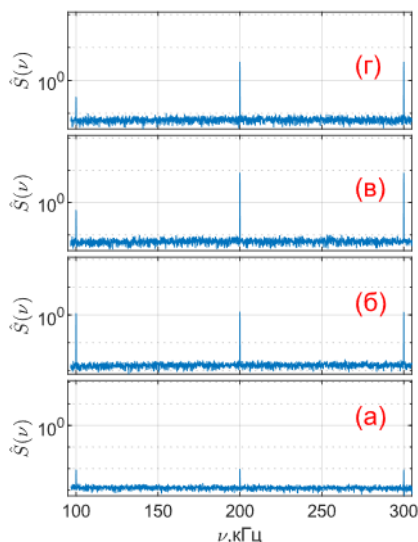


Рис. 2. Амплитуда спектра выходного сигнала ИИН в зависимости от дисперсии добавленного шума при амплитуде входного сигнала $A_d = 1,8$ В при пороге генерации. 1.85 В, (а) $\sigma^2=0,04$ В², (б) $\sigma^2=0.16$ В², (в) $\sigma^2=1.96$ В², (г) $\sigma^2=8.41$ В²

На Рис. 3 представлены результаты исследования зависимостей отклика ИИН от дисперсии шума для различных амплитуд входного сигнала.

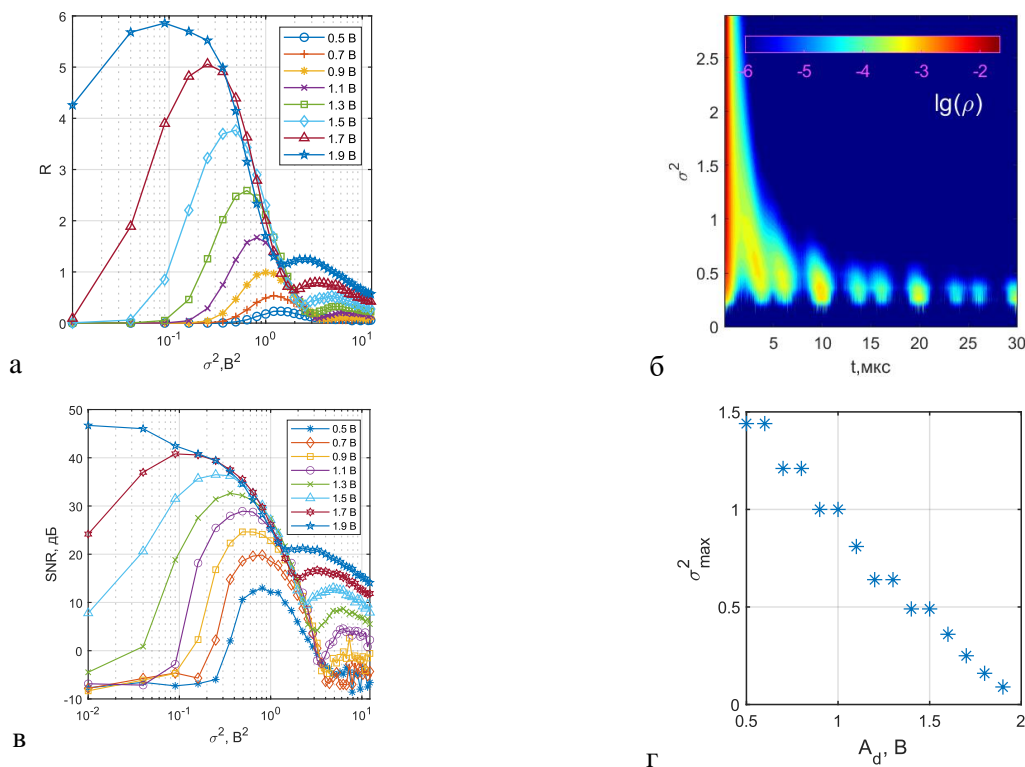


Рис. 3. Значение отклика ИИН, в зависимости от дисперсии добавочного шума для различных амплитуд входного сигнала (а). Контурный график плотности вероятности меж импульсных интервалов от времени и от дисперсии шума при амплитуде входного сигнала 1 Вольт (б). Зависимость соотношения сигнал/шум на фантомной частоте от дисперсии добавочного шума (в). Зависимость значения дисперсии добавочного шума, при котором достигается максимальное значение отклика на фантомной частоте от амплитуды подпорогового сигнала (г)

На Рис.3,а наблюдается немонотонная зависимость отклика ИИН от дисперсии шума. Это свидетельствует о наличии явления фантомного стохастического резонанса в ИИН. Увеличение плотности вероятности меж-импульсных интервалов во временных областях кратных 10 мкс также свидетельствует о проявлении фантомной частоты. С увеличением амплитуды периодического сигнала A_d увеличивается максимальное значение отклика и его сдвиг, что также показано на Рис.3, а, г. Это характерно для систем с порогом срабатывания. На Рис.3,в немонотонная зависимость соотношения сигнал/шум также свидетельствует о проявлении фантомного резонанса. Следует отметить, что при амплитуде $A_d = 1,9$ В. входной сигнал в максимуме превышает порог генерации лазера (1,85 В) без добавления шума, об этом свидетельствует Рис. 3,в.

Аналогичные исследования были проведены с использованием ВЧ сигнала вместо шума. На Рис. 4, 5 представлены результаты исследования фантомного вибрационного резонанса. На Рис.4 наблюдается явно выраженное линейное смещение оптимальной амплитуды ВЧ сигнала. как и в случае со стохастическим фантомным резонансом характерно для пороговых систем.

На Рис.5,в диапазоне времени 10 мкс наблюдается увеличение плотности вероятности меж-импульсных интервалов. Это свидетельствует о том, что импульсы идут серией, с промежутком времени 10 мкс. Здесь также можно выделить оптимальную амплитуду ВЧ сигнала около 1,63 В.

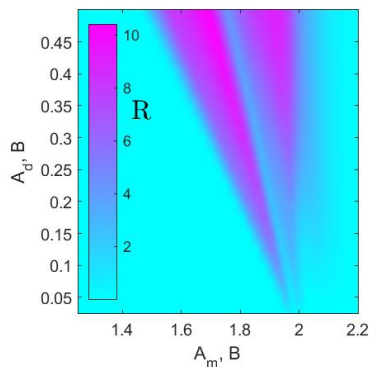


Рис. 4. Контурный график зависимости отклика нейрона на фантомной частоте от амплитуды входного сигнала (A_d) и амплитуды ВЧ сигнала (A_m)

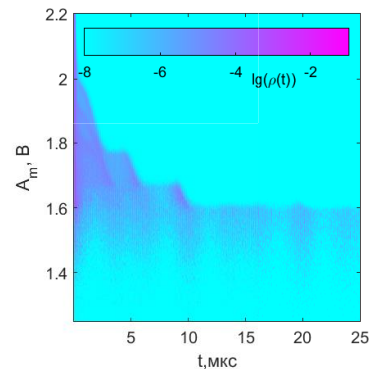


Рис. 5. Контурный график плотности вероятности меж-импульсных интервалов от амплитуды ВЧ сигнала (A_m) и от времени t при фиксированной амплитуде подпорогового сигнала $A_d=0.375$ В.

Заключение. Таким образом, в работе показано, что прохождение сложного сигнала, представляющий собой сумму гармоник фундаментальной частоты, отсутствующей в сигнале, через оптоэлектронный ИИН, при добавлении оптимальных значений шума или ВЧ сигнала приводит появлению фантомных частот в отклике ИИН и, соответственно, фантомного стохастического и вибрационного резонансов. Это явление может быть использовано для обработки сигналов при помощи импульсной нейронной сети на основе оптоэлектронного импульсного нейрона.

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. V.119, P. 041107-5(2021)
2. Gomes, I. and Vermelho, M. V. D. and Lyra, M. L. / Ghost resonance in the chaotic Chua's circuit // Phys. Rev. E, V 85, P. 056201-8 (2012).
3. J. M. Buldú, D. R. Chialvo, C. R. Mirasso, M. C. Torrent, J. García-Ojalvo / Ghost resonance in a semiconductor laser with optical feedback // Europhysics Letters, V. 64, P. 178 (2003)

4. Iaczel G. Silva, Osvaldo A. Rosso, Marcos V.D. Vermelho, Marcelo L. Lyra / Ghost stochastic resonance induced by a power-law distributed noise in the FitzHugh–Nagumo neuron model // Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation, V. 22, P. 641-649 (2015).
5. Chizhevsky, V. N. and Lakhmitski, M. V / Improvement of signal propagation in the optoelectronic artificial spiking neuron by vibrational resonance // Phys. Rev. E, V. 109. 014211 (2024)
6. Лахмицкий Н.В., Чижевский В.Н., Килин С.Я. / Стохастический резонанс в оптоэлектронном искусственном импульсном нейроне. // Журнал прикладной спектроскопии. 2023;90(5):780-784.

Формирование фантомных изображений с использованием вертикально-излучающих лазеров

А.А. Смоляков^а, В.Н. Чижевский^б

^а *Белорусский государственный университет, 220030 Минск, Беларусь*

^б *Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси, 220072 Минск, Беларусь*

E-mail: smoluakovadam@gmail.com

Введение. В последние годы квантовые технологии стали широко распространены и используются в различных областях, таких как квантовая криптография, генерация случайных бит, квантовая метрология, фантомная визуализация и другие. Фантомная визуализация, или ghost imaging, представляет собой метод получения изображений объектов без прямого взаимодействия светового пучка с объектом [1]. Вместо этого информация извлекается из взаимной пространственной корреляции фотонов с другим пучком, который не взаимодействует с объектом. Одним из ключевых преимуществ фантомной визуализации является минимальное воздействие излучения на объект, что важно для биологических применений.

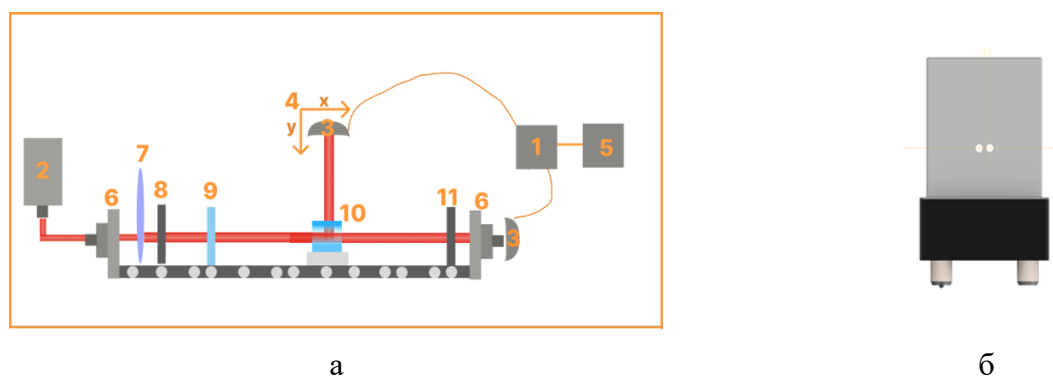
Для реализации фантомных изображений необходимо использовать пространственно коррелированные фотоны, которые могут быть получены с помощью неклассических источников света, либо с использованием источников с тепловой или квазирепетивной статистикой фотонов [2-5]. Статистика фотонов определяется через корреляции высших порядков, которые являются важным аспектом исследований когерентности света. Когерентность света первого порядка связана с его спектральными свойствами, проявляющимися в интерференционных эффектах. Корреляции света второго и высших порядков относятся к его статистическим свойствам. Различия между статистическими свойствами теплового и лазерного света могут быть поняты только при анализе корреляций второго порядка и выше. Это позволяет получить глубокое понимание о природе света и его характеристиках, что важно для развития новых методов в области квантовых технологий.

Целью данной работы является изучение и реализация метода формирования фантомных изображений с использованием вертикально-излучающих лазеров. Кроме того, работа также направлена на разработку лабораторного комплекса для обучения студентов, магистрантов и аспирантов статистическим свойствам излучения и формированию фантомных изображений. Ключевыми задачами работы являются разработка и анализ источника излучения с псевдотепловой и экстратепловой статистикой на основе вертикально-излучающих лазеров, а также создание и изучение различных схем получения фантомных изображений с использованием разработанного источника излучения.

1 Материалы и методы. В экспериментах использовался полупроводниковый лазер с вертикальным резонатором (ЛВР), работающий на длине волны 850 нм с выходной мощностью 2 мВт. Лазер был установлен в корпус типа "DIL-14" с микрохолодильником и

терморезистором для стабилизации температуры. Для генерации псевдо-теплового излучения использовался вращающийся диффузно рассеивающий диск, имеющий структурные неоднородности с размерами порядка 0,1 - 0,2 мм и на который направлялось лазерное излучение. Сгенерированные спекл-паттерны на выходе диска направлялись на светоделитель, генерируя взаимно (статистически) коррелированные световые пучки.

Исследование пространственных корреляций света и получение фантомных изображений осуществлялись на основе оптической установки, включающей в себя вертикально-излучающий лазер, фильтры для регулировки интенсивности света, светоделительный кубик и два детектора одиночных фотонов на основе лавинных фотодиодов с волоконно-оптическим вводом излучения (Рис. 1,а). Оптоволоконный вход одного из детекторов был установлен на 3D столике и сканировал пространство для анализа пространственных корреляций света, в то время как оптоволоконный вход второго детектора был неподвижен. В обоих случаях входная апертура детекторов была 50 мкм. Данные с детекторов считывались с помощью цифрового осциллографа и обрабатывались по разработанным программам для вычисления корреляций. В случае исследования фантомных изображений, оптоволоконный вход неподвижного детектора дополнительно снабжался объективом, собирающим все проходящее излучение и вводящее его в детектор одиночных фотонов (так называемый бакет-детектор). При получении фантомных изображений перед объективом на платформу устанавливался исследуемый объект так, чтобы лазерное излучение попадало на центральную часть. Размер отверстий составлял 1 мм, а расстояние между ними – 0,75 мм (Рис. 1,б).



- 1 – Цифровой USB осциллограф HS5; 2 – Лазерный модуль, программно-управляемый источник лазерного излучения на длине волны 850 нм; 3 – Детекторы одиночных фотонов; 4 – 3D столик с программно-управляемыми шаговыми двигателями; 5 – Персональный компьютер; 6 – Коллиматор лазерного излучения PAF2-7B; 7 – Диффузно-рассеивающий вращающийся диск, закрепленный на микродвигателе с программно-управляемой скоростью вращения и стабилизацией частоты вращения; 8 -Диафрагма 3 мм; 9 – Линза F = 20 мм; 10 – Светоделительный кубик 50/50; 11 – Объект.

Рис. 1. Оптическая схема установки по получению прозрачных изображений (а). Объект – два круглых отверстия диаметром 1 мм, расположенных на расстоянии 0,75 мм (б).

2 Результаты и их обсуждение. На Рис. 2 представлены результаты измерения пространственной автокорреляционной функции второго порядка g_2 при использовании диффузно рассеивающего диска для трех различных фиксированных положений подвижного детектора. Результаты измерений представлены в виде графиков зависимости функции g_2 от взаимного положения детекторов.

Из Рис. 2 видно, что корреляционная функция "следует" за движением подвижного детектора D1: сдвиг в положении D1 вызывает сдвиг в том же направлении корреляционной функции. Важно отметить, что значения g_2 примерно равные 2, указывают на наличие квази-теплового состояния света. При этом полуширина пространственной автокорреляционной

функции 2-го порядка составляет примерно 0,4 мм. Рис. 3 показывает фантомное изображение исследуемого объекта, где 2 пика соответствуют двум отверстиям, а провал – расстоянию между ними.

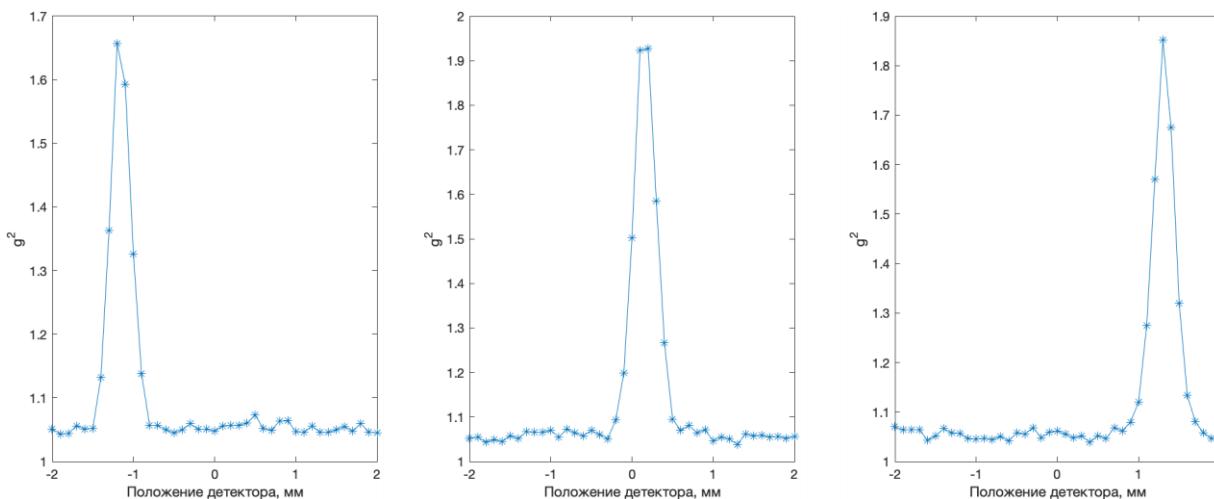


Рис. 2. Нормализованная корреляционная функция второго порядка в зависимости от положения фиксированного детектора (D2) для трех фиксированных положений подвижного детектора (D1)

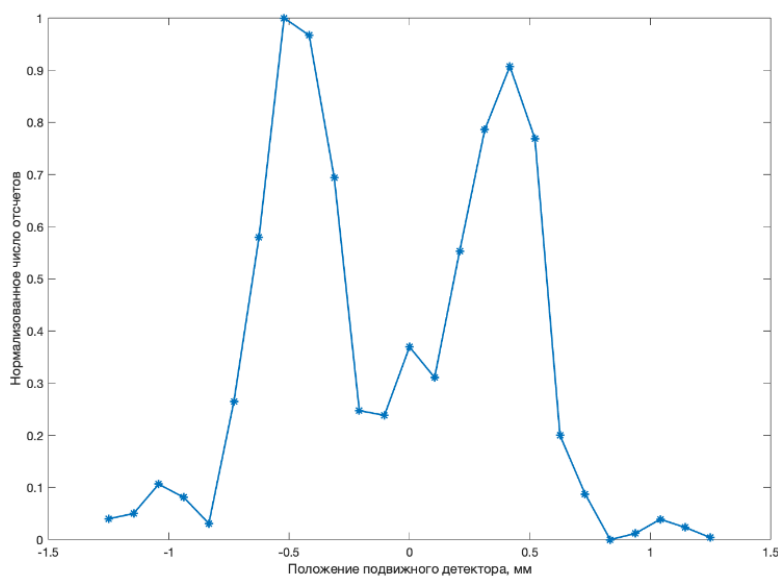


Рис. 3. Фантомное изображение объекта.

Одно из важных условий для получения фантомного изображения является равенство плеч (расстояний) от светоделительного кубика до бакет-детектора и точечного детектора, соответственно. В частности, исследования показали, когда длина плеч была не равна друг другу, фантомное изображение было сильно размыто, а двойное отверстие было плохо различимо.

Заключение. Представлены результаты разработки источника псевдотеплового излучения на основе использования вертикально-излучающего лазера и вращающегося диффузно рассеивающего диска. Полученные значения пространственной автокорреляционной функции $g_2=2$ с полушириной корреляции 0,4 мм позволили уверенно получить фантомные изображения исследуемого объекта. Кроме того, проанализировано влияние длины пространственной когерентности на качество этих изображений.

Литература.

1. Correlated two-photon imaging with true thermal light / D. Zhang [et al.] // Opt. Lett. – 2005. – Vol. 30. – No18 – P. 2354–2356.
2. Two-photon imaging with thermal light / A. Valencia [et al.] // Phys. Rev. Lett. – 2005. – Vol. 94. – P. 63-70.
3. Coherent imaging with pseudo-thermal incoherent light / A. Gatti [et al.] // Journal of Modern Optics. – 2006. – Vol. 53. – No 5-6. – P. 739-760.
4. High visibility temporal ghost imaging with classical light / J. Liu [et al.] // Optics Communications. – 2018. – P. 824-829.
5. Ghost imaging in the time domain / P. Ryczkowski [et al.] // Nature Photonics. – 2016. – Vol. 10 – P. 167-170.

Использование волоконных лазеров для удаления с поверхности стали коррозионного слоя

И.Ю. Славинский, В.Э. Анискевич, А.И. Чернышевич

Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси, 220072 Минск, Беларусь
E-mail: i.slavinskiy@dragon.bas-net.by

Введение. Волоконные лазеры применяются в различных отраслях промышленности от микроэлектроники до металлургического производства благодаря удобству их внедрения в технологические линии и высокой технико-экономической эффективности. Одно из распространенных направлений использования волоконных лазеров - очистка поверхности изделий от широкого спектра загрязнений [1-6].

Традиционные способы удаления поверхностных загрязнений (химический, механический и ультразвуковой) имеют ряд недостатков: механическая очистка небезопасна, трудоемка и длительна; ультразвуковой способ очистки не позволяет в полной мере удалять субмикронные частицы с поверхности изделия и имеет ограничения по размерам очищаемых изделий; химическая очистка – негативно воздействует на человека и окружающую среду, а используемые реактивы при длительном воздействии на материал могут вызвать его коррозию [6].

Отличительной особенностью лазерной очистки от классических методов является возможность подбора таких параметров воздействия, при которых удаление слоя загрязнения происходит без повреждения подложки. Кроме того, процесс лазерной очистки сопровождается активацией поверхности, улучшением ее трибологических свойств и перераспределением остаточных поверхностных напряжений в материале.

Впервые концепция лазерной очистки была предложена в 1969 году [7]. Авторы работы, выполненной при поддержке Исследовательского центра NASA, провели ряд успешных экспериментов по импульсной лазерной очистке кремния. С тех пор, многие исследователи изучали возможности применения лазеров для очистки поверхностей памятников архитектуры и объектов живописи (так называемая – лазерная реставрация), удаления коррозии и краски с корпусов морских судов и самолетов, масляных пленок и оксидного слоя с металлических поверхностей перед их покраской и т.д. [1-6].

Основное внимание исследователи уделяют качеству очищенной поверхности, ее морфологии и физико-химическим свойствам, в то время как механизмам лазерной очистки уделяется недостаточно внимания. На сегодняшний день выделяют три основных механизма удаления загрязнения с поверхности материала при лазерном воздействии – лазерная термическая абляция, лазерное термическое напряжение и создание плазменной ударной волны (в отличие от двух предыдущих - данный механизм реализуется при направлении

лазерного луча вдоль обрабатываемой поверхности и создании приповерхностного оптического пробоя в воздухе) [6]. Как правило, и лазерная абляция, и создание термического напряжения на поверхности очищаемого материала происходят совместно в процессе лазерной очистки, а преобладание того или иного механизма зависит от коэффициента поглощения материала и размеров зоны термического влияния, что в свою очередь зависит от характеристик загрязнения и материала подложки и параметров воздействующего лазерного излучения.

Подбор оптимальных параметров лазерного излучения осуществляют таким образом, чтобы энергии импульса было достаточно для удаления вещества-загрязнителя, но не превышался порог разрушения материала подложки. Такой режим обработки наиболее актуален в случаях высокоточной очистки и применим для реставрации объектов культурно-исторического наследия [2]. Актуальными задачами являются разработка методов управления лазерной очисткой и контроля протекающих процессов с использованием оптических и оптоакустических методов [2, 4]. Плазменный факел, образующийся в процессе лазерной очистки поверхности, имеет достаточно спектрально-аналитической информации для анализа химического состава поверхности, благодаря чему имеется возможность создавать системы для диагностики процесса очистки по амплитудам и соотношениям спектральных линий [5].

Цель настоящей работы состоит в проведении экспериментов по лазерной очистке стального образца от коррозионного слоя с использованием двух различных волоконных излучателей и подборе параметров лазерного воздействия при которых не превышает порог разрушения материала стальной подложки с помощью метода спектральной диагностики плазменного факела.

1 Эксперимент. Очистка поверхности изделия из конструкционной стали от коррозионного слоя проводилась с использованием волоконных лазеров ИК-диапазона.

Первая экспериментальная установка реализована на базе волоконного лазера YLP-V2-1-100-20-20 (IPG Photonics, США) с длиной волны излучения 1064 нм. Для перемещения лазерного луча по поверхности образца использовалась сканаторная головка (АТЕКО, Россия), оснащенная объективом F-Theta с фокусным расстоянием 163 мм. Обработка велась в несколько проходов при следующих параметрах: мощность лазера – 20 Вт, длительность импульса – 100 нс, частота следования импульсов – 10÷50 кГц, скорость сканирования поверхности лучом лазера – 100 мм/с.

В основе второй экспериментальной установки использовался волоконный лазер YLPN-1.8-20/500-200-A-S-6/5-C (GW LaserTech, КНР). Данный лазер имеет конфигурацию МОРА (англ. Master Oscillator Power Amplifier, т.е. задающий генератор - усилитель мощности). Преимуществом такой конфигурации является возможность сохранения высокого уровня пиковой мощности при высокой частоте следования импульсов. Для перемещения лазерного луча по поверхности образца использовался сканатор Sino-galvo SG7110 (Sino-Galvo Tech., КНР) с объективом F-Theta, фокусное расстояние которого 250 мм. Обработка велась в несколько проходов при следующих параметрах: мощность лазера – 32 Вт, длительность импульса – 100 нс, частота следования импульсов – 100 кГц, скорость сканирования поверхности лучом лазера – 100 мм/с.

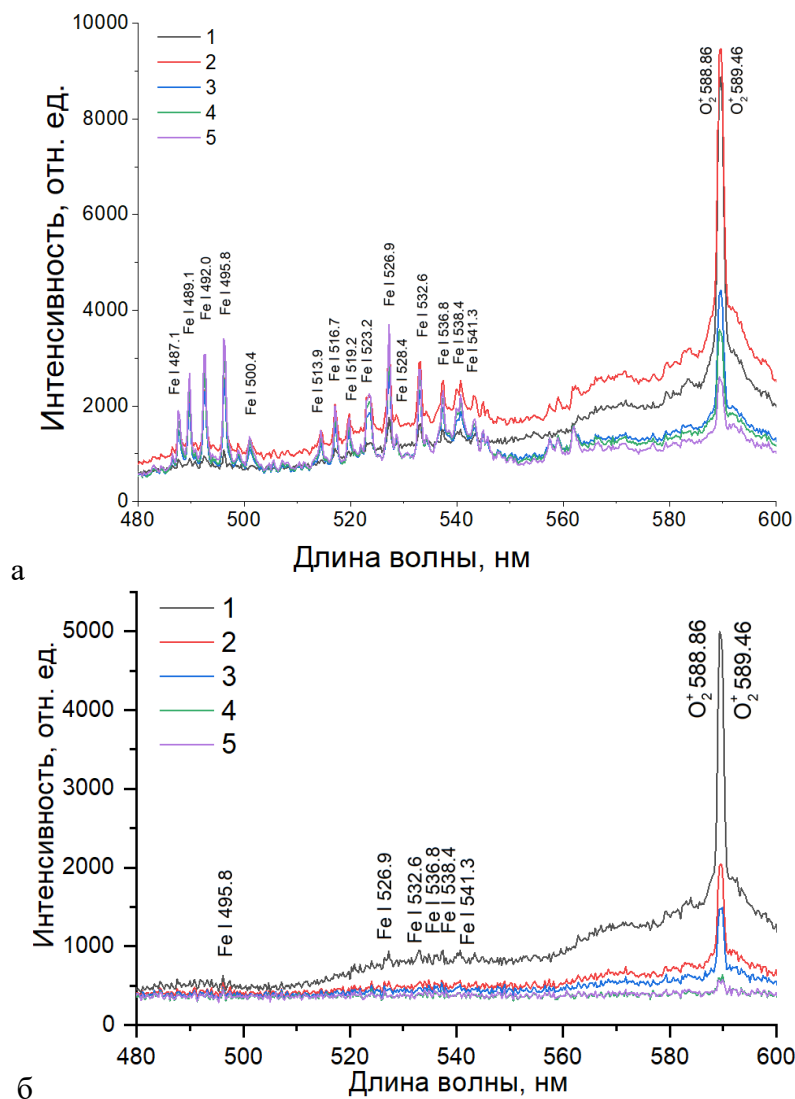
Для спектроскопического исследования плазмы, образующейся в процессе лазерной очистки, применялся спектрометр S100 (SOLAR LS, Беларусь). Качество очистки поверхности оценивалось методами оптической микроскопии.

2 Анализ результатов. Изначально обработка стали излучением лазера YLP-V2-1-100-20-20 до полной очистки образца от коррозионного слоя проводилась в пять проходов при мощности 20 Вт и частоте следования импульсов 10 кГц. Процесс сопровождался интенсивным образованием приповерхностной плазмы, спектры излучения которой регистрировались для каждого прохода лазерным лучом по поверхности (Рис.1,а). В спектрах излучения лазерной плазмы наряду с линиями основного элемента мишени (Fe) и достаточно интенсивного сплошного фона, присутствуют линии кислорода [5]. Согласно многочисленным исследованиям, степень очистки металлических поверхностей от коррозии

коррелирует с интенсивностью присутствующих в спектрах линий кислорода, которая уменьшается с каждым последующим проходом, то есть уменьшается содержание этого элемента в мишени [5].

Как видно из Рис. 1,а интенсивность дублета кислорода (588,86 и 589,46 нм) уменьшается с увеличением числа проходов, одновременно с ростом интенсивности спектральных линий железа, что свидетельствует о постепенном удалении коррозионного слоя и начале разрушения стальной подложки.

При повышении частоты следования до 50 кГц (Рис.1,б) и уменьшении плотности мощности лазерного излучения достигнут пороговый режим воздействия, при котором плотность мощности лазерного излучения достаточна для разрушения коррозионного слоя, но не достаточна для разрушения стальной подложки (о чем свидетельствует низкая интенсивность спектральных линий железа). Данный режим обладает преимуществом, благодаря селективному удалению коррозионного слоя.

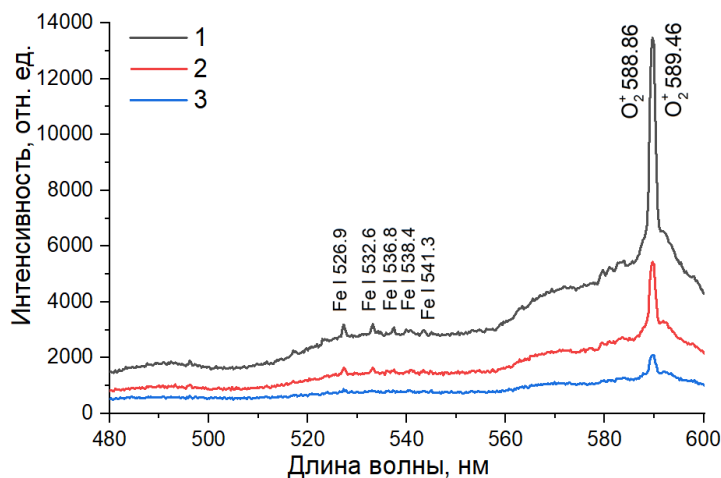


а - очистка производилась с частотой 10 кГц,
 б - очистка производилась с частотой 50 кГц.

Рис.1. Спектры излучения лазерной плазмы, образующейся в процессе удаления коррозионного слоя излучением лазера YLP-V2-1-100-20-20.

С целью уменьшения временных затрат на удаление коррозии со стальной подложки осуществлялось воздействие излучением лазера YLPN-1.8-20/500-200-A-S-6/5-C, обладающего большей средней мощностью и возможностью повышать частоту импульсов

излучения до 100 кГц и более. На Рис. 2 представлены спектры излучения лазерной плазмы при удалении коррозионного слоя в три прохода практически без разрушения материала подложки, о чем свидетельствует низкая интенсивность линий атомов железа.



очистка производилась с частотой 100 кГц

Рис.2. Спектры излучения лазерной плазмы, образующейся в процессе удаления коррозионного слоя излучением лазера YLPN-1.8-20/500-200-A-S-6/5-C.

Заключение. Проведена очистка коррозионного слоя с поверхности стального образца с использованием двух волоконных лазерных систем в широком диапазоне режимов лазерного воздействия. Экспериментально определены параметры лазерного излучения для очистки коррозии со стальной пластины без повреждения ее поверхности. Показана возможность оптимизации скорости лазерной очистки при использовании излучателя с большей пиковой мощностью и частотой. Полученные результаты будут полезны для оптимизации методов спектральной диагностики процесса лазерной очистки стальных поверхностей от коррозионного слоя, а также разработки систем лазерной очистки на базе волоконных лазеров ИК-диапазона.

Работа выполнена в рамках задания 1.4 ГПНИ «Фотоника и электроника для инноваций».

Литература.

1. Вейко, В. П. Лазерная очистка растриваемых валов со спектральным контролем / В. П. Вейко, А. А. Самохвалов // Изв. ВУЗов. Приборостроение. – 2013 – Т. 56, № 3. – С. 86–92.
2. Laser cleaning and spectroscopy: a synergistic approach in the conservation of a modern painting / K. Melessanaki [et al.] // Laser Chemistry. – Vol. 2006.
3. Laser-induced breakdown spectroscopy for on-line control of laser cleaning of sandstone and stained glass / S. Klein [et al.] // J. Appl. Phys. A. – 1999. – Vol. 69 – P. 441–444.
4. Cleaning laser spark spectroscopy for online cleaning quality control method development / T.Y. Mutin [et al.] // Proceedings of Fundamentals of Laser-Assisted Micro- and Nanotechnologies 2010, St. Petersburg, 2010. – St. Petersburg, 2011. – Vol. 7996
5. О возможности спектроскопического контроля процесса лазерной очистки / В. П. Вейко [и др.] // Изв. ВУЗов. Приборостроение. – 2011. – Т. 54, № 2. – С. 65-68.
6. The Fundamental Mechanisms of Laser Cleaning Technology and Its Typical Applications in Industry / Zhihu Zhou [et al.] // Processes. – 2023. – Vol. 11. –P. 1445.
7. Bedair, S.M.; Smith, H.P. Atomically Clean Surfaces by Pulsed Laser Bombardment. J. Appl. Phys. 1969 – Vol. 40 – P. 4776–4781.

Мощностные и пространственные характеристики излучения промышленных волоконных лазеров ИК диапазона

А.И. Чернышевич, И.Ю. Славинский

Институт физики имени Б. И. Степанова НАН Беларуси, Минск, Беларусь

E-mail: a.chernyshevich@ifanbel.bas-net.by

Введение. Волоконные лазеры с излучением среднего ИК диапазона нашли свое широкое применение во многих технологических процессах обработки различных материалов импульсным или непрерывным лазерным излучением высокой мощности. В традиционных промышленных системах лазерной резки и сварки используются волоконные лазеры с непрерывным излучением на длине волны 1060 – 1070 нм мощностью в десятки кВт. В системах лазерной 3d-печати металлическими материалами используются также лазеры с непрерывным излучением мощностью до 1 кВт. В свою очередь, операции микрообработки поверхностей материалов, включая гравировку, маркировку, сверление, очистку металлов, а также скрайбирование и структурирование полупроводниковых и диэлектрических материалов, выполняются с использованием волоконных лазеров с импульсным наносекундным излучением на длине волны 1064 нм и средней мощностью в диапазоне от 10 Вт до 1 кВт.

Импульсный режим генерации излучения в волоконных лазерах может быть достигнут преимущественно двумя способами. В первом случае такой режим реализуется в волоконных лазерах с модуляцией добротности. Лазеры такого типа характеризуются фиксированной длительностью импульсов излучения при возможности изменения его частоты в диапазоне от 1 до 500 кГц.

Во втором случае импульсный режим достигается использованием конфигурации задающего генератора с усилителем мощности (МОРА) в волоконном лазере. По сравнению с технологией модуляции добротности, частота повторения импульсов (PRF) и ширина импульса могут контролироваться независимо в конфигурации МОРА. Системы такой конфигурации используют для этого импульсные лазерные диоды. Излучение лазерного диода усиливается в активированной сердцевине волокна. В этом случае управление частотой и длительностью импульсов излучения волоконного лазера сводится к управлению характеристиками импульсов задающего лазерного диода. При соответствующей настройке параметров, можно поддерживать пиковую энергию импульсов близкой к постоянной в широком диапазоне изменения частот повторения и длительностей импульсов, гарантируя тем самым достижение оптимальных характеристик для широкого круга материалов и методов лазерной обработки [1-3].

Целью работы являлось определение мощностных и пространственных характеристик двух типов волоконных лазеров ИК диапазона, применяемых для маркировки, очистки, микрообработки материалов.

1 Объект исследования. В данной работе были измерены мощностные характеристики двух импульсных волоконных лазеров: IPG YLP-V2-1-100-20-20 мощностью 20 Вт и GW YLPN-1.8-20/500-200-A-S-6/5-C мощностью 200 Вт.

Волоконный лазер IPG YLP-V2-1-100-20-20 (IPG Photonics, США) с длиной волны излучения 1064 нм разработан на основе генератора с модуляцией добротности (Q-switch). Лазер с модуляцией добротности, позволяет генерировать высокоэнергетические и короткие по длительности импульсы излучения. Волоконный лазер GW YLPN-1.8-20/500-200-A-S-6/5-C (GW LaserTech, КНР) имеет конфигурацию МОРА. Преимуществом такой конфигурации является возможность сохранения высокого уровня пиковой мощности при высокой частоте следования импульсов.

2 Результаты и обсуждение. Для лазера фирмы GW измерения выходной мощности излучения проводились при значениях длительности импульса 100 и 500 нс. Мощность

накачки была установлена на уровне 50 %, 75 % и 100 % от максимальной. Частота излучения изменялась в диапазоне от 30 кГц до 1500 кГц (в диапазоне от 30 до 200 кГц с шагом 50 кГц, далее с шагом 100 кГц). Для измерения оптической мощности лазера использовался тепловой измеритель оптической мощности L50(150)A (Ophir Photonics Group). В результате чего были получены зависимости (Рис. 1 а, б) выходной оптической мощности лазера от частоты при различных длительностях импульса и мощности накачки.

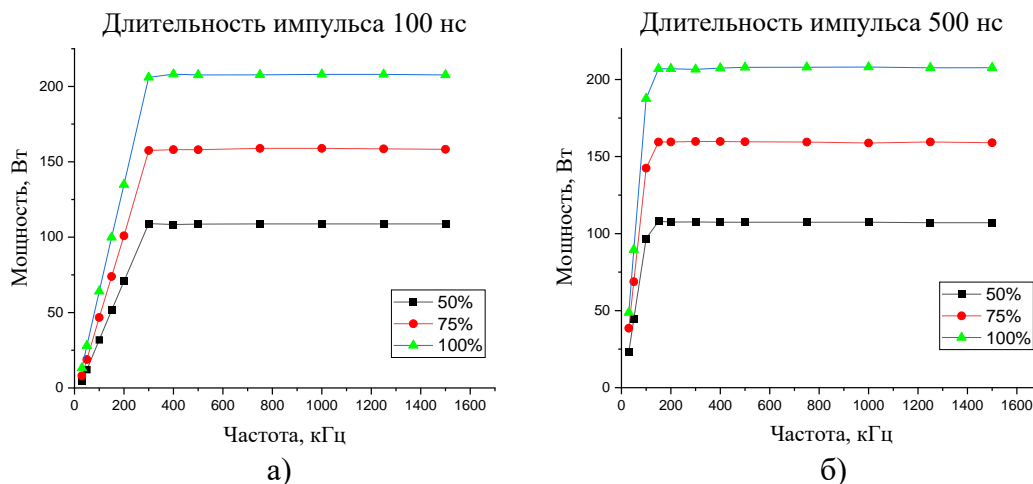


Рис. 1. Зависимость оптической мощности излучения от частоты при мощности накачки 50%, 75%, 100% и длительности импульса 100 нс (а) и 500 нс (б).

Для лазера фирмы IPG длительность импульса была установлена на значении 100 нс. Для данного лазера также были измерены зависимости выходной оптической мощности от частоты следования импульсов излучения при различных мощностях накачки. Частота менялась в диапазоне от 2 до 100 кГц (в диапазоне от 2 до 10 кГц с шагом 2 кГц, далее с шагом 10 кГц). Полученные значения зависимостей средней выходной мощности от частоты следования импульсов излучения при различной мощности накачки представлены на Рис. 2.

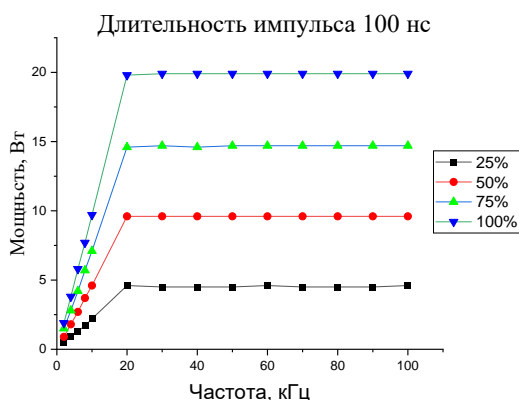


Рис. 2 Зависимость оптической мощности излучения от частоты при мощности накачки 25%, 50%, 75%, 100% и длительности импульса 100 нс.

Для измерения пространственного профиля излучения исследуемых волоконных лазеров часть их излучения отводилась с помощью призмного аттенюатора (Thorlabs АТТ30/М-YAG) на фотодиодную СМОР-матрицу камеры ADF Pro 08 (КНР). Далее по интенсивности излучения были построены профили пучка для двух лазеров (Рис.3а, б).

Измерение длительности импульсов излучения исследуемых лазеров проводилось путем отвода части лазерного излучения призмным аттенюатором на фотодетектор Thorlabs DET08CFC/М (ширина полосы пропускания 5ГГц и спектральный диапазон 800 ÷ 1700 нм), подключенный к осциллографу с полосой пропускания 500 МГц.

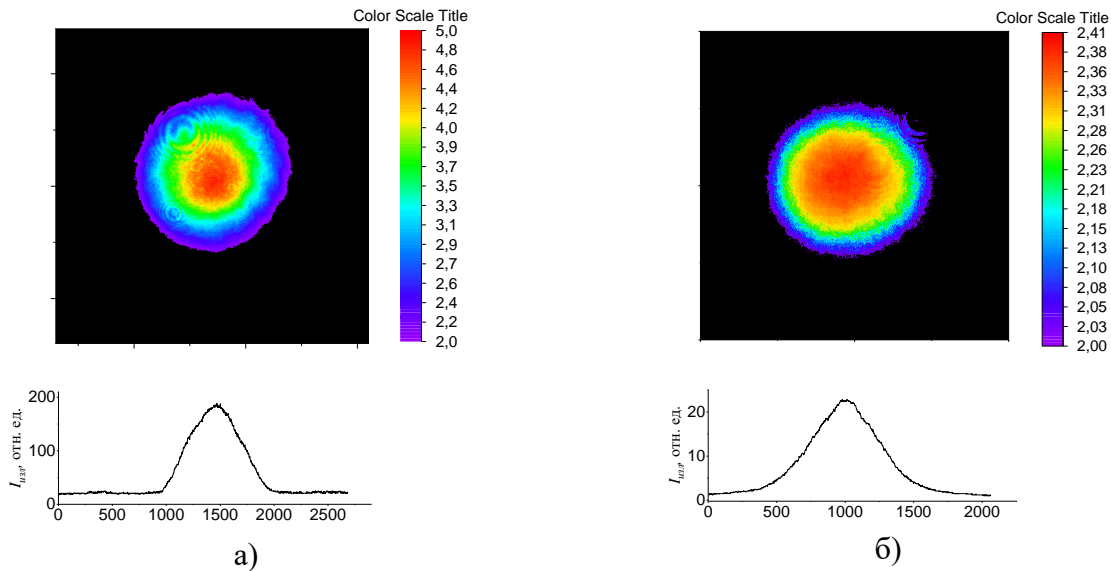


Рис. 3. Профиль пучка для лазера IPG YLP-V2-1-100-20-20 (а) и лазера GW YLPN-1.8-20/500-200-A-S-6/5-C (б).

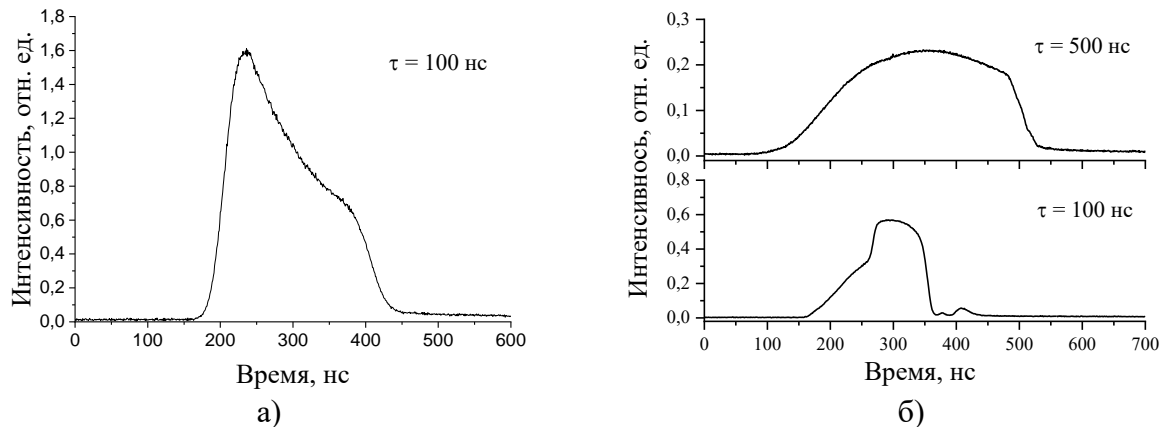


Рис. 4. Длительность импульса для лазера IPG YLP-V2-1-100-20-20 (а) и лазера GW YLPN-1.8-20/500-200-A-S-6/5-C (б).

Заключение. В результате работы проведены измерения выходных характеристик излучения промышленных волоконных импульсных лазеров. Показано, что волоконные лазеры в конфигурации «задающий генератор – усилитель мощности» обладают более широким функционалом по управлению длительностью и частотой следования импульса их излучения, что способствует расширению их потенциала для промышленного применения. Дальнейшая работа будет направлена на изучение технологических процессов обработки поверхности материалов излучением волоконных лазеров с различной конфигурацией усилителя мощности.

Работа выполнена в рамках задания 1.4 ГПНИ «Фотоника и электроника для инноваций».

Литература.

1. Е.М. Дианов Волоконные лазеры / Конференции и симпозиумы. – 2004. – Т.174, № 10. – С.1139-1142
2. С.Вудс, М.Дака, Г.Флин Волоконные лазеры средней мощности и их применение /ФОТНИКА. – 2008. – Вып. 4. – С.6-10.
3. H. Chui, R. Patel. Hybrid fiber lasers raise the bar for precision manufacturing / Photonics Spectra. – September 2017.

Оценка применимости устройства для юстировки источников оптического излучения основанного на методе параллакса

А.С. Яськов

*Институт физики НАН Беларуси, 220072, г. Минск, пр. Независимости 68-2, Беларусь
E-mail: a.yascov@dragon.bas-net.by*

Точность измерения расстояния между приемником и источником излучения при проведении фотометрических измерений в значительной степени определяет качество измерения различных оптических характеристик как источников, так и приемников оптического излучения. Анализ стандартизованных рекомендаций по измерению расстояния при фотометрических измерениях с использованием традиционных источников излучения (ламп накаливания и разрядных ламп) [1 - 3] показывает, что если источник излучения (лампа) условно является точечным источником излучения, то граница погрешности измерения расстояния должна быть не более $\pm 1,0$ мм. Тем не менее, в этих рекомендациях не характеризуется местоположение точек, между которыми следует измерить расстояние. Если в отношении точки, относящейся к приемнику излучения, хотя бы можно предположить, что она расположена приблизительно в центре входной апертуры приемника или его фоточувствительной поверхности, то определение местоположения светового (фотометрического) центра источника излучения является проблемой. Строго говоря, световой центр источника излучения в соответствии с его определением [4] является только исходной расчетной точкой, а не физической, а его местоположение находится где-то около центра тела накала источника излучения. Но лампы (источники излучения) имеют очень разные вариации форм их колб, конструкции тел накала, нити накала (проволока, лента), габаритные размеры. Кроме того, колбы ламп могут быть матированными или с чернением тыльной стороны. Т.е. все лампы, независимо от их типа и конструктивных особенностей, имеют сложную форму излучающей поверхности. В то же время, данные стандартизованные требования сформулированы скорее для точечного источника излучения или для источников, имеющих форму излучающей поверхности, близкую к плоской. На практике, при использовании эталонных ламп особых проблем с определением расстояния измерения нет, так как производители эталонных ламп облегчили эту задачу: лампы имеют специальную юстировочную метку, или целеуказатель, или юстировочную плоскость. При использовании специальных устройств для юстировки, позволяющих зафиксировать изображение точки, предполагаемой как световой центр [5], расстояние измерения можно измерить с погрешностью, границы которой составляют $\pm 0,1$ мм.

Эта проблема особенно стала очевидной после появления светодиодов. В настоящее время измерения оптических характеристик LED проводятся на основании рекомендаций CIE 127 [6] и CIE S 025/E [7], на базе которых разработан ряд международных и национальных стандартов. В [8] более подробно рассмотрена проблема измерения расстояния и характеристика местоположения светового центра для светодиодного (LED) источника излучения. Также в [8] отмечается, что LED излучатели имеют сложную излучающую поверхность, неоднородность которой по высоте может составлять 7 мм. Для решения проблемы определения светового центра источников излучения, имеющих сложную форму излучающей поверхности в [8], предложено применять устройство на основе метода параллакса.

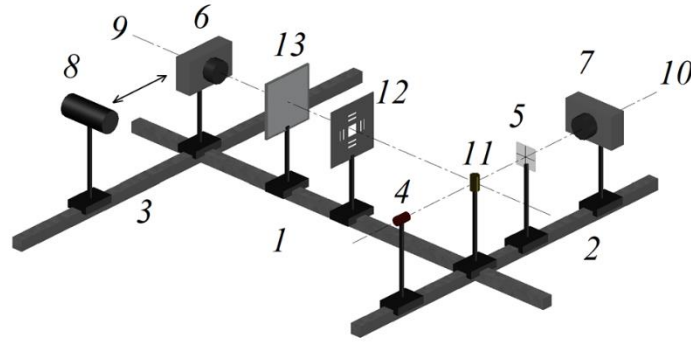


Рис. 1. Модель устройства определения светового центра источника излучения.

На Рис. 1 представлена принципиальная схема модели такого устройства. Модель включает в себя: оптические направляющие 1, 2, 3, источник излучения 11, юстировочный лазер 4, пластину с перекрестием 5, цифровые камеры 6 и 7, маску 12, экран 13, фотоприемник 8, оптические оси 9 и 10. Рельс 3 предназначен для перемещения цифровой камеры 6 и фотоприемника 8. На Рис. 2 показана маска. Маска представляет собой непрозрачную пластину 3 со щелями 2, расположенными периодически по вертикальной и горизонтальной осям, и квадратным отверстием 1 на пересечении оптических осей.

Устройство функционирует следующим образом. Излучение проходит через маску и проецируется на экран в виде отдельных линий и квадрата. Центр квадрата маски используется для выравнивания источника излучения путем сопоставления его центра с изображением квадрата на экране. По проецируемым линиям определяют расстояние до источника излучения по их отклонению от меток, расположенных на экране. Цифровая камера передает изображение экрана на компьютер для последующих расчетов.

На Рис. 3 представлена оптическая схема устройства.

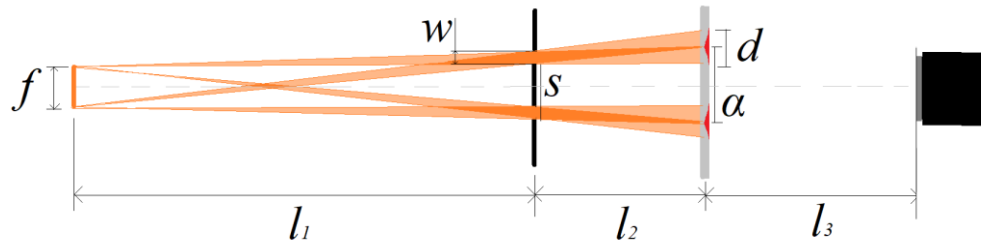
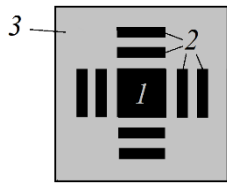


Рис. 2. Конструкция маски.

Рис. 3. Оптическая схема устройства.

Расстояние от светового центра источника излучения (ИИ) до плоскости апертуры камеры определяется по формуле (1):

$$l = \frac{l_2}{\frac{\alpha}{s \cdot n} - 1} + l_2 + l_3 \quad (1)$$

где, l – расстояние от светового центра ИИ до апертуры приёмника; l_2 – расстояние между маской и экраном, м; l_3 – расстояние между экраном и камерой, м; α – отклонение светового пятна, м; s – шаг щелей на маске, м; n – количество щелей.

Для оценки применимости предложенного нами метода, необходимо определить угол падения излучения на экран 3. Для этого нужно определить местоположение проекции на экране. Так как получаемое камерой изображение экрана проецируется оптической системой 2 на матрицу 1, то точность определения местоположения проекции ограничена размером в один пиксель, что соответствует значению коэффициента преобразования пикселя в длину на

экране устройства. Коэффициент преобразования определяется путём настройки устройства, во время которой устанавливается сколько пикселей размещается в рамках экрана 3.

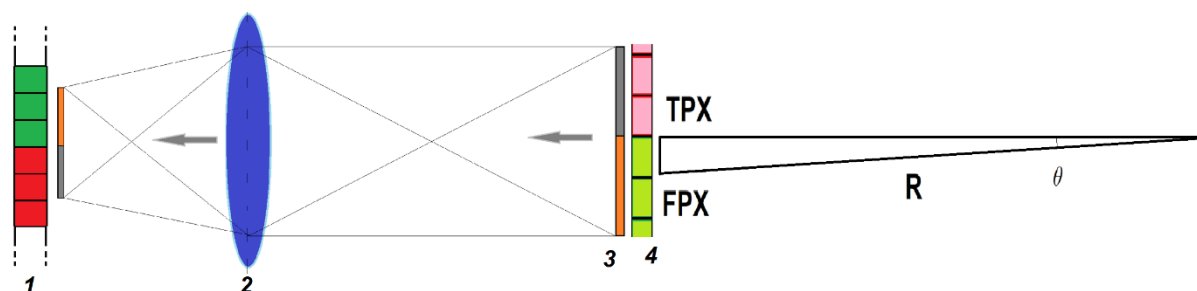


Рис. 4. Оптическая схема цифровой видеокамеры.

Определение угла падения оптического излучения на экран осуществляется согласно формуле (2):

$$\cos(\theta) = \frac{\sqrt{r^2 + (TPX - FPX)^2 + (TPY - FPY)^2}}{r} \quad (2)$$

где, TPX – координата x точки на оптической оси, м; FPX – реальная точка по оси x на изображении камеры, м; TPY – координата y точки на оптической оси, м; FPY – реальная точка по оси y на изображении камеры, м.

Далее мы провели анализ отклонений получаемой освещённости с использованием различных входных данных. Таким образом определяется минимально возможное и максимально возможное расстояние измерений предложенного нами метода.

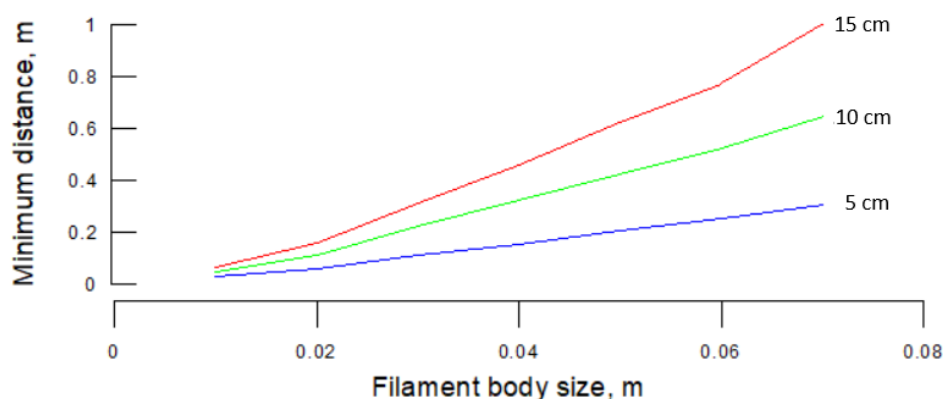


Рис. 5. Зависимости минимального расстояния измерений от размера тела накала.

Зависимость значений минимального расстояния измерений от размера тела накала лампы можно наблюдать на Рис. 5, где представлены 3 графика, соответствующие разным установленным расстояниям между экраном и маской устройства. Можно заметить, что чем ближе экран к маске, тем более близкое расстояние от источника излучения можно мониторить.

Установлено, что для самого большого взятого тела накала размером в 7 см расстояние измерений может быть от 0,30 м и более. Для самого малого взятого тела накала размером в 1 см расстояние измерений может быть от 0,025 м и более, (Рис. 5).

Используя камеру с разрешением не меньше 10 мегапикселей для диапазона отклонений не более 0,5 % и используя источник излучения с размером тела накала в 7 см, диапазон работы устройства составит от 0,30 до 4 м, а для тела накала размером в 1 см, диапазон будет от 0,025 до 4 м. Так как типичные значения расстояния для эталонных ламп находятся в диапазоне от 0,5 до 3,5 м.

Таким образом, можно сделать вывод, что полученные результаты исследований свидетельствуют о применимости предложенного метода юстировки источников оптического излучения с неправильной формой излучающей поверхности излучателя.

Литература.

1. ГОСТ 17616-82 Лампы электрические. Методы измерения электрических и световых параметров.
2. ГОСТ 23198-94 Лампы электрические. Методы измерения спектральных и цветовых характеристик.
3. ГОСТ 10771-82 Лампы накаливания светоизмерительные рабочие. Технические условия.
4. Международный электротехнический словарь. Глава 845 Освещение. Publication 50(845) / Международный словарь по освещению. CIE Publ. № 17-4 / Bureau Central de la Commission Electrotechnique Internationale. Genève, Suisse. – 1987. – 379 p.
5. В.А. Длугунович Устройство юстировки тела накала светоизмерительных ламп / В.А. Длугунович [и др.] // Приборы и методы измерений. – 2015. – Т. 6, № 2. – С. 148–155.
6. CIE 127:2007 Technical report CIE. Measurement of LEDs.
7. CIE S 025/E, 2015, Test Method for LED Lamps, LED Luminaires and LED Modules.
8. Nikanenka S.V. Problems of modern led light sources photometric measurements /S.V. Nikanenka, A.V. Kreidzich, A.S. Jaskov/, Proc; 30th CIE session, CIE x050:2023, – 2023, – Vol. 1, – Part 2, – P. 1199–1203.



ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА И
ФИЗИКА ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ
ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ, АСТРОФИЗИКА

Минимизация времени смешивания в решетках Руднера-Левитова оптимизацией начального состояния

М.А. Анцух^а, П.А. Леоник^а, И.А. Пешко^б

^а Физический факультет, Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь;

^б Институт физики Б. И. Степанова НАН Беларуси, Минск, Беларусь

E-mail: vanishinggraceew@gmail.com

Введение. Смешивание, т. е. процесс перехода системы от начального локализованного состояния к конечному делокализованному стационарному состоянию, вызывает широкий интерес в физике и находит приложения в том числе в квантовых вычислениях [1].

В данной работе мы обращаемся к оптимизации смешивания в устройствах, использующих смоделированные потери для получения делокализованных стационарных конечных состояний из начальных локализованных.

Определённые типы систем со смоделированными потерями можно рассматривать с точки зрения неэрмитовой физики [2], особенностью которой является то, что неэрмитовы матрицы, описывающие “Гамильтониан” системы, допускают особый тип вырождений спектра в так называемых исключительных точках (в этих точках набор собственных векторов становится неполным и “Гамильтониан” не может быть диагонализирован). Было показано, что в неэрмитовых цепочках, рассматриваемых в данной работе, особые точки могут определять не только характер смешивания, но даже и само его существование; помимо этого, было показано, что оптимизировать время смешивания можно посредством изменения параметров системы, более того, взаимное расположение отношения параметров системы и наибольшей исключительной точки определяет скейлинг времени смешивания в зависимости от числа узлов системы [3].

1 Модель. Мы рассматриваем цепочку, состоящую из унитарно связанных одномодовых волноводов, моделируя дополнительные потери в каждом втором волноводе.

Полагая начальное состояние системы когерентным, динамику системы можно записать в виде уравнения Шредингера для вектора когерентных амплитуд с неэрмитовым эффективным Гамильтонианом:

$$\frac{d\vec{\psi}(t)}{dt} = -iH\vec{\psi}(t), \quad H_{2n,2n} = -i\Gamma, \quad H_{2n-1,2n} = H_{2n,2n-1} = v_1, \quad (1)$$

$$H_{2n,2n+1} = H_{2n+1,2n} = v_2, \quad n = \overline{1, N_L},$$

где компоненты вектора амплитуд ψ_j – амплитуды населенностей соответствующих узлов решетки, Γ – коэффициент затухания мод с потерями, N_L – число мод с потерями в системе, v_j – скорости унитарного взаимодействия между модами. Далее положим, что $v_1 = v \cos(\phi)$, $v_2 = v \sin(\phi)$, $v = \sqrt{v_1^2 + v_2^2}$.

Мы рассматриваем системы, обладающие «темновым» состоянием. Темновое состояние является невакуумным стационарным состоянием, что требует наличия нулевого собственного значения в спектре матрицы, определяемой выражением (1). Практическая значимость рассматриваемых систем заключается в том, что они проецируют начальное состояние на некоторое темновое, при условии, что мнимые части остальных собственных значений спектра Гамильтониана имеют отрицательное значение.

Потери в системе приводят к тому, что суммарная вероятность населенности не сохраняется, поэтому для описания смешивания в системе необходимо ввести нормированные в каждый момент времени вероятности, что позволит определить время смешивания классическим образом:

$$p_j(t) = \frac{|\psi_j(t)|^2}{P_{tot}(t)}, \quad P_{tot}(t) = \sum_{j=1}^{2N_L+1} |\psi_j(t)|^2, \quad (2)$$

$$T_{mix}(\varepsilon) = \min\{t \geq 0: \sum_{\forall j} |p_j(t) - p_j^{st}| \leq \varepsilon\},$$

где p_j^{st} – стационарное распределение, к которому система смешивается, T_{mix} – время смешивания.

2 Результаты. Динамика системы претерпевает качественное изменение при переходе отношения параметров v/Γ наибольшей исключительной точки [3] (точка слияния ветвей собственных значений с наибольшим отношением v/Γ). Таким образом, для выявления нетривиальных эффектов, достаточно рассматривать только два случая: отношение v/Γ находится за наибольшей исключительной точкой и до наибольшей исключительной точки.

Подбором начального состояния можно эффективно уменьшать вклад самой медленной динамики в процесс смешивания системы. Так, выбор начального одномодового возбуждения позволяет, в общем случае, лишь минимизировать вклад медленной динамики в процесс смешивания. В случае начального возбуждения двух и более мод можно полностью исключить нежелательную динамику, выбрав возбуждение таким образом, чтобы вектор начального состояния был ортогонален векторам, соответствующим собственным значениям со второй наименьшей мнимой частью.

Рассмотрим зависимость времени смешивания от положения начального одномодового возбуждения. Структура собственного вектора, отвечающего темновому состоянию показывает, что режим конвенционального смешивания (подробнее в [3]) реализуется только при начальном возбуждении мод без потерь.

Зависимость времени смешивания от положения начального одномодового возбуждения определяется положением параметров системы относительно наибольшей исключительной точки. Рис. 1,с представляет зависимость для случаев как симметричной ($v_1 = v_2$), так и асимметричной ($v_1 \neq v_2$) решеток, когда система находится до наибольшей исключительной точки. Получаем, что для симметричной системы, время смешивания также симметрично относительно центрального узла, при этом, что довольно очевидно, возбуждение центрального узла приводит к минимальному времени смешивания. При этом, важно еще учитывать четность-нечетность числа N_L . Так, для четного числа узлов с потерями компонента центрального узла вектора, соответствующего второму наименьшему собственному значению, равна нулю; для асимметричной цепочки – центральным модам соответствуют две малые, но отличные от нуля компоненты.

Введение асимметрии в систему сдвигает наибольшую исключительную точку в сторону меньшего отношения параметров, что отчетливо видно на Рис. 1,а. Пока отношение параметров системы находится между двумя исключительными точками, зависимость времени смешивания от положения начального возбуждения будет оставаться немонотонной, при этом минимум зависимости будет смещаться к краю цепочки. При этом, есть соответствие между компонентами собственного вектора, соответствующего собственному значению со второй наименьшей мнимой частью и зависимостью времени смешивания от положения начального одномодового возбуждения.

Как только отношение параметров системы оказывается за наибольшей исключительной точкой, то зависимость времени смешивания от положения становится монотонно убывающей функцией номера узла. Это связано с тем, что теперь зависимость диктуется не структурой собственного вектора, соответствующего собственному значению со второй наименьшей мнимой частью, а структурой вектора темнового состояния, компоненты которого при асимметрии возрастают с ростом номера узла. Для симметричной цепочки время смешивания практически не будет зависеть от положения начального возбуждения ввиду того, что компоненты темнового вектора будут равномерно распределены.

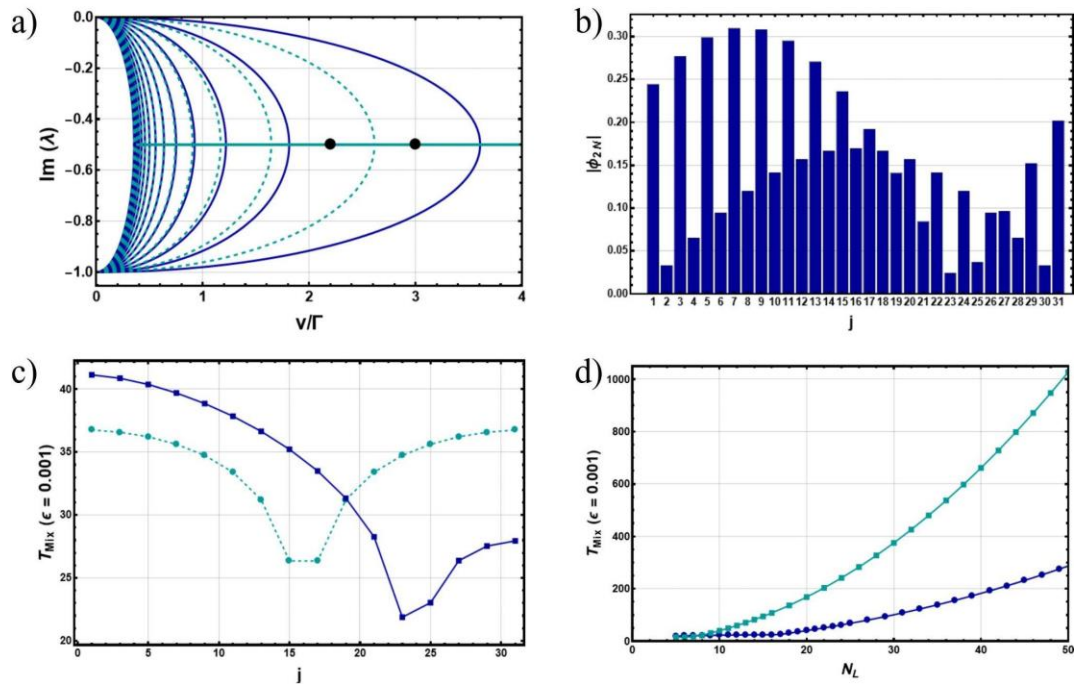


Рис. 1. (a): Мнимая часть спектра исследуемой системы в зависимости от отношения параметров v/Γ при $N_L = 15$. Сплошные линии отвечают симметричной решетке ($v_1 = v_2$), пунктирные – асимметричной ($v_1 \neq v_2$). Черными точками отмечены параметры, использовавшиеся для построения графика (с): $v/\Gamma = 2,2$, $\phi = 0,22\pi$ и $v/\Gamma=3$, $\phi=0,25\pi$; (b): Абсолютные значения компонент вектора, соответствующего собственному значению со второй наименьшей мнимой частью для асимметричной решетки; (с): Зависимость времени смешивания от положения начального одномодового возбуждения для симметричной и асимметричной решеток; сплошная кривая отвечает асимметричной системе, пунктирная – симметричной; (d): Зависимость времени смешивания от числа мод с потерями при начальном возбуждения двух мод. Сплошная кривая соответствует случаю, когда вектор начального возбуждения ортогонален вектору, соответствующего собственному значению со второй наименьшей мнимой частью; Пунктирная кривая – в начальный момент времени возбуждаются моды с одинаковой по модулю амплитудой. Параметры системы в двух случаях: $v/\Gamma=2$, $\phi=0,25\pi$. Во всех случаях возбуждались первая и третья моды.

Таким образом, если отношение параметров системы находится до наибольшей исключительной точки, то знание компонент собственного вектора, соответствующего собственному значению со второй наименьшей мнимой частью, позволяет сразу выбрать узел, возбуждение которого при заданных параметрах системы, приведет к наиболее интенсивному процессу смешивания. Для случая, когда отношение параметров системы находится за наибольшей исключительной точкой, то зависимость времени от изначально возбуждаемого узла полностью определяется вектором темнового состояния.

Возбуждая в начальный момент времени две моды так, чтобы вектор начального состояния был ортогонален собственному вектору соответствующему собственному значению со второй наименьшей мнимой частью, мы ставим своей целью эффективно сдвинуть наибольшую исключительную точку в сторону меньших значений, увеличивая таким образом область логарифмического скейлинга [3]. Рис. 1,d показывает, что такой эффект обусловлен смещением исключительной точки при надлежащем начальном возбуждении.

Заключение. Мы показали, что время смешивания системы может быть уменьшено не только изменением констант связи или геометрии системы, но также правильным подбором начального состояния в соответствии со структурой собственных векторов эффективного Гамильтониана: при перемещении одномодового начального возбуждения по цепочке есть

явное соответствие между компонентами вектора и временем смешивания – минимальное время смешивания соответствует минимальной по абсолютному значению компоненте (рис. 1(b)). Также, было показано, что, подбирая начальное состояние, ортогональное вектору, соответствующему собственному значению со второй наименьшей мнимой частью можно добиться значительного уменьшения времени смешивания и увеличения области логарифмического скейлинга (Рис. 1,с).

Литература.

1. S. Venegas-Andraca / Quantum walks: A comprehensive review // Quantum Information Processing 11 (2012).
2. Y. Ashida, Z. Gong, and M. Ueda / Non-hermitian physics // Advances in Physics 69, 249–435 (2020).
3. D. Mogilevtsev, I. Peshko, M. Antsukh, D. Novitsky / Optimizing mixing in the Rudner–Levitov lattice // JOSAB Vol. 40, Issue 10, 2566-2575(2023), <https://doi.org/10.1364/JOSAB.499818>.

Нерелятивистская частица со спином 2 в магнитном поле

А.В. Бурый, А.В. Ивашкевич

*Институт физики имени Б.И. Степанова Национальной академии наук Беларуси
E-mail: anton.buryu.97@mail.ru*

Введение. Задача о частице в магнитном поле является классической для квантовой механики. Первыми были решены уравнение Шредингера и релятивистское уравнение Дирака [1-3]. Значительно позже были найдены решения релятивистского уравнения Даффина – Кемма для частицы со спином 1 при наличии у векторной частицы дополнительных характеристик: поляризуемости, аномального магнитного и электрического квадрупольного моментов; а также при учете геометрии 3-мерных пространств постоянной кривизны [4–13]. В настоящей работе мы обращаемся к исследованию уравнения для частицы со спином 2 в магнитном поле. Исходным является введенное Ф.И. Федоровым [14] матричное 39-компонентное уравнение 1-го порядка; см. также недавние работы [15-19]. В частности, в [19] были найдены решения этого уравнения во внешнем однородном магнитном поле; анализ оказался достаточно сложным; в частности, релятивистские спектры энергии получаются как корни алгебраического уравнения 7-го порядка, 5 корней которого дают физически интерпретируемые уровни энергий. К сожалению, их анализ возможен только численными методами. В работе [20] из 39-компонентного матричного уравнения Федорова было выведено нерелятивистское уравнение, напоминающее уравнение для нерелятивистской частицы со спином 1/2, но в данном случае волновая функция имеет пять компонент. В настоящей работе построены решения этой системы уравнений с учетом внешнего магнитного поля.

В работе [20] было выведено нерелятивистское уравнение для частицы со спином 2:

$$iD_0\Psi = -\frac{1}{2M}(D_1^2 + D_2^2 + D_3^2)\Psi - \frac{ie}{2M}(F_{23}S_1 + F_{31}S_2 + F_{12}S_3)\Psi; \quad (1)$$

волновая функция имеет 5 компонент, явный вид трех спиновых матриц следующий:

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \\ \psi_5 \end{pmatrix}, S_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}, S_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 2 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2 & 0 & 0 \end{pmatrix}, S_3 = \begin{pmatrix} 0 & -2 & 0 & 0 & -1 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix};$$

символ D_a обозначает $D_a = \partial_a + ieA_a, a = 0, 1, 2, 3$. Для спиновых матриц выполняются коммутационные соотношения:

$$S_1 S_2 - S_2 S_1 = S_3, \quad S_2 S_3 - S_3 S_2 = S_1, \quad S_3 S_1 - S_1 S_3 = S_2. \quad (2)$$

1 Диагонализация матрицы проекции спина S_3 . Для анализа уравнения в присутствии магнитного поля матрицу третьей проекции спина S_3 удобно иметь диагональной. Для этого над волновой функцией необходимо совершить линейное преобразование

$$S_3 \Psi = \bar{\Psi}, \quad \Psi' = U\Psi, \quad \bar{\Psi}' = U\bar{\Psi}, \quad US_3U^{-1}\Psi = \bar{\Psi}',$$

которое диагонализует матрицу S_3 :

$$US_3U^{-1} = \Lambda \Rightarrow US_3 = \Lambda U, \quad \Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda_5 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

С учетом обозначений

$$U = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & x_{13} & x_{14} & x_{15} \\ x_{21} & x_{22} & x_{23} & x_{24} & x_{25} \\ x_{31} & x_{32} & x_{33} & x_{34} & x_{35} \\ x_{41} & x_{42} & x_{43} & x_{44} & x_{45} \\ x_{51} & x_{52} & x_{53} & x_{54} & x_{55} \end{pmatrix}, \quad S_3 = \begin{pmatrix} 0 & -2 & 0 & 0 & -1 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

для элементов матрицы U находим систему уравнений

$$\begin{aligned} 2x_{12} &= \lambda_1 x_{11}, -2x_{11} = \lambda_1 x_{12}, x_{14} = \lambda_1 x_{13}, -x_{13} = \lambda_1 x_{14}, -x_{11} = \lambda_1 x_{15}, \\ 2x_{22} &= \lambda_2 x_{21}, -2x_{21} = \lambda_2 x_{22}, x_{24} = \lambda_2 x_{23}, -x_{23} = \lambda_2 x_{24}, -x_{21} = \lambda_2 x_{25}, \\ 2x_{32} &= \lambda_3 x_{31}, -2x_{31} = \lambda_3 x_{32}, x_{34} = \lambda_3 x_{33}, -x_{33} = \lambda_3 x_{34}, -x_{31} = \lambda_3 x_{35}, \\ 2x_{42} &= \lambda_4 x_{41}, -2x_{41} = \lambda_4 x_{42}, x_{44} = \lambda_4 x_{43}, -x_{43} = \lambda_4 x_{44}, -x_{41} = \lambda_4 x_{45}, \\ 2x_{52} &= \lambda_5 x_{51}, -2x_{51} = \lambda_5 x_{52}, x_{54} = \lambda_5 x_{53}, -x_{53} = \lambda_5 x_{54}, -x_{51} = \lambda_5 x_{55}. \end{aligned} \quad (4)$$

Отсюда следует

$$\Psi' = U\Psi, \quad U = \begin{pmatrix} 2i & 2 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & i & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -i & 1 & 0 \\ -2i & 2 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad US_3U^{-1} = \begin{pmatrix} -2i & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2i \end{pmatrix} = S'_3. \quad (5)$$

2 Разделение переменных. Используем известное представление для векторного потенциала однородного магнитного поля

$$\vec{A} = \frac{1}{2} \vec{B} \times \vec{r}, \quad \vec{B} = (0, 0, B), \quad F_{12} = B, F_{23} = 0, F_{31} = 0;$$

отсюда после пересчета к цилиндрическим координатам получаем

$$A_t = 0, \quad A_r = 0, \quad A_x = 0, \quad A_\phi = -\frac{Br^2}{2}. \quad (6)$$

Исходное уравнение в случае такого поля упрощается. Введем обозначения:

$$\frac{eB}{\hbar c} = b, \quad \frac{e\hbar}{2M} B = \mu_0,$$

тогда исходное уравнение примет вид

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = -\frac{\hbar^2}{2M} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial}{\partial \phi} - i \frac{br^2}{2} \right)^2 + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \Psi + \mu_0 \begin{vmatrix} -2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & +1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & +2 \end{vmatrix} \Psi. \quad (7)$$

Поскольку матрица смешивания в уравнении (7) диагональна, то отдельные компоненты волновой функции $\Psi'_\alpha, \alpha = 1, \dots, 5$ будут подчиняться независимым уравнениям с одинаковой структурой:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_\alpha = -\frac{\hbar^2}{2M} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial}{\partial \phi} - i \frac{br^2}{2} \right)^2 + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \Psi_\alpha + \mu_\alpha \Psi_\alpha, \quad (8)$$

Решения уравнения (7) ищем в виде $\Psi = e^{-i\frac{\epsilon t}{\hbar}} e^{im\phi} e^{ikz} f(r)$, при этом из (8) получаем пять уравнений со следующей структурой:

$$\epsilon f = -\frac{\hbar^2}{2M} \left[\frac{d^2}{dr^2} f + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} f - \frac{1}{r^2} \left(m - \frac{br^2}{2} \right)^2 f - k^2 f \right] + \mu f.$$

С использованием обозначения $\frac{2M(\epsilon - \mu)}{\hbar^2} = E$ уравнение записывается так:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \frac{1}{r^2} \left(m - \frac{br^2}{2} \right)^2 + E - k^2 \right] f = 0.$$

Это уравнение решается в вырожденных гипергеометрических функциях. Условие полиномиальности решений $a = -n, n = 0, 1, 2, 3, \dots$ дает

$$\frac{|m| - m + 1}{2} - \frac{E - k^2}{2b} = -n \Rightarrow E - k^2 = 2b \left(n + \frac{|m| - m + 1}{2} \right). \quad (9)$$

Учитывая выражения для используемых параметров

$$E = \frac{2M\epsilon_i}{\hbar^2} - \frac{2M\mu_i}{\hbar^2}, \quad \mu_0 = \frac{e\hbar}{2M} B, \quad b = \frac{eB}{\hbar c},$$

получаем формулу для пяти серий энергетических уровней:

$$\epsilon_i - \frac{p^2}{2M} = \frac{e\hbar B}{Mc} \left(n + \frac{|m| - m + 1}{2} \right) + \mu_i, \quad \mu_i = \{-2, -1, 0, 1, 2\} \frac{e\hbar}{2M} B. \quad (10)$$

Заключение. Возможным обобщением этой системы является частица со спином 2, обладающая аномальным магнитным моментом [19]; релятивистское уравнение для такой частицы в формализме уравнений 1-го порядка включает 50 уравнений, и получение нерелятивистского приближения является непростой и все еще не решенной задачей.

Литература.

1. Rabi, I. I. Das freie Electron in Homogenen Magnetfeld nach der Diraschen Theorie / I. I. Rabi // Z. Phys. – 1928. – Vol. 49. – P. 507–511.
2. Landau, L. Diamagnetismus der Metalle / L. Landau // Ztschr. Phys. – 1930. – Vol. 64. – P. 629–637.
3. Plesset, M. S. Relativistic wave mechanics of the electron deflected by magnetic field / M. S. Plesset // Phys.Rev. – 1931. – Vol. 12. – P. 1728–1731.
4. Bogush, A. A. Schrödinger particle in magnetic and electric fields in Lobachevsky and Riemann spaces / A. A. Bogush, V. M. Red'kov, G. G. Krylov // Nonlinear Phenomena in Complex Systems. – 2008. – Vol. 11. – № 4. – P. 403–421.
5. Богуш, А. А. Квантовомеханическая частица в однородном магнитном поле на фоне пространства Лобачевского / А. А. Богуш, В. М. Редьков, Г. Г. Крылов // Доклады НАН Беларуси. – 2009. – Том 53, № 2. – С. 45–51.
6. Богуш, А. А. Квантовомеханическая частица в однородном магнитном поле в сферическом пространстве S_3 / А. А. Богуш, В. М. Редьков, Г. Г. Крылов // Весці. Нац. акад. навук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2009. – № 2. – С. 57–63.
7. В.В. Кисель, Е.М. Овсиюк, В.М. Редьков. О решениях уравнения Даффина – Кеммера для частицы со спином 1 в однородном магнитном поле ДАН Беларуси. 2010. Т. 54. № 4, С. 64 – 71.
8. Овсиюк, Е. М. О дираковской частице в однородном магнитном поле в пространстве Римана / Овсиюк Е. М., Кисель В. В., Редьков В. М. // Весці НАН Беларусі. Сер. фіз. - мат. навук. – 2010. – № 4. – С. 95–101.
9. Ovsyuk, E. M. On a Dirac particle in an uniform magnetic field in 3-dimensional spaces of constant negative curvature / E. M. Ovsyuk, V. V. Kisel, V. M. Red'kov // NPCS. 2012. Vol. 15, no 1. – P. 41 – 55.
10. Квантовая механика векторной частицы в магнитном поле на четырехмерной сфере / В. В. Кисель, Е. М. Овсиюк, О. В. Веко, В. М. Редьков // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Сер. Физико-математические науки. – Теоретическая физика. 2012. № 1 (141) С. 128 – 137.
11. В.В. Кисель, Е.М. Овсиюк, Ю.Я.А. Войнова, О.В. Веко, В.М. Редьков. Квантовая механика частицы со спином 1 и аномальным магнитным моментом в магнитном поле // Доклады НАН Беларуси. – 2016. – Том 60. № 5. – С. 83-90.
12. В.В. Кисель, Е.М. Овсиюк, Я.А. Войнова, В.М. Редьков Квантовая механика частицы со спином 1 и квадрупольным моментом во внешнем однородном магнитном поле // Проблемы физики, математики и техники. – 2017. – № 3(32). – С. 18–27.
13. Овсиюк, Е. М. Квантовая механика частиц со спином во внешнем магнитном поле / Е.М. Овсиюк, О.В. Веко, Я.А. Войнова, В.В. Кисель, В.М. Редьков. – Беларуская навука: Мінск, 2017. – 515 стр.
14. Федоров Ф.И. К теории частицы со спином 2 // Уч. зап. БГУ. Сер. физ.-мат. – 1951. – № 12. – С. 156–173.
15. Кисель, Е.М. Овсиюк, О.В. Веко, В.М. Редьков. Нерелятивистский предел в теории частицы со спином 2. // Доклады НАН Беларуси.– 2015. - Том 59, № 3. - С. 21–27.
16. On the matrix equation for a spin 2 particle in pseudo-Riemannian space-time, tetrad method / A. Ivashkevich, A. Buryu, E. Ovsyuk, V. Balan, V. Kisel, V. Red'kov // Proceedings of Balkan Society of Geometers. 2021. Vol. 28. P. 45–66.

17. Ивашкевич, А.В. Уравнение Федорова для поля со спином 2, учет псевдоримановой структуры пространства-времени / А.В. Ивашкевич, А.В. Бурый, В.М. Редьков // Вестник Фонда Фундаментальных исследований. – 2022. – № 4. – С. 48–60.

18. On the matrix equation for a spin 2 particle in pseudo-Riemannian space-time. II. Separating the variables in spherical coordinates / A. Ivashkevich, A. Buryy, E. Ovsyuk, V. Balan, V. Kisel, V. Red'kov // Proceedings of Balkan Society of Geometers. – 2022. – Vol. 29. – P. 12 – 33.

19. Ivashkevich, A.V. Spin 2 particle, cylindric symmetry, projective operator method, external magnetic field / A.V. Ivashkevich, A.V. Bury, V.M. Red'kov, O.A. Semenyuk, E.M. Ovsyuk, V.V. Kisel // Nonlinear Dynamics and Applications: Proceedings of the Twenty eight Anniversary Seminar NPCSS-2022, Minsk, June 18 – 21, 2022 = Нелинейная динамика и приложения: труды XXVIII Международного семинара, Минск, 21 – 24 июня 2022 г. / редкол.: В.А. Шапоров [и др.]; под ред. В.А. Шапорова, А.Г. Трифонова; Объединенный институт энергетических и ядерных исследований – «Сосны» НАН Беларуси. – Минск: Право и экономика, 2022.– 486 с.; С. 302–341.

20. Нерелятивистское приближение в 39-компонентной теории для частицы со спином 2 / А.В. Ивашкевич, А.В. Бурый, Е.М. Овсюк, В.В. Кисель, В.М. Редьков / ... 2024 –

Гравитационные волны в теории относительности Хаяши-Ширафуджи

А.В. Головнев^а, А.Н. Семенова^б, В.П. Вандеев^б

^а*Centre for Theoretical Physics, The British University in Egypt,
El Sherouk City, Cairo 11837, Egypt*

^б*Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова Национального
исследовательского центра «Курчатовский институт»,
Гатчина, 188300, Россия
E-mail: vandeev_vp@npi.nrcki.ru*

Несмотря на грандиозные успехи теории относительности Эйнштейна в описании гравитационных явлений, она имеет ряд космологических сложностей, связанных в первую очередь с природой темных секторов. Это приводит нас к естественному заключению о том, что-либо они состоят из неизвестных нам элементарных частиц, либо, что гравитацию на определенных масштабах нужно описывать отличным от общей теории относительности (ОТО) образом. Мы рассматриваем трехпараметрическое обобщение [1] телепараллельного эквивалента эйнштейновской общей теории относительности TEGR (Teleparallel Equivalent of General Relativity), где плотность лагранжиана имеет вид:

$$\frac{a}{4} T_{\alpha\beta\mu} T^{\alpha\beta\mu} + \frac{b}{2} T_{\alpha\beta\mu} T^{\beta\alpha\mu} - c T_{\mu} T^{\mu}, \quad (1)$$

который при $a=b=c$ становится плотностью лагранжиана TEGR. В рамках этой теории основной геометрической характеристикой пространственно-временного многообразия является кручение

$$T_{\alpha\beta\mu} = g_{\alpha\gamma} e_a^\gamma (\partial_\beta e_\mu^a - \partial_\mu e_\beta^a), \quad T_\mu = g^{\alpha\beta} T_{\alpha\mu\beta}, \quad (2)$$

а динамической переменной является тетрада e_μ^a , которая с помощью плоской метрики Минковского η_{ab} задает риманову метрику

$$g_{\mu\nu} = e_\mu^a e_\nu^b \eta_{ab}. \quad (3)$$

В рамках этой теории мы рассматриваем линейные возмущения вакуумных уравнений движения над плоской тетрадой $e_\mu^a = \delta_\mu^a$ в виде

$$e_0^0 = 1 + \phi, e_i^0 = \partial_i \beta + u_i, e_0^i = \partial_i \zeta + v_i, e_j^i = 1 - \psi \delta_{ij} + \partial_{ij}^2 \sigma + \partial_j c_i + \epsilon_{ijk} (\partial_k s + w_k) + \frac{1}{2} h_{ij}, \quad (4)$$

где, w_i, c_i - бездивергентные вектора, h_{ij} - симметричная, бесследовая, и бездивергентная матрица. Эти возмущения упрощаются фиксацией калибровки $\sigma=0, c_i=0, \beta=\zeta$, что после замен $w_i = \epsilon_{ijk} \partial_k \chi_k, M_i = \frac{u_i - v_i}{2}, L_i = \frac{u_i + v_i}{2}$, ведет к тому, что в первом порядке теории возмущений уравнения движения в тензорном секторе имеют вид

$$(a+b)(h_{ij}'' - \Delta h_{ij}) = 0, \quad (5)$$

в векторном секторе

$$(a+b)(M_i'' - \Delta M_i) = 0, \quad (6)$$

$$(a+b)M_i - (a-b)(L_i + \chi_i') = 0, \quad (7)$$

$$(a+b+2c)M_i' - (a+b-2c)(L_i' + \Delta \chi_i) = 0, \quad (8)$$

в скалярном секторе

$$4c\psi + (2c - a - b)(\zeta' - \phi) = 0, \quad (9)$$

$$(2c - a - b)\Delta \zeta + (6c - a - b)\psi' = 0, \quad (10)$$

$$2c\phi - (4c - a - b)\psi - (2c - a - b)\zeta' = 0, \quad (11)$$

$$(a-b)(s'' - \Delta s) = 0. \quad (12)$$

Анализируя систему уравнений (5)-(12), определяем характер всех переменных, в рамках моделей, реализуемых при различных комбинациях параметров a, b, c . Оказывается, что в первом порядке теории возмущений подобно ОТО [2], то есть при $a=b=c$, где уравнения движения имеют вид

$$\phi = \psi = 0, M_i = 0, h_{ij}'' - \Delta h_{ij} = 0, \quad (13)$$

ведут себя две модели:

1. $2c = a + b$, где уравнения движения

$$\phi = \psi = 0, s'' - \Delta s = 0, M_i = 0, L_i = -\chi_i' h_{ij}'' - \Delta h_{ij} = 0. \quad (14)$$

Откуда видно, что динамика метрических переменных ϕ, ψ, M_i, h_{ij} тождественна (13), а Лоренцевы переменные s, L_i, χ_i перестают быть полностью калибровочными, но так как они не входят в метрику, то на наблюдаемые величины влияния не окажут.

2. $a = b = 3c$ где уравнения движения

$$\phi + \psi = \zeta = 0, M_i = 0, L_i' = -\Delta \chi_i, h_{ij}'' - \Delta h_{ij} = 0. \quad (15)$$

Где также видно, что тензорные переменные h_{ij} подчиняются волновому уравнению, вектор M_i тривиален, метрические скаляры обладают несколько большей свободой по сравнению с ОТО, а среди Лоренцевых переменных лишь скаляр s и вектор χ_i калибровочные, тогда как на остальные наложены связи.

Остальные шесть моделей даже в линейном порядке очень далеки от эквивалента ОТО, поэтому малоприменимы к описанию физики.

Таким образом мы рассмотрели одно из возможных обобщений ТЕГР, в рамках линейной теории возмущений и обнаружили две модели, которые могут быть интересны для дальнейшего исследования при поиске модификаций теории относительности.

Литература

1. K. Hayashi, T. Shirafuji. New general relativity. *Physical Review* **D19**, (1979), 3524.
2. A. Golovnev, A.N. Semenova, V.P. Vandeev. *Gravitational Waves in New General Relativity. Journal of Cosmology and Astroparticle Physics* **JCAP01**, (2024), 003.

Строение, конформации и торсионные ИК спектры молекулы HSSOH

Е.А. Жук^a, Д.С. Галинская^a, А.Е. Малевич^b, Г.А. Пицевич^a

^a Физический факультет БГУ, 220030 Минск, Беларусь

^b Механико – математический факультет БГУ, 220030 Минск, Беларусь

E-mail: zhuk.katerina05@gmail.com

Молекула оксатрисульфана (ОТС) – HSSOH, является комбинаторным представителем молекул общих рядов HS_nH и HO_nH , которые сами по себе представляют огромный интерес во многих приложениях. С другой стороны, началом смешанных комбинаций цепочек атомов серы и кислорода можно считать хорошо известную молекулу HSOH. Ранее мы исследовали торсионные спектры некоторых представителей этого ряда молекул: HSOSH [1] и HOSOH [2], что во многом определяет наш интерес к молекуле ОТС.

Хотя с позиций точечных групп симметрии анализируемая молекула не имеет элементов симметрии, как, и например, молекулы DOSOH и DSOSH, однако, согласно [1,2], с позиций инверсно – перестановочных групп и групп молекулярной симметрии молекула помимо тривиального содержит еще один инверсно – перестановочный элемент симметрии и, благодаря этому относится к группе молекулярной симметрии $C_s(M)$. Отметим также, что колебательные состояния молекулы ОТС дополнительно конфигурационно вырождены (HSSOH и HOSSH), однако, поскольку туннелирование между этими структурно эквивалентными конфигурациями должно сопровождаться разрывом химических связей, расщеплением колебательных состояний в этом случае следует пренебречь. Так же, как и исследованные в [1,2] соединения молекула ОТС реализуется в виде цис – и транс – конформеров, представленных на Рис.1

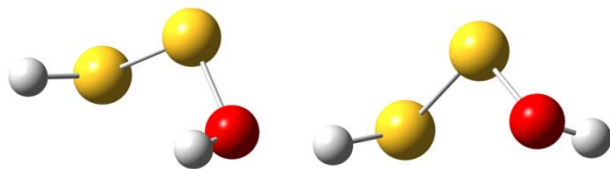


Рис.1. Равновесные конфигурации цис – (слева) и транс – (справа) конформеров молекулы ОТС.

Каждый из двух конформеров, представленных на Рис.1, может реализовываться в виде двух эквивалентных конфигураций, между которыми возможно туннелирование. Равновесные конфигурации конформеров молекулы ОТС и их ИК спектры были рассчитаны на уровне теории MP2/dAug-cc-pVTZ. Однако, стандартные расчеты колебательных спектров, как в гармоническом, так и в ангармоническом приближениях, не учитывают тот факт, что молекула ОТС является нежесткой и реализуется в нескольких

эквивалентных конфигурациях. Чтобы рассчитать частоты туннелирования в транс – и цис – конформерах необходимо рассчитать двухмерную поверхность потенциальной энергии (ППЭ) молекулы, формирующуюся за счет вращения O – H и S – H групп вокруг S – O и S – S связей соответственно. Торсионные координаты γ_1 и γ_2 варьировались в интервале $4^0 - 356^0$ с интервалом 8^0 . В каждой точке с заданными координатами γ_1 и γ_2 выполнялась оптимизация конфигурации молекулы по всем остальным геометрическим параметрам. Расчеты выполнялись на уровне теории MP2/dAug-cc-pVTZ. Рассчитанная 2D ППЭ в координатах γ_1 и γ_2 представлена на Рис. 2.

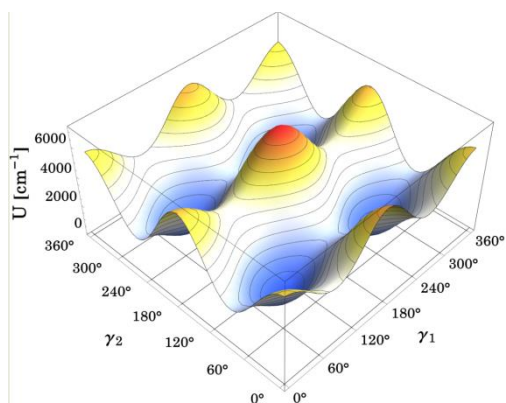


Рис.2. Рассчитанная на уровне теории MP2/Aug-cc-pVTZ 2D ППЭ молекулы ОСТ в координатах γ_1 и γ_2 .

На Рис.2 хорошо видны два глобальных минимума для двух эквивалентных конфигураций транс – конформеров и два локальных минимума для двух эквивалентных конфигураций цис – конформеров. Глобальный максимум реализуется в точке с координатами $\gamma_1 = \gamma_2 = 180^0$. Были также рассчитаны 2D поверхности кинетических коэффициентов, которые представлены на Рис. 3.

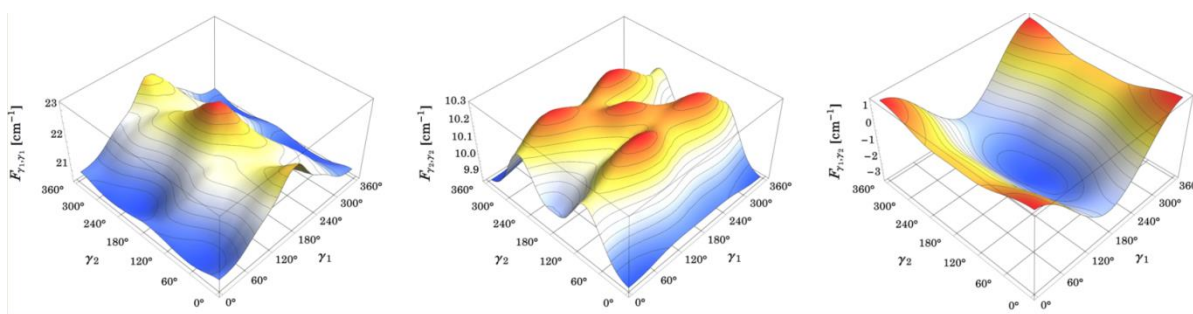


Рис.3. Рассчитанные на уровне теории MP2/Aug-cc-pVTZ 2D поверхности кинетических коэффициентов: для O – H группы (слева), для S – H группы (посередине) для их кинетического взаимодействия (справа).

Численное решение колебательного уравнения Шредингера ограниченной размерности позволило определить частоты торсионных колебаний внутренних волчков. Расчеты показали, что частота туннелирования в основном состоянии транс – конформера равна $3.56 \cdot 10^{-20} \text{ см}^{-1}$, а в цис – конформере – $1.76 \cdot 10^{-19} \text{ см}^{-1}$.

Литература.

1. Pitsevich G.A., Malevich A.E., Kisuryna D.G., Ostyakov A.A., Sapeshka U.U. / Torsional States and Tunneling Probability in HOSOH, DOSOD, and DOSOH Molecules Analyzed at the CBS Limit, J. Phys. Chem. A. – 2020. – Vol. 124, №. 42. P. 8733 – 8743.

2. Pitsevich G.A., Malevich A.E., Zheutok V., Khrapunova A., Sapeshka U.U. / Torsional Vibrations of Two Thiol Groups in the HSOSH, DSOSD, and DSOSH Molecules: 2D PES Study in CBS Limit, *Vibr. Spectr.* – 2021. – Vol. 113, 103208.

Massless Stueckelberg field and the gauge degrees of freedom

A.V. Bury^a, A.V. Ivashkevich^a, O.A. Semenyuk^b

^a*B.I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus,*

^b*Brest State University named after A. S. Pushkin*

E-mail: anton.buryy.97@mail.ru

Introduction. In this paper, we examine the massless Stueckelberg field. Among 11 components field function, antisymmetric tensor represents the gauge variables, the scalar and vector correspond to physically observable quantities. It is shown that in Cartesian coordinates the Stueckelberg equations permits existence of five independent solutions describe the different states of the field. We have derived expression for the energy-momentum tensor of the massless Stueckelberg field. We have found 4 combinations of solutions which do not contribute to energy-momentum tensor, therefore they correspond to purely gauge states. There exist only one solution to which there corresponds nonvanishing energy-momentum tensor, it relates to physically observably state of the massless Stueckelberg field.

1 Cartesian coordinates. Let us start with the known system of equations for massless Stueckelberg field in Cartesian coordinates [1,2]

$$\partial^a \Psi_a = 0, \quad \partial_a \Psi + \partial^b \Psi_{ab} - \Psi_a = 0, \quad \partial_a \Psi_b - \partial_b \Psi_a = 0; \quad (1)$$

as it should be, in this system there is no parameter with the dimension of the inverse length (in other words, the mass). The physical dimensions of the components are as follows $[L^{-1}\Psi] = [L^{-1}\Psi_{ab}] = [\Psi_a]$. In (1), the antisymmetric tensor represents gauge variables, whereas the scalar and vector relate to physically observable variables. Let us apply the matrix form of equations (1). As a field function, we will use an 11-dimensional column

$$\Phi = (\Psi; \Psi_0, \Psi_1, \Psi_2, \Psi_3; \Psi_{01}, \Psi_{02}, \Psi_{03}, \Psi_{23}, \Psi_{31}, \Psi_{12}) = (H, H_1, H_2). \quad (2)$$

The system (1) can be written in the matrix form

$$(\Gamma^a \partial_a - P)\Phi = 0, \quad \Gamma^a = \begin{vmatrix} 0 & G^a & 0 \\ \Delta^a & 0 & K^a \\ 0 & L^a & 0 \end{vmatrix}, \quad P = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & I_{4 \times 4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}, \quad \Phi = \begin{vmatrix} H \\ H_1 \\ H_2 \end{vmatrix}. \quad (3)$$

Taking in mind the substitutions

$$\Psi = fK(x), \quad \Psi_a = f_a K(x), \quad \Psi_{ab} = f_{ab} K(x); \quad K(x) = e^{-icx^0} e^{-ik_1 x^1} e^{-ik_2 x^2} e^{-ik_3 x^3}; \quad (4)$$

we should make the following changes $\partial_a \Rightarrow -ik_a, a = 0, 1, 2, 3, k_0 = k^0 = \epsilon$. We have the algebraic system in the matrix form, $A\Phi = 0$:

$$\begin{pmatrix}
 0 & -k_0 & k_1 & k_2 & k_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 -k_0 & i & 0 & 0 & 0 & k_1 & k_2 & k_3 & 0 & 0 & 0 \\
 k_1 & 0 & -i & 0 & 0 & -k_0 & 0 & 0 & 0 & k_3 & -k_2 \\
 -k_2 & 0 & 0 & i & 0 & 0 & k_0 & 0 & k_3 & 0 & -k_1 \\
 k_3 & 0 & 0 & 0 & -i & 0 & 0 & -k_0 & k_2 & -k_1 & 0 \\
 0 & k_1 & -k_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & k_2 & 0 & -k_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & k_3 & 0 & 0 & -k_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & k_3 & -k_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & -k_3 & 0 & k_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & k_2 & -k_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0
 \end{pmatrix}
 \begin{pmatrix}
 f \\
 f_0 \\
 f_1 \\
 f_2 \\
 f_3 \\
 E_1 \\
 E_2 \\
 E_3 \\
 B_1 \\
 B_2 \\
 B_3
 \end{pmatrix}
 = 0.$$

Allowing for the condition $k_0 = \sqrt{k_1^2 + k_2^2 + k_3^2}$, we get the matrix of the rank 6. As a result, we find 5 independent solutions. In 11-dimensional form these 5 solutions read

$$\Psi_1 = \begin{pmatrix} i/k_3 \\ k_0/k_3 \\ k_1/k_3 \\ k_2/k_3 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} f_3, \quad \Psi_5^{gauge} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ -k_2/k_0 \\ k_1/k_0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} B_3, \quad \Psi_2 = \begin{pmatrix} k_0/k_3 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ k_1/k_3 \\ k_2/k_3 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} E_3, \quad \Psi_3 = \begin{pmatrix} -k_2/k_3 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ -k_1 k_2 / (k_3 k_0) \\ -(k_2^2 + k_3^2) / (k_3 k_0) \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} B_1, \quad \Psi_4 = \begin{pmatrix} k_1/k_3 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ (k_1^2 + k_2^2) / (k_3 k_0) \\ k_1 k_2 / (k_3 k_0) \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} B_2. \quad (5)$$

2 The energy-momentum tensor and gauge solutions. It is necessary to know, which solutions are the gauge ones and which are physically observable. To this end, in the next section we will construct expression for the energy-momentum tensor of the massless Stueckelberg field. In order to separate the gauge solutions and physically observable solutions, we should specify the structure of the energy-momentum tensor for the massless Stueckelberg field. To this end, we need the matrix of the bilinear form:

$$\eta = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & B & 0 \\ 0 & 0 & D \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

As known, the energy-momentum tensor is determined as follows

$$T_b^a(x) = \Psi^+ \eta \Gamma^a \partial_b \Psi(x), \quad (6)$$

whence it follows

$$T_b^a(x) = H^+ G^a \partial_b H_1 + H_1^+ B (\Delta^a \partial_b H + K^a \partial_b H_2) + H_2^+ D L^a \partial_b H_1. \quad (7)$$

Taking into account the substitutions in the form of plane waves, we get

$$T_b^a(x) = -i[H^+AG^ak_bH_1 + H_1^+B(\Delta^ak_bH + K^ak_bH_2) + H_2^+DL^ak_bH_1]. \quad (8)$$

Let us calculate this tensor for 5 independent solutions (5). For solution Ψ_1 we obtain (it is convenient to set both indices down, the total minus before is not substational)

$$\Psi_1, \quad T_{ab} = - \begin{vmatrix} \frac{2k_0^4}{k_3^2} & \frac{2k_0^3k_1}{k_3^2} & \frac{2k_0^3k_2}{k_3^2} & \frac{2k_0^3}{k_3} \\ \frac{2k_0^3k_1}{k_3^2} & \frac{2k_0^2k_1^2}{k_3^2} & \frac{2k_0^2k_1k_2}{k_3^2} & \frac{2k_0^2k_1}{k_3} \\ \frac{2k_0^3k_2}{k_3^2} & \frac{2k_0^2k_1k_2}{k_3^2} & \frac{2k_0^2k_2^2}{k_3^2} & \frac{2k_0^2k_2}{k_3} \\ \frac{2k_0^3}{k_3} & \frac{2k_0^2k_1}{k_3} & \frac{2k_0^2k_2}{k_3} & 2k_0^2 \end{vmatrix} \neq 0; \quad (9)$$

we conclude that this solution represents physically observable state. We readily verify that four remaining solutions $\Psi_2, \Psi_3, \Psi_4, \Psi_5$ give zero contribution to tensor T_b^a :

$$\Psi_i, \quad T_b^a \equiv 0, \quad i = 2, 3, 4, 5; \quad (10)$$

they represent the gauge solutions.

Conclusion. It is shown that in Cartesian coordinates, the Stueckelberg equations permit existence of five independent solutions describing the different states of the field. We have derived expression for the energy-momentum tensor of the massless Stueckelberg field, and have shown that this tensor vanishes identically for 4 independent solutions, and does not vanish only for one solution. The last solution represents the physically observable state of Stueckelberg massless particle, and four remaining ones relate to gauge states. Additionally, we have found its explicit form for arbitrary linear combination of 5 established solutions. These results resolve the problem of separating the physically observable state and the problem of eliminating the gauge solutions.

References.

1. Stueckelberg, E.C.G. Die Wechselwirkungskräfte in der Elektrodynamik und in der Feldtheorie der Kernkräfte (Teil II and III) / E.C.G. Stueckelberg // *Helv. Phys. Acta.* – 1938. – Vol. 11. – P. 299–312. – P. 312–328.
2. Ruegg, H. The Stueckelberg field / H. Ruegg, M. Ruiz-Altabal // *Int. J. Mod. Phys. A.* – 2004. – Vol. 119. – P. 3265–3348.
3. Ovsiyuk, E.M. Stueckelberg particle in external magnetic field. The method of projective operators / E.M. Ovsiyuk, A.P. Safronov, A.V. Ivashkevich, O.A. Semenyuk // *Proceedings of the Komi Science Centre of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences. Series "Physical and Mathematical Sciences"*. – 2022. – № 5 (57). – P. 69–78.
4. Stueckelberg particle in external magnetic field, nonrelativistic approximation, exact solutions / E.M. Ovsiyuk, A.P. Safronov, A.V. Ivashkevich, O.A. Semenyuk // E.M. Ovsiyuk, A.P. Safronov, A.V. Ivashkevich, O.A. Semenyuk // *Proceedings of the Komi Science Centre of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences. Series "Physical and Mathematical Sciences"*. – 2022. – № 5 (57). – P. 79–88.
5. Stueckelberg particle in the Coulomb field, non-relativistic approximation, wave functions and spectra / E.M. Ovsiyuk, O.A Semenyuk, A.V. Ivashkevich, M. Neagu // *Nonlinear Phenomena in Complex Systems.* – 2022. – Vol. 25, № 4. – P. 387–404.

Туннельное расщепление некоторых колебательных уровней энергии а катионе ${}^+\text{SH}_3$ и радикале GeH_3

Е.Е. Ковалева^a, А.Э. Малевич^b, Г.А. Пицевич^a

^a Физический факультет БГУ, 220030 Минск, Беларусь

^b Механико – математический факультет БГУ, 220030 Минск, Беларусь

E-mail: kovaleva.elizaveta.12345@gmail.com

Четырехатомные молекулы, радикалы и ионы с равновесной структурой, аналогичной молекуле аммиака (NH_3), привлекают внимание исследователей по ряду причин. Способность этих соединений туннелировать в эквивалентную конфигурацию, преодолевая барьер плоской структуры, ведет к расщеплению всех колебательных уровней энергии. Многие из пирамидальных соединений вида XY_3 широко распространены в космическом пространстве, также установлено, что некоторые из них являются астрофизическими мазерами. Колебательные и микроволновые спектры катиона ${}^+\text{SH}_3$ и радикала GeH_3 интенсивно исследуются, однако, до сих пор не определены величины туннельных расщеплений их основных колебательных состояний. Отсутствуют также попытки теоретического определения величин соответствующих расщеплений.

Недавно мы предложили оригинальный подход к определению величин туннельных расщеплений некоторых колебательных состояний в пирамидальных соединениях, и протестировали его на катионе гидрониума – ${}^+\text{OH}_3$ [1]. При этом, было достигнуто отличное согласие с представленными в литературе экспериментальными данными.

Для того, чтобы определить энергии стационарных колебательных уровней энергии соединений ${}^+\text{SH}_3$ и GeH_3 , необходимо, прежде всего, рассчитать их двухмерные поверхности потенциальной энергии с использованием двух колебательных координат - $(h, q_{H\dots H}^S)$. Координата h варьировалась в интервале от -0.9 до $+0.9$ Å с шагом 0.05 Å. При этом учитывалось условие симметрии для поверхности потенциальной энергии.

Значение координаты $q_{H\dots H}^S$ варьировалось в интервале от -0.8 до $+0.9$ Å с шагом 0.05 Å. С учетом анализа, расчеты выполнялись на уровне теории CCSD(T)/dAug-cc-pVQZ. Поскольку геометрия пирамидальной четырехатомной молекулы, принадлежащей к точечной группе симметрии C_{3v} для произвольных значений полносимметричных валентных и деформационных координат однозначно определена значениями пары координат $(h, q_{H\dots H}^S)$, то при нахождении потенциальной энергии в каждой точке на двухмерной поверхности не требовалась оптимизация по каким – либо геометрическим параметрам. Это существенно сокращало время, затраченное на выполнение расчетов. Рассчитанная таким образом 2D поверхность потенциальной энергии радикала GeH_3 представлена на Рис. 1

Двухмерная поверхность потенциальной энергии радикала GeH_3 симметрична относительно плоскости, проходящей через точку $h = 0$, перпендикулярно координатной плоскости $(h, q_{H\dots H}^S)$ и параллельно координате $q_{H\dots H}^S$. Два глобальных минимума на 2D потенциальной поверхности соответствуют двум эквивалентным равновесным конфигурациям аниона. Минимум потенциального барьера соответствует точке с нулевыми координатами, но пути перемещения из одного глобального минимума в другой с достаточно соизмеримой вероятностью могут быть достаточно разнообразными. Рассчитанная 2D поверхность потенциальной энергии аниона ${}^+\text{SH}_3$ представлена на Рис 2.

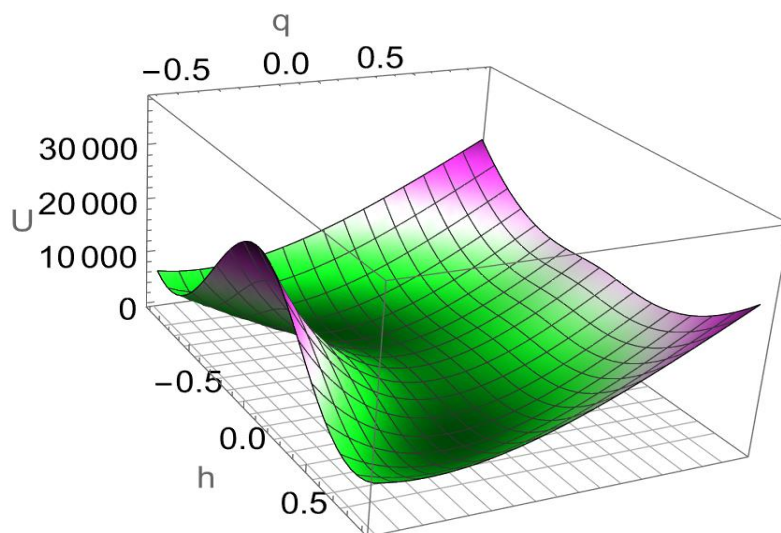


Рис. 1. Рассчитанная на уровне теории CCSD(T)/dAug-cc-pVQZ 2D поверхность потенциальной энергии радикала GeH_3 .

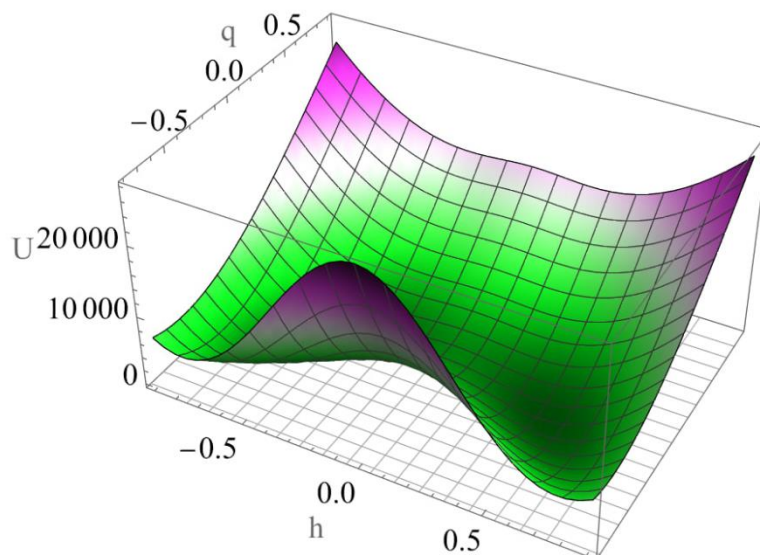


Рис. 2. Рассчитанная на уровне теории CCSD(T)/dAug-cc-pVQZ 2D поверхность потенциальной энергии аниона $+\text{SH}_3$.

Анализ положения двух глобальных минимумов энергии на 2D поверхности потенциальной энергии аниона $+\text{SH}_3$ показывает, что интервалы варьирования координат выбраны не корректно. Видно, что отрицательные значения координаты $q_{H\dots H}^S$ должны быть пролонгированы в сторону уменьшения и значения модуля координаты h должны быть увеличены. Поэтому диапазон варьирования обеих координат был увеличен. Координата h теперь варьировалась в интервале от -1.25 до $+1.25 \text{ \AA}$ с шагом 0.05 \AA . А значение координаты $q_{H\dots H}^S$ теперь варьировалось в интервале от -1.4 до $+0.9 \text{ \AA}$ с шагом 0.05 \AA . Соответствующая 2D поверхность потенциальной энергии аниона $+\text{SH}_3$ представлена на Рис. 3

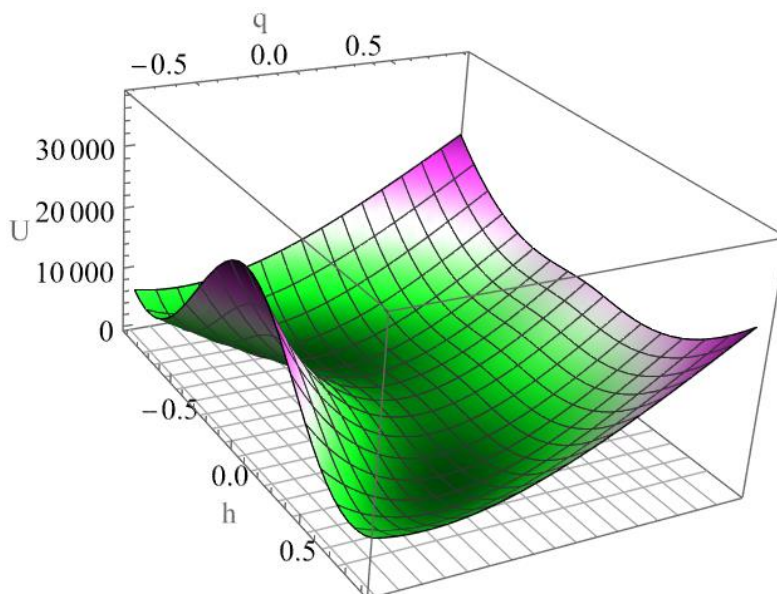


Рис. 3. Рассчитанная на уровне теории CCSD(T)/dAug-cc-pVQZ 2D поверхность потенциальной энергии аниона ${}^+\text{SH}_3$ с расширенным диапазоном варьирования колебательных координат $(h, q_{H\dots H}^S)$.

Очевидно, что в данном случае глобальные минимумы на двухмерной поверхности потенциальной энергии охвачены достаточно широко областью варьирования колебательных координат.

2D поверхности потенциальной энергии для соединений ${}^+\text{SH}_3$ и GeH_3 были рассчитаны на уровне теории CCSD(T)/dAug-cc-pVQZ, опираясь на развитый в работе [1] подход. Последующее численное решение колебательного уравнения Шредингера ограниченной размерности (1), позволило определить энергии ряда колебательных состояний этих соединений

$$-F_Q(Q) \frac{\partial \Psi}{\partial Q} - F_{QQ} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial Q^2} - F_{HH} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial H^2} + U(Q, H) \Psi = E \Psi \quad (1)$$

Величины расщеплений основных колебательных состояний ${}^+\text{SH}_3$ и GeH_3 оказались равными $3.6 \cdot 10^{-11}$ и 0.22 см^{-1} , соответственно. Выполнено сравнение с имеющимися экспериментальными результатами.

Литература

1. G.A. Pitsevich, A.E. Malevich, A.A. Kamnev, A Convenient Set of Vibrational Coordinates for 2D Calculation of the Tunneling Splittings of the Ground State and Some Exited Vibrational States for the Inversion Motion in H_3O^+ , H_3O^- , and H_3O^\cdot , Spectrochim.Acta Part A, 296 (2023) 122660.

Diffusion spectra of ultrarelativistic shell radiation depending on the initial energy distribution in the shell

A. Kurhuzava

B.I. Stepanov Institute of Physics National Academy of Sciences of Belarus

Nezalezhnasci Ave. 68-2, 220072 Minsk, Belarus

E-mail: kuppyory@gmail.com

Introduction. Large-scale cosmic emissions of explosive energy that occur during the explosions of certain supernovae or the merger of compact objects (binary neutron stars, neutron stars and black holes) are called gamma-ray bursts [1]. The initial stage of a gamma-ray burst can be described by the diffusion of radiation in an ultrarelativistic shell [2].

1. Radiation intensity. Let us consider various functions of the initial energy distribution in the shell, including linear and quadratic:

- 1) $L_{01} = a\xi (a - \text{const})$;
- 2) $L_{02} = a(\xi - l/2) + b (a, b - \text{const})$;
- 3) $L_{03} = a\xi^2 - 2al\xi + b (a, b - \text{const})$;
- 4) $L_{04} = a\xi^2 - al\xi + b (a, b - \text{const})$.

Solutions of the radiation diffusion equation under zero boundary conditions and given initial conditions can be written in the form

$$L_1 = \frac{2}{l} \sum_{n=1}^{\infty} \exp\left[-\frac{\Delta c^3 \pi^2 n^2 t^3}{9R_0 l^2}\right] \sin\left(\frac{n\pi\xi}{l}\right) \frac{al^2(-n\pi(-1)^n)}{n^2\pi^2} \quad (1)$$

$$L_2 = \sum_{n=1}^{\infty} \exp\left[-\frac{\Delta c^3 \pi^2 n^2 t^3}{9R_0 l^2}\right] \sin\left(\frac{n\pi\xi}{l}\right) \frac{2b(1 - (-1)^n) - al(1 + (-1)^n)}{n\pi} \quad (2)$$

$$L_3 = 2 \sum_{n=1}^{\infty} \exp\left[-\frac{\Delta c^3 \pi^2 n^2 t^3}{9R_0 l^2}\right] \sin\left(\frac{n\pi\xi}{l}\right) \frac{-2al^2 + bn^2\pi^2 + (-bn^2\pi^2 + al^2(2 + n^2\pi^2))(-1)^n}{n^3\pi^3} \quad (3)$$

$$L_4 = 2 \sum_{n=1}^{\infty} \exp\left[-\frac{\Delta c^3 \pi^2 n^2 t^3}{9R_0 l^2}\right] \sin\left(\frac{n\pi\xi}{l}\right) \frac{(2al^2 - bn^2\pi^2)(-1 + (-1)^n)}{n^3\pi^3} \quad (4)$$

We used functions (1)–(4), Stefan-Boltzmann and Planck laws, as well as typical parameters of gamma-ray bursts ($l = 10^{10}$ cm, $R_0 = 10^8$ cm, $\Delta = 10^{-16}$, $\Gamma = 100$) to obtain time-integrated emission spectra of the photosphere of the ultrarelativistic shell. These spectra are implied by diffusion.

2. Time-integrated spectra for cases 1-4 are presented in Fig. 1-4 respectively. They are obtained by summing instantaneous spectra over time $t = t_a / (1 - \sqrt{1 - \Gamma^{-2}\mu})$ when the arrival time t_a changes from 0.005 to 10 s with a step of 0.01 s:

$$F_{\text{int}} = \sum_{t_{a \min}}^{t_{a \max}} \int_{\beta}^1 \frac{t_a^2 (\mu - \beta)}{(1 - \beta\mu)^3} \frac{v^3}{\exp\left[\frac{v\Gamma(1 - \beta\mu)}{T}\right] - 1} d\mu. \quad (5)$$

In case 1, the slopes of the linear parts of the graphs do not depend on the slope of the initial energy distribution function inside the shell, but the frequency of the flux peak increases with increasing parameter a . In case 2, the slope of the linear part of the graphs at lower frequencies is the

same for any initial envelope energy distribution, and at higher frequencies it becomes steeper with increasing slope of the function corresponding to the initial envelope energy distribution. In cases 3 and 4, the diffusion spectra depend on the initial energy distribution inside the shell only in the frequency region near the flux peak.

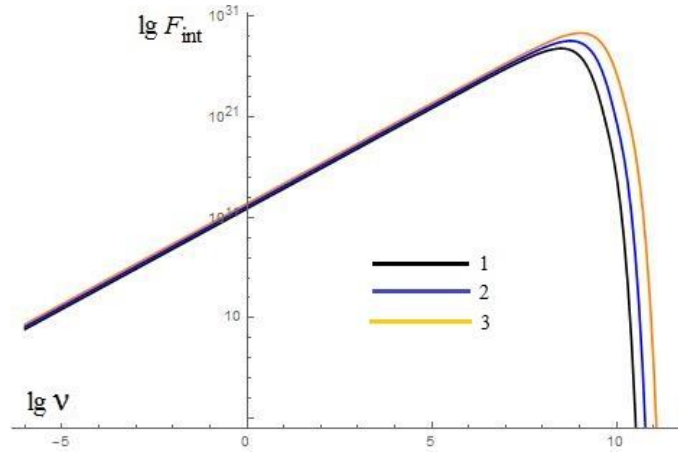


Fig. 1. Time-integrated spectra for the case $L_{01} = a\xi$ ($a - \text{const}$):
 $1 - a = 10$; $2 - a = 100$; $3 - a = 1000$.

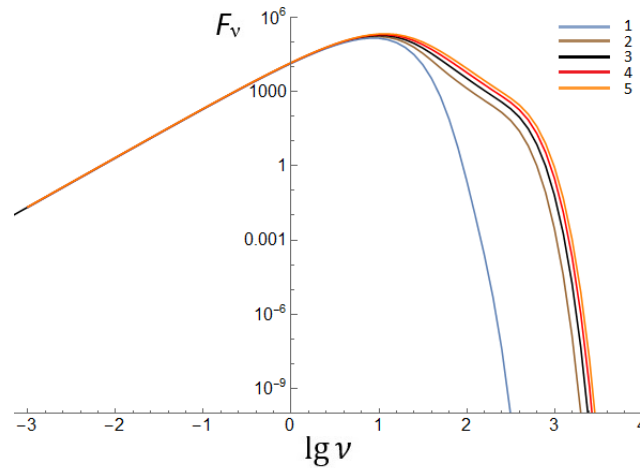


Fig. 2. Time-integrated spectra for the case $L_{02} = a(\xi - l/2) + b$ ($a, b - \text{const}$):
 $1 - a = 2T_0/l$; $2 - a = T_0/l$; $3 - a = 0$; $4 - a = -T_0/l$; $5 - a = -2T_0/l$.

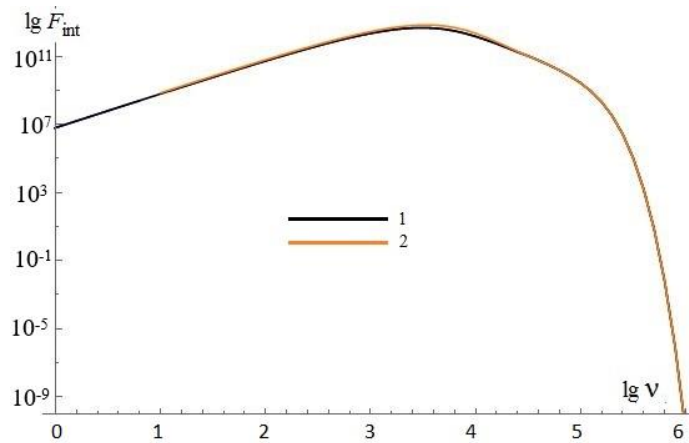


Fig. 3. Time-integrated spectra for the case $L_{03} = a\xi^2 - 2al\xi + b$ ($a, b - \text{const}$):
 $1 - a = 1,25b/l^2$ and $a = 0$ (graphs coincide), $2 - a = -1,25b/l^2$.

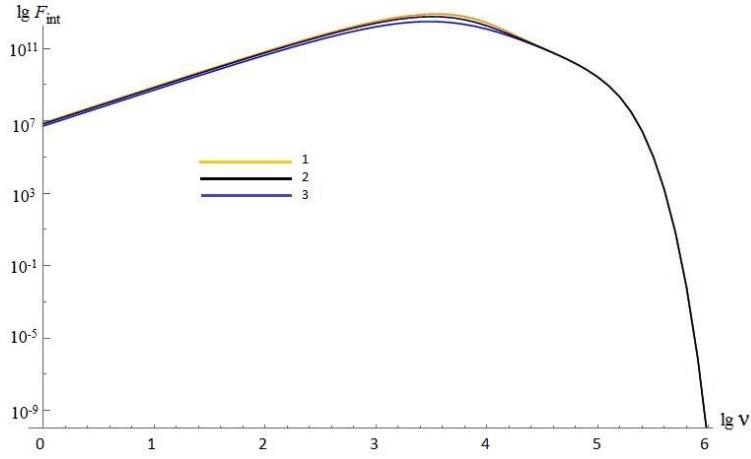


Fig. 4. Time-integrated spectra for the case $L_{04} = a\xi^2 - al\xi + b$ ($a, b - \text{const}$):
 $1 - a = -b/l^2$, $2 - a = 0$, $3 - a = b/l^2$.

The values of the effective temperature of the shell photosphere for cases 1 and 2 are calculated by the formulas

$$T_1 = \left(\frac{4\pi}{3\sigma_{SB}} \frac{2c^2 t^2 \beta^2 \Delta \Gamma^2}{R_0} \left(\frac{t_0}{t} \right)^{8/3} \exp \left[-\frac{\Delta c^3 \pi^2 t^3}{9R_0 l^2} \right] \frac{al^2}{\pi} \right)^{1/4}, \quad (6)$$

$$T_2 = \left(\frac{4\pi}{3\sigma_{SB}} \frac{\Delta \Gamma^2 c^2 t t_0 \beta^2}{l R_0} \left(\frac{t_0}{t} \right)^{5/3} \left(al + \left(b - \frac{al}{2} \right) \Theta_3 \left(0, \exp \left[-\frac{c^3 \pi^2 t^3 \Delta}{9l^2 R_0} \right] \right) - \left(b + \frac{al}{2} \right) \Theta_4 \left(0, \exp \left[-\frac{c^3 \pi^2 t^3 \Delta}{9l^2 R_0} \right] \right) \right) \right)^{1/4}. \quad (7)$$

Similar expressions for cases 3 and 4 contain infinite sums:

$$T_3 = \left[\frac{8\pi c^2 \beta^2 \Delta \Gamma^2 t^2}{3\sigma_{SB} R_0} \left(\frac{t_0}{t} \right)^{8/3} \sum_{n=1}^{\infty} \exp \left[-\frac{\Delta c^3 \pi^2 n^2 t^3}{9R_0 l^2} \right] \frac{(-2al^2 + bn^2 \pi^2 + (-bn^2 \pi^2 + al^2(2 + n^2 \pi^2))(-1)^n)}{n^2 \pi^2} \right] \right)^{1/4}, \quad (8)$$

$$T_4 = \left[\frac{8\pi c^2 \beta^2 \Delta \Gamma^2 t^2}{3\sigma_{SB} R_0} \left(\frac{t_0}{t} \right)^{8/3} \sum_{n=1}^{\infty} \exp \left[-\frac{\Delta c^3 \pi^2 n^2 t^3}{9R_0 l^2} \right] \frac{(2al^2 - bn^2 \pi^2)(-1 + (-1)^n)}{n^2 \pi^2} \right] \right)^{1/4}. \quad (9)$$

Therefore, it is important to determine the critical value of the terms of the sum n_{cr} , which must be taken into account when calculating the spectra. It is found by equating the exponent in the written solution to the shell radiation diffusion equation to unity. So we get

$$n_{cr} = \frac{3l}{c\pi t} \sqrt{\frac{R_0}{\Delta c t}}. \quad (10)$$

To calculate the sum you need $n \gg n_{cr}$. Figure 5 shows time-integrated spectra for $a = 1,25b/l^2$, calculated for case 4 taking into account the different number of first terms of the sum in the corresponding formula for the effective temperature of the shell photosphere. As we see, at low frequencies the spectrum is described by the Band function when using any number of summing terms, and all graphs coincide, and at high frequencies, when using a small number of summing terms, we observe a thermal component of the spectrum, which turns into the Band component with an increase in the number of summing terms.

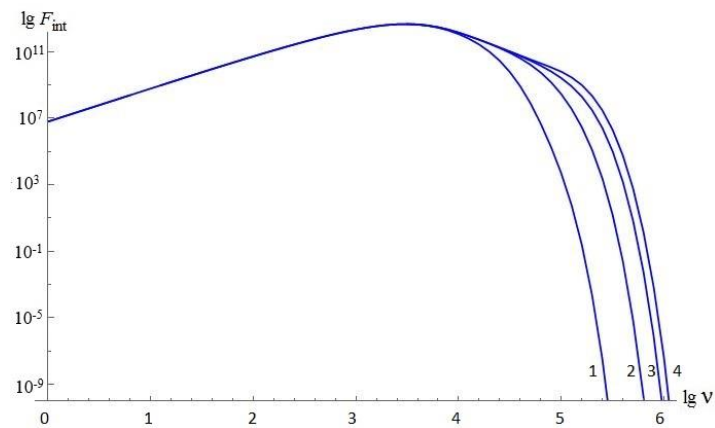


Fig. 5. Time-integrated spectra for $a = 1,25b/l^2$, $L_{04} = a\xi^2 - al\xi + b$ ($a, b - \text{const}$), for the calculation of which the following number of sum terms in formula (9) was taken into account: 1 – 10, 2 – 200, 3 – 1000, 4 – 10000.

Conclusion. The initial stage of a gamma-ray burst can be described by the diffusion of radiation in an ultrarelativistic shell. Cases are considered when the initial energy distribution in the shell depends on the depth according to linear and quadratic laws. The resulting time-integrated emission spectra of the shell photosphere contain a Band component at both high and low frequencies; the slope of the linear part of the spectra at low frequencies is the same in all cases and is approximately 2, and at high frequencies it takes different values depending on the initial distribution energy inside the shell, which allows us to use our model to explain a larger number of gamma-ray bursts that have a typical Band spectrum. The frequency of the flux peak also depends on the initial energy distribution within the shell. For cases of quadratic initial energy distribution inside the shell, the shape of the spectra did not depend on the number of summing terms taken into account in the formulas for the effective temperature of the shell photosphere at low frequencies, but this was not true at high frequencies.

References.

1. Zhang, B. The Physics of Gamma-Ray Bursts / B. Zhang // Rev. Mod. Phys. – 2004. – Vol. 76, No. 4. – P. 1143–1210.
2. Siutsou, I. A. Dependence of gamma-ray burst spectra on the initial energy distribution in the ultrarelativistic shell / I. A. Siutsou, A. E. Kurhuzava // Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. – 2023. – Vol. 59, No. 2. – P. 136–146. <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2023-59-2-136-146>.

Электромагнитное излучение заряда, движущегося вблизи черной дыры Шварцшильда

С.О. Комаров^{a,b}

^a Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь

^b ICRA Net-Minsk, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь

E-mail: KomarovSO@bsu.by

Введение. Исследование процессов, происходящих вблизи сверхмассивных черных дыр, играет большое значение как для астрофизики галактик, так и для физики фундаментальных взаимодействий (см., напр. [1-3]). Единственным источником информации о таких процессах является электромагнитное излучение, испускаемое заряженными частицами вблизи активных ядер галактик. В данной работе рассмотрена модельная задача о

вычислении спектра электромагнитного излучения точечного электрического заряда, движущегося по произвольной орбите вблизи черной дыры Шварцшильда. Найдена спектральная плотность электромагнитного излучения, соответствующая нескольким первым мультипольным моментам. Многие из полученных результатов хорошо известны в литературе (см., напр. [4, 5]). Некоторые из полученных результатов, например, относящиеся к излучению частицы, движущейся по орбите с произвольными параметрами (механической энергией и моментом импульса), по-видимому, являются новыми.

Электромагнитное излучение. Электромагнитное поле, излучаемое зарядом, может быть найдено из общековариантных уравнений Максвелла (используем систему единиц, в которой скорость света в вакууме $c=1$, гравитационная постоянная $G=1$):

$$F^{kl};l=4\pi j^k, \tag{1}$$

$$F_{[kl;m]}=0, \tag{2}$$

где F_{kl} – тензор электромагнитного поля, j^k – вектор 4-тока, создаваемый движущимся зарядом. Точка с запятой перед индексом означает ковариантную производную. Для решения системы уравнений (1) – (2) мы используем разложение поля по сферическим функциям (см., напр. [4]).

Кроме того, предположим, что сила реакции излучения достаточно мала. Обсуждение условий, соответствующих такому приближению, можно найти, напр., в работах [6, 7]. Тогда можно рассматривать свободное движение заряда в гравитационном поле, мировой линией которого будет являться некоторая времениподобная геодезическая. Она характеризуется механической энергией частицы и моментом импульса (см., напр. [8]).

Тогда спектральная плотность излучения $dE/d\omega$ на большом расстоянии от черной дыры может быть выражена через мультипольные коэффициенты электромагнитного поля b_l , ψ_l и η_l [4]:

$$dE/d\omega=2\Sigma(b_l \psi_l(\omega) l(l+1)+\psi_l(\omega) r^2)*(i\omega b_l(-\omega) l(l+1)+\eta_l(-\omega))/(2l+1). \tag{3}$$

Здесь символ Σ означает суммирование по всем номерам мультипольного момента l , ω – частота излучения, а r – радиальная координата Шварцшильда.

Наиболее хорошо изученным является спектральная плотность электромагнитного излучения для случая радиального падения в черную дыру (см., напр. [4, 5, 9]). Для первых трех мультиполей он представлена на Рис. 1.

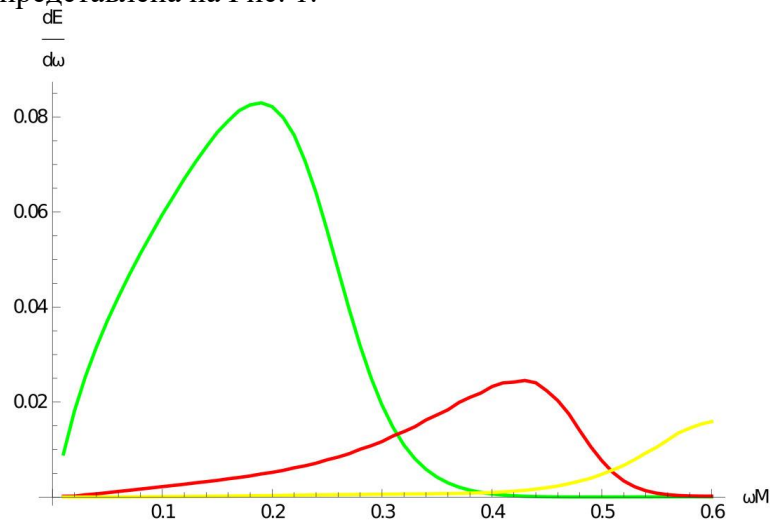


Рис. 1. Спектральная плотность энергии, излученной частицей, падающей в черную дыру радиально, без начальной скорости для различных мультипольных моментов: $l=1$ (зеленый), $l=2$ (красный), $l=3$ (желтый); M – масса черной дыры.

В случае движения заряда по произвольной траектории вблизи черной дыры уравнения для мультипольных коэффициентов усложняются (см., напр. [10]). Решив данные уравнения численно, мы нашли спектральную плотность излучения для заряда, движущегося по орбите вблизи черной дыры, с произвольными, наперед заданными параметрами. Полученная зависимость представлена на Рис. 2. Траектория источника представлена на Рис. 3.

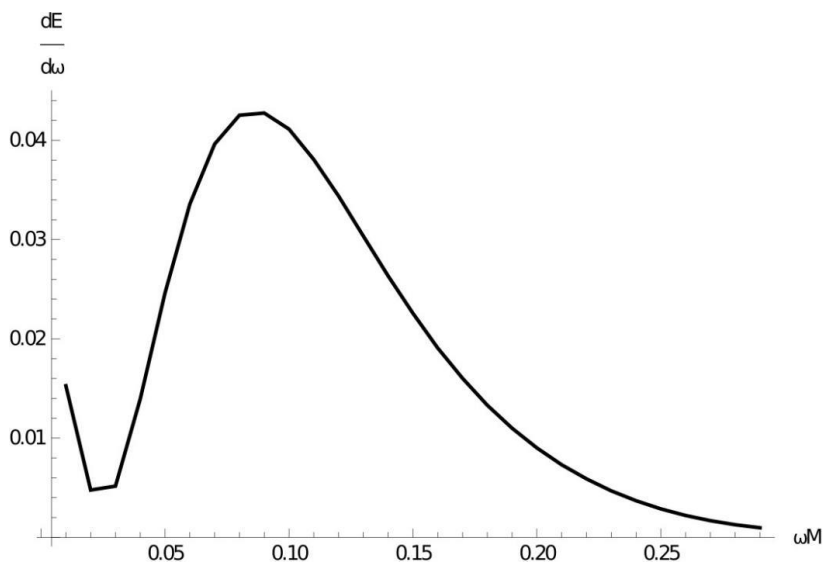


Рис. 2. Спектральная плотность энергии, излученной частицей, движущейся вблизи черной дыры по траектории со следующими параметрами: энергия на единицу массы 1,05; момент импульса на единицу массы 4,5 М.

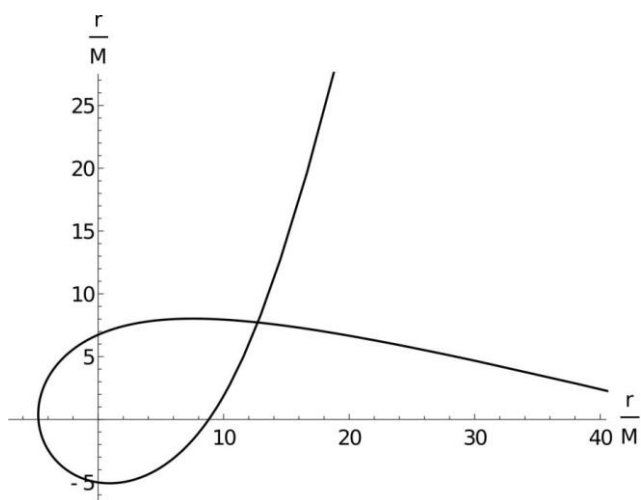


Рис. 3. Траектория движения заряда, используемая при вычислении спектральной плотности электромагнитного излучения (Рис. 2).

Заключение. Как видно из Рис. 1 и Рис. 2, спектральные плотности электромагнитного излучения для заряда, движущегося по радиальной траектории и траектории более общего вида (Рис. 3), имеют качественные различия. Для исследования этого различия мы ограничимся лишь составляющей, соответствующей мультипольному моменту $l=1$, так как эта составляющая имеет наибольшую полную энергию излучения (см., напр. [4]). В случае нерадиального движения на графике спектральной плотности имеется локальный минимум, которого нет на графике, соответствующему радиальному движению. Таким образом, по наблюдаемой спектральной плотности излучения можно сделать вывод о характере движения заряда.

В реальных астрофизических сценариях, однако, задача является более сложной. В реальности имеют дело не с одной, а системой частиц, образующих плазму. Кроме того, на движение частиц влияет их электромагнитное взаимодействие между собой, а также взаимодействие с внешними электромагнитными полями, часто присутствующими в окрестности активных ядер галактик. Обобщение полученных результатов на эти случаи мы оставляем на будущее.

Благодарности. Работа выполнена при поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований. Номер проекта: БРФФИ-ИКРАНет: Ф23ИКР-003.

Автор хотел бы выразить благодарность А.К. Горбачевичу и Г.В. Верещагину, за плодотворные дискуссии, приведшие к идее написания данной работы.

Литература.

1. R. Ruffini. 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]. – 2019
2. R. Ruffini. On the GeV emission of the type I bdn GRB 130427a / R. Ruffini, R. Moradi, J. A. Rueda, et. al. // The Astrophys. J. – 2019. – (82). – P. 886
3. R. Ruffini. The blackhole quantum / R. Ruffini, J. A. Rueda // The European Physical Journal C. – 2020. – №30. – P. 300
4. R. Ruffini. Fully relativistic treatment of the brehmstrahlung radiation from a charge falling in a strong gravitational field / R. Ruffini // Phys. Lett.–1972.–41(B).–P. 334–338.
5. Folacci. Electromagnetic radiation generated by a charged particle falling radially into a Schwarzschild black hole: A complex angular momentum description / A. Folacci and M. Ould El Hadj // Phys. Rev. D. – 102.– 2020. – P. 024026.
6. Komarov S. O. Electromagnetic Radiation and Electromagnetic Self-Force of a Point Charge in the Vicinity of the Schwarzschild Black Hole / S. O. Komarov and A. K. Gorbatsievich, A. S. Garkun, G. V. Vereshchagin // Nonlinear Phenomena in Complex Systems. – 2023. – Vol. 26. – no 1. – pp. 77-82.
7. J. S. Santos. Electromagnetic radiation reaction and energy extraction from black holes: The tail term cannot be ignored / J. S. Santos, V. Cardoso, J. Natario // Phys. Rev. D.– 2023.–107.–P. 064046.
8. Мизнер Ч., Торн К., Уилер Дж. / Гравитация: в 3-х т., пер. с англ. М. М. Баско. Под ред. В. Б. Брагинского и И. Д. Новикова. – Мир. – Москва. – 1977.
9. Komarov, S. O. Electromagnetic field of a charge asymptotically approaching a spherically symmetric black hole / Komarov, S. O., Gorbatsievich, A. K. and Vereshchagin, G. V. // Physical Review D. – 2023. – Vol. 108. – P. 104056.
10. R. Ruffini, in Black Holes (Les Astres Occuls) (Gordon and Breach, New York, 1973), pp. 471 – 546.

Реконструкция движения звезды в поле Шварцшильда с использованием производной функции красного смещения её излучения

Ю.С. Петров^a, С.О. Комаров^{a, b}

^a *Белорусский государственный университет, 220030 Минск, Беларусь*

^b *ICRANet-Minsk, 220072 Минск, Беларусь*

E-mail: yurisp@tut.by

Введение. Исследование посвящено проблеме решения обратной задачи нахождения параметров движения звезды в поле чёрной дыры Шварцшильда по красному смещению её спектра. Данная задача является актуальной при рассмотрении движения звёзд вблизи центра Галактики. Часто для решения обратной задачи в литературе используются таблицы прицельных параметров, что снижает точность, также используется метод минимизации

функции χ^2 [1]. Рассмотрение дополнительно к функции красного смещения z её производной $dz/d\tau$ в качестве параметра уравнений позволяет получить приближённую систему нелинейных уравнений для параметров движения звезды. Для этого рассмотрены свойства конгруэнций изотропных геодезических, соединяющих мировую линию источника и мировую линию наблюдателя.

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

1 Тетрадный формализм Ньюмана-Пенроуза и оптические скаляры. Рассмотрим координатные системы $K: \{r, \theta, \varphi, t\}$ и $K': \{r, \theta', \varphi', t\}$, выбранные так, что орбита звезды лежит в плоскости $\theta = \pi/2$, а наблюдатель находится на оси $\theta' = 0$, $\varphi' = 0$. Угловые координаты систем связаны соотношением $\cos \theta' \cos i_{orb} = \cos \varphi' \sin \theta' \sin i_{orb}$, где i_{orb} – угол наклона орбиты звезды.

Введём следующую изотропную тетраду Ньюмана-Пенроуза [2] вдоль мировой линии луча электромагнитного излучения звезды:

$$k^i, n^i, m^i, \bar{m}^i. \quad (1)$$

Здесь k_i – волновой вектор луча. Все векторы (1) являются изотропными. Все скалярные произведения между векторами (1) равны 0, кроме

$$m^i \bar{m}_i = -k^i n_i = 1. \quad (2)$$

Рассмотрим конгруэнцию изотропных геодезических, имеющих касательные векторы k_i и пересекающих мировую линию наблюдателя в момент времени t_0 . Рассмотрим также тетраду Ньюмана-Пенроуза (1) во всех точках данной конгруэнции. Тогда компоненты векторов тетрады в системе координат K' имеют вид (аффинный параметр λ выбран так, что $k_4 = -1$):

$$k_j = \left\{ e_r \frac{\sqrt{1 - (1 - 2M/r) D^2 / r^2}}{1 - 2M/r}, -D, 0, -1 \right\},$$

$$n_j = \left\{ -\frac{e_r}{2} \sqrt{1 - (1 - 2M/r) D^2 / r^2}, \frac{D}{2} (1 - 2M/r), 0, -\frac{1}{2} (1 - 2M/r) \right\}, \quad (3)$$

$$m_j = (\bar{m}_j)^* = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ i \frac{D}{r} (1 - 2M/r), i \frac{e_r}{r} \sqrt{1 - (1 - 2M/r) D^2 / r^2}, \frac{1}{r \sin \theta}, 0 \right\},$$

где e_r – знак производной $dr/d\tau$, D – прицельный параметр, M – масса чёрной дыры.

Для рассматриваемой конгруэнции могут быть получены следующие уравнения [3-5]:

$$k_{i;j} m^i \bar{m}^j = -\rho, \quad k_{i;j} m^i m^j = -\sigma \quad (4)$$

$$k_{i;j} k^i = k_{i;j} k^j = 0. \quad (5)$$

Здесь ρ и σ – оптические скаляры, которые подчиняются следующей системе уравнений [2-4]:

$$\frac{d\rho}{d\lambda} = \rho^2 + \sigma^2, \quad (6)$$

$$\frac{d\sigma}{d\lambda} = 2\rho\sigma + \frac{3D^2}{r^5}. \quad (7)$$

Система (6), (7) может быть решена численно. Для суммы $\rho + \sigma$ существует аналитическое решение [4].

2 Система уравнений обратной задачи. С помощью вышеприведённых выражений можно получить приближённое аналитическое выражение для $dz/d\tau = -k_{j,l}u^j u^l$, где u^j – 4-скорость источника. В данном выражении производится замена суммы $\rho + \sigma \cos P_A$ на $\rho + \sigma$, т.к. σ мало по сравнению с ρ на достаточном отдалении от чёрной дыры. Красное смещение z также выражается аналитически [6]. Переход от наблюдаемой зависимости $z(t)$ к $z(\tau)$ осуществляется обращением функции $t = \int_0^\tau (z(\tau') + 1)d\tau'$. Из уравнений для z и $dz/d\tau$ можно выразить прицельный параметр D и получить функции F_1 и F_2 , имеющие достаточно громоздкий вид, который здесь опущен:

$$\frac{D}{r} = F_1(r, z, E, L, i_{orb}, \theta'), \quad (8)$$

$$\frac{D}{r} = F_2(r, z, \frac{dz}{d\tau}, E, L, i_{orb}, \theta'). \quad (9)$$

Здесь E и L – удельные энергия и угловой момент звезды, они вместе с массой чёрной дыры M однозначно определяют расстояния от чёрной дыры до перицентра p_1 и апоцентра p_2 .

Уравнения (8) и (9) позволяют избавиться от прицельного параметра D :

$$F_1(r, z, E, L, i_{orb}, \theta') = F_2(r, z, \frac{dz}{d\tau}, E, L, i_{orb}, \theta'). \quad (10)$$

Уравнение (10) позволяет найти связь между постоянными параметрами движения E , L и i_{orb} , когда радиус r и угол θ' точки излучения известны. Следовательно, необходимы дополнительные уравнения. Решения уравнений геодезических в метрике Шварцшильда известны [6]. Таким образом, получаются следующие уравнения:

$$\theta' = f(r, F_1(r, z, E, L, i_{orb}, \theta')). \quad (11)$$

$$r = r_s(\varphi(\theta'(r, z, E, L, i_{orb}), i_{orb}) + \delta, E, L). \quad (12)$$

Здесь δ - начальная фаза. Уравнение (11) относительно θ' может быть решено методом итераций. Система из 2 уравнений (10), (12) имеет 5 неизвестных и её решение представляет собой 3-мерную гиперповерхность в 4-мерном пространстве параметров E, L, i_{orb}, δ или $p_1, p_2, i_{orb}, \delta$. Данная гиперповерхность может быть рассчитана численно. На рис. 1 представлено пересечение двух поверхностей.

Использование метода наименьших квадратов позволяет добиться улучшения результатов. Для этого можно воспользоваться функциями геодезических $\tau_s(\varphi, E, L)$ и $r_s(\varphi, E, L)$ [6]. Тогда (10) примет вид:

$$F_1(r_s(\varphi + \delta, E, L), z, E, L, i_{orb}, \theta'(\varphi, i_{orb})) = F_2(r_s(\varphi + \delta, E, L), z, \frac{dz}{d\tau}, E, L, i_{orb}, \theta'(\varphi, i_{orb})). \quad (13)$$

Левая и правая части уравнения (13) содержат определённые функции φ , которые должны быть равны для определённого набора неизвестных параметров E, L, i_{orb}, δ . Следовательно, данные параметры могут быть найдены методом наименьших квадратов.

3 Результаты. В таблице 1 представлены начальные параметры системы, для которой были смоделированы движение звезды и её излучение в направлении наблюдателя.

Таблица 1. Начальные параметры.

Перицентр, p_1	32,67 M
Апоцентр, p_2	81,67 M
Орбитальное наклонение, i_{orb}	$\pi/3$
начальная фаза, δ	-0,066 π

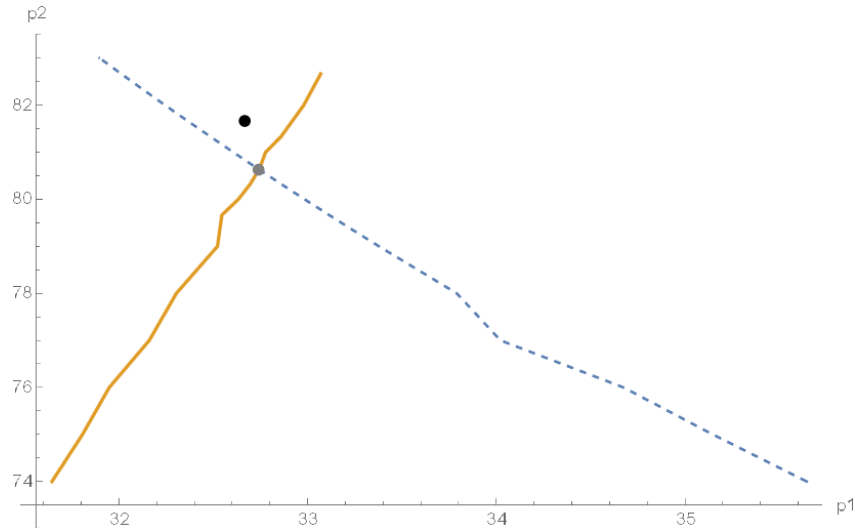


Рис. 1. 2-мерный срез пространства решений для данных, соответствующих различным моментам времени, при фиксированных параметрах i_{orb} и δ .

Заключение. Представленный подход позволяет решить обратную задачу нахождения параметров орбиты звезды, движущейся во внешнем гравитационном поле сверхмассивной черной дыры по красному смещению спектра принимаемого излучения. Для этого используются свойства конгруэнций изотропных геодезических для формулировки задачи в виде системы нелинейных алгебраических уравнений, имеющих вид аналитических функций от интегралов движения звезды. Данный подход можно использовать непосредственно для данных о красном смещении звезд, движущихся в непосредственной близости от сверхмассивной черной дыры в галактическом центре, с целью проверки общей теории относительности. Для этого с помощью представленного алгоритма можно получить интеграл движения звезды и вычислить красное смещение как функцию времени наблюдения для будущих моментов времени. Сравнение полученной кривой с данными наблюдений даст результат тестирования. С некоторыми обобщениями подход можно использовать для реконструкции движения звезды вблизи вращающейся черной дыры.

Литература.

1. T. P. M. Grould, F. H. Vincent and G. Perrin, *Astronomy and Astrophysics* 608, A60, 1 (2017).
2. Roger Penrose and Wolfgang Rindler, *Spinors and space-time. V. 1 Two-spinor calculus and relativistic fields* (Cambridge University Press, 1987) p. 472, in 2 parts.
3. E. Newman and R. Penrose, *Journal of Mathematical Physics* 3, 566 (1961).
4. Serge Pineault and R. C. Roeder, *Astrophys. J.* 212, 541 (1977).
5. Komarov S., Gorbatsievich A., Tarasenko A., *General Relativity and Gravitation* 50, 132 (2018).
6. S. Chandrasechar, *The mathematical theory of black holes* (Oxford University press, New York, 1983).

Эволюция поляризации электромагнитного излучения от источника, движущегося в окрестности чёрной дыры Шварцшильда

А.В. Савенок^a, С.О. Комаров^{a,b}

^a Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь

^b ICRA Net-Minsk, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь

E-mail: fiz.savenok@bsu.by

Введение. В докладе будет рассмотрена эволюция плоскости поляризации электромагнитного источника в окрестности черной дыры. Для конкретности будем говорить об излучении пульсара в окрестности черной дыры. Пульсары являются источниками космического импульсного излучения с очень большой стабильностью периода, а диапазон излучения пульсара чаще всего лежит в промежутке между метровыми и сантиметровыми волнами, но существуют и пульсары оптического, рентгеновского и гамма-излучения. В настоящее время всё ещё происходят открытия, направленные на наблюдения и изучения физики пульсара. К примеру, команда [1], сделавшая открытие пульсара PSR J0523–7125, использовала технику, которая блокирует определенный спектр поляризованного света. Таким образом, определение эволюции плоскости поляризации излучения, получаемого извне, является важной теоретической задачей, следствием которой можно определять более точное расстояние до объекта и усредненное влияние массивных тел на поляризацию излучения проходя от источника до наблюдателя.

1 Расчёт прицельного параметра. Воспользуемся эффективным Лагранжианом:

$$L_{eff} = \left(1 - \frac{2M}{r}\right)^{-1} (k^1)^2 + r^2 (k^2)^2 + r^2 \sin^2 \theta (k^3)^2 - \left(1 - \frac{2M}{r}\right) (k^4)^2. \quad (1)$$

В дальнейшем для задачи выберем $\theta = \frac{\pi}{2}$, т. к. в следствии сферической симметрии метрики всегда можно подобрать угол θ так, что геодезическая электромагнитного излучения будет проходить в экваториальной плоскости. Отсюда можно заключить, что

$$\theta = \frac{\pi}{2} \Rightarrow k^2 = \frac{d\theta}{d\lambda} = 0 \quad (2)$$

Найдём обобщённые импульсы и обобщённые координаты Лагранжиана:

$$\frac{dL_{eff}}{dk^3} = 2k^3 r^2 \sin \theta = \alpha \Rightarrow k^3 = \frac{D}{r^2} \quad (3)$$

$$\frac{dL_{eff}}{dk^4} = -2 \left(1 - \frac{2M}{r}\right) = \beta \Rightarrow k^4 = \frac{1}{1 - \frac{2M}{r}} \quad (4)$$

где константа $\beta = -2$ выбрана из соображений удобства, D – прицельный параметр. Подставляя (3), (4), (5) в (2) находим k^1 :

$$L_{eff} = 0 \Rightarrow k^1 = \pm \sqrt{1 + \frac{D^2(2M-r)}{r^3}} \quad (5)$$

где знак « $-$ » соответствует распространению излучения от источника к чёрной дыре, а знак « $+$ » означает распространение от периферии до наблюдателя.

Для нахождения прицельного параметра рассмотрим зависимость $\varphi = \varphi(r)$. Для этого разделим k^3 на k^1 с последующей заменой $u = \frac{1}{r}$:

$$\varphi = \int_{u_1}^{u_2} \frac{du}{\sqrt{2Mu^3 - u^2 + D^{-2}}}. \quad (6)$$

Перепишем данный интеграл с помощью эллиптического интеграла Лежандра 1-го рода [2] для бесконечно удалённого наблюдателя:

$$\varphi = \int_0^{u_2} \frac{du}{\sqrt{2Mu^3 - u^2 + D^{-1}}} - \int_0^{u_1} \frac{du}{\sqrt{2Mu^3 - u^2 + D^{-2}}}$$

$$\varphi(r, k) = \sqrt{\frac{2}{M(\alpha_1 - \alpha_3)}} F \left(\arcsin \left(\sqrt{\frac{\frac{1 - \alpha_3}{r}}{\alpha_2 - \alpha_3}} \right), k \right) - \sqrt{\frac{2}{M(\alpha_1 - \alpha_3)}} F \left(\arcsin \left(\sqrt{\frac{0 - \alpha_3}{\alpha_2 - \alpha_3}} \right), k \right) \quad (7)$$

где $\alpha_1 > \alpha_2 > \alpha_3$ – корни подкоренного выражения интеграла, $k^2 = \frac{\alpha_2 - \alpha_3}{\alpha_1 - \alpha_3}$.

Для нахождения прицельного параметра корни α_1, α_2 и α_3 должны быть выписаны в явной зависимости от прицельного параметра D , т. е. $\alpha = \alpha(D)$ и рассчитана времениподобная траектория источника излучения в собственных координатах с последующем преобразованием [5] к системе координат излучения. Совмещая рассчитанные координаты траектории излучения и преобразованные координаты траектории источника к системе координат излучения получим уравнение для численного определения прицельного параметра:

$$\tilde{\varphi}(r(\tau), k(D)) = \tilde{\varphi}(r(\tau)). \quad (8)$$

где $\tilde{\varphi}$ означает принадлежность координаты к системе координат излучения, τ – собственное время источника.

2.Нахождение начальных значений для вектора поляризации. Значения для вектора поляризации e^i находятся исходя из следующих соображений:

- 1) Вектор напряжённости ортогонален скорости движения источника: $e_i U^i = 0$
- 2) Норма вектора напряжённости сохраняется: $e^i e_i = 1$.
- 3) Вектор напряжённости ортогонален волновому вектору k^i : $e_i k^i = 0$.

Скорости источника задаются с помощью следующих уравнений:

$$\begin{aligned} \tilde{U}^1 &= \pm \sqrt{E^2 - \left(1 - \frac{2M}{r}\right) \left(1 + \frac{L^2}{r^2}\right)} \\ \tilde{U}^2 &= -\frac{L}{r^2} \sin \arccos \left(\frac{\sin \varphi \sin i}{\sin \tilde{\varphi}} \right) \\ \tilde{U}^3 &= \frac{L}{r^2} \cdot \frac{\sin \varphi \sin i}{\sin \tilde{\varphi}} \\ \tilde{U}^4 &= \frac{1}{1 - \frac{2M}{r}} \end{aligned} \quad (9)$$

К примеру, для пульсара вектор напряжённости имеет зависимость от его расположения в пространстве и, в частности, от оси вращения. Расположим наш пульсар так, что в системе координат, сопутствующей плоскости траектории источника, вектор напряжённости равен $e_0^i = (0, e_0^\theta, e_0^\varphi, e_0^t)$, где e_0^i – нормированные единичные векторы напряжённости электромагнитного поля. Таким образом после перехода из системы координат источника к системе координат излучения и решив систему из трёх уравнений относительно \tilde{e}^i получим зависимость от собственного времени источника, играющую роль начальных значений для вектора напряжённости.

3. Параллельный перенос вектора напряжённости. В данной работе излучение будет рассматриваться в приближении геометрической оптики. Введём нормированные векторы для напряжённости электромагнитного поля и для векторного потенциала:

$$e_l = \frac{\bar{E}_l}{\sqrt{E^l(E_l)^*}}, \quad a_l = \frac{\bar{A}}{\sqrt{A^l(A_l)^*}} \quad (10)$$

Тогда e^i – вектор поляризации электромагнитного излучения. Для векторного потенциала известно [5], что $\frac{Da^l}{d\lambda} = 0$, а так как $e_l = i a_l - i \frac{a_m \tilde{u}^m}{\tilde{\omega}} k_l$ и для покоящегося бесконечно далеко наблюдателя $\tilde{u}^m = 0$, то $\frac{De^l}{d\lambda} = 0$. Таким образом запишем систему уравнений параллельного переноса:

$$\frac{de^i}{dr} = -(k^1)^{-1} \Gamma_{jk}^i k^j e^k \quad (11)$$

где Γ_{jk}^i – символы Кристоффеля для метрики Шварцшильда с начальными значениями $\tilde{e}_0^i = (0, \tilde{e}_0^\theta, \tilde{e}_0^\varphi, e_0^t)$.

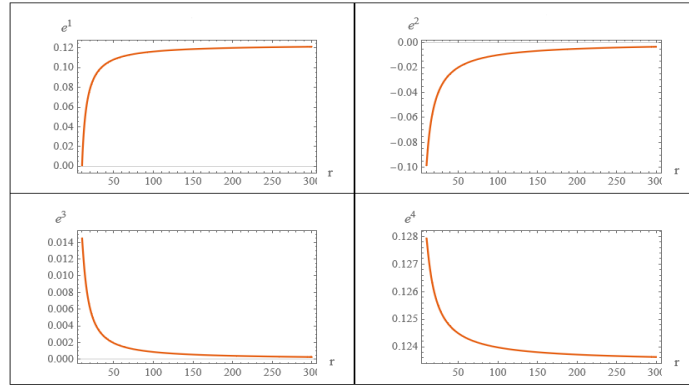


Рис. 1. Графики изменения компонент вектора напряжённости e^l в зависимости от пройденного расстояния r вдоль траектории.

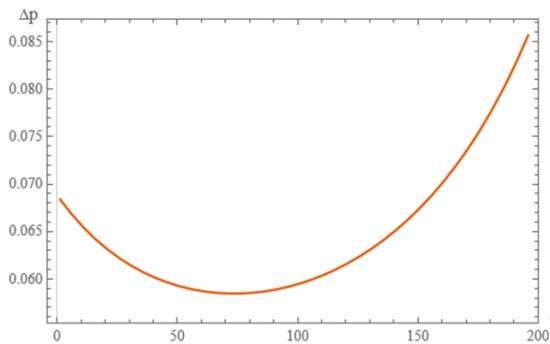


Рис. 2. Графики зависимости угла $\Delta\varphi$ поворота вектора напряжённости, найденная как разность между значением угла в момент излучения и в момент регистрации, от собственного времени τ движущегося источника.

Заключение. Данная работа изучает связь геодезической источника и вектора, параллельно переносимого вдоль изотропной геодезической. Перейдя в тетрадный формализм, можно сопоставить полученные результаты с экспериментальными данными. На данный момент рассматривается один лишь частный случай с выделенным пульсаром.

Линейная поляризация зачастую представляет собой распределение, а не вектор, что в будущем будет обобщено.

Литература.

1. Yuanming Wang, Tara Murphy, David L. Kaplan, Teresa Klinner-Teo, Alessandro Ridolfi, Matthew Bailes, Fronefield Crawford, Shi Dai, Dougal Dobie, B. M. Gaensler, Discovery of PSR J0523-7125 as a Circularly Polarized Variable Radio Source in the Large Magellanic Cloud, *The Astrophysical Journal*, Volume 930, Number 1 <https://doi.org/10.3847/1538-4357/ac61dc>
2. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике (для научных работников и инженеров): пер. с англ. М. : Наука, 1973. 752-756
3. Чандрасекар С. Математическая теория черных дыр: в 2 ч. : пер. с англ. М. : Мир, 1986. Ч. 1.
4. Stephani H. *Relativity. An introduction to special and general relativity.* Cambridge: Camb. Univ. Press, 2004.
5. Komarov, S. Optical Characteristics of Electromagnetic Radiation, Emitted by Particles or Stars Moving Near Supermassive Black Hole / S. Komarov // *Galaxies*, 2021, 9, 57, 12 p. <https://doi.org/10.3390/galaxies9030057>

Смешивание в цепочках волноводов с потерями

И.А. Пешко

Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси, 220072 Минск, Беларусь
E-mail: i.peshko@dragon.bas-net.by

Введение. Для того, чтобы управлять возбуждением в волноводных антеннах, необходимо хорошо понимать особенности распространения возбуждения в системе взаимодействующих одномодовых волноводов. Эта задача тесно связана с такой областью физики и математики, как случайные блуждания (Random walks) и с их квантовым аналогом – квантовыми блужданиями (Quantum walks) [1].

Квантовые и случайные блуждания характеризуются таким параметром как «время смешивания». Этот параметр характеризует время, необходимое локализованному в системе возбуждению прийти к некоторому предельному распределению (например, равномерное распределение по всем модам). Известно, что время смешивания в непрерывных квантовых блужданиях на цепочке ДУС в форме кольца с N элементами пропорционально $N \ln(N)$ [2] для непрерывных квантовых блужданий, в отличие от классического аналога, где время смешивания пропорционально N^2 [1, 3]. Следует отметить, что предельное распределение для квантовых блужданий с непрерывным временем не сходится к стационарному распределению, и описанный выше результат получен для распределения, усредненного по всему времени эволюции.

В последнее время всё больше внимания уделяется системам с потерями во взаимодействующих волноводных сетях. С одной стороны, потери ассоциируются с негативным влиянием на систему, поэтому огромная часть усилий направлена на поиск таких материалов, которые бы позволили сделать потери как можно меньше. Тем не менее, всё больший интерес привлекают системы со спроектированными усиленными потерями [4, 5, 6].

1 Общий вид уравнения Линдблада цепочки взаимодействующих волноводов с потерями в каждом втором волноводе. Мы рассмотрели одномерную цепочку линейно связанных одномодовых волноводов, иначе говоря, бозонных мод, в которой каждая мода взаимодействует только с соседними. Причём каждая вторая мода взаимодействует с резервуаром, то есть обладает потерями. Такая система представляет собой конечную модель Руднера-Левитова (RL-цепочка) [7], которая, в свою очередь, является обобщением модели

Су–Шриффера–Хигера (SSH-модель [8]) с добавлением потерь во вторую моду подрешётки. Схематически такая система изображена на Рис. 1.

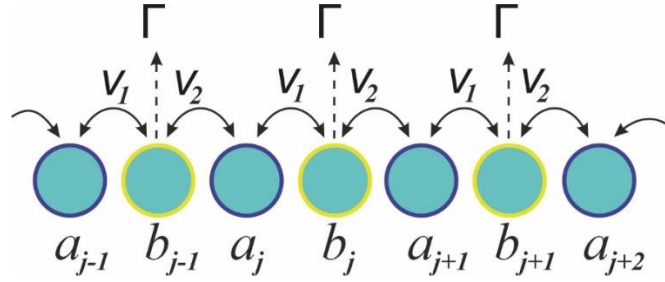


Рис. 1. Схема линейной RL-цепочки.

Эволюция состояния такой системы описывается следующим управляющим уравнением Линдблада для матрицы плотности

$$\frac{d}{dt} \rho_{tot} = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho_{tot}] + \Gamma \sum_{\forall j} (2b_j \rho_{tot} b_j^+ - \rho_{tot} b_j^+ b_j - b_j^+ b_j \rho_{tot}), \quad (1)$$

где

$$H = \sum_{\forall j} \hbar (b_j^+ (v_1 a_j + v_2 a_{j+1}) + (v_1 a_j^+ + v_2 a_{j+1}^+) b_j), \quad (2)$$

ρ_{tot} – матрица плотности, описывающая состояние всей системы, \hbar – приведённая постоянная планка, которую в дальнейшем мы положим равной 1, Γ – скорость добавленных потерь мод b_j , v_l – скорость унитарного взаимодействия между модами a_j и b_j при $l = 1$, и между модами b_j и a_{j+1} при $l = 2$.

Если предположить, что волноводы изначально когерентно возбуждены, то возможно существенно упростить анализ. Действительно, ведь система (1) является линейной, что говорит о том, что состояния мод всегда будут оставаться в когерентном состоянии [9]. Тогда, система (1) может быть сведена к описанию через уравнение Шрёдингера с неэрмитовым «гамильтонианом», который имеет вид:

$$H_{eff} = \begin{pmatrix} 0 & v_1 & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 \\ v_1 & -i\Gamma & v_2 & \dots & \dots & 0 & 0 \\ 0 & v_2 & 0 & & & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & & & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & -i\Gamma & v_2 \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & v_2 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Этот факт подталкивает нас к такой области как неэрмитова фотоника. Ключевыми особенностями подобных неэрмитовых гамильтонианов является существование в их спектре «исключительных точек», нарушение PT -симметрии и т.д.

В нашей системе также присутствуют эти особенности. Так, из вида собственных значений

$$\lambda_k^\pm(\phi) = -\frac{i}{2} \left(\Gamma \pm \sqrt{\Gamma^2 - 4v^2 \mu_k(\phi)} \right), \quad (4)$$

где $\mu_k(\phi) = 1 + \sin 2\phi \cos \left\{ \frac{k\pi}{N_L + 1} \right\}$ и $k = 1, 2, \dots, N_L$, N_L - число мод с потерями. При условии, что $v_1 = v \cos(\phi)$, $v_2 = v \sin(\phi)$.

Также присутствует ещё одно собственное значение $\lambda_0 = 0$. Этому собственному значению соответствует стационарное собственное состояние, которое мы будем называть «темновое состояние».

2 Определение времени смешивания. Немаловажным фактором является скорость, с которой происходит динамика в нашей системе. Действительно, ведь если динамика будет слишком медленной, то, например, в случае волноводной её реализации потребуется более длинное устройство, что нежелательно. Во введении была упомянута такая характеристика в случайных и квантовых блужданиях, как время смешивания. Эта величина описывает то, как быстро система приходит к стационарному распределению. Однако для описания смешивания необходимо ввести нормированные вероятности заполнения мод:

$$p_j(t) = |\psi_j(t)|^2 / P_{total}(t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} p_j^{(st)} \quad (7)$$

где $p_j^{(st)}$ – это стационарное распределение, соответствующее предельному состоянию системы. Тогда время смешивания определяется стандартным образом, как

$$T_{mix}(\varepsilon) = \min \{ t \geq 0 : \sum_{\forall j} |p_j(t) - p_j^{st}| \leq \varepsilon \}, \quad (8)$$

для $\varepsilon > 0$ [10].

3 Режимы смешивания. В спектр собственных значений исследуемой системы, а точнее в его зависимости от отношения v/Γ можно выделить две области, которые в некоторой мере соответствуют режимам с PT -симметрией и с её нарушением. Оказывается, что смешивание в этих режимах происходит качественно различным образом. Когда число узлов цепочки меньше определённого значения, зависимость времени смешивания от этого числа имеет логарифмический характер, тогда как после этого значения зависимость становится квадратичной.

Примеры такого поведения показаны на Рис. 2 для первоначально возбуждённого только краевого узла. Здесь показана зависимость $T_{mix}(0.001)$ от N_L для разных отношений v/Γ . Сплошная, штрихпунктирная и штриховая линии соответствуют $v/\Gamma = 3, 5, 7$ соответственно. Видно, что после пересечения определённого значения время смешивания возрастает как N_L^2 . На вставке показано, что до пересечения этого значения T_{mix} растёт гораздо медленнее. Такое смешивание хорошо ложится на логарифмическую зависимость.

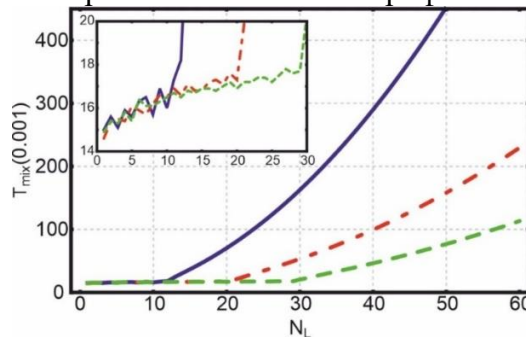


Рис. 2. Зависимость времени смешивания $T_{mix}(0.001)$, выраженная в единицах Γ^{-1} , от количества узлов с потерями N_L для симметричной RL-цепочки. Сплошная, штрихпунктирная и штриховая линии соответствуют $v/\Gamma = 3, 5, 7$ соответственно. На вставке показано T_{mix} для тех же кривых, но в меньшем масштабе. Изначально возбуждается только первый узел RL-цепочки.

Заключение. Мы рассмотрели особенности динамики возбуждения в цепочке линейно связанных бозонных мод, причём каждая вторая мода обладает усиленными потерями. Оказалось, что такая система в случае когерентного возбуждения может быть описана с помощью уравнения Шрёдингера с неэрмитовым гамильтонианом. Как следствие, в системе обнаруживаются особенности, свойственные неэрмитовой системе, как например существование исключительных точек в спектре гамильтониана, а также нарушение РТ-симметрии.

Мы показали, что положение исключительных точек определяет режимы процесса смешивания в цепочке. Как следствие, управляя параметрами системы, а также начальным возбуждением, можно значительно уменьшить время смешивания, что имеет большое прикладное значение

Благодарности. Автор благодарит своего научного руководителя д-ра физ.-мат. наук, чл.-кор. НАН Беларуси Д.С. Могилевцева за полезную критику и плодотворное обсуждение.

Литература.

1. Dorit Aharonov, et al., Quantum Walks on Graphs. – New York: Association for Computing Machinery, 2001.
2. Daniel Reitzner, et al., Quantum Walks // Acta Physica Slovaca. – 2012. – Vol. 61.
3. David J. Aldous, Some Inequalities for Reversible Markov Chains // Journal of the London Mathematical Society. – 1982. – Vol. s2-25, № 3. – P. 564-576.
4. C. Arenz, et al., Emerging unitary evolutions in dissipatively coupled systems // Phys. Rev. A. – 2020. – Vol. 101, № 2. – P. 022101.
5. A. Metelmann, et al., Nonreciprocal Photon Transmission and Amplification via Reservoir Engineering // Phys. Rev. X. – 2015. – Vol. 5, № 2. – P. 021025.
6. Seabrata Mukherjee, et al., Dissipatively coupled waveguide networks for coherent diffusive photonics // Nature Communications. – 2017. – Vol. 8, № 1. – P. 1909.
7. M. S. Rudner, and L. S. Levitov, Topological Transition in a Non-Hermitian Quantum Walk // Phys. Rev. Lett. – 2009. – Vol. 102, № 6. – P. 065703.
8. W. P. Su, et al., Solitons in Polyacetylene // Phys. Rev. Lett. – 1979. – Vol. 42, № 25. – P. 1698-1701.
9. H. P. Breuer, F. Petruccione, The theory of open quantum systems. – Great Clarendon Street: Oxford University Press, 2002.
10. Salvador Elías Venegas-Andraca, Quantum walks: a comprehensive review // Quantum Information Processing. – 2012. – Vol. 11, № 5.

Ограничения на параметры дополнительного нейтрального тяжелого бозона на ускорителе CLIC

Д.В. Синегрибов^{a, b}, В.В. Андреев^a, И.А. Серенкова^b

^a Гомельский государственный университет имени Ф. Скорины, 246028 Гомель, Республика Беларусь

^b Гомельский государственный технический университет имени П.О. Сухого, 246746 Гомель, Республика Беларусь
E-mail: dvsinegribov@gmail.com

Введение. При наличии в природе «новой» физики, будущие ускорительные эксперименты должны иметь отклонения от поведения Стандартной Модели (СМ). Если отклонение существенное, его можно интерпретировать, используя параметры дополнительного калибровочного Z' -бозона. Z' – массивная, электрически-нейтральная, синглетная по цвету, гипотетическая частица, имеющая спин 1 [1]. Квантовые теории поля, содержащие тяжелую частицу спина 1, хорошо описываются при энергии порядка ТэВ только

тогда, когда такой частицей является Z' , возникающий в следствии спонтанного нарушения калибровочной симметрии [2].

В работе предполагается, что основная эффективная калибровочная группа типичной модели, предсказывающей один дополнительный бозон Z' , имеет вид:

$$SU(3)_C \times SU(2)_L \times U(1)_Y \times U'(1) \quad (1)$$

где СМ дополнена группой $U'(1)$.

Симметрия калибровочной группы $U'(1)$ нарушается при энергии порядка ТэВ, в следствии чего появляется возможность рождения тяжелого Z' бозона.

Для получения ограничений на параметры Z' , лептонные коллайдеры имеют весомое преимущество – различные наблюдаемые можно измерить достаточно точно за счет небольшого фона. Как показали эксперименты LEP и SLC, конечные фермионные состояния μ , τ , c и b можно надежно зарегистрировать с высокой эффективностью [2]. Столкновения $f\bar{f}$ имеют уникальное свойство – все константы связи Z' с фермионами можно ограничить отдельно. Поэтому для извлечения ограничений на параметры Z' используется реакция:

$$e^+e^- \rightarrow \gamma, Z^0, Z' \rightarrow f\bar{f} \quad (2)$$

За счет небольшого фона, высокой энергии и наличия возможности поляризации e^+ и e^- пучка, будущие e^+e^- коллайдеры ILC, CLIC и FCCee позволяют исследовать масштабы и сценарии «новой» физики, недоступные Большому адронному коллайдеру (LHC).

Современные ограничения на массу Z' заметно больше в сравнении с планируемыми энергиями e^+e^- ускорителей следующего поколения. Поэтому, предоставляется возможность только существенно уточнить характеристики Z' , проявляющиеся в виде отклонений наблюдаемой от поведения СМ [3,4]. Экспериментальную информацию для такого случая можно представить в виде ограничений на физические параметры Z' (масса, константы связи, ширина). Такие оценки полезны для корректировки моделей Z' (SSM , LR , ALR , E_6 модели и другие) и построения будущей фундаментальной теории.

1 Представление дифференциального сечения. Для выполнения модельно-независимого анализа нужно получить представление дифференциального сечения, содержащее эффективные параметры Z' , линейно входящие в выражение. Условие линейности позволяет использовать стандартную методику получения ограничений при условии, что отклонение от СМ не больше одного стандартного отклонения.

Таким образом, получено представление дифференциального сечения рассеяния в приближении Борна для процесса (2), которое записывается:

$$\frac{d\sigma^{SM+Z'}}{dz}(P_{e^+}, P_{e^-}) = \frac{d\sigma^{SM}}{dz} + \frac{\Delta d\sigma}{dz} = N_C(1 - P_{e^+}P_{e^-}) \frac{\alpha^2 \beta \pi}{8s} [(1 - z\beta)^2 Q_1^{SM+Z'} + (1 + z\beta)^2 Q_2^{SM+Z'} + \eta_f^2 Q_3^{SM+Z'}] \quad (3)$$

В формуле (3): $z \equiv \cos \theta$ (θ – угол между e^- и f); N_C – цветовой фактор ($N_C = 1(3)$ для лептона(кварка)); α – постоянная тонкой структуры; P_{e^+} и P_{e^-} – степени продольной поляризации e^+ и e^- пучка; $\beta = \sqrt{1 - 4m_f^2/s}$ ($\eta = \sqrt{1 - \beta^2}$), здесь m_f – масса конечного фермиона; \sqrt{s} – энергия столкновения.

Параметры $Q_{1,2,3}^{SM+Z'}$ определяются комбинациями $q_{\lambda_e \lambda_f}^{SM+Z'}$ (λ_e и λ_f – спиральности начального и конечного состояния) и функцией $P_{eff} = (P_{e^-} - P_{e^+}) / (1 - P_{e^+}P_{e^-})$:

$$\begin{aligned}
 Q_1^{SM+Z'} &= p_{eff}^- |q_{LR}^{SM+Z'}|^2 + p_{eff}^+ |q_{RL}^{SM+Z'}|^2 \\
 Q_2^{SM+Z'} &= p_{eff}^- |q_{LL}^{SM+Z'}|^2 + p_{eff}^+ |q_{RR}^{SM+Z'}|^2 \\
 Q_3^{SM+Z'} &= 2p_{eff}^- Re[q_{LL}^{SM+Z'} q_{LR}^{SM+Z'}]^2 + 2p_{eff}^+ Re[q_{RL}^{SM+Z'} q_{RR}^{SM+Z'}]^2
 \end{aligned} \tag{4}$$

где $p_{eff}^\pm = 1 \pm P_{eff}$.

Параметры $q_{\lambda_e \lambda_f}^{SM+Z'}$, содержащие константы связи, массу и полную ширину Z' , определяются формулами:

$$q_{\lambda_e \lambda_f}^{SM+Z'} = \sum_i \frac{s g_{i,e}^{\lambda_e} g_{i,f}^{\lambda_f}}{s - m_i^2 + im_i \Gamma_i} \tag{5}$$

здесь $g_{i,f}^{L,R} \equiv g_{i,f}^\mp$ – фермионные константы связи с бозонами $i = \gamma, Z^0, Z'$ с соответствующими массами m_i и ширинами Γ_i .

В свою очередь, фермионные константы связи с γ и Z^0 определяются значениями электрического заряда Q_f и третьей компоненты изоспина t_f :

$$g_{\gamma,f}^\rho = -Q_f, \quad g_{Z^0,f}^\rho = \frac{\delta_{\rho,-t_f/2 - Q_f s_w^2}}{s_w c_w}, \tag{6}$$

где s_w и c_w – синус и косинус угла Вайнберга-Салама θ_w .

Введенные обобщенные, эффективные параметры отклонения ΔQ_i , определяющие отклонение дифференциального сечения от СМ, записываются:

$$\begin{aligned}
 \Delta Q_1(p_{eff}^+, p_{eff}^-) &= Q_1^{SM+Z'} - Q_1^{SM} = p_{eff}^- \Delta q_{LR} - p_{eff}^+ \Delta q_{RL} \\
 \Delta Q_2(p_{eff}^+, p_{eff}^-) &= Q_2^{SM+Z'} - Q_2^{SM} = p_{eff}^- \Delta q_{LL} - p_{eff}^+ \Delta q_{RR} \\
 \Delta Q_3(p_{eff}^+, p_{eff}^-) &= Q_3^{SM+Z'} - Q_3^{SM}
 \end{aligned} \tag{7}$$

здесь $\Delta q_{\lambda_e \lambda_f} = |q_{\lambda_e \lambda_f}^{SM+Z'}|^2 - |q_{\lambda_e \lambda_f}^{SM}|^2$.

2 Методика получения ограничений на характеристики Z' . Для получения ограничений на физические параметры Z' нужно:

- 1) используя функцию χ^2 найти области изменения ΔQ_i (7);
- 2) получить области изменения $\Delta q_{\lambda_e \lambda_f}$ используя систему уравнений;
- 3) используя выражения для $\Delta q_{\lambda_e \lambda_f}$, получить ограничения на физические параметры Z' .

Для выполнения первого этапа используется следующее предположение: будущие экспериментальные результаты по измерению сечения процесса (2) согласуются с предсказаниями СМ в пределе ожидаемой точности измерений. Тогда для получения ограничений на параметры отклонения $\Omega = \Delta Q_i$ используется функция χ^2 , которая записывается:

$$\chi^2(\Omega) = \sum_i^{bins} \left[\frac{N_i^{SM+Z'}(\Omega) - N_i^{SM}}{\delta N_i^{SM}} \right]^2 \leq \chi_{min}^2 + \chi_{C.L.}^2. \tag{8}$$

где $\delta N_i^{SM} = \sqrt{N_i^{SM}(1 + \delta_{syst}^2 N_i^{SM})}$ – экспериментальная относительная погрешность процесса (2), состоящая из случайной $\sqrt{N_i^{SM}}$ и систематической ошибки $\sim \delta_{syst} N_i^{SM}$.

Экспериментальной величиной является число событий N_i^{SM} , которое в i -ом бине определяется по формуле:

$$N_i^{SM+Z'} = \mathcal{L}_{int} p_L \varepsilon_f \int_{z_i}^{z_{i+1}} \frac{d\sigma^{SM+Z'}}{dz} dz \quad (9)$$

здесь \mathcal{L}_{int} – интегральная светимость; p_L – коэффициент, уменьшающий светимость при наличии поляризации e^+ и e^- пучка; ε_f – эффективность регистрации конечного состояния f ; $|z| \leq 0,9$ – угловой интервал, разбитый на 19 бинов [5].

В качестве модельной функции используется число событий $N_i^{SM+Z'}(\Omega)$ индуцируемое взаимодействиями при наличии Z' .

χ_{min}^2 определяется из требования минимального значения функции $\chi^2(\Omega)$ и для нашего случая равно нулю. Значение $\chi_{C.L.}^2$ задается уровнем достоверности (C.L.) и вычисляется из определения квантиля (обратная функция распределения χ^2).

Для выполнения второго этапа необходимы две наблюдаемые с различной начальной поляризацией $a = \{P_{e^-} = a_1, P_{e^+} = a_2\}$ и $b = \{P_{e^-} = b_1, P_{e^+} = b_2\}$. С помощью (8) для случая a и b нужно получить ограничения на параметры $\Delta Q_i(p_{eff}^+, p_{eff}^-)$, которые обозначаются ΔQ_i^a и ΔQ_i^b .

После чего, используя уравнения (7) можно получить следующие выражения:

$$\begin{aligned} \Delta q_{LR} &= \frac{p_{eff}^{+,b} \Delta Q_1^a - p_{eff}^{+,a} \Delta Q_1^b}{p_{eff}^{-,a} p_{eff}^{+,b} - p_{eff}^{+,a} p_{eff}^{-,b}}, & \Delta q_{RL} &= \frac{p_{eff}^{-,a} \Delta Q_1^b - p_{eff}^{-,b} \Delta Q_1^a}{p_{eff}^{-,a} p_{eff}^{+,b} - p_{eff}^{+,a} p_{eff}^{-,b}}, \\ \Delta q_{LL} &= \frac{p_{eff}^{+,b} \Delta Q_2^a - p_{eff}^{+,a} \Delta Q_2^b}{p_{eff}^{-,a} p_{eff}^{+,b} - p_{eff}^{+,a} p_{eff}^{-,b}}, & \Delta q_{RR} &= \frac{p_{eff}^{-,a} \Delta Q_2^b - p_{eff}^{-,b} \Delta Q_2^a}{p_{eff}^{-,a} p_{eff}^{+,b} - p_{eff}^{+,a} p_{eff}^{-,b}}, \end{aligned} \quad (10)$$

где значения $p_{eff}^{\pm,a}$ и $p_{eff}^{\pm,b}$ вычисляются для набора поляризаций a и b .

3 Ограничения на физические параметры Z' . Для получения ограничений используется конечное состояние $\tau^+ \tau^-$ в предположении, что для Z' выполняется лептонная универсальность ($g_{Z',e}^\rho = g_{Z',\mu}^\rho = g_{Z',\tau}^\rho$). С помощью (8) получены одномерные ограничения на параметры $\Delta Q_{1,2,3}$ (см. Табл. 1) для различной поляризации и энергии коллайдера CLIC [5].

Таблица 1. Одномерные модельно-независимые ограничения на параметры отклонения $\Delta Q_{1,2,3}$ (C.L. = 68,27 %, $\varepsilon_\tau = 0,5$, при наличии поляризации $p_L = 4/5$).

P_{e^-}/P_{e^+}	Этап CLIC	$\Delta Q_1 \times 10^{-3}$	$\Delta Q_2 \times 10^{-3}$	$\Delta Q_3 \times 10^3$
0/0	I.	∓ 11.7	$\mp 20,8$	$\mp 4,24$
0,8/-0,2	$\sqrt{s} = 1,5$ ТэВ, $\mathcal{L}_{int} = 2,5$ аб $^{-1}$.	∓ 12	$\mp 20,5$	$\mp 4,28$
-0,8/0,2		∓ 12.3	$\mp 22,6$	$\mp 4,51$
0/0	II.	∓ 16.4	$\mp 28,8$	$\mp 23,7$
0,8/-0,2	$\sqrt{s} = 3$ ТэВ, $\mathcal{L}_{int} = 5$ аб $^{-1}$.	∓ 16.8	$\mp 28,4$	$\mp 24,0$
-0,8/0,2		∓ 17.2	$\mp 31,3$	$\mp 25,3$

Ограничения на ΔQ_3 аномально большие, потому что, соответствующее слагаемое в выражении (3) пропорционально $\eta_f^2 = 4m_f^2/s$ (значение порядка 10^{-5}). Очевидно, если использовать полученные ограничения на ΔQ_3 , нельзя улучшить ограничения на физические параметры Z' по сравнению с $\Delta Q_{1,2}$. Используя ограничения на $\Delta Q_{1,2}$ и уравнения (10) для

набора поляризаций $a = \{P_{e^-} = 0,8, P_{e^+} = -0,2\}$ и $b = \{P_{e^-} = -0,8, P_{e^+} = 0,2\}$ можно получить следующие ограничения:

$$\begin{aligned} & \text{Этап I:} \\ & -0,006 \leq \Delta q_{LR}, \Delta q_{RL} \leq 0,006; -0,011 \leq \Delta q_{LL} \leq 0,011; -0,010 \leq \Delta q_{RR} \leq 0,010, \\ & \text{Этап II:} \\ & -0,008 \leq \Delta q_{LR}, \Delta q_{RL} \leq 0,008; -0,016 \leq \Delta q_{LL} \leq 0,016; -0,014 \leq \Delta q_{RR} \leq 0,014 \end{aligned} \quad (11)$$

После чего, используя уравнения (5), нужно определить параметры $\Delta q_{\lambda_e \lambda_f}$ как функции, содержащие физические характеристики Z' . Предполагая, что $\Gamma_{Z'} = 0,1 \times m_{Z'}$ и используя результаты (11) можно получить ограничения на $m_{Z'}$ и $g_{Z',l}^{\lambda_l} \times g_{Z',l}^{\lambda_l}$, представленные на Рис. 1.

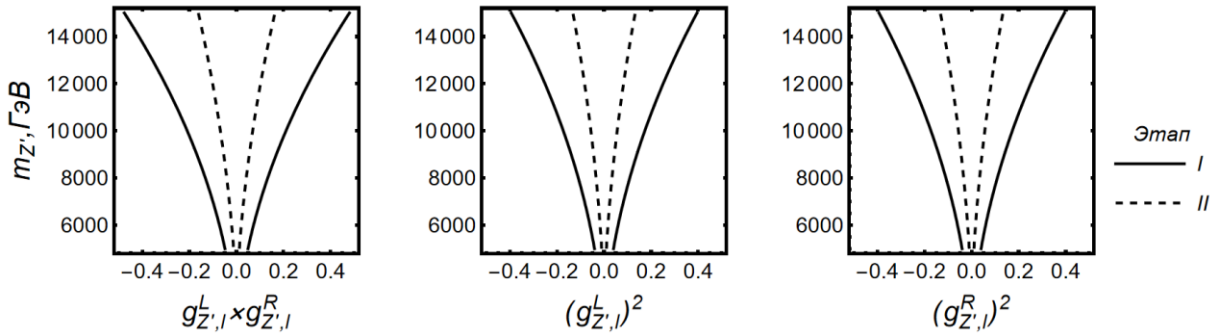


Рис. 1. Ограничения на $m_{Z'}$ и $g_{Z',l}^{\lambda_l} \times g_{Z',l}^{\lambda_l}$.

Можно заметить ощутимую зависимость ограничений от величины \sqrt{s} и \mathcal{L}_{int} .

Заключение. В работе предложена методика получения ограничений на физические параметры Z' для процесса (2). Основой методики является представление дифференциального сечения с тремя вещественными эффективными параметрами. Получены ограничения на физические характеристики $m_{Z'}$ и $g_{Z',l}^{\lambda_l} \times g_{Z',l}^{\lambda_l}$ для эксперимента CLIC без учета корреляции.

Для полного анализа, нужно исследовать другие наблюдаемые (A_{FB} , A_{LR} и другие), выполнить комбинированный и модельно-зависимый анализ, учесть влияние корреляции и радиационных поправок.

Благодарности. Авторы выражают благодарность Белорусскому республиканскому фонду фундаментальных исследований за финансовую поддержку настоящей работы.

Литература.

1. Leike, A. The Phenomenology of extra neutral gauge bosons / A. Leike // Phys. Rept. – 1999. – Vol. 317. – P. 143-250.
2. Workman, R. L. Review of Particle Physics / R. L. Workman et al. // Prog. Theor. Exp. Phys. – 083C01 (2022). – P. 995-999.
3. Funatsu, S. Fermion pair production at e^+e^- linear collider experiments in GUT inspired gauge-Higgs unification [Электронный ресурс] / S. Funatsu, Hatanaka H. and other // 2020. – Режим доступа: <https://arxiv.org/pdf/2006.02157.pdf>. – Дата доступа: 05.03.2024.
4. Das, A. Probing the minimal $U(1)_X$ model at future electron-positron colliders via fermion pair-production channels [Электронный ресурс] / A. Das, P. S. Bhupal Dev, Y. Hosotani, S. Mandal // 2022. – Режим доступа: <https://arxiv.org/pdf/2104.10902.pdf>. – Дата доступа: 15.03.2024.
5. Franceschini, R. Beyond the Standard Model physics at CLIC [Электронный ресурс] / R. Franceschini // 2019. – Режим доступа: <https://arxiv.org/pdf/1902.10125.pdf>. – Дата доступа: 20.03.2024.

Влияние хиральности полуметаллов Вейля на рассеивающие свойства цилиндров

М.М. Хартон, А.В. Новицкий

Белорусский государственный университет, 220030 Минск, Беларусь

E-mail: michelkhariton@gmail.com

Введение. Полуметаллы Вейля представляют собой уникальный класс полуметаллов. В отличие от обычных полуметаллов, валентная зона и зона проводимости соприкасаются в дискретных точках импульсного пространства, причем вблизи этих точек закон дисперсии линеен. Полуметаллы Вейля демонстрируют богатое разнообразие различных интересных для исследования свойств. В данной работе основное внимание уделяется обусловленным аномальным эффектом Холла хиральным эффектам, описываемым посредством тензора диэлектрической проницаемости материала, имеющего следующий вид:

$$\varepsilon = \varepsilon_D (1 - \mathbf{e}_z \otimes \mathbf{e}_z) + \varepsilon'_D \mathbf{e}_z \otimes \mathbf{e}_z + i\varepsilon_a \mathbf{e}_z^\times, \quad (1)$$

где ε_D и ε'_D – комплексные диэлектрические проницаемости анизотропного полуметалла, следующие из формализма Кубо-Гринвуда; \mathbf{e}_z^\times – тензор, дуальный вектору \mathbf{e}_z ; недиагональные элементы ε_a пропорциональны расстоянию между узлами Вейля в импульсном пространстве, связаны с аномальным эффектом Холла и обусловлены структурой полуметалла [1].

Цилиндрически симметричные оптические структуры представляют интерес для создания оптических волокон с необходимыми свойствами, высокоотражающих покрытий, зеркал и экранов, обладающих повышенными коэффициентами отражения в определенном частотном диапазоне и позволяющими задавать угол отражения, а также различных невзаимных оптических элементов. В данной работе рассматривается точное решение уравнений Максвелла для однородного цилиндра из полуметалла Вейля.

1 Аналитическое решение. Для нахождения точного аналитического решения воспользуемся операторным методом [2, 3]. Если считать цилиндры достаточно длинными по сравнению с их радиусом, а также учитывая необходимость однозначности определения полей при повороте на полный оборот вокруг оси цилиндра, получаем следующую подстановку

$$\begin{pmatrix} \mathbf{H}(\rho, \varphi, z) \\ \mathbf{E}(\rho, \varphi, z) \end{pmatrix} = e^{i(m\varphi + \beta z)} \begin{pmatrix} \mathbf{H}(\rho) \\ \mathbf{E}(\rho) \end{pmatrix}, \quad (2)$$

где m – целое число, β – проекция волнового вектора \mathbf{k} на ось z . Тогда можно записать уравнения для электрического и магнитного полей в следующей форме [2]

$$\frac{d\mathbf{W}(\rho)}{d\rho} = ik\hat{\mathbf{M}}(\rho)\mathbf{W}(\rho), \quad (3)$$

где тензор тангенциальных компонент

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} H_z \mathbf{e}_z + H_\varphi \mathbf{e}_\varphi \\ E_z \mathbf{e}_z + E_\varphi \mathbf{e}_\varphi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{H}_t \\ \mathbf{E}_t \end{pmatrix}, \quad (4)$$

матрица $\hat{\mathbf{M}}(\rho)$

$$\hat{\mathbf{M}}(\rho) = \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{A}} & \hat{\mathbf{B}} \\ \hat{\mathbf{C}} & \hat{\mathbf{D}} \end{pmatrix}, \quad (5)$$

и, с учетом (1),

$$\hat{\mathbf{A}} = \frac{i}{k} \left[\frac{1}{\rho} \left(\mathbf{e}_\varphi \otimes \mathbf{e}_\varphi - \frac{\varepsilon_a}{\varepsilon_D} m \mathbf{e}_z \otimes \mathbf{e}_z \right) + \frac{\varepsilon_a}{\varepsilon_D} \beta \mathbf{e}_z \otimes \mathbf{e}_\varphi \right], \quad (6)$$

$$\hat{\mathbf{B}} = \left(\varepsilon_D - \frac{\varepsilon_a^2}{\varepsilon_D} - \frac{\beta^2}{k^2} \right) \mathbf{e}_z \otimes \mathbf{e}_\varphi + \frac{m\beta}{k^2 \rho} (\mathbf{e}_z \otimes \mathbf{e}_z - \mathbf{e}_\varphi \otimes \mathbf{e}_\varphi) + \left(\frac{m^2}{k^2 \rho^2} - \varepsilon'_D \right) \mathbf{e}_\varphi \otimes \mathbf{e}_z, \quad (7)$$

$$\hat{\mathbf{C}} = \left(\frac{\beta^2}{\varepsilon_D k^2} - 1 \right) \mathbf{e}_z \otimes \mathbf{e}_\varphi + \frac{m\beta}{\varepsilon_D k^2 \rho} (\mathbf{e}_\varphi \otimes \mathbf{e}_\varphi - \mathbf{e}_z \otimes \mathbf{e}_z) + \left(1 - \frac{m^2}{\varepsilon_D k^2 \rho^2} \right) \mathbf{e}_\varphi \otimes \mathbf{e}_z, \quad (8)$$

$$\hat{\mathbf{D}} = \frac{i}{k} \left[\frac{1}{\rho} \left(1 + \frac{\varepsilon_a}{\varepsilon_D} m \right) \mathbf{e}_\varphi \otimes \mathbf{e}_\varphi + \frac{\varepsilon_a}{\varepsilon_D} \beta \mathbf{e}_z \otimes \mathbf{e}_\varphi \right]. \quad (9)$$

Матрица $\hat{\mathbf{M}}(\rho)$ может быть разложена по степеням ρ

$$\hat{\mathbf{M}} = \hat{\mathbf{M}}^{(0)} + \frac{\hat{\mathbf{M}}^{(1)}}{\rho} + \frac{\hat{\mathbf{M}}^{(2)}}{\rho^2}. \quad (10)$$

Укажем явный вид всех входящих в (10) матриц

$$\hat{\mathbf{M}}^{(0)} = \hat{\mathbf{M}}_{z\varphi}^{(0)} \mathbf{e}_z \otimes \mathbf{e}_\varphi + \hat{\mathbf{M}}_{\varphi z}^{(0)} \mathbf{e}_\varphi \otimes \mathbf{e}_z, \quad (11)$$

$$\hat{\mathbf{M}}^{(1)} = \hat{\mathbf{M}}_{\varphi\varphi}^{(1)} \mathbf{e}_\varphi \otimes \mathbf{e}_\varphi + \hat{\mathbf{M}}_{zz}^{(1)} \mathbf{e}_z \otimes \mathbf{e}_z, \quad (12)$$

$$\hat{\mathbf{M}}^{(2)} = \hat{\mathbf{M}}_{\varphi z}^{(2)} \mathbf{e}_\varphi \otimes \mathbf{e}_z, \quad (13)$$

где определены вспомогательные матрицы

$$\hat{\mathbf{M}}_{z\varphi}^{(0)} = \begin{pmatrix} \frac{i}{k} \frac{\varepsilon_a}{\varepsilon_D} \beta & \left(\varepsilon_D - \frac{\varepsilon_a^2}{\varepsilon_D} - \frac{\beta^2}{k^2} \right) \\ \left(\frac{\beta^2}{\varepsilon_D k^2} - 1 \right) & \frac{i}{k} \frac{\varepsilon_a}{\varepsilon_D} \beta \end{pmatrix}, \quad \hat{\mathbf{M}}_{\varphi z}^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 & -\varepsilon'_D \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (14)$$

$$\hat{\mathbf{M}}_{\varphi\varphi}^{(1)} = \begin{pmatrix} \frac{i}{k} & -\frac{m\beta}{k^2} \\ \frac{m\beta}{\varepsilon_D k^2} & \frac{i}{k} \left(1 + \frac{\varepsilon_a}{\varepsilon_D} m \right) \end{pmatrix}, \quad \hat{\mathbf{M}}_{zz}^{(1)} = \begin{pmatrix} -\frac{i}{k} \frac{\varepsilon_a}{\varepsilon_D} m & \frac{m\beta}{k^2} \\ -\frac{m\beta}{\varepsilon_D k^2} & 0 \end{pmatrix}, \quad (15)$$

$$\hat{\mathbf{M}}_{\varphi z}^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{m^2}{k^2} \\ -\frac{m^2}{\varepsilon_D k^2} & 0 \end{pmatrix}. \quad (16)$$

После несложных математических преобразований получаем

$$\frac{d^2 \mathbf{W}_z}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d\mathbf{W}_z}{d\rho} + \left(k^2 \hat{\mathbf{M}}_{z\varphi}^{(0)} \hat{\mathbf{M}}_{\varphi z}^{(0)} - \frac{m^2}{\rho^2} \right) \mathbf{W}_z = 0. \quad (17)$$

Здесь обозначено

$$\mathbf{W}_z = \begin{pmatrix} H_z \\ E_z \end{pmatrix}. \quad (18)$$

Общее решение уравнения (17) даётся функциями Бесселя:

$$\begin{pmatrix} H_z \\ E_z \end{pmatrix} = (\mathbf{a}_1 \quad \mathbf{a}_2) \begin{pmatrix} C_1 J_m(\alpha_1 \rho) + C_2 Y_m(\alpha_1 \rho) \\ C_3 J_m(\alpha_2 \rho) + C_4 Y_m(\alpha_2 \rho) \end{pmatrix}, \quad (19)$$

где $(\alpha_{1,2})^2$ - собственные значения матрицы $\hat{\mathbf{M}}_{z\varphi}^{(0)} \hat{\mathbf{M}}_{\varphi z}^{(0)}$, соответствующие собственным векторам $\mathbf{a}_{1,2}$. Значения остальных компонент можно восстановить, используя соотношения

$$\begin{pmatrix} H_\varphi \\ E_\varphi \end{pmatrix} = -(\hat{\mathbf{M}}_{z\varphi}^{(0)})^{-1} \left(\frac{i}{k} \frac{dW_z}{d\rho} + \frac{\hat{\mathbf{M}}_{zz}^{(1)} W_z}{\rho} \right), \quad (20)$$

$$\begin{pmatrix} \mathbf{H} \\ \mathbf{E} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & -\mathbf{e}_\rho \otimes \mathbf{u} \\ (\varepsilon_D)^{-1} \mathbf{e}_\rho \otimes \mathbf{u} & \mathbf{1} + i \frac{\varepsilon_a}{\varepsilon_D} \mathbf{e}_\rho \otimes \mathbf{e}_\varphi \end{pmatrix} \mathbf{W} \quad (21)$$

с вектором

$$\mathbf{u} = \frac{\beta}{k} \mathbf{e}_\varphi - \frac{m}{kr} \mathbf{e}_z. \quad (22)$$

Далее рассмотрим подробнее случай падения плоских волн перпендикулярно оси цилиндра. Такие волны можно представить в виде суперпозиции ТЕ- и ТМ-волн. Для них можно получить вид рассеянных волн

$$TM: \begin{pmatrix} \mathbf{H} \\ \mathbf{E} \end{pmatrix}_{sc} = H_0^{TM} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} b_m^{TM} e^{im\varphi} \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} [\mathbf{e}_+ H_{m-1}^{(1)}(k\rho) + \mathbf{e}_- H_{m+1}^{(1)}(k\rho)] \\ \mathbf{e}_z H_m^{(1)}(k\rho) \end{pmatrix}, \quad (23)$$

$$TE: \begin{pmatrix} \mathbf{H} \\ \mathbf{E} \end{pmatrix}_{sc} = H_0^{TE} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} b_m^{TE} e^{im\varphi} \begin{pmatrix} H_m^{(1)}(k\rho) \mathbf{e}_z \\ \frac{1}{2} [\mathbf{e}_+ H_{m-1}^{(1)}(k\rho) + \mathbf{e}_- H_{m+1}^{(1)}(k\rho)] \end{pmatrix}. \quad (24)$$

где коэффициенты $b_m^{TM(TE)}$ определяются из граничных условий.

2 Сечение рассеяния. Подробную информацию о рассеянии можно получить, измеряя дифференциальное сечение рассеяния. В случае цилиндрической симметрии его рационально определить на единицу длины

$$\frac{d\sigma_{sc}}{Ld\Omega} = \lim_{r \rightarrow \infty} \left(r \frac{|\mathbf{E}_{sc}|^2}{|\mathbf{E}_{inc}|^2} \right) = \lim_{r \rightarrow \infty} \left(r \frac{|\mathbf{H}_{sc}|^2}{|\mathbf{H}_{inc}|^2} \right), \quad (25)$$

где обозначены $\mathbf{E}_{sc}, \mathbf{H}_{sc}$ - напряженности полей рассеянной волны и $\mathbf{E}_{inc}, \mathbf{H}_{inc}$ - падающей.

Дифференциальное сечение можно вычислить с помощью (23)-(24)

$$\frac{d\sigma_{sc}^{TM(TE)}}{Ld\Omega} = \frac{2}{\pi k} \left| \sum_{m=-\infty}^{+\infty} b_m^{TM(TE)} e^{im\phi} i^{-m} \right|^2. \quad (26)$$

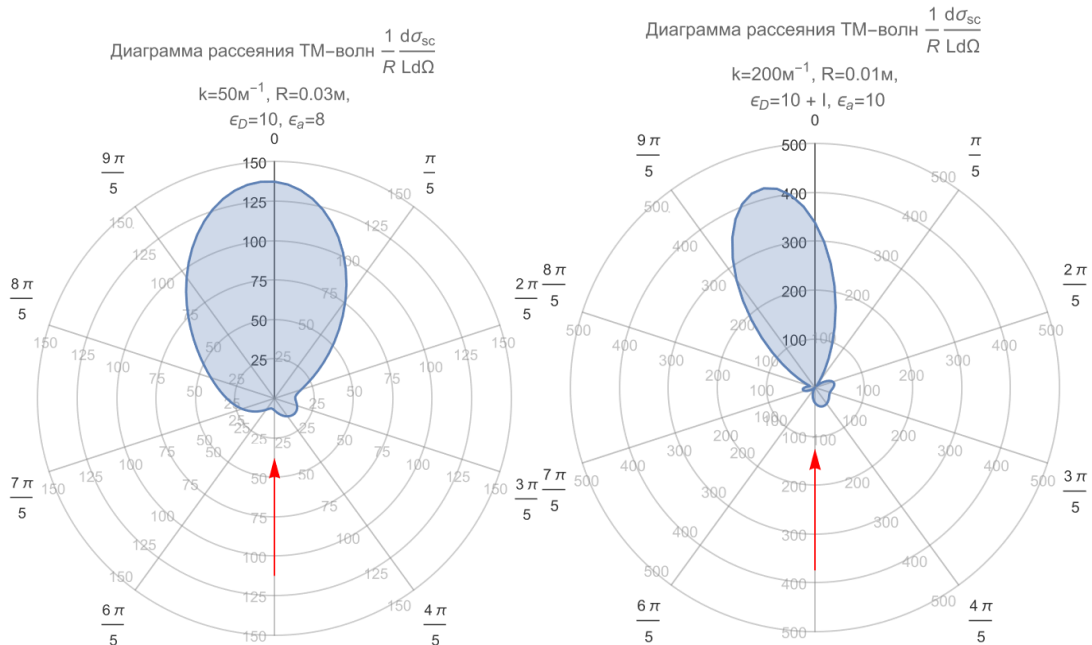
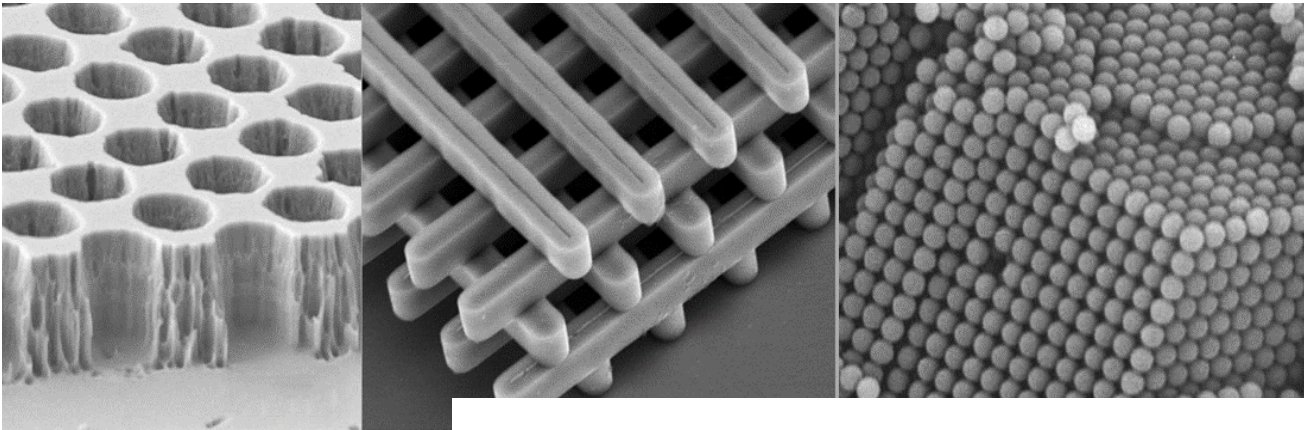


Рис. 1. Диаграммы рассеяния ТМ-волн для материалов с диэлектрической проницаемостью (1). Направление падения волны – красная стрелка.

Заключение. В результате решения уравнений Максвелла в полуметалле Вейля найдены точные аналитические цилиндрически симметричные решения для векторов напряженности электрического и индукции магнитного полей. С их использованием найдены коэффициенты рассеяния для отдельных мод на частицах круглой цилиндрической формы. Вид диаграмм рассеяния указывает на сильное влияние хиральных эффектов на направление и распределение интенсивности рассеянного излучения. Установлено, что, изменяя такие параметры полуметаллических частиц как радиус и значения компонент тензора диэлектрической проницаемости, можно добиться подавления или усиления как прямого, так и обратного рассеяния. Изменением недиагональных компонент регулируется направление главного максимума рассеяния. Итак, полуметаллы Вейля могут быть использованы для создания различных компактных невзаимных оптических элементов.

Литература.

1. Light control with Weyl semimetals / C. Guo [et al.] // eLight. – 2023. – Vol. 3, № 1. – P. 2.
2. Novitsky, A.V. Operator matrices for describing guiding propagation in circular bianisotropic fibres / A.V. Novitsky, L.M. Barkovsky // J. Phys. A: Math. Gen. – 2005. – Т. 38, № 2. – С. 391-404.
3. Novitsky, A.V. Matrix approach for light scattering by bianisotropic cylindrical particles / A.V. Novitsky // J. Phys.: Condens. Matter. – 2007. – Т. 19, № 8. – С. 086213.



**ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО
СОСТОЯНИЯ, НАНОСТРУКТУР И
МАТЕРИАЛОВ**

Адсорбция азота на монослой ReS_2 : квантово-механическое моделированиеА.А. Жойдик^а, А.В. Козич^а, А.В. Баглов^{а, б}, Л.С. Хорошко^{а, б}^а Белорусский государственный университет, 220030 Минск, Беларусь^б Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, 220013 Минск, Беларусь

E-mail: schwarzwar@gmail.com

Введение. Дисульфид рения относится к новому поколению слоистых дихалькогенидов тугоплавких металлов, отличаясь от дисульфидов молибдена и вольфрама искаженной низкосимметричной решеткой, приводящей к слабовыраженному эффекту квантового ограничения, анизотропии физических свойств и нетривиальной электронной структуре [1–4]. Помимо использования наноструктурированного дисульфида рения в качестве перспективного (фото)катализатора [5, 6], можно отметить формирование массивов вертикально ориентированных нанолистков ReS_2 химическим осаждением из газовой фазы, перспективных для создания литий-серных аккумуляторов с очень малой потерей емкости на цикл заряд/разряд [7]. Также данный материал в виде нанолистков демонстрирует газочувствительные свойства [8]. Все эти приложения предполагают активное взаимодействие поверхности нанолистков дисульфида рения с теми или иными соединениями. Тем не менее, непосредственно взаимодействие поверхности ReS_2 , в том числе с молекулами, последовательно не изучалось. Целью данной работы было проанализировать адсорбцию азота на монослой ReS_2 путем численного квантово-механического моделирования.

1 Методика исследования. Монослой дисульфида рения строили из объемного материала, который, в свою очередь, был нами исследован ранее [9]. При этом структурную модель монослоя строили в стандартизированной форме, как предложено в [10]. Численное моделирование осуществляли в рамках теории функционала плотности и псевдопотенциала, реализованных в пакете *OpenMX* [11–13]. Критерий сходимости расчета самосогласованного поля составлял 10^{-6} эВ/ион. Интегрирование в первой зоне Бриллюэна проводили по Γ -центрированной регулярной сетке k -точек размером $5 \times 4 \times 1$. Сетку для численного интегрирования выбирали такой, чтобы среднее значение энергии обрезания составляло около 2100 эВ. Псевдопотенциалы включали в качестве валентных: $5s$ -, $5p$ -, $5d$ - и $6s$ -электроны для рения, $3s$ - и $3p$ -электроны для серы, а также $2s$ - и $2p$ -электроны для азота. Двойной валентно-расщепленный базис с одной поляризационной функцией был использован для представления волновых функций электронов. Численное моделирование проводили в рамках приближения локальной плотности и обменно-корреляционного функционала SA-PZ. После размещения молекулы азота над одним из центров адсорбции проводили структурную ее релаксацию без ограничений с фиксированными граничными условиями и позициями ионов рения и серы. Критерием сходимости считали достижение любой компонентой сил, действующих на ионы азота, величины, меньшей 0,01 эВ/Å.

2 Результаты и обсуждение. Кристаллическая структура ReS_2 предполагает четыре неэквивалентных атома серы, взаимодействующих с молекулой азота. На Рис. 1 представлена типичная структура монослоя ReS_2 с размещенной над одним из атомов серы молекулой азота в исходном виде и после структурной релаксации. Во всех случаях наблюдается смещение молекулы азота из исходного положения, при котором один из атомов азота расположен точно над атомом серы, в положение между атомами (Рис. 1а, б).

При это молекула азота ориентировалась под углом 26–28° к плоскости монослоя (плоскости распространения) ReS_2 (Рис. 1,в). Расстояние от атомов азота до атомов серы незначительно различалось и составляло в среднем 3,4 Å. Полученные значения углов и расстояний близки к результатам, полученным при исследовании адсорбции азота на монослой MoS_2 . Электронные состояния молекул азота локализованы в области шириной около 1 эВ, лежащей на 2 эВ выше дна зоны проводимости ReS_2 . Это показывает, что электронные состояния молекулы азота слабо смешиваются с электронными состояниями

атомов серы, что говорит о физической адсорбции. Тем не менее наблюдается небольшая деформация эквипотенциальной поверхности одноэлектронного потенциала, что также свидетельствует о физической природе адсорбции азота на монослой ReS_2 (Рис. 2).

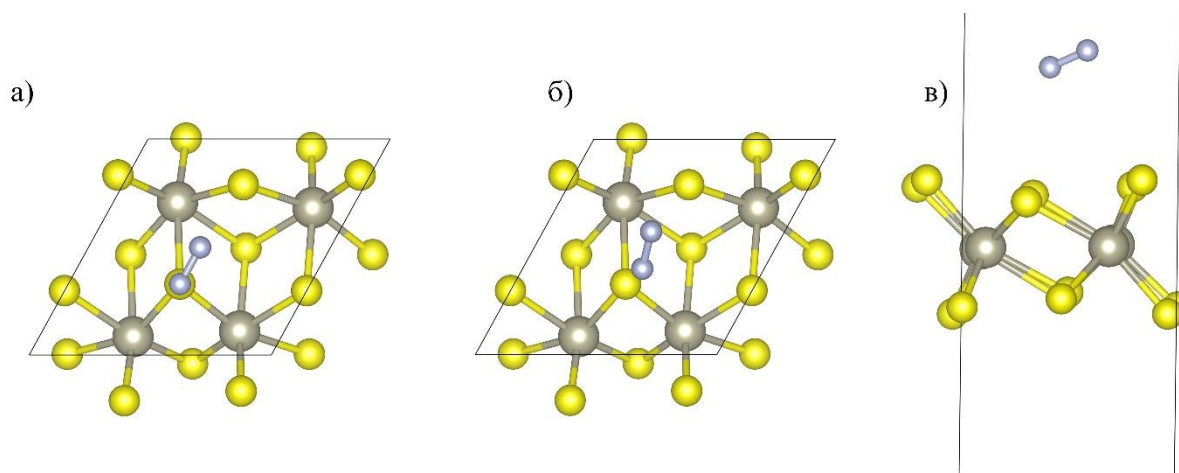


Рис. 1. Вид монослоя дисульфида рения с молекулой азота: исходная структура, вид сверху (а); отрелаксированная структура, вид сверху (б); отрелаксированная структура, вид сбоку (в).

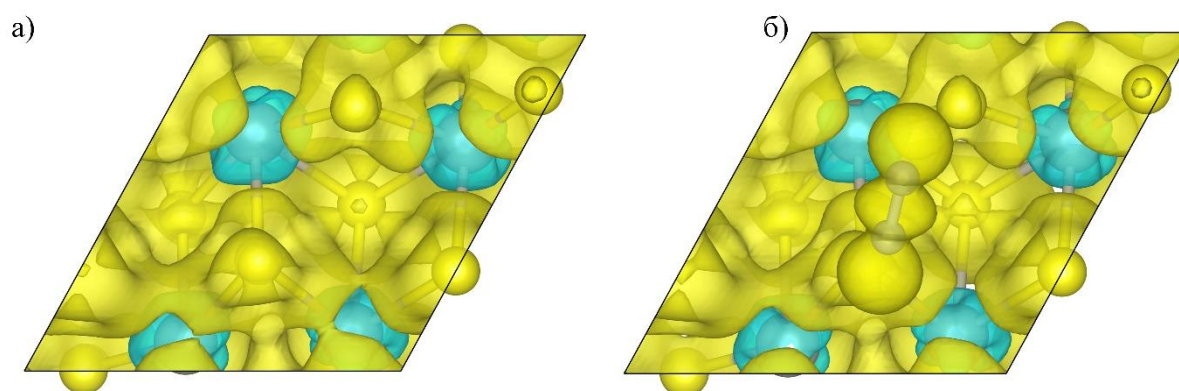


Рис. 2. Визуализация одноэлектронного потенциала: монослой дисульфида рения (а); монослой дисульфида рения с молекулой азота (б).

Заключение. Методами квантово-механического моделирования из первых принципов была исследована адсорбция азота (толщиной $1/4$ монослоя) на поверхности дисульфида рения. Модельной структурой является жесткий монослой ReS_2 , в котором атомы серы являются сорбционными центрами. Показано, что независимо от центра адсорбции молекула азота ориентируется под углом $26\text{--}28^\circ$ к плоскости инверсии на расстоянии около $3,4 \text{ \AA}$ от центров адсорбции. Это говорит о преимущественно о физическом характере адсорбции, что подтверждается анализом энергетического спектра электронных состояний, согласно которому электронные состояния молекул азота локализованы в области шириной около 1 эВ , лежащие на 2 эВ выше дна зоны проводимости ReS_2 , что говорит о слабом смешивании электронных состояний молекулы азота с электронными состояниями атомов серы. Полученные результаты качественно совпадают с результатами исследования адсорбции азота на монослой MoS_2 , что обусловлено одними и теми же центрами адсорбции (атомами серы) в обоих случаях. Различия же в ориентации молекулы азота связаны с более сложным строением эквипотенциальной поверхности монослоя ReS_2 в сравнении с MoS_2 вследствие его низкосимметричной структуры. Полученные данные представляют интерес как для интерпретации экспериментальных данных, так и для дальнейших теоретических

исследований мультислойных структур, в том числе в гетероструктур, а также исследования роли поверхностных состояний для анализа (фото)химической активности материала.

Благодарности. Работа выполнена при поддержке Государственной программы научных исследований «Материаловедение, новые материалы и технологии» в рамках задания 2.14.3.

Литература.

1. Rahman, M.Z. Advent of 2D rhenium disulfide (ReS₂): Fundamentals to applications / M.Z. Rahman, K. Davey, S.-Z. Qiao // *Adv. Funct. Mater.* – 2017. – V. 27. – P. 1606129.
2. Murray, H.H. Structure of rhenium disulfide / H.H. Murray [et al.] // *Inorg. Chem.* – 1994 – V. 33, – Iss. 19. – P. 4418–4420.
3. Gunasekera, S.M. Electronic band structure of rhenium dichalcogenides / S.M. Gunasekera [et al.] // *J. Electron. Mater.* – 2018. – V. 47. – P. 4314–4320.
4. Biswas, D. Narrow-band anisotropic electronic structure of ReS₂ / D. Biswas [et al.] // *Phys. Rev. B.* – 2017. – V. 96. – P. 085205.
5. Xu, X. Identification of few-layer ReS₂ as photo-electro integrated catalyst for hydrogen evolution / X. Xu [et al.] // *Nano Energy.* – 2013. – V. 48. – P. 337–344.
6. Zhou, Y. Auto-optimizing Hydrogen Evolution Catalytic Activity of ReS₂ through Intrinsic Charge Engineering / Y. Zhou [et al.] // *ACS Nano.* – 2018. – V. 12, – Iss. 5. – P. 4486–4493
7. Gao, J. Vertically Oriented Arrays of ReS₂ Nanosheets for Electrochemical Energy Storage and Electrocatalysis / J. Gao [et al.] // *Nano Lett.* – 2016. – V. 16, – Iss. 6. – P. 3780–3787.
8. Yang, A. Humidity sensing using vertically oriented arrays of ReS₂ nanosheets deposited on an interdigitated gold electrode / A. Yang [et al.] // *2D Mater.* – 2016. – V. 3. – P. 045012.
9. Baglov, A.V. Crystal structure and electronic properties of rhenium disulfide / A.V. Baglov, L.S. Khoroshko // *J. Appl. Spectrosc.* – 2022. – V. 89. – P. 860–864.
10. Baglov, A.V. Evolution of structural and electronic properties standardized description in rhenium disulfide at the bulk-monolayer transition / A.V. Baglov [et al.] // *Heliyon.* – 2024. – V. 10, – Iss. 7. – P. e28646.
11. Ozaki, T. Variationally Optimized Atomic Orbitals for Large-Scale Electronic Structures / T. Ozaki // *Phys. Rev. B.* – 2003. – V. 67, – Iss. 15. – P. 155108.
12. Ozaki, T. Numerical Atomic Basis Orbitals from H to Kr / T. Ozaki, H. Kino // *Phys. Rev. B.* – 2004. – V. 69, – Iss. 19. – P. 195113.
13. Ozaki, T. Efficient Projector Expansion for the Ab Initio LCAO Method / T. Ozaki, H. Kino // *Phys. Rev. B.* – 2005. – V. 72, – Iss. 4, – P. 045121.

Состав, структура и фотолюминесцентные свойства ионно-синтезированных нановключений оксида галлия

Д.С. Королев, К.С. Матюнина, А.А. Никольская, Р.Н. Крюков, А.И. Белов, А.Н. Михайлов,
А.А. Сушков, Д.А. Павлов, Д.И. Тетельбаум

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, 603022 Нижний
Новгород, Россия
E-mail: dmkorolev@phys.unn.ru*

Введение. Широкозонные полупроводники в последние годы привлекают все большее внимание исследователей благодаря их свойствам, обусловленным большим значением ширины запрещенной зоны (более 3 эВ). Одним из наиболее привлекательных материалов является оксид галлия, который рассматривается в качестве основного материала электроники нового четвертого поколения. Для таких материалов продемонстрирована возможность создания эффективных газовых сенсоров, а также «солнечно-слепых» фотодетекторов УФ-диапазона. Однако, его широкое коммерческое применение ограничивается сложностью

технологии его получения и последующей модификации. В данной работе предлагается новый способ получения наноматериалов на основе оксида галлия путем ионного синтеза нанокристаллических включений этого полупроводника в диэлектрических матрицах на кремнии. Приводятся результаты исследования состава, структуры и люминесцентных свойств синтезированных образцов.

1 Методика эксперимента. В качестве исходных образцов использовались пластины кремния КЭФ-4,5 (100), на которые методом электронно-лучевого испарения осаждались пленки SiO_2 толщиной 300 нм. На первом этапе ионного синтеза образцы облучались ионами Ga^+ (80 кэВ, $5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$) и 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. Также применялся однократный отжиг при температурах 700 и 900 °С в течение 30 мин в атмосфере азота или кислорода. Исследование образцов проводилось методами, фотолюминесценции (ФЛ), спектроскопии возбуждения ФЛ, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) и просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ).

2 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. Исследование состава выявило образование химических связей Ga-O в отсутствие отжига. Другой интересной особенностью является образование оксидных связей даже в отсутствие дополнительной имплантации кислорода. Наряду с этим, наблюдается 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. Однако, при отжиге в атмосфере азота галлий находится преимущественно в состоянии с недостатком кислорода Ga_2O . Отжиг в атмосфере кислорода приводит к дополнительному окислению имплантированного галлия и в результате приводит к увеличению содержания галлия в состоянии стехиометрического оксида Ga_2O_3 до концентрации выше 90 % (Рис.1).

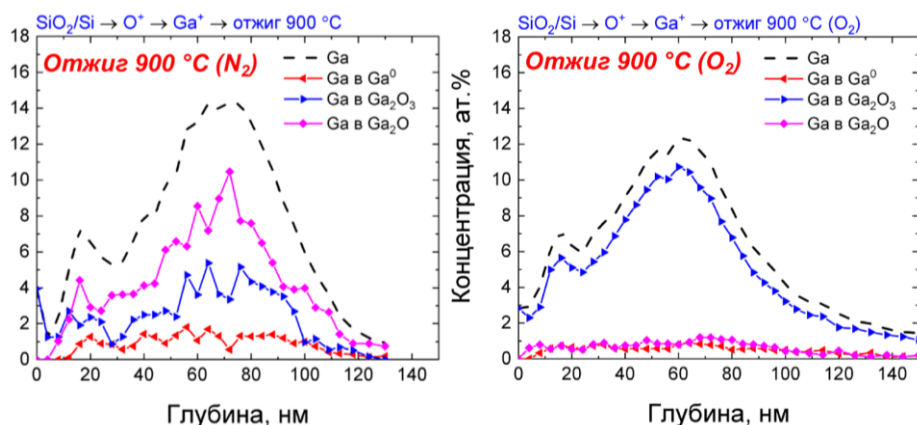


Рис. 1. Спектры РФЭС облученных структур SiO_2/Si после отжига при 900 °С в атмосфере азота и кислорода.

Исследование спектров ФЛ выявило появление новых линий с максимумом при $\sim 480 \text{ нм}$ (Рис. 2). Эта линия характерна для рекомбинации донорно-акцепторных пар в оксиде галлия. Отметим, что форма линии и максимальная интенсивность ФЛ существенно изменяется при вариации условий постимплантационной термообработки. Исследование спектров возбуждения ФЛ демонстрирует наличие максимума энергии возбуждения при $\sim 4,7 \text{ эВ}$, что совпадает со значением ширины запрещенной зоны для Ga_2O_3 . Этот факт

свидетельствует о том, что наблюдаемая люминесценция связана с рекомбинацией носителей, возбужденных в синтезированных нанокристаллах Ga₂O₃.

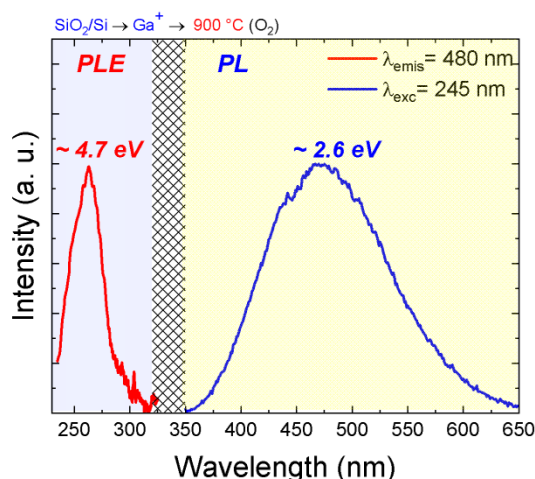


Рис. 2. Спектры ФЛ и возбуждения ФЛ облученных структур SiO₂/Si после отжига в атмосфере кислорода при 900 °С.

Исследование методом ПЭМ поперечного среза структур SiO₂/Si, облученных ионами Ga⁺, O⁺ и отожженных при 900 °С в атмосфере азота или кислорода, выявило формирование нановключений оксида галлия в имплантированном слое.

Заключение. Продемонстрирована возможность ионного синтеза нановключений оксида галлия, обладающих люминесценцией в видимой части спектра. Показано, что состав, 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/>.

Электрофизические свойства серебряно-графеновых наночастиц с комплексом метилпропилфенилпропановой кислоты для микроволновой терапии опухолевой ткани шейки матки

Е.А. Зелковский^a, Е.С Карпилова^{a,b}, Д.В. Радюк^a

^a Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, 220013 Минск, Беларусь

^b Белорусский государственный университет, 220030 Минск, Беларусь
E-mail: radziuk@bsuir.by

Введение. Кислородсодержащий графен (кГ) с атомно-кластерной структурой серебра находит широкое применение в качестве активных компонент полимерных и неорганических материалов в нанoeлектронике, квантовых точках и фототермической терапии в наномедицине. Электрофизические свойства и параметры каталитической активности кГ можно контролировать путем легирования его структуры атомами серебра, а цитотоксичность и активность кГ в воспалительных и онкологических процессах можно улучшить посредством комплексообразования с лекарственными лигандами. Однако для практического применения таких наночастиц требуется сочетание высокой электрокинетической активности поверхности и коллоидной устойчивости, что представляет собой нерешенную задачу.

В отличие от фототермических методов, микроволновая терапия обеспечивает более глубокое проникновение в опухолевую ткань и вызывает высокочастотные колебания (~1x10²-10³ МГц для клинических применений) внутриклеточных ионов и полярных молекул. Однако

микроволновая терапия часто приводит к некрозу клеток и распаду клеточной мембраны, вызывая провоспалительную реакцию, опосредованную утечкой биологических компонентов. Установлено, что серебряно-графеновые наноплатформы вызывают локальное усиление микроволновой сенсбилизации посредством уменьшения воспалительных процессов благодаря сопряженному действию неорганических и органических компонентов в комплексах с лекарственными лигандами. В связи с этим, для практического применения важно определить условия распределения поля электромагнитного излучения в зависимости от электропроводности лекарственных серебряно-графеновых наночастиц.

Таким образом, в нашей работе мы выполнили теоретическое моделирование напряженности электромагнитного поля и распределения плотности потока мощности в серебряно-графеновых наночастицах с комплексом метилпропилфенилпропановой кислоты (МПК), сопряженных с уравнением биотепла в опухоли шейки матки под воздействием микроволнового облучения в диапазоне частот от 100 МГц до 1 ГГц с использованием программы COMSOL Multiphysics 4.3. Эта модель относится к области микроволновой химиотерапии онкологических заболеваний и позволяет рассчитать электромагнитное поле, создаваемое наночастицами, в сочетании с уравнением биотепла ткани шейки матки. Целью биофизического моделирования является определение условий наибольшего ускорения изменения напряженности электрического поля E (В/м(См⁻¹)) и усредненного по времени распределения потока мощности P_{cervix} (Вт/кг(См⁻¹)) на поверхности полупроводниковых наночастиц по сравнению с исходной МПК внутри опухолевой ткани шейки матки. В модели рассматривается селективное облучение глубоко расположенной шейки матки в условиях снижения повреждения окружающих здоровых тканей путем введения в опухоль тонкой микроволновой коаксиальной щелевой антенны. Проникающие микроволны нагревают опухоль изнутри, образуя коагулированную область, в которой раковые клетки могут быть уничтожены.

1 Материалы и методы. Частично восстановленный кГ был синтезирован из пиролитического графита (размер кристаллитов 8-34 нм, С (96,3±10,0 ат.%), О (3,7±0,8 ат.%) и С1 (~1 ат.%) с помощью метода Тура с применением ультразвука (20 кГц). Легирование структуры кГ было выполнено в результате химического восстановления ионов серебра (1 моль/л AgNO₃) при взаимодействии с NaBH₄ (7 моль/л) при объемном отношении прекурсоров 1:3 в ДИ воде и азотом после термической обработки в изопропанольном растворе NH₄SCN (~1 моль/л). Таким образом сформированные серебряно-графеновые наночастицы, содержащие азот, подвергли ультразвуковой обработке (20 кГц) в водно-этанольной среде для комплексообразования с МПК.

2 Результаты. Для проведения математического моделирования были определены морфология и элементный состав синтезированных серебряно-графеновых наночастиц с комплексом МПК с помощью методов электронной микроскопии и энергодисперсионной рентгеновской флуоресценции. В результате анализа установлено, что наночастицы представляют собой тонкие листы кГ со средним латеральным размером ~50 нм, на поверхности которых сформированы серебряные сферы со средним размером 12 нм (Рис. 1).

Детальное описание теоретического моделирования описано в [1]. Значения E и P_{cervix} были рассчитаны с учетом электропроводности исходной МПК, серебряных наночастиц с МПК без кГ (~30 нм) в диапазоне от 80 См·м⁻¹ до 8х10⁻⁴ См·м⁻¹ и с кГ (~15 нм) в диапазоне от 0,8 См·м⁻¹ до 8х10⁻⁵ См·м⁻¹. Значения остальных параметров были следующими: плотность воды 997 кг·м⁻³ и этанола 789 кг·м⁻³, удельная теплоемкость воды 4187 Дж·(кг·К)⁻¹, плотность ткани шейки матки 1105 кг·м⁻³, и его теплоемкость при постоянном давлении 3676 Дж·(кг·°С).

В результате моделирования выявлена прямопропорциональная нелинейная зависимость рассчитанных величин E_{max} исходной МПК (Рис. 2,а), серебряных наночастиц с МПК без кГ (Рис. 2,б) и с кГ (Рис. 2,в) от электропроводности в диапазоне от 1х10⁻⁴ См/м до 1х10² См/м при микроволновом облучении.

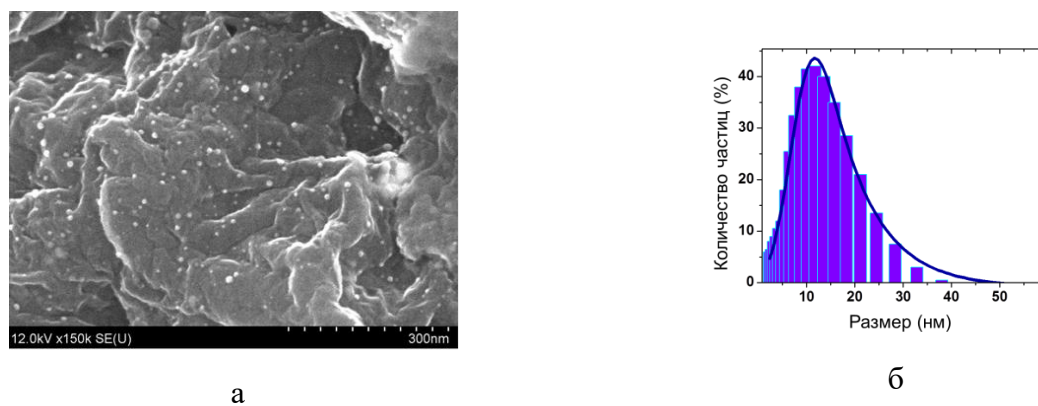


Рис. 1. Морфология серебряно-графеновых наночастиц (шкала 300 нм) (а); гистограмма распределения сферических серебряных частиц на поверхности кГ по среднему размеру (б).

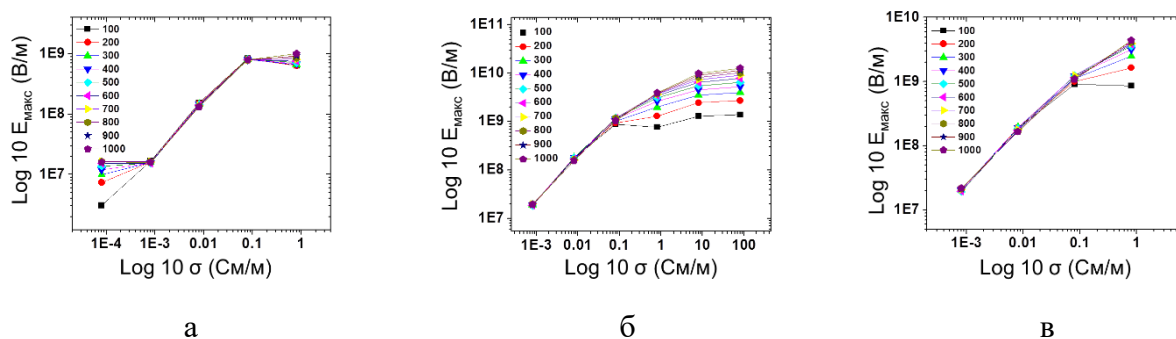


Рис. 2. Графики зависимости рассчитанных максимальных величин напряженности электрического поля $E_{\text{макс}}$ от электропроводности σ в исходной МПК (а); серебряных наночастицах с МПК без кГ (б) и с кГ (в).

Как видно на Рис. 3, рассчитанные значения величин скорости максимального изменения $E_{\text{макс}}$ достигают наибольших значений в серебряно-графеновых наночастицах с МПК $\sim 1,28 \times 10^8$ В/м согласно $y = 5,66 \times 10^4 - 5,66 \times 10^4 \exp(-x/1,28 \times 10^8)$ (Рис. 3,в) и наименьших сравнимых значений с исходной МПК ($\sim 6,79 \times 10^2$ В/м с $y = 0,05 + 0,0037 \exp(x/678,69)$) (Рис. 3,а) и в наночастицах без кГ ($\sim 6,74 \times 10^2$ В/м с $y = 0,28 - 0,29 \exp(-x/673,87)$) (Рис. 3,б).

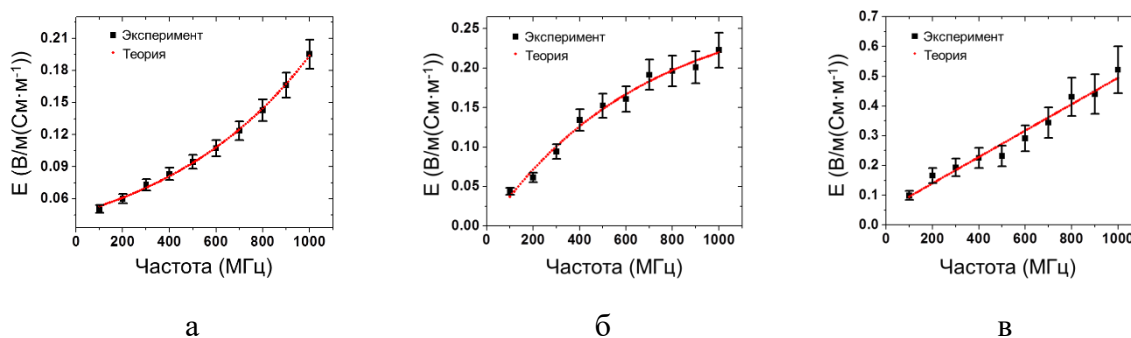


Рис. 3. Графики зависимости скорости максимального изменения $E_{\text{макс}}$ от частоты микроволнового излучения в исходной МПК (а); серебряных наночастицах с МПК без кГ (б) и с кГ (в).

Рассчитанные значения скорости P_{cervix} в зависимости от σ позволил выявить, что наибольшие значения скорости изменения общей плотности рассеиваемой мощности потока распространения биотепла достигают в серебрянных наночастицах с МПК без кГ $\sim 7,39 \times 10^3$ (Рис. 4,б), что в $\approx 1,1$ раз меньше значений в наночастицах с кГ ($\sim 6,83 \times 10^2$) (Рис. 4,в) и в $\approx 2,0$ раза меньше, чем в исходном МПК ($\sim 3,63 \times 10^2$) (Рис. 4,а). Установлено, что величина P_{cervix} достигала наибольшей интенсивности на кончике электрода во всех трех типах наночастиц, а их поверхностные зоны рассеяния в прорези уменьшались в следующем порядке: от серебрянных наночастиц с МПК без кГ к наночастицам с кГ и исходной МПК, что обусловлено действием серебра (Рис. 5).

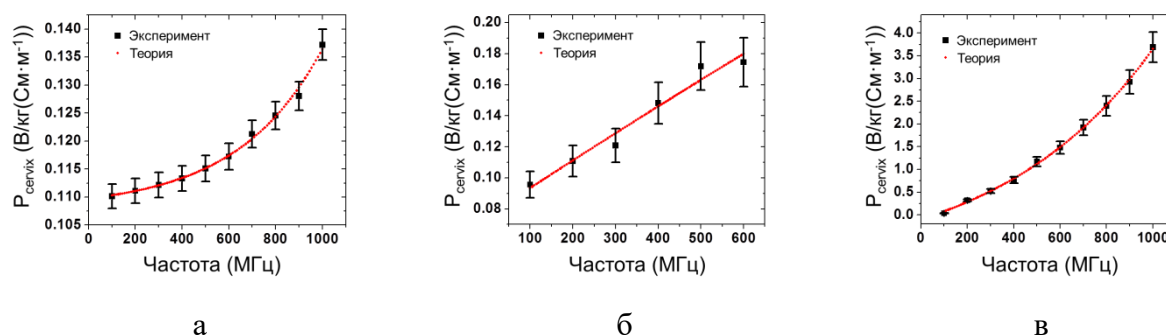


Рис. 4. Графики зависимости скорости P_{cervix} от частоты микроволнового излучения в исходной МПК (а); серебрянных наночастицах с МПК без кГ (б) и с кГ (в).

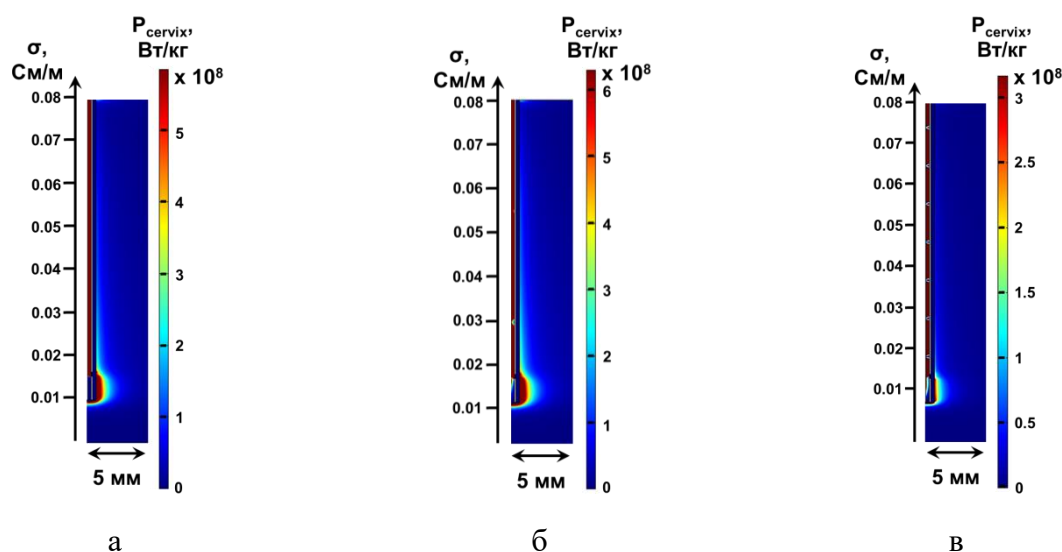


Рис. 5. Графики зависимости скорости изменения P_{cervix} (Вт/кг) на кончике электрода и поверхностных зонах рассеяния в прорези в зависимости от электропроводности σ в исходной МПК (а); серебрянных наночастицах с МПК без кГ (б) и с кГ (в).

Заключение. Применительно к микроволновой химиотерапии опухолевой ткани шейки матки рассчитанные величины $E_{\text{макс}}$ на поверхности серебряно-графеновых наночастиц с комплексом МПК претерпевают изменения в $\sim 10^5$ раз выше, чем в исходной МПК или серебрянных наночастицах без кГ. Установлено, что P_{cervix} приводит к периодическому появлению локальных изменений поля только в наночастицах с Ag, кГ и МПК. Этот метод может быть успешно применен для активизации лекарственных молекулярных кристаллов и определения биофизических условий улучшенной микроволновой химиотерапии тканей шейки матки.

Благодарности. БРФФИ грант «Ученый-Ф22У-007» и ГПНИ «Фотоника и электроника для инноваций» №21-3067 задание 1.17 («Фотоника и ее применения»).

Литература.

1. Drinevskiy A., E. Zelkovskiy, V. Abashkin, D. Shcharbin, T. Rysalskaya, D.V. Radziuk / Activation of ibuprofen via ultrasonic complexation with silver in N-doped oxidized graphene nanoparticles for microwave chemotherapy of cervix tumor tissue // ACS Biomater. Sci. Eng. - 2023. - Vol. 9, № 1. - P. 182–196.

Метод вложения в моделях эффективной среды для учёта взаимодействия электромагнитного излучения с нанокompозитом

А.А. Лихачев, М.С. Баранова, А.Л. Данилюк

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,
220013 Минск, Беларусь
E-mail: milkartem-work@mail.ru*

Введение. Модель эффективной среды [1], также известная как модель Брагемана, является одной из самых известных моделей, используемых для описания взаимодействия электромагнитного излучения (ЭМИ) с композитом. Эта модель может быть применена как к средам с макроскопическими включениями, так и к средам с наноструктурными объектами [2]. В такой модели композит с включениями (наночастицами) представляется эффективной средой, которая обладает эффективными параметрами: эффективной диэлектрической и магнитной проницаемостями. При этом считается, что включения имеют сферическую форму, имеют достаточно высокую концентрацию и взаимодействуют с окружением как с эффективной средой. В [3] предложено развитие модели эффективной среды для наноструктурированного углеродного композита. В модели предлагается учитывать импедансы RLC-контуров, которые служат представлениями структурных элементов нанокompозита. Углеродная матрица является сопротивлением, наночастицы – индуктивностью, а переходные оболочки на поверхности наночастиц – емкостью. Тем не менее, эта модель обладает недостатком: предполагается, что во всем композите учитываются наночастицы только одного типа. Это накладывает ограничения и не позволяет учитывать сложные системы с разнообразными типами наночастиц. В работе предложен метод, который позволяет адаптировать модель эффективной среды для расчета электродинамических параметров нанокompозитов, функционализированных магнитными наночастицами.

1 Методика моделирования. Эффективное значение магнитной проницаемости для двухкомпонентной среды, где первый компонент – матрица, а второй – ферромагнитные наночастицы, находится по следующим формулам:

$$\mu_{eff} = \frac{-B_{\mu} + \sqrt{B_{\mu}^2 + 8\mu_m Q_{\mu}}}{4Q_{\mu}} \quad (1)$$

с коэффициентами:

$$Q_{\mu} = \frac{1}{\mu_1} + \frac{i\omega a \mu_0}{2Z}; B_{\mu} = \frac{(3-5c) - \mu_m Q_{\mu} (6-7c)}{3-2c} \quad (2)$$

где μ_m и μ_1 – относительные магнитные проницаемости матрицы и ферромагнитных наночастиц соответственно; a – диаметр наночастиц; ω циклическая частота ЭМИ; μ_0 – магнитная константа; c – объемная концентрация наночастиц; Z – импеданс переходной оболочки (RLC -контур).

Эффективное значение диэлектрической проницаемости находится по следующим формулам:

$$\varepsilon_{eff} = \frac{-B_\varepsilon + \sqrt{B_\varepsilon^2 + 8\varepsilon_m Q_\varepsilon}}{4Q_\varepsilon} + i \frac{\sigma}{\omega} \quad (3)$$

с коэффициентами:

$$Q_\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon_1} + \frac{i\omega a \varepsilon_0}{2Z}; B_\varepsilon = \frac{(3-5c) - \varepsilon_m Q_\varepsilon (6-7c)}{3-2c} \quad (4)$$

где ε_m и ε_1 – комплексные относительные диэлектрические проницаемости углеродной матрицы и наночастиц соответственно; ε_0 – диэлектрическая проницаемость вакуума, σ – проводимость матрицы.

Выражения (1)-(4) используются для двухкомпонентной среды. Однако нанокомпозит представляет собой систему со сложной микро- и макроструктурой, в которой случайным образом распределены наночастицы. Наночастицы могут быть разных типов, обладать различными размерами, концентрацией, а в композите могут образовываться различные типы RLC -контуров. Для нахождения эффективных электродинамических параметров нанокомпозита, в котором находится N типов включений, предложено использовать метод вложения, который позволяет поэтапно гомогенизировать моделируемую систему. На первом этапе рассчитываются эффективные параметры для среды с одним типом включений. На последующих этапах используются эффективные электродинамические параметры с предыдущего этапа и в модель вводится новый компонент:

$$\mu_i = \frac{-B_{\mu_i} + \sqrt{B_{\mu_i}^2 + 8\mu_{i-1} Q_{\mu_i}}}{4Q_{\mu_i}} \quad (5)$$

$$Q_{\mu_i} = \frac{1}{\mu_i} + \frac{i\omega a_i \mu_0}{2Z_i}; B_{\mu_i} = \frac{(3-5c_i^*) - \mu_{i-1} (6-7c_i^*)}{3-2c_i^*} \quad (6)$$

где, c_i^* – объёмная концентрация наночастиц i -типа, которая рассчитывается как $c_i^* = V_i / \sum_{i=0}^N V_i$, где V_i объем наночастиц i -типа; μ_{i-1} эффективная магнитная проницаемость,

рассчитанная на предыдущем этапе, μ_0 – магнитная проницаемость углеродной матрицы.

Аналогичный подход применяется для расчета эффективной диэлектрической проницаемости ε_{eff} . Процедуру расчета можно повторить и тем самым ввести в модель учет дополнительных компонентов.

Таким образом, не возникает необходимости прибегать к трудоемким вычислениям, что не накладывает ограничений на количество компонентов, учитываемых в модели, а также появляется возможность вычислить параметры среды, учитывая различный тип включений, их различный диаметр и концентрацию в композите.

Далее, используя полученные значения магнитной и диэлектрической проницаемости, можно рассчитать коэффициенты отражения R и пропускания T электромагнитного излучения по формулам:

$$R = 20 \log \left(\left| \frac{Z_c - 377}{Z_c + 377} \right| \right) \quad (7)$$

где Z_c – волновое сопротивление композита, которое вычисляется как $Z_c = \sqrt{\mu_0 \mu_{eff} / (\epsilon_0 \epsilon_{eff})}$.

$$T = 8,68 \cdot \alpha d \cdot 20 \log \left(\left| \frac{(377 + Z_c)^2}{4 \cdot 377 \cdot Z_c} \right| \right) \cdot 20 \log \left(\left| 1 + e^{\frac{-2\alpha d}{8,68}} \cdot \frac{(377 - Z_c)^2}{(377 + Z_c)^2} \right| \right) \quad (8)$$

где α – коэффициент, равный $\alpha = \text{Re}(i \omega \sqrt{\mu_0 \mu_{eff} \epsilon_0 \epsilon_{eff}})$.

2 Результаты. На Рис. 1 и на Рис. 2 представлены результаты расчета коэффициентов отражения R и пропускания T соответственно, с использованием предложенного в работе метода для структуры с параметрами: диаметр наночастиц $a = 50$ нм, магнитная проницаемость наночастиц $\mu_1 = 2-3i$, диэлектрическая проницаемость наночастиц $\epsilon_1 = 2+0,1i$; толщина композита $d = 0,001$ м, магнитная проницаемость композита $\mu_0 = 2-3i$, диэлектрическая проницаемость композита $\epsilon_0 = 10+0,1i$, проводимость матрицы $\sigma = 120$ (Ом·м)⁻¹; сопротивление углеродной матрицы $R = 0,005$ Ом, емкость переходных оболочек $C = 6$ пФ, индуктивность наночастиц $L = 0,01$ пГн. Расчет проводился с учетом двух типов включений, которые учитывались с использованием частично-параллельной и последовательно-параллельной RLC -цепочек [3]. Рассматриваемый частотный диапазон 1-25 ГГц. Объемная концентрация матрицы 0,5, объемная концентрация частиц первого и второго типа одинаковая и составляла 0,25.

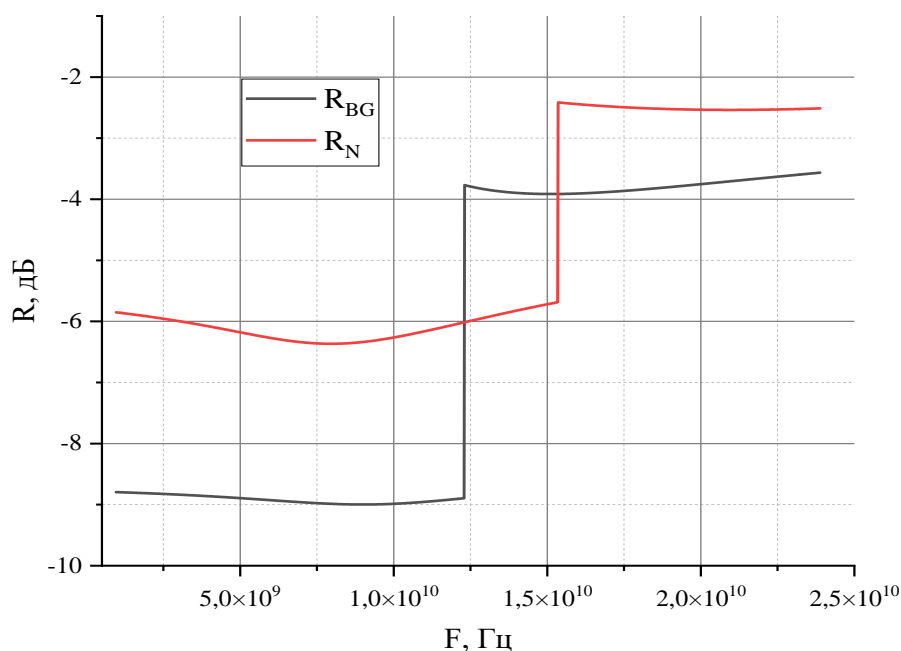


Рис. 1. Зависимость коэффициента отражения от частоты ЭМИ при использовании приближения Брегемана (R_{BG}) и при использовании метода вложения (R_N).

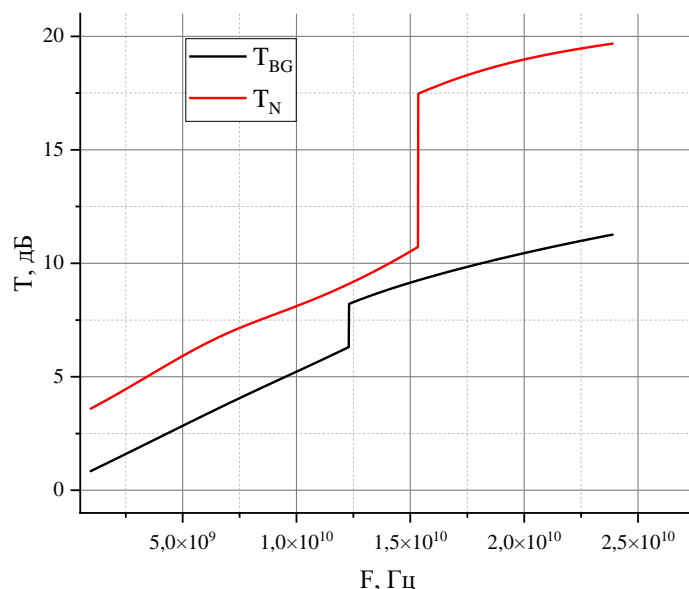


Рис. 2. Зависимость коэффициента пропускания от частоты ЭМИ при использовании приближения Брегмана (T_{BG}) и при использовании метода вложения (T_N).

Метод, предложенный в работе, позволяет рассчитывать электродинамические параметры в рамках модели эффективной среды для нанокомпозита с большим количеством включений, не прибегая к сложным вычислениям.

Литература.

1. Choy, T.C. Effective medium theory. Second edition / T.C. Choy – Oxford: Oxford university press, 2016. – 241 p.
2. Ефимова, А. И. Инфракрасная спектроскопия твердотельных систем пониженной размерности / А. И. Ефимова, Л. А. Головань, П. К. Кашкаров, В. М. Сенявин, В Ю. Тимошенко – Санкт-Петербург.: «Лань», 2016. – 246 с.
3. Atdayev A., Danilyuk A. L., Prischepa S. L. (2015) Interaction of Electromagnetic Radiation in the 20–200 GHz Frequency Range with Arrays of Carbon Nanotubes with Ferromagnetic Nanoparticles. Beilstein. (6), 1056–1064.

Квантово-химическое исследование Тиофлавина Т в основном и электронно-возбужденном состоянии

А.С. Пилипович

*Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси, 220072 Минск, Беларусь
E-mail: h.pilipovich@ifanbel.bas-net.by*

Введение. Для детектирования образования амилоидных фибрилл широко используется тиофлавин Т (ThT). Один из наиболее часто используемых методов выявления амилоидных фибрилл основывается на характерных изменениях интенсивности флуоресценции в ThT при связывании этого красителя в амилоидных фибрилах [1]. В силу широкого применения данной молекулы на практике [2], она является хорошим источником освоения расчетных методов. В работе проводятся исследования по разработке модели фотофизических процессов в молекулярных роторах на примере ThT, воспроизводящей схему энергетических уровней, структуру молекулы в основном и возбужденном S_1 состояниях.

1 Вычислительные методы. Расчеты проводились с использованием программ Gaussian 09 и PC Gamess 6.3. Полуэмпирическими методами AM1 и PM3 были рассчитаны

геометрия и поверхности потенциальной энергии (ППЭ) катиона ThT ($Z=+1$) в основном S_0 и возбужденном S_1 состояниях. Значения силы осциллятора при кручении фрагментов и энергия электронного перехода S_0 - S_1 молекулы получены с учетом конфигурационного взаимодействия шести занятых и шести незаполненных молекулярных орбиталей.

2. Результаты и обсуждение. На Рис. 1 представлена структурная формула молекулы ThT, которую условно можно разделить на три фрагмента: бензтиазольное кольцо (I), бензольное кольцо (II) и диметиламиногруппу (III). Следует ожидать, что фотофизические свойства ThT должны определяться главным образом их взаимной пространственной ориентацией. Принимая во внимание эти предположения, мы выбрали два торсионных угла φ (N15-C20-C21-C22) и ψ (C23-C24-N27-C29) для анализа при численном моделировании возможных конформаций ThT в основном и возбужденном состояниях. Эти торсионные углы φ и ψ определяют пространственное расположение фрагмента II относительно фрагмента I и фрагмента III относительно фрагмента II, соответственно (Рис. 1).

Остальные параметры молекулярной геометрии (кроме φ и ψ) обозначаются как совокупность параметров ω . Здесь и далее параметры, оптимальные для основного S_0 состояния, обозначаем как $\omega = \omega_0$, а для первого возбужденного синглетного состояния – как $\omega = \omega_1$.

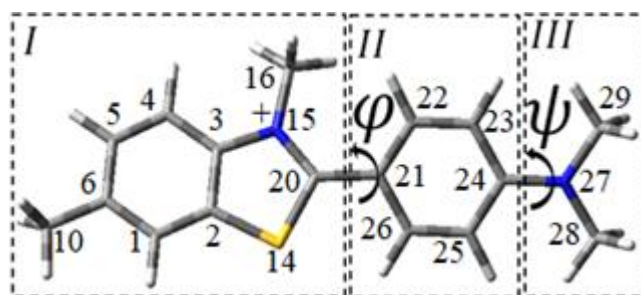


Рис. 1. Структурная формула катиона ThT. Бензтиазольное кольцо (I), бензольное кольцо (II) и диметиламиногруппа (III) заключены в рамки. Атомы S, C и N показаны желтым, светло серым и синим цветом, соответственно.

На первом этапе была проведена оптимизация геометрии ThT при фиксированных углах φ и ψ в диапазоне от 0° до 360° с шагом 10° с использованием полуэмпирических методов расчета AM1 и PM3 для обнаружения конформаций с минимальной энергией (Рис. 2 (А)). В каждой точке с заданными координатами φ и ψ выполнялась оптимизация конфигурации молекулы по всем остальным геометрическим параметрам ω_0 . На энергетической 2D поверхности можно увидеть восемь минимумов, которые соответствуют стабильным конформациям с практически одинаковыми энергиями при φ равной 37° , 145° , 217° , 325° и ψ равной 0° , 180° . Таким образом, расчеты показывают, что бензтиазольный и бензольный фрагменты в основном состоянии некомпланарны и угол между их плоскостями равен $\varphi \sim 37^\circ$. Минимумы функции $E_{S_0}(\varphi, \psi, \omega_0)$ при $\varphi = 37^\circ$, 145° , 217° или 325° молекулы ThT (Рис. 2,б), обусловлены стерическими взаимодействиями метильной группы бензтиазола с атомами водорода фрагмента II. На Рис. 2, в видно, что диметиламиногруппа и бензольное кольцо молекулы ThT компланарны в основном состоянии с $\psi = 0^\circ$, 180° или 360° , что обусловлено эффектами сопряжения. При вращении диметиламиногруппы ее планарность искажается, что приводит к несимметричной форме барьеров в энергетическом профиле в зависимости от угла ψ .

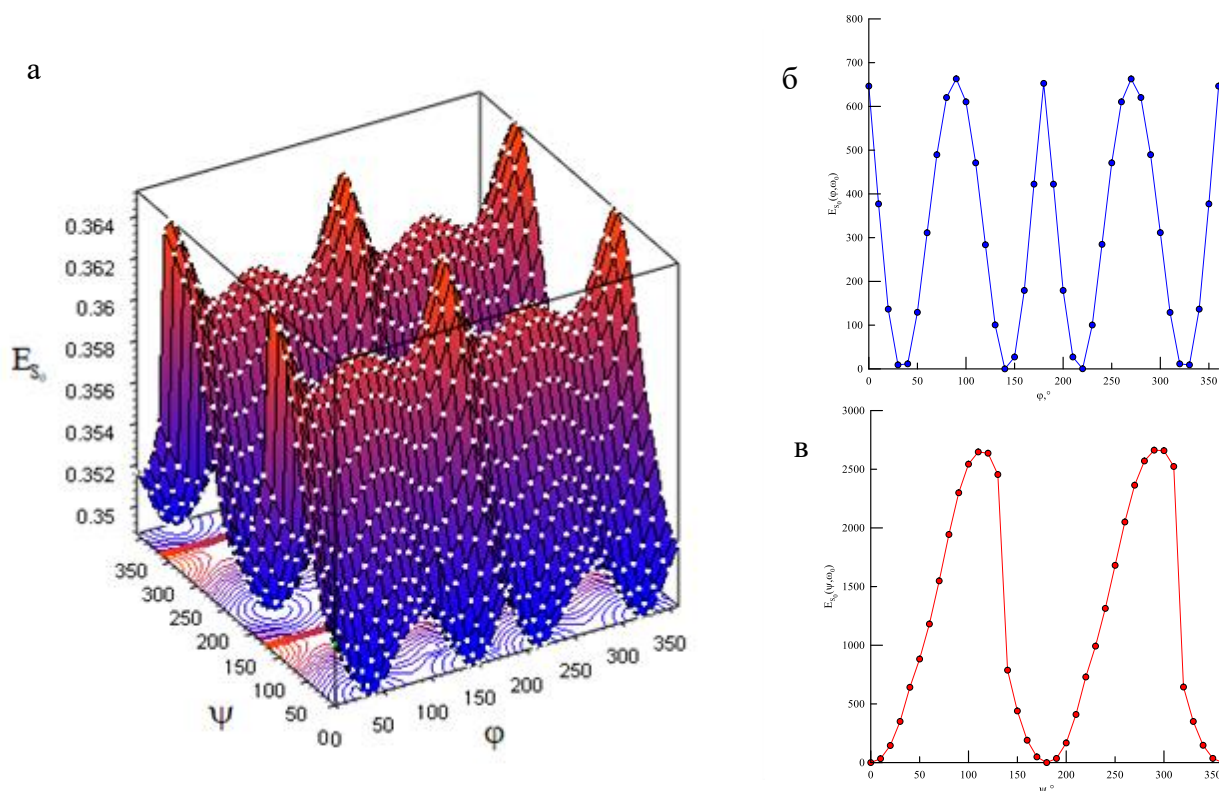


Рис. 2. Зависимость энергии E_{S_0} основного состояния молекулы ThT от значений двугранных углов φ и ψ . (а) 2D ППЭ $E_{S_0}(\varphi, \psi, \omega_0)$ в зависимости от φ и ψ . (б) ППЭ в зависимости от угла φ , угол ψ изменяется в соответствии с расчетом и (в) ППЭ в зависимости от угла ψ , угол φ изменяется в соответствии с расчетом.

Поскольку профиль потенциальной энергии вдоль углов симметричен, то дальнейшие расчеты проводились в интервале от 0° до 180° . Установлено, что энергетический барьер между соседними минимумами на поверхности потенциальной энергии $E_{S_0}(\varphi, \psi, \omega_0)$ связанный с изменением торсионного угла φ , который соответствует взаимному повороту фрагментов I и II по связи C20-C21, не велик, $\Delta E \sim 700 \text{ см}^{-1}$ (значение получено методами AM1 и PM3). Величина потенциального барьера, соответствующего вращению диметиламиногруппы относительно бензольного кольца, примерно в 4 раза выше $\Delta E \sim 2800 \text{ см}^{-1}$ (Рис. 2, в).

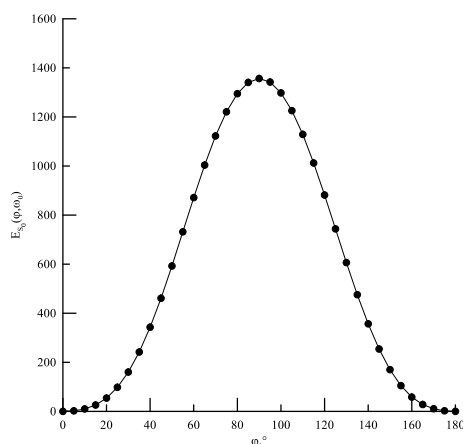


Рис. 3. ППЭ основного состояния производной молекулы ThT с атомом водорода в положении 16 вдоль торсионного угла φ .

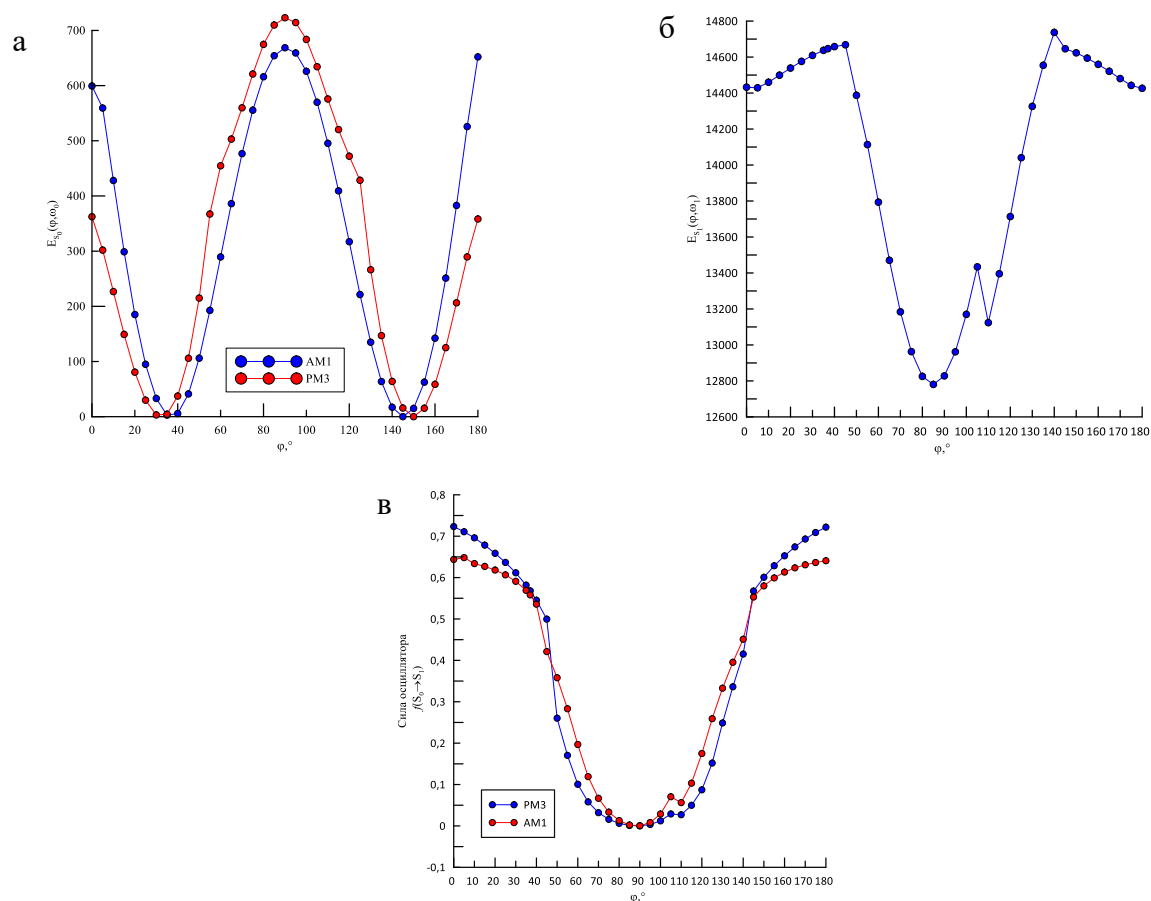


Рис. 4. Свойства основного S_0 и первого возбужденного состояния S_1 для конформеров в зависимости от φ . Геометрия конформеров и другие свойства основного состояния были рассчитаны методами AM1 и PM3. Свойства первого возбужденного состояния были получены методом PM3. (А) Энергия основного состояния S_0 . (Б) Энергия возбужденного состояния S_1 . (В) Сила осциллятора для первого электронного перехода $f(S_0 \rightarrow S_1)$, рассчитанная методами AM1 и PM3.

Нами было проведено предположение, что замещение метильной группы атомом водорода в положении 16 приведет к плоской конформации молекулы с общей π -электронной системой. На Рис. 3 представлены результаты расчета ППЭ основного состояния катиона производной ThT от величины торсионного угла φ . Выполненные исследования AM1 методом подтверждают сделанное предположение. Энергия основного S_0 состояния достигает минимального значения для планарной конформации с $\varphi = 0^\circ$ и 180° . Интересно отметить, что барьер внутреннего вращения при $\varphi \sim 90^\circ$ возрастает существенно, до значения 1360 см^{-1} .

Результаты зависимости ППЭ от углов φ и ψ для основного состояния были получены с использованием полуэмпирического метода PM3 (Рис. 4,а), которые качественно аналогичны результатам методом AM1.

С использованием полуэмпирических методов AM1 и PM3 были определены вертикальные энергии перехода во Франк-Кондоновское состояние S_1 и построена зависимость ППЭ для нерелаксированного S_1 состояния относительно торсионного угла φ (Рис.4,б). Для этого использовалась геометрия ThT оптимизированная в основном состоянии. Как можно видеть, ППЭ S_1 состояния имеет минимум при $\varphi \sim 85^\circ$. Такое поведение обусловлено понижением π -сопряжения фрагментов I и II молекулы. На основании этого можно полагать, что после перехода в возбужденное состояние молекула ThT будет испытывать конформационную перестройку, сопровождающуюся изменением угла φ от 37° до 90° .

На Рис 4, представлены значения силы осциллятора f перехода S_0-S_1 молекулы ThT от угла φ , рассчитанные AM1 и PM3 методами. Как следует из рисунка, с увеличением значения φ от 0° до 90° сила осциллятора снижается от значения ~ 0.7 до практически нулевой величины.

Заключение. Выполнены квантово-химические расчеты геометрии и энергии молекулы ThT в основном и возбужденном состояниях с использованием программы Gaussian 09 и PC Gamess 6.3. Исследования проведены для молекул в газовой фазе с изменением двугранных углов φ и ψ между фрагментами в диапазоне от 0° до 180° . Показано, что энергетический барьер между соседними минимумами на ППЭ, связанный с изменением торсионного угла φ , не велик, $\Delta E \sim 700 \text{ см}^{-1}$. Величина потенциального барьера, соответствующего вращению диметиламиногруппы относительно бензольного кольца, примерно в 4 раза выше $\Delta E \sim 2800 \text{ см}^{-1}$. Также расчеты показывают, что бензтиазольный и бензольный фрагменты в основном состоянии некомпланарны и угол между их плоскостями равен $\varphi \sim 37^\circ$. ППЭ S_1 состояния имеет минимум при $\varphi \sim 85^\circ$. Значение силы осциллятора f перехода S_0-S_1 молекулы ThT зависит от угла φ ; с его увеличением 0° до 90° сила осциллятора снижается от значения ~ 0.7 до практически нулевой величины.

Благодарности. Работа выполнена при поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (проект № Ф24В-006).

Литература

1. Naiki H. / Fluorometric determination of amyloid fibrils in vitro using the fluorescent dye, thioflavine T / H. Naiki, K. Higuchi, M. Hosokawa, T. Takeda // Analytical Biochemistry. - 1989. - Vol. 177, № 2. - P. 244-249.
2. Stsiapura V. I. / Computational Study of Thioflavin T Torsional Relaxation in the Excited State / V. I. Stsiapura, A. A. Maskevich, V. A. Kuzmitsky, K. K. Turoverov, I. M. Kuznetsova // J. Phys. Chem. - 2007. - № 111. - P. 4829-4835.

Кристаллическая структура объемного и двумерного перовскита (Rb)Sr₂Nb₃O₁₀

Е.В. Лишко^a, А.В. Баглов^{a, b}, Л.С. Хорошко^{a, b}, Д.Б. Мигас^b, М.С. Тиванов^a

^a Белорусский государственный университет, 220030 Минск, Беларусь

^b Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, 220013

Минск, Беларусь

E-mail: lishko.0146@gmail.com

Введение. Слоистые материалы длительное время удерживают интерес исследователей благодаря уникальному сочетанию их структурных, электронных, и физико-химических свойств. Большой интерес представляет использование слоистых материалов в качестве катализаторов и фотокатализаторов для очистки «технологической» воды (воды, участвующей в технологическом процессе), загрязненной ионами тяжелых металлов, органическими красителями и иными поллютантами органической и неорганической природы [1, 2]. Фотокатализаторы играют важную роль в очистке воды с помощью излучения, в т.ч. солнечного, обеспечивая фотодеградацию органических поллютантов и перевод ионов тяжелых металлов и неорганических поллютантов в иммобилизованную форму вследствие их доокисления и включения в нерастворимые в воде соединения. К настоящему моменту большая часть известных фотокатализаторов относятся к трем группам материалов различной структуры и состава: оксиды металлов; материалы на основе нитридов и оксинитридов, в т.ч. металлов; различные сульфидные материалы; а также композиты и нанокompозиты на основе перечисленных материалов [3–6]. С практической точки зрения общая эффективность

фотокаталитической очистки воды недостаточна по ряду причин: несоответствие ширины запрещенной зоны полупроводников и спектра солнечного света, низкая абсорбция солнечного излучения, недостаточно эффективного разделения зарядов, плохо контролируемые процессы миграции и рекомбинации зарядов и т.д. Поэтому поиск новых перспективных материалов непрерывно продолжается и последнее десятилетие активно изучаются слоистые перовскитные материалы, которые могут применяться как для решения задач фотокатализа, так и для фотовольтаических и других приложений. В принципе слоистые, или пластинчатые, оксиды бывают двух типов: фазы Раддлседена-Поппера (англ. Ruddlesden-Popper, R-P) и фазы Диона-Яacobсона (англ. Dion-Jacobson D-J), различающиеся химическим составом [7–12]. Фазы Раддлседена-Поппера имеют состав вида $M_2[A_{n-1}B_nO_{3n+1}]$, а фазы Диона-Яacobсона – $M[A_{n-1}B_nO_{3n+1}]$. Здесь M – межслойный (интеркалирующий) катион, A – двух- или трехвалентный иона металла, B – четырех- или пятивалентные ионы Nb/Ta/Ti, а n описывает общее число октаэдров BO_6 , которые представляет собой толщину ламеллярного слоя перовскитной структуры. Таким образом, перечисленные материалы являются типичными интеркаляционными соединениями, что позволяет их анализировать с позиций исследований одного модельного материала, характеризующего весь класс. Уникальной особенностью этих материалов является изменение их химического состава при переходе из объемного состояния в наноразмерное вследствие удаления интеркалирующего иона. Целью данного исследования является анализ изменения кристаллической структуры путем численного квантово-механического моделирования методами из первых принципов типичного представителя фаз Диона-Яacobсона – перовскита состава $RbSr_2Nb_3O_{10}$ – при переходе из объемного вида в наноразмерный ламеллярный, сопровождающийся изменением химического состава до $Sr_2Nb_3O_{10}$.

1 Методика исследования. Численное моделирование осуществляли в рамках теории функционала плотности и псевдопотенциала, реализованных в пакете *OpenMX* [13–15]. Критерий сходимости расчета самосогласованного поля составлял 10^{-6} эВ/ион. Интегрирование в первой зоне Бриллюэна проводили по Γ -центрированной регулярной сетке k -точек размером $6 \times 6 \times 2$ и $6 \times 6 \times 1$ для объемного $RbSr_2Nb_3O_{10}$ и монослоя $Sr_2Nb_3O_{10}$ соответственно. Сетку для численного интегрирования выбирали такой, чтобы среднее значение энергии обрезания составляло около 2200 эВ для всех случаев. Псевдопотенциалы включали в себя в качестве валентных 4s-, 5s- и 5p-электроны для рубидия; 4s-, 4p- и 5s- электроны для стронция; 4s-, 4p-, 4d- и 5s- электроны для ниобия; 2s- и 2p-электроны для кислорода. Численное моделирование проводили в рамках обобщенного градиентного приближения и обменно-корреляционного функционала PBE. Структурную релаксацию для объемного $RbSr_2Nb_3O_{10}$ проводили для параметров решетки и позиций ионов, в случае $Sr_2Nb_3O_{10}$ только для позиций ионов. Критерием сходимости считали достижение любой компоненты тензора напряжений или силы, действующих на ионы, величины, меньшей 0,01 эВ/Å.

2 Результаты и обсуждение. Внешний вид элементарной ячейки представлен на Рис. 1. Она относится к дитетрагонально-дипирамидальному классу тетрагональной сингонии с пространственной группой $P4/mmm$ и включает одну формульную единицу (16 атомов). Решетка centrosymmetric типа, параметры решетки, согласно экспериментальным измерениям, составляют 3,8944 Å (a и b) и 15,2710 Å (c) [16].

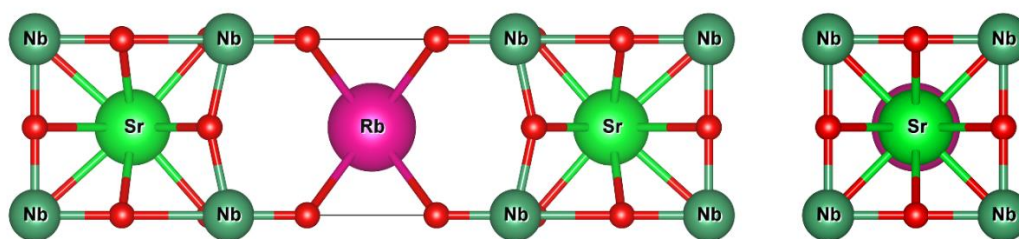


Рис. 1. Вид элементарной ячейки $RbSr_2Nb_3O_{10}$ в направлении (010) (слева) и (001) (справа).

По результатам расчетов получены близкие значения (в скобках отклонения от литературных данных в процентах): $3,9627 \text{ \AA}$ (+1,75% для a и b) и $15,2404 \text{ \AA}$ (-0,20% для c). Величины типичны для выбранного модельного приближения, что позволяет достоверно проводить анализ на указанном уровне теории без дополнительных расчетов и анализа применимости других обменно-корреляционных функционалов и ван-дер-Ваальсовых поправок.

Понижение размерности при синтезе двумерного материала (флейков и т.д.) осуществляется удалением интеркалирующего иона путем его связывания с реагентами в специальных растворах, что приводит к химической эксфолиации отдельных монослоев $\text{Sr}_2\text{Nb}_3\text{O}_{10}$. Схематично механизм образования монослоя можно описать в два этапа. Эволюция структуры $\text{RbSr}_2\text{Nb}_3\text{O}_{10}$ в $\text{Sr}_2\text{Nb}_3\text{O}_{10}$ приведена на Рис. 2. На первом этапе удаляется интеркалирующий ион из исходной объемной фазы $\text{RbSr}_2\text{Nb}_3\text{O}_{10}$ (Рис. 2,а и 2,б). Сопряженный кислород для наглядности также удален на схеме. Затем происходит формирование непосредственно монослоя $\text{Sr}_2\text{Nb}_3\text{O}_{10}$ (Рис. 2,в). Подписи s_1 и s_2 означают полуслои (от англ. *semilayers*) которые сопрягаются в друг с другом обозначенным образом. При этом понижается симметрия с переходом к дитетрагонально-пирамидального классу тетрагональной сингонии с пространственной группой $P4mm$.

Тенденции изменения структуры оцениваем из рассчитанных данных, т.к. ошибка невелика и полученные результаты могут быть распространены на экспериментальные значения. Толщину монослоя $\text{Sr}_2\text{Nb}_3\text{O}_{10}$ в $\text{RbSr}_2\text{Nb}_3\text{O}_{10}$ определим как сумму проекции полуслоев s_1 и s_2 на ось c (Рис. 2, б). В случае объемной фазы толщина монослоев составляет $12,310 \text{ \AA}$, незначительно увеличиваясь до $12,401 \text{ \AA}$ при понижении размерности. Благодаря образованию плоскости инверсии при понижении размерности и симметрии, проходящей через центр монослоя перпендикулярно оси c , фактически можно анализировать только половину структуры. Расстояние между атомами стронция и плоскостью инверсии увеличивается с $2,209 \text{ \AA}$ до $2,284 \text{ \AA}$. Каждый атом стронция связан с 8 атомами кислорода, расположенными в 2 неэквивалентных позициях. Обозначим атомы кислорода, лежащие на сторонах элементарной ячейки ближе плоскости инверсии как O_1 , лежащие внутри как O_2 , а внешние атомы, лежащие сторонах элементарной ячейки как O_3 . Длины связей $\text{Sr}-\text{O}_1$ и $\text{Sr}-\text{O}_2$ составляют $2,813 \text{ \AA}$ и $2,638 \text{ \AA}$ для объемной структуры $2,821 \text{ \AA}$ и $2,598 \text{ \AA}$ для монослоя. При этом угол $\text{O}_1-\text{Nb}-\text{O}_1$ меняется незначительно, уменьшаясь с $89,57^\circ$ до $89,23^\circ$, в то время как угол $\text{O}_2-\text{Nb}-\text{O}_2$, напротив, увеличивается с $97,36^\circ$ до $99,42^\circ$. После удаления интеркалирующего атома связь $\text{Nb}-\text{O}_3$ укорачивается с $1,783 \text{ \AA}$ до $1,721 \text{ \AA}$, в то время как связь $\text{Nb}-\text{O}_1$ удлиняется с $2,408 \text{ \AA}$ до $2,522 \text{ \AA}$, а связь $\text{Nb}-\text{O}_2$ слабо изменяется, удлиняясь с $2,026 \text{ \AA}$ до $2,047 \text{ \AA}$. Угол $\text{O}_2-\text{Nb}-\text{O}_3$, как и угол $\text{O}_2-\text{Nb}-\text{O}_2$ изменяется достаточно выраженно, увеличиваясь с $102,00^\circ$ до $104,57^\circ$.

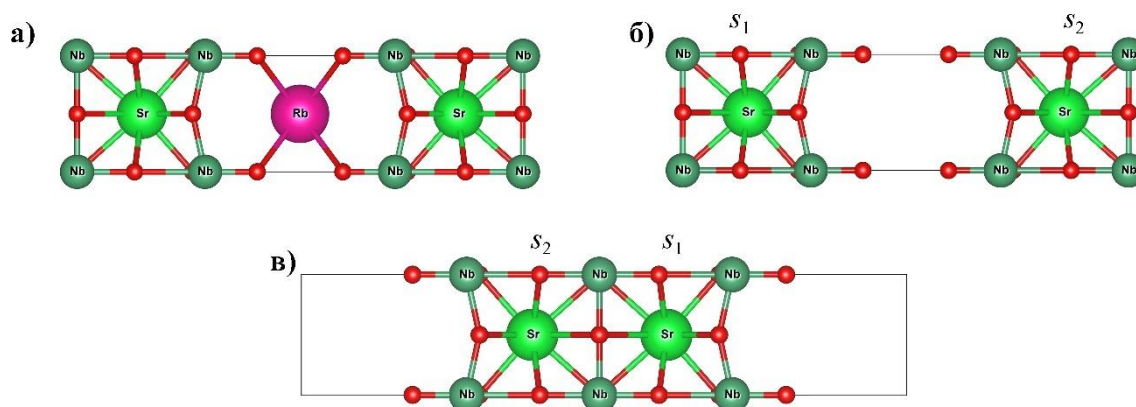


Рис. 2. Вид элементарной ячейки $\text{RbSr}_2\text{Nb}_3\text{O}_{10}$ в направлении (010) (а); образование зеркально-симметричных полуслоев s_1 и s_2 и удаление интеркалирующего иона (б); монослой $\text{Sr}_2\text{Nb}_3\text{O}_{10}$ (в).

Заключение. Методами квантово-механического моделирования из первых принципов были исследованы изменения в структуре типичного представителя фаз Диона-Якобсона состава $\text{RbSr}_2\text{Nb}_3\text{O}_{10}$ при его переходе из объемного (трехмерного) состояния в двумерное за счет удаления интеркалирующего атома, при котором наблюдается изменение химического состава до $\text{Sr}_2\text{Nb}_3\text{O}_{10}$. Размерный переход приводит к понижению симметрии исследованной системы с $P4/mmm$ до $P4mm$. Показано, что толщина монослоя практически не зависит от размерности системы, увеличиваясь всего на 0,7 % при переходе к двумерному состоянию. Анализ длин связей и межатомных углов показывает, что сохранению толщины монослоя способствует специфика перестройки кристаллической структуры, при которой наблюдается взаимокompенсирующее уменьшение и увеличение длин связей Nb-O для двух исследованных полуслоев в процессе структурной релаксации. Помимо этого, атомы стронция отдаляются от плоскости инверсии, что также компенсирует изменения в строении ячейки. Полученные данные представляют интерес как для интерпретации экспериментальных данных, так и для дальнейших теоретических исследований мультислойных структур, влияния деформационных эффектов на структурные и электронные свойства данного материала при понижении размерности, а также исследования роли поверхностных состояний для анализа фотохимической активности материала.

Литература.

1. Li, Z. Recent development on MoS_2 -based photocatalysis: A review / Z. Li [et al.] // J. Photochem. Photobiol. C: Photochem. Reviews. – 2018. – V. 35. – P. 39–55.
2. Thakur, D. WS_2 Monolayer for Piezo–Phototronic Dye Degradation and Bacterial Disinfection / D. Thakur [et al.] // ACS Appl. Nano Mater. – 2021. – V. 4, – Iss. 8, P. 7879–7887.
3. Chubenko, E.B. Estimation of the Integral Toxicity of Photocatalysts Based on Graphitic Carbon Nitride in a Luminescent Test / E.B. Chubenko [et al.] // Kinetics and Catalysis. – 2022. – V. 63, – Iss. 2. – P. 166–171.
4. Baglov, A.V. Photocatalytic activity of nanostructured titania coatings on aluminum substrates / A.V. Baglov [et al.] // Inorganic Materials. – 2017. – V. 53. – P. 1180–1184.
5. Menon, S.S. $\text{ZnO}:\text{InN}$ oxynitride: A novel and unconventional photocatalyst for efficient UV–visible light driven hydrogen evolution from water / S.S. Menon [et al.] // Renewable Energy. – 2019. – V. 141. – P. 760–769.
6. Hara, M. TaON and Ta_3N_5 as new visible light driven photocatalysts / M. Hara [et al.] // Catalysis Today. – 2003. – V. 78, – Iss. 1–4. – P. 555–560.
7. Ruddlesden, S.N. New compounds of the K_2NIF_4 type / S.N. Ruddlesden, P. Popper // Acta Crystallogr. – 1957. – V. 10. – P. 538–539.
8. Dion, M. Nouvelles familles de phases $\text{MIMII}_2\text{Nb}_3\text{O}_{10}$ a feuillet "perovskites" / M. Dion, M. Ganne, M. Tournoux // Mater. Res. Bull. – 1981. – V. 16. – P. 1429–1435.
9. Jacobson, A.J. Interlayer chemistry between thick transition-metal oxide layers: synthesis and intercalation reactions of $\text{K}[\text{Ca}_2\text{Na}_{n-3}\text{Nb}_n\text{O}_{3n+1}]$ ($3 \leq n \leq 7$) / A.J. Jacobson, J.W. Johnson, J.T. Lewandowski // Inorg. Chem. – 1985. – V. 24. – P. 3727–3729.
10. Jacobson, A.J. Ion exchange of the layered perovskite $\text{KCa}_2\text{Nb}_3\text{O}_{10}$ by protons / A.J. Jacobson, J.W. Johnson, J.T. Lewandowski // J. Less Common Met. – 1986. – V. 116. – P. 137–146.
11. Gopalakrishnan, J. $\text{AlLaNb}_2\text{O}_7$: a new series of layered perovskites exhibiting ion exchange and intercalation behaviour / J. Gopalakrishnan, V. Bhat, B. Raveau // Mater. Res. Bull. – 1987. – V. 22. – P. 413–417.
12. Химия и периодическая таблица / К. Сайто [и др.]; Под ред. К. Сайто. – Москва; Мир, 1982. – 400 с.
13. Ozaki, T. Variationally Optimized Atomic Orbitals for Large-Scale Electronic Structures / T. Ozaki // Phys. Rev. B. – 2003. – V. 67, – Iss. 15. – P. 155108.
14. Ozaki, T. Numerical Atomic Basis Orbitals from H to Kr / T. Ozaki, H. Kino // Phys. Rev. B. – 2004. – V. 69, – Iss. 19. – P. 195113.
15. Ozaki, T. Efficient Projector Expansion for the Ab Initio LCAO Method / T. Ozaki, H. Kino //

Phys. Rev. B. – 2005. – V. 72, – Iss. 4, – P. 045121.

16. Thangadurai, V. Synthesis, Structure, and Electrical Conductivity of $A'[A_2B_3O_{10}]$ ($A'=Rb, Cs$; $A=Sr, Ba$; $B=Nb, Ta$): New Members of Dion–Jacobson-Type Layered Perovskites / V. Thangadurai // J. Solid State Chem. – 2001. – V. 158, – Iss. 2. P. 279–289.

Влияние гамма-лучей ^{60}Co на диэлектрическую проницаемость полимерных композиционных материалов

Н.И. Волынец^a, Ф.Ю. Мисиук^a, Г.В. Горохов^a, Д.В. Городецкий^b

^a Научно-исследовательский институт ядерных проблем БГУ, 220006, Минск, Беларусь

^b Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, 630090, Новосибирск
E-mail: philip9090@mail.ru

Введение. Полимерные композиционные материалы (ПКМ) перспективны для использования в целях экранирования электромагнитного излучения (ЭМИ) ввиду сочетания их электромагнитных свойств с малым удельным весом, коррозионной стойкостью, устойчивостью к механическим нагрузкам и воздействию высоких температур. Углеродные материалы, в частности, терморасширенный оксид графита, обладают уникальными характеристиками, поэтому широко используются в качестве наполнителя при создании ПКМ с контролируемыми электромагнитными свойствами (комплексная диэлектрическая проницаемость, электрическая проводимость) [1].

Для оценки применимости ПКМ в аэрокосмических и других подобных приложениях требуется изучить влияние взаимодействия материала с гамма-излучением. Известно, что воздействие гамма-лучей ^{60}Co может приводить к деструкции, сшиванию и разветвлению высокомолекулярных соединений (в частности, полимеров), а также повреждению структуры частиц углеродного наполнителя, в результате чего может произойти изменение электромагнитных свойств ПКМ.

В настоящей работе исследованы электромагнитные свойства композиционных материалов на основе терморасширенного оксида графита (ТРОГ) в низкочастотном диапазоне 10^4 – 10^6 Гц, определено влияние гамма-излучения на спектры диэлектрической проницаемости и электрической проводимости исследуемых композиционных материалов в диапазоне 26–37 ГГц, а также проведен сравнительный анализ диэлектрических свойств ПКМ до и после облучения.

1 Материалы и методы исследования. Изготовление ПКМ, содержащих 0.1 и 0.3 мас. % растворенного в органических растворителях модифицированного ТРОГ в матрице полистирола проводилось методом вальцевания. Для этого наполнитель был диспергирован в смеси растворителей (изопропанола и толуола), после чего полученный раствор был подвергнут ультразвуковой обработке в течение 1 часа при мощности 200 Вт с целью разрушения агломератов ТРОГ в растворе. Далее раствор подвергался перемешиванию в течение 30 минут при температуре 50°C с целью удаления части растворителя (толуола) и полного удаления изопропанола. На следующем этапе в полученный раствор ТРОГ добавлялся полимер. После полного растворения полимера раствор был вылит в форму с фольгой и подсушен на воздухе при нормальном давлении и комнатной температуре. Полученная в результате подсушивания вязкая композитная смесь прокатывалась через механические вальцы. После каждого этапа прокатывания пленка композиционного материала складывалась и направлялась в пространство между роликками вальцов так, чтобы направление прокатывания было сохранено. Изменение расстояния между роликками вальцов позволяло изменять толщину пленки композиционного материала. Толщина полученных образцов композиционных материалов составляла 200 и 230 мкм. В результате вальцевания композиционный материал приобретал однородный цвет. После стадии вальцевания образцы

композиционных материалов на 12 часов помещались между тефлоновыми пластинками под небольшим сжатием для окончательного высыхания. Стоит отметить, что полученные данным способом образцы являются гибкими и эластичными.

Для полученных композиционных материалов было проведено измерение диэлектрического отклика материалов в низкочастотном диапазоне 10^4 – 10^6 Гц путем измерения емкости конденсаторной ячейки. Измерения диэлектрических характеристик материала проводились по двухконтактной схеме с помощью импедансометра Z-2000 производства компании «Элинс» (г. Черноголовка, Россия).

Измерения электромагнитных свойств полученных композиционных материалов в СВЧ диапазоне (26–37 ГГц) проводились с помощью скалярного анализатора цепей ELMICA R2-408R, оснащённого волноводным трактом размером 7.2×3.4 мм. Образец исследуемого материала в виде плоскопараллельной пластинки размещался в волноводе, полностью перекрывая его сечение. Параметры рассеяния S_{11} и S_{21} (S-параметры) для каждого образца были получены как отношение отраженного и прошедшего амплитудного сигнала к исходному, соответственно. Для анализа электромагнитных свойств исследованных образцов использовалась стандартная процедура преобразования S-параметров в спектр диэлектрической проницаемости.

Облучение образцов ПКМ гамма-квантами ^{60}Co с энергией 1.25 МэВ происходило в течение различного времени (3–24 часа) с помощью источника активностью 30 кБк, расположенного на расстоянии 10 см от образца, что соответствует удельной экспозиционной дозе 0.4 Гр/м^2 в сутки.

2 Результаты и обсуждение. На Рис. 1 представлено изображение СЭМ используемого в качестве наполнителя терморасширенного оксида графита. Можно отметить, что поверхность материала имеет характерную для ТРОГ слоистую пластинчатую структуру.

Частотные зависимости комплексной диэлектрической проницаемости ПКМ с концентрацией наполнителя 0.1 и 0.3 масс. % в диапазоне частот 10^4 Гц– 10^6 Гц, измеренные при комнатной температуре представлены на Рис. 1. Экспериментально установлено, что действительная часть диэлектрической проницаемости не имеет частотной дисперсии в исследуемом диапазоне и составляет ~ 1.7 , что характерно для композиционных материалов, содержащих подобный наполнитель [2]. Значение мнимой части диэлектрической проницаемости невелико 10^{-2} – 10^{-1} , что указывает на невысокую электропроводность материала.

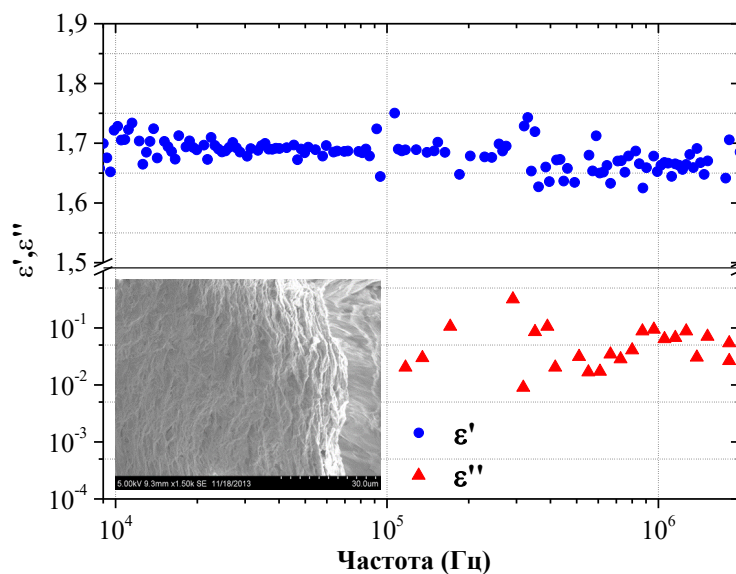


Рис. 1. Зависимость комплексной диэлектрической проницаемости композитного материала на основе 0.1 масс. % ТРОГ от частоты. На вставке: СЭМ-изображение терморасширенного оксида графита.

Облучение высокоэнергетическими ионизирующими частицами может приводить к возникновению радиационных повреждений, которые отражаются на электромагнитных свойствах композитного материала в связи с появлением дополнительного взаимодействия между наполнителем и матрицей. Анализ зависимостей коэффициентов отражения, поглощения и прохождения композиционных материалов от частоты падающего электромагнитного излучения в диапазоне частот 26-37,5 ГГц при последовательном облучении γ -излучением ^{60}Co в течение 3 и 24 часов не показал существенного изменения данных параметров (Табл. 1). Стабильность коэффициентов отражения, поглощения и прохождения после облучения наблюдается для двух образцов, вне зависимости от концентрации наполнителя в ПКМ, что может указывать на преимущественную зависимость радиационной стойкости электромагнитных свойств ПКМ от стойкости его полимерной матрицы [3]. Ввиду этого можно заключить, что поглощенная доза γ -излучения является недостаточной для оказания существенного влияния на электромагнитные свойства исследуемых композиционных материалов.

Таблица 1. Коэффициенты отражения (R), прохождения (T) и поглощения (A) ТРОГ на частоте 30 ГГц до и после облучения гамма-квантами ^{60}Co в зависимости от времени облучения.

Образец	Толщина, мкм	Время облучения, часов	R , %	T , %	A , %
0,1 масс. %	230	0	2,2	97,7	0,1
		3	2,3	97,2	0,5
		24	2,2	97,6	0,2
0,3 масс. %	200	0	2,3	97,6	0,1
		3	2,4	97,2	0,4
		24	2,4	97,3	0,3

Заключение. Облучение γ -излучением ^{60}Co с энергией 1,25 МэВ длительностью вплоть до 24 часов не приводит к изменению электромагнитных свойств композиционных материалов на основе полистирола с добавлением ТРОГ. Таким образом, электромагнитные свойства исследуемых композиционных материалов обладают радиационной стойкостью к удельным дозам гамма-излучения вплоть до 0,4 Гр/м².

Благодарности. Работа выполнена в рамках НИР № 829/02. Облучение происходило на кафедре ядерной физики физического факультета БГУ.

Литература.

1. Kazakova M. A., Golubtsov G. V., Selyutin A. G., Ishchenko A. V., Serkova A. N., Gorokhov G. V., Misiyuk P. Y., Valynets N. I. / Electromagnetic interference shielding performance of Ag/multi-walled carbon nanotubes-poly(methyl methacrylate) composites // Materials Chemistry and Physics. - 2023. - Vol. 307, 128176. - P. 0254-0584.
2. Wang D., Zhang X., Zha J., Zhao J., Dang Z., Hu G. / Dielectric properties of reduced graphene oxide/polypropylene composites with ultralow percolation threshold // Polymer. - 2013. - Vol. 54, №. 7. - P. 1916-1922.
3. Lobko A., Kazhuro V., Valynets N., Bellucci S., Celzard A., Zicans J., Kuzhir P. / Radiation modification and radiation hardness of microwave properties for some polymer nanocomposites under Co-60 gamma irradiation // NIM-B. – 2018. – Vol. 435 – P. 242-245.

Резонансный перенос энергии вблизи двухслойной *PT*-симметричной среды

А.В. Орловский, А.В Новицкий

Белорусский государственный университет, 220030 Минск, Беларусь
E-mail: av.arlouski@gmail.com

Введение. Резонансный перенос энергии (РПЭ) – это безызлучательный перенос энергии между двумя системами, обладающими электрическим дипольным моментом: донор D , находящийся в возбужденном состоянии, передает энергию акцептору A , находящемуся в основном состоянии. Схематично: $D^* + A \rightarrow D + A^*$, где звездочка означает возбужденное состояние.

Современное описание резонансного переноса энергии основывается на формализме квантовой электродинамики. В дипольном приближении можно получить следующее выражение для скорости (или интенсивности) РПЭ [1]:

$$\gamma_{D \rightarrow A} = \int_0^\infty \sigma_{em}(\omega) \sigma_{abs}(\omega) T(\omega) d\omega \quad (1)$$

где

$$T(\omega) = \frac{2\pi}{\hbar^2} \left(\frac{\omega^2}{\epsilon_0 c} \right)^2 |d_D \hat{G}(\omega, r_D, r_A) d_A|^2 \quad (2)$$

\hat{G} – так называемая диадная функция Грина, $\sigma_{em}(\omega)$ и $\sigma_{abs}(\omega)$ – спектр излучения донора и спектр поглощения акцептора соответственно, d_A, d_D – их электрические дипольные моменты, r_A, r_D – их радиус-векторы, ω – частота обменного фотона.

Наличие диадной функции Грина \hat{G} в уравнении (2) означает, что интенсивность обмена энергией сильно зависит от свойств окружающей среды. Это обусловлено тем, что нетривиальное окружение может в значительной степени изменить распределение электромагнитного поля в пространстве.

Тот факт, что окружающая среда влияет на интенсивность РПЭ может быть использован для контроля над этим процессом. Варьируя параметры среды (например, ее толщину, диэлектрическую проницаемость и магнитную восприимчивость) можно, по крайней мере в принципе, добиться требуемой интенсивности РПЭ.

В настоящей работе представлены результаты численного расчета спектральной функции $T(\omega)$ для случая двухслойной *PT*-симметричной среды. По определению, среда называется *PT*-симметричной, если ее диэлектрическая проницаемость удовлетворяет условию

$$\epsilon^*(\mathbf{r}, \omega) = \epsilon(-\mathbf{r}, \omega),$$

где \mathbf{r} – радиус-вектор, ω – частота излучения. Термин “*PT*-симметричный” пришел в оптику из квантовой механики на основании формального сходства уравнения Гельмгольца и стационарного уравнения Шредингера [2]. Характерной особенностью *PT*-симметричных сред является наличие как поглощающих, так и усиливающих составляющих, что, вкупе с интерференцией, выливается в сложный характер распределения электромагнитного поля и зависящих от его значения величин.

Более подробное исследование на данную тему может быть найдено в работе [3].

1 Численные расчеты. Разумно предположить, что интенсивность обмена энергией между диполями будет тем больше, чем сильнее электрическое поле в точках их расположения. Оно, в свою очередь, будет тем сильнее, чем лучше исходящее от диполей

излучение рассеивается и усиливается средой. Следовательно, зная, при каких материальных параметрах среда лучше всего отражает, пропускает и усиливает излучение, мы одновременно получим информацию о том, при каких материальных параметрах скорость РПЭ будет максимальной. Поэтому, прежде чем переходить к непосредственному вычислению скорости РПЭ, имеет смысл изучить, как PT -симметричная среда рассеивает и усиливает падающее на нее электромагнитное излучение.

Коэффициенты отражения и пропускания. Вывод коэффициентов отражения r и пропускания t для произвольной плоскостройной среды может быть найден, например, в [4]. Заметим, что т.к. PT -симметричная среда может как поглощать, так и усиливать излучение, то сумма коэффициентов $r + t$, описывающая изменение интенсивности излучения после взаимодействия со средой, может быть как меньше, так и больше единицы.

Геометрия исследуемой системы представлена на Рис. 1. Полагаем, что двухслойная среда с двух сторон ограничена средой с $\epsilon = 1$ (вакуум или воздух).

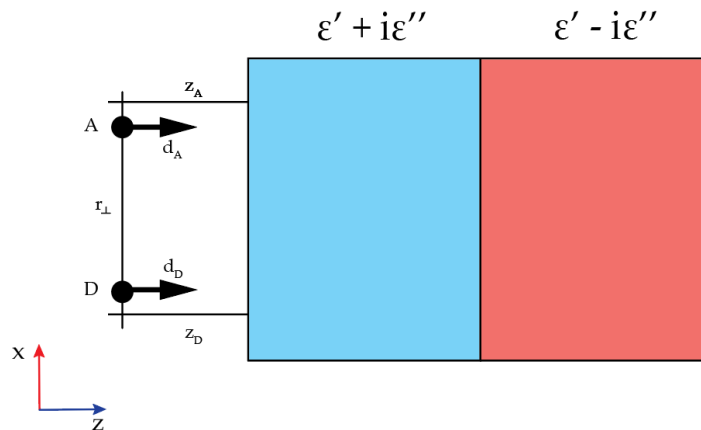


Рис. 1. Два диполя находятся вблизи двухслойной PT -симметричной среды, состоящей из двух слоев толщины L с противоположными знаками $\text{Im}(\epsilon)$.

Расчет коэффициентов r и t проводился для четырех значений $\text{Im}(\epsilon)$: 0,03, 0,05, 0,1 и 0,3. Во всех вычислениях предполагалось, что $\text{Re}(\epsilon) = 3$.

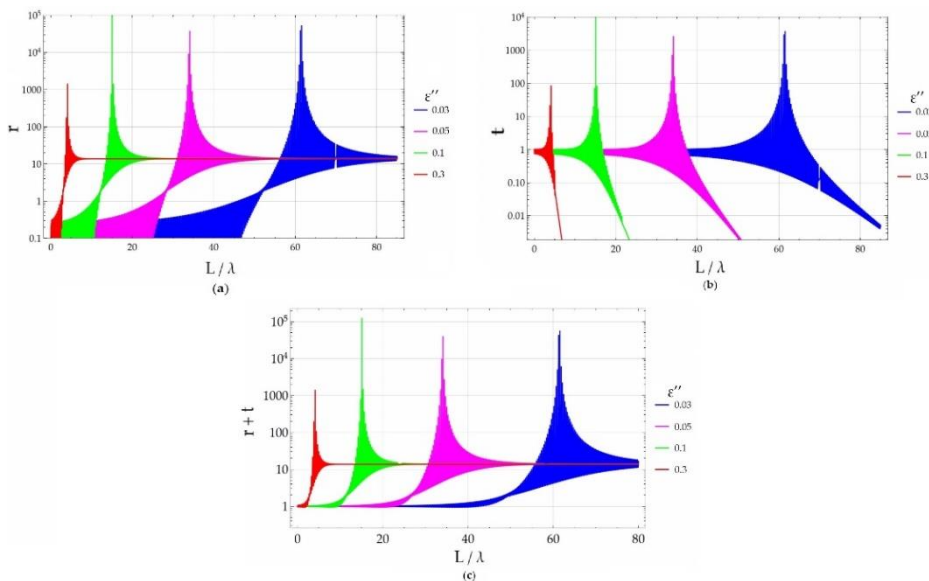


Рис. 2. (a) Коэффициент отражения r , (b) коэффициент пропускания t , (c) полное усиление $r + t$. Усиливающий слой расположен первым.

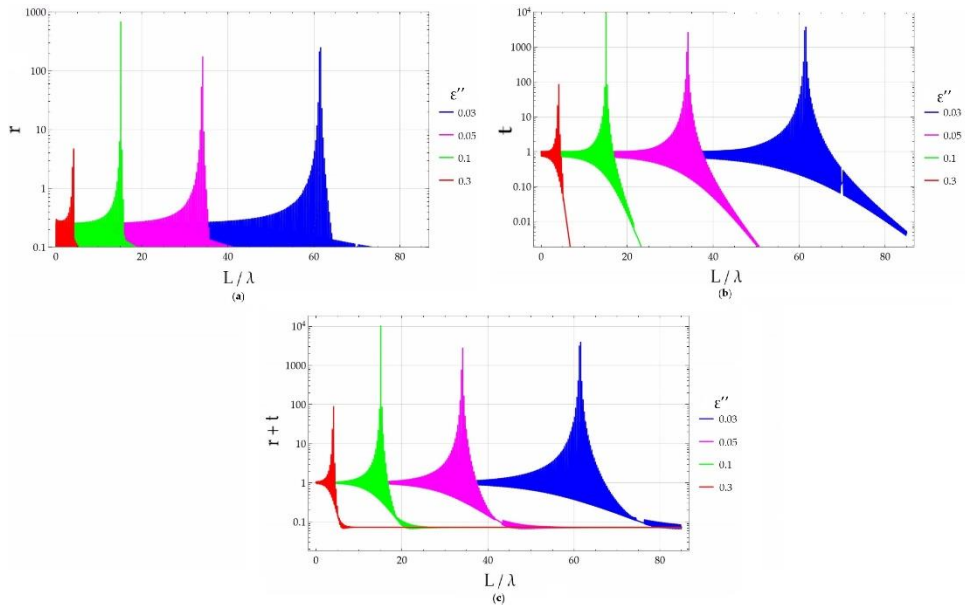


Рис. 3. Коэффициент отражения r (а), коэффициент пропускания t (б), полное усиление $r + t$. Поглощающий слой расположен первым (с).

Скорость РПЭ. Параметры, определяющие значение скорости РПЭ, следующие (см. Рис. 1: 1) направления векторов дипольных моментов акцептора и донора и их модули $d_{A,D}$; 2) расстояния $z_{A,D}$ от диполей до слоистой среды; 3) расстояние r_{\perp} между диполями в плоскости, перпендикулярной оси z ; 4) длина волны λ (или частота ω) обменного фотона; 5) диэлектрическая проницаемость ε и толщина L слоев. Представляет интерес сравнение скорости РПЭ в присутствии слоистой среды со случаем, когда оба диполя окружены вакуумом. В этом случае точные значения $d_{A,D}$ не имеют значения, поскольку они сокращаются при взятии отношения спектральных функций T/T_0 . Остальные параметры положим следующими: $\lambda = 500$ нм, $z_A = z_D = \lambda/10 = 50$ нм, $r_{\perp} = \lambda/50 = 10$ нм. Как и ранее, рассматриваем четыре значения $\text{Im}(\varepsilon)$: 0.03, 0.05, 0.1 и 0.3. $\text{Re}(\varepsilon)$ полагаем равной 3.

Результаты представлены на Рис. 4 и 5 для случаев, когда оба диполя ориентированы вдоль оси z и вдоль оси x соответственно.

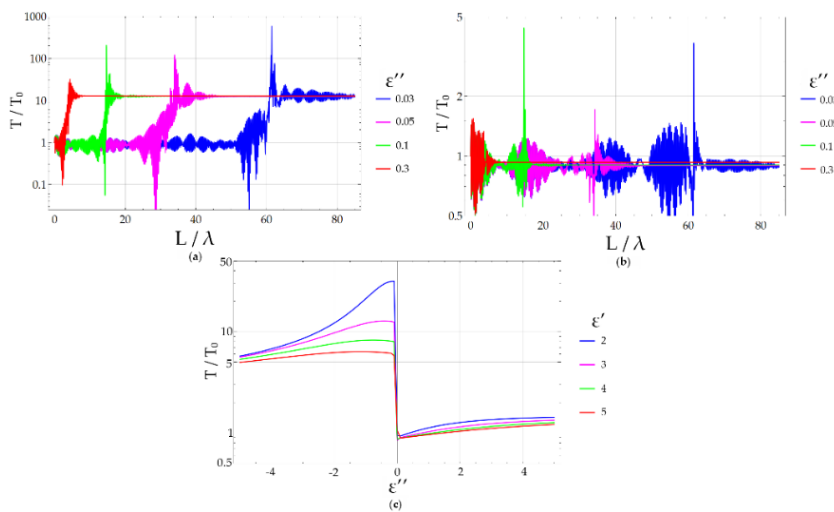


Рис. 4. Отношение спектральной функции T в присутствии PT -симметричной среды к функции T_0 , когда диполи окружены вакуумом. Диполи ориентированы вдоль оси z . (а) Первым располагается усиливающий слой; (б) первым располагается поглощающий слой; (с) асимптотическое поведение при $L/\lambda \rightarrow \infty$.

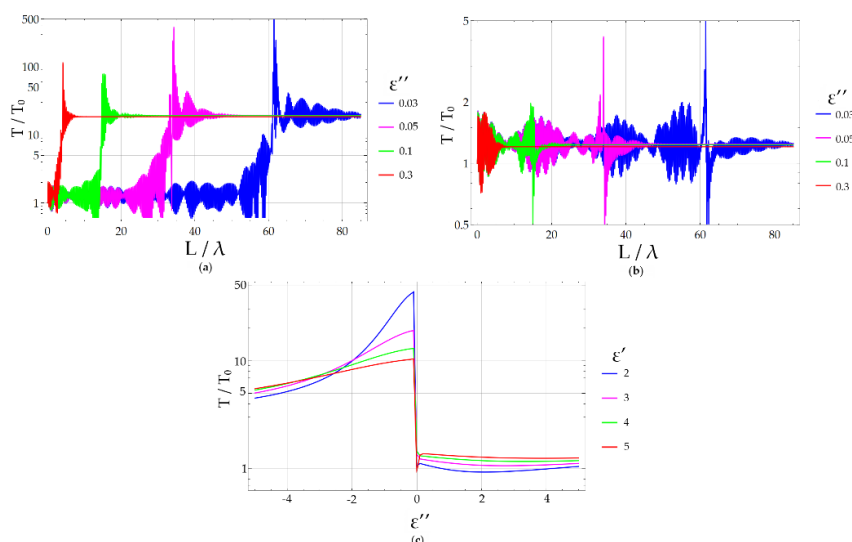


Рис. 5. Отношение спектральной функции T в присутствии PT -симметричной среды к функции T_0 , когда диполи окружены вакуумом. Диполи ориентированы вдоль оси x . (а) Первым располагается усиливающий слой; (б) первым располагается поглощающий слой; (с) асимптотическое поведение при $L/\lambda \rightarrow \infty$.

Заключение. При расчете скорости резонансного переноса энергии вблизи PT -симметричной среды были получены следующие результаты:

1. Форма кривых, отвечающих отношению спектральных функций T/T_0 напоминает форму кривых, отвечающую коэффициентам отражения и усиления. Другими словами, интенсивность РПЭ увеличивается (уменьшается) тогда, когда увеличивается (уменьшается) отражательная способность среды.

2. Если усиливающий слой расположен первым, то максимальное значение T/T_0 имеет порядок 10^2 , а асимптотическое усиление принимает значения около 20. При обратной последовательности расположения слоев увеличение интенсивности РПЭ мало: максимальное ее значение имеет порядок 1, а асимптотическое усиление практически отсутствует. Этот результат справедлив как для случая, когда диполи ориентированы вдоль оси z , так и когда они ориентированы вдоль оси x .

Для последующего изучения представляет интерес случай анизотропных и многослойных ($N > 2$) PT -симметричных сред. Можно предположить, что общая картина интенсивности РПЭ будет такой же, как и в настоящей работе, однако не исключена возможность появления качественно новых эффектов.

Литература.

1. Dung H. T. [et al.] / Intermolecular Energy Transfer in the Presence of Dispersing and Absorbing Media // Phys. Rev. A. – 2002. – Vol. 65. – P. 043813.
2. Zyablovsky A. A. [et al.] / PT -symmetry in optics // Phys.-Usp. – 2014. – Vol. 57. – P. 1063.
3. Arlouski A., Novitsky A. / Planar Bilayer PT -Symmetric Systems and Resonance Energy Transfer // Photonics. – 2024. – Vol. 11. – P. 169.
4. Borzdov G. N. / Frequency domain wave splitting techniques for plane stratified bianisotropic media // J. Math. Phys. – 1997. – Vol. 38. – P. 6328-6366.

Влияние термобарической обработки на кристаллическую структуру и магнитные характеристики твердых растворов $MnZn_{1-x}Cr_xSb$

Г.С. Римский, А.Л. Желудкевич

*НПЦ НАН Беларуси по материаловедению, 220072, Минск, Беларусь
E-mail: rimskiy@physics.by*

Введение. В настоящее время исследование твердых растворов на основе $MnZnSb$ является актуальной задачей материаловедения и физики конденсированного состояния благодаря тому, что эти сплавы обладают перспективными функциональными свойствами [1, 2]. Относительно высокая величина удельной намагниченности, температура Кюри вблизи комнатной температуры, сильная спиновая поляризация и высокие значения термо-ЭДС делают твердые растворы на основе $MnZnSb$ многообещающими кандидатами для практического использования в широком спектре приложений, например, спинтроника, магнитокалорика. Варьируя режимы синтеза $MnZnSb$, можно создавать структурные модификации, которые приведут к улучшению его магнитных свойств, что является возможностью настраивать и контролировать магнитное упорядочение и спиновые конфигурации. При воздействии высоких давлений кристаллическая структура $MnZnSb$ может претерпевать фазовые переходы, что приводит к изменению его магнитных характеристик или повлиять на зонную структуру $MnZnSb$. Эти изменения могут иметь решающее значение для создания материалов с необходимыми магнитными характеристиками материала для конкретных применений [3-5]. Цель работы: синтез твердых растворов $MnZn_{1-x}Cr_xSb$, изучение их кристаллической структуры и магнитных характеристик до и после термобарической обработки.

1 Методы эксперимента. Твердые растворы системы $MnZn_{1-x}Cr_xSb$ синтезированы методом твердофазных реакций в вакуумированных кварцевых ампулах. Стехиометрически рассчитанные количества исходных порошков Mn (99,9%), Cr (99,9%), Zn (99,9%) и Sb (99,999%) тщательно перемешивались и запаивались в вакуумированные кварцевые ампулы, которые разогревались до температуры 1020 К с последующей выдержкой при этой температуре в течение 24 ч. После чего ампулы закаляли в воду. В дальнейшем часть полученных твердых растворов спрессовывали под давлением 5 ГПа при температуре 623 К в течение 120 с. Аттестация кристаллической структуры и фазового состава образцов осуществлялась при комнатной температуре методом дифракции рентгеновских лучей в $CuK\alpha$ излучении. Расчет структурных параметров выполнен с использованием программы FullProf. Температурные зависимости удельной намагниченности получены пондеромоторным методом в магнитном поле с индукцией 0,86 Тл. Полевые зависимости удельной намагниченности исследованы на вибрационном магнитометре Cryogenic Ltd. (VSM) в магнитных полях до ± 3 Тл при температуре 5 К.

2 Результаты эксперимента и обсуждение. Установлено, что при комнатной температуре твердые растворы обладают тетрагональной кристаллографической структурой типа Cu_2Sb (анти-PbFCl) пространственной группы $P4/nmm$. Рентгеновские исследования показали существование однофазных твердых растворов в интервале концентраций $0,15 \leq x \leq 0,20$. При обработке изобарическим прессом не наблюдается появление новых дифракционных рефлексов. Значения величин, характеризующих размеры элементарной кристаллической ячейки исследуемых твердых растворов, приведены в табл. 1. Малые величины изменения параметров кристаллической ячейки обусловлены малым отличием ионных радиусов цинка и хрома.

Таблица 1. Величины параметров кристаллической решетки твердых растворов $MnZn_{1-x}Cr_xSb$.

x	До термообработки			После термообработки		
	a, нм	c, нм	c/a	a, нм	c, нм	c/a
0,00	0,417	0,625	1,497	0,418	0,626	1,496
0,05	0,417	0,626	1,502	0,417	0,626	1,501
0,10	0,416	0,626	1,504	0,416	0,626	1,505
0,20	0,416	0,627	1,507	0,415	0,627	1,511

Температурные и полевые зависимости удельной намагниченности твердых растворов $MnZn_{1-x}Cr_xSb$ представлены на Рис. 1 и Рис. 2.

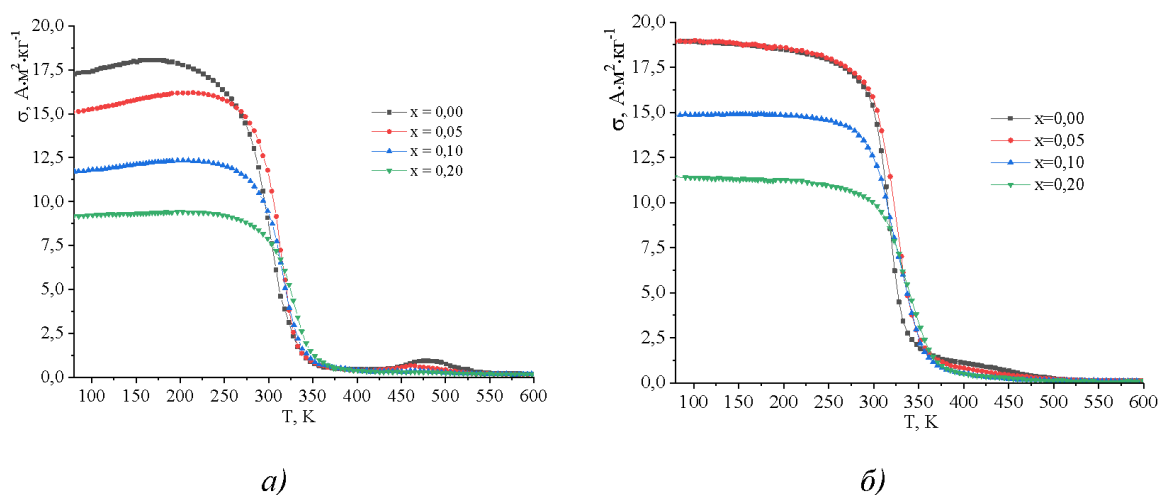


Рис. 1. Температурные зависимости удельной намагниченности твердых растворов $MnZn_{1-x}Cr_xSb$ до (a) и после (б) термобарической обработки

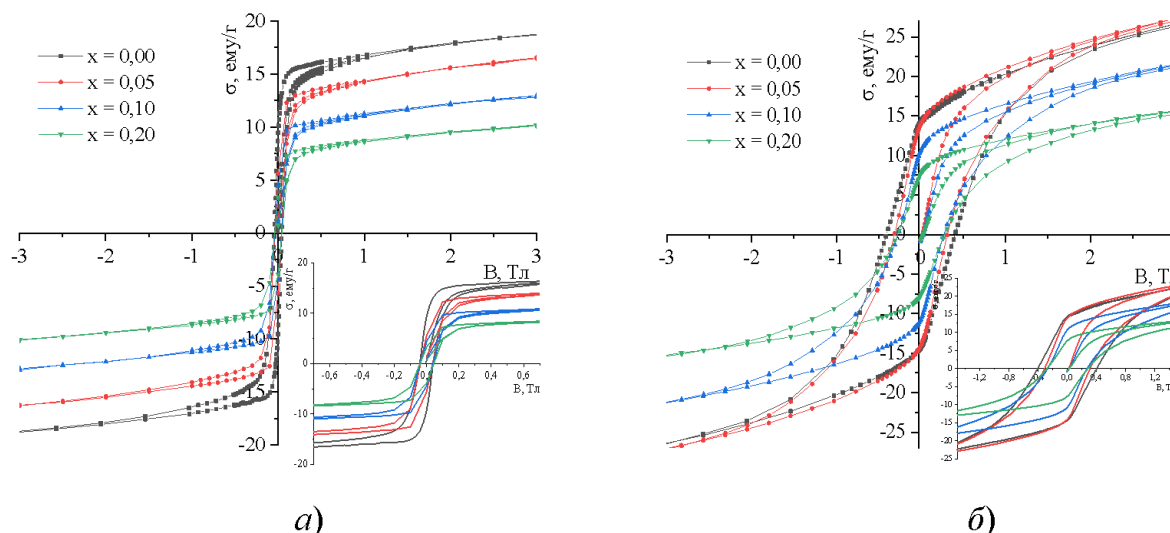


Рис. 2. Полевые зависимости удельной намагниченности до (a) и после (б) термобарической обработки твердых растворов $MnZn_{1-x}Cr_xSb$ при 5 К.

Для исходного соединения $MnZnSb$ величина удельной намагниченности при 350 К практически становится равной нулю. В области температур 400-600 К имеется аномалия удельной намагниченности. В этой области температур твердые растворы имеют небольшую намагниченность, которая пропадает по мере увеличения замещения цинка. Так как атом Zn не имеет магнитного момента, магнитные свойства $MnZnSb$ определяются магнитоактивными

атомами марганца, находящимся в структурном положении Mn(I), что характеризует MnZnSb как ферромагнетик. Однако температурные зависимости намагниченности твердых растворов до обработки термобарическим прессом свидетельствуют об кластерной природе магнетизма. Это может быть связано с локальными неоднородностями в распределении атомов по подрешёткам и структурных вакансий. При замещении цинка на хромом температура Кюри может увеличиваться из-за различий в магнитных свойствах этих элементов. Хром имеет более высокий магнитный момент по сравнению с цинком, а кроме того, хром имеет более высокую температуру магнитного упорядочения по сравнению с цинком, а это означает, что он может более эффективно способствовать выравниванию магнитных моментов в твердых растворах. Увеличение удельной намагниченности, температуры Кюри, намагниченности насыщения и коэрцитивной силы при обработке твердых растворов термобарическим прессом обусловлено изменением межатомных расстояний, что влияет на силу магнитных обменных взаимодействий между соседними атомами марганца. Твёрдые растворы выходят на насыщение в поле 1,5 Тл.

В Табл. 2 приведены значения магнитных моментов твердых растворов, рассчитанные из величин удельных намагниченностей при 80К. Температуры Кюри твердых растворов определяли экстраполяцией линейной части зависимости квадрата удельной намагниченности от температуры к оси температур $\sigma^2 = f(T)$.

Таблица 2. Значения величины средних магнитных моментов при 80К (μ_{80K}), температуры Кюри (T_C), намагниченности насыщения (σ_s), остаточной намагниченности (σ_r) и коэрцитивной силы (H_C) твердых растворов $MnZn_{1-x}Cr_xSb$.

x	До термообработки					После термообработки				
	μ_{80K}, μ_B	T_C, K	σ_s, μ_B	σ_r, μ_B	$H_C, kЭ$	μ_{80K}, μ_B	T_C, K	σ_s, μ_B	σ_r, μ_B	$H_C, kЭ$
0,00	0,72	313	0,75	0,41	0,45	0,82	323	0,97	0,62	4,1
0,05	0,65	318	0,65	0,24	0,41	0,82	326	0,95	0,60	3,1
0,10	0,51	323	0,51	0,19	0,40	0,64	330	0,79	0,46	2,6
0,20	0,39	333	0,40	0,15	0,39	0,49	337	0,70	0,34	2,6

Заключение. В работе сообщается о влиянии термобарической обработки на кристаллическую структуру и магнитных свойствах твердых растворов системы $MnZn_{1-x}Cr_xSb$ ($0 \leq x \leq 0,20$) полученных методом твердофазных реакций с последующей закалкой. Установлено, что все твердые растворы описываются в рамках тетрагональной кристаллической структуры с пространственной группой $P4/nmm$, а параметры кристаллической ячейки слабо изменяются от термобарической обработки. Наблюдается фазовый переход второго рода при температуре Кюри от 313 К для MnZnSb и увеличивает до 333 К для $MnZn_{0,80}Cr_{0,20}Sb$. Применение термобарической обработки приводит к росту температуры Кюри от 323 К для MnZnSb и увеличивает до 337 К для $MnZn_{0,80}Cr_{0,20}Sb$. Из полевых зависимостей намагниченности установлено, что коэрцитивная сила всех составов составляет около 0,4кЭ. Применение термобарической обработки приводит к увеличению коэрцитивной силы до 4кЭ для MnZnSb и уменьшается с ростом концентрации замещения до 2,7кЭ для $MnZn_{0,80}Cr_{0,20}Sb$, а также наблюдается рост величины удельной намагниченности.

Благодарности. Работа выполнена при финансовой поддержке БРФФИ (проект №Т23М-063).

Литература.

1. N.Yu. Pankratov, V.I. Mitsiuk, V.M. Ryzhkovskii, S.A. Nikitin / Direct measurement of the magnetocaloric effect in MnZnSb intermetallic compound // J. of Magnetism a. Magnetic Materials. – 2019. – Vol. 470. – P. 46–49.
2. P. A. E. Murgatroyd, K. Routledge, S. Durdy, M. W. Gaultois, T. W. Surta, M. S. Dyer, J. B. Claridge, S. N. Savvin, D. Pelloquin, S. Hebert, J. Alaria / Chemically Controllable Magnetic Transition Temperature and Magneto-Elastic Coupling in MnZnSb Compounds // Advanced Functional Materials. – 2021. – Vol. 31, iss. 17. – Art. № 2100108.

3. D. K. Dinkar, M. Palit, R. Gopalan, B. Das / Magnetocaloric properties and critical exponents in anti-PbFCl type ZnMnSb room temperature ferromagnet prepared via different routes // J. of Magnetism a. Magnetic Materials. – 2019. – Vol. 489. – Art. № 165437.
4. Md Rafique Un Nabi, R. Basnet, K. Pandey, S. K. Chhetri, D. Upreti, G. Acharya, F. Wang, A. Fereidouni, Hugh O H Churchill, Yingdong Guan, Zhiqiang Mao, Jin Hu / Coupling between magnetic and transport properties in magnetic layered material $Mn_{2-x}Zn_xSb$ // Acta Materialia. – 2023. – Vol. 259. – Art. № 119251.
5. M. M. Greve, B. Das, I. Issac, R. Witte, D. Wang, R. Kruk, H. Hahn, S. Dasgupta / Electric-Potential-Induced Complete Control of Magnetization in MnZnSb Metallic Ferromagnets // Advanced Functional Materials. – 2020. – Vol. 7, iss.1. – Art. № 2000790.

Исключительные точки \mathcal{PT} -симметричных структур с изотропным и анизотропным дефектным слоем

М.Г. Романович

*Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси, 220072 Минск, Беларусь
E-mail: m.ramanovich@ifanbel.bas-net.by*

Введение. Идеи неэрмитовой квантовой механики находят практическое применение при решении задач классической физики в оптике, акустике, механике и т.д. В системах, описываемых неэрмитовым гамильтонианом, возникают особенности специального вида – исключительные точки. Одним из наиболее ярких примеров неэрмитовых систем являются \mathcal{PT} -симметричные системы, которые содержат сбалансированное распределение материалов, поглощающих и усиливающих электромагнитное излучение. В исключительной точке \mathcal{PT} -симметричной системы происходит переход от \mathcal{PT} -симметричной фазы к фазе с нарушенной \mathcal{PT} -симметрией.

В работе исследуется взаимодействие нормально падающего ($\theta = 0^\circ$) оптического излучения с \mathcal{PT} -симметричными трёхслойными структурами (Рис. 1), содержащими изотропный или анизотропный средний слой (IL – INTERLAYER), заключенный между изотропными слоями усиливающего (GAIN) и поглощающего (LOSS) материалов. Изотропные слои характеризуются диагональными тензорами диэлектрической $\hat{\epsilon} = \epsilon \hat{1}$ и магнитной $\hat{\mu} = \hat{1}$ проницаемости. Внешние слои характеризуются комплексной диэлектрической проницаемостью $\epsilon_{L/G} = (n \pm ik)^2$, так что выполняется условие баланса между поглощением и усилением электромагнитного излучения вследствие совпадения значений параметра неэрмитовости k . В качестве среднего слоя используется жидкий кристалл E7. Оптические свойства анизотропного материала определяются показателями преломления для обычной волны n_o и необычной волны n_e и единичным вектором ориентации оптической оси $\mathbf{c} = (\sin \phi, \cos \phi, 0)$. Тензор диэлектрической проницаемости анизотропного среднего слоя $\hat{\epsilon}_{IL} = n_o^2 \hat{1} + (n_e^2 - n_o^2) \mathbf{c} \otimes \mathbf{c}$, где \otimes – тензорное произведение, в случае изотропного среднего слоя $n_e^2 = n_o^2$. Дисперсионные свойства жидкого кристалла (зависимости показателей преломления от частоты падающего излучения) взяты из [1]. Толщина всех слоёв d одинакова. В данной работе при расчётах были использованы значения $d = 2$ мкм и $n = 2$, а параметр неэрмитовости k выступал в качестве свободного параметра. Для описания распространения света в описанных структурах используется операторный метод [2-4] и формализм матрицы рассеяния [5].

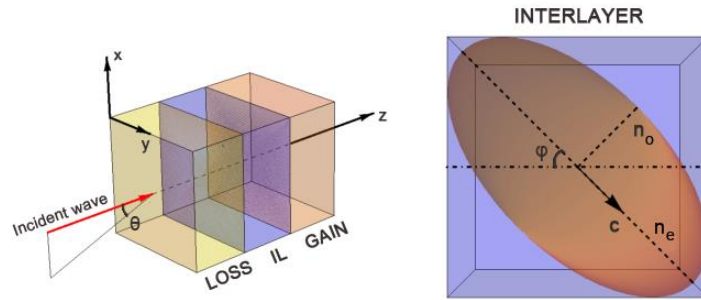


Рис. 1. Геометрия \mathcal{PT} -симметричной трёхслойной структуры.

1 Изотропный средний слой. При нормальном падении коэффициенты отражения и пропускания не зависят от поляризации волны. На Рис. 2,b приведён спектр пропускания неэрмитовой структуры ($\kappa = 0.1$), демонстрирующий несколько пиков, где $T > 1$. Связь этих пиков и исключительных точек демонстрируется в рамках формализма матрицы рассеяния. Так, для изотропного случая, матрица рассеяния записывается следующим образом:

$$\hat{S} = \begin{pmatrix} t & r^R \\ r^L & t \end{pmatrix} \quad (1)$$

где t , r^R и r^L – комплексные амплитудные коэффициенты пропускания, отражения справа и отражения слева соответственно. Известно [5], что исключительные точки разделяют \mathcal{PT} -симметричную фазу, где собственные значения матрицы рассеяния унимодулярны ($|s_{1,2}| = 1$), и фазу с нарушенной \mathcal{PT} -симметрией, где собственные значения матрицы рассеяния обратны ($|s_1| = 1/|s_2|$).

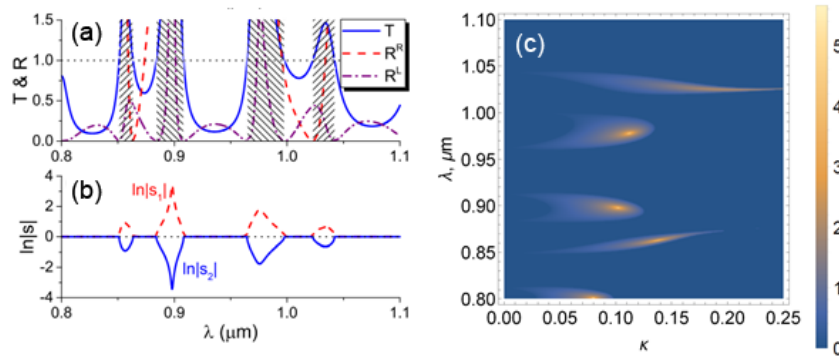


Рис. 2. (а) Спектр отражения и пропускания \mathcal{PT} -симметричной трёхслойной структуры с изотропным средним слоем рассчитанный при $\kappa = 0.1$. (б) Логарифм собственных значений матрицы рассеяния при $\kappa = 0.1$. Заштрихованные области в (а) соответствуют областям нарушения \mathcal{PT} -симметрии со значениями $\ln|S| \neq 0$ в (б). (с) Фазовая диаграмма логарифма собственных значений матрицы рассеяния как функции от κ и λ для трёхслойной структуры с изотропным средним слоем.

Согласно анализу, проведённому в работе [5], исключительные точки соответствуют так называемым анизотропным резонансам пропускания – точкам, в которых коэффициент пропускания принимает единичное значение, а один из коэффициентов отражения обращается в ноль, что подтверждается и Рис. 2,а. Исключительные точки ограничивают область нарушенной \mathcal{PT} -симметрии с обеих сторон и соответствуют нулям коэффициентов пропускания – $R^R = |r^R|^2$ или $R^L = |r^L|^2$. Таким образом, можно выделить два типа областей нарушенной \mathcal{PT} -симметрии: I тип соответствует нисходящей штриховке на Рис. 2,а – с обеих сторон такая область ограничена нулями коэффициента отражения одного вида (в данном случае – $R^L = 0$); II тип соответствует восходящей штриховке – с обеих сторон такая область

ограничена нулями коэффициента отражения разного вида (с одной стороны – $R^L = 0$, а с другой – $R^R = 0$).

Фазовая диаграмма, представленная на Рис. 2,с, позволяет более полно оценить поведение системы. На диаграмме чётко видны \mathcal{PT} -симметричные области и области, где \mathcal{PT} -симметрия нарушена. Рис. 2,b представляет собой сечение данной диаграммы при $\kappa = 0,1$. Диаграмма позволяет определять положения исключительных точек, разделяющих описанные области. Можно заметить, что в определённых спектральных диапазонах, близких к резонансам структуры, \mathcal{PT} -симметрия может быть нарушена довольно легко, в то время как на других длинах волн она практически не нарушаема. Примечательно, что области с нарушенной симметрией могут независимо возникать на определённых длинах волн и способны объединяться с ростом параметра неэрмитовости, что наиболее наглядно наблюдается вблизи $\lambda = 0,9$ мкм. Приведенная на Рис. 2,с диаграмма позволяет определить тип области нарушенной \mathcal{PT} -симметрии по её форме. Так, области I типа обладают округлой каплеобразной формой (область при $\lambda \approx 0,9$ мкм), тогда как области II типа обладают более вытянутой, даже змеевидной, формой (область при $\lambda \approx 0,85$ мкм). Фактически, области I типа можно рассматривать как результат слияния двух областей II типа.

2 Анизотропный средний слой. Анизотропия материала среднего слоя приводит к зависимости коэффициентов пропускания и отражения структуры от взаимной ориентации вектора поля падающего излучения и вектора ориентации оптической оси \mathbf{s} . В частности, при $\phi = 0^\circ$ оптическая ось располагается вдоль оси y . Тогда матрица рассеяния может быть записана в следующем виде:

$$\hat{\mathcal{S}} = \begin{pmatrix} t_{xx} & t_{xy} & r_{xx}^R & r_{xy}^R \\ t_{yx} & t_{yy} & r_{yx}^R & r_{yy}^R \\ r_{xx}^L & r_{xy}^L & t_{xx} & t_{xy} \\ r_{yx}^L & r_{yy}^L & t_{yx} & t_{yy} \end{pmatrix} \quad (2)$$

где нижние индексы определяют ко- и кроссполаризованные члены.

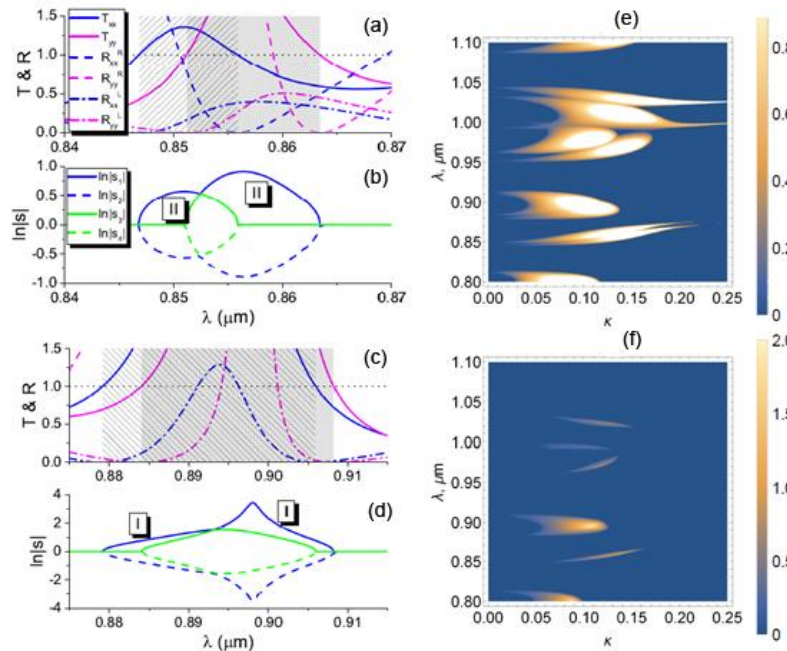


Рис. 3. (a), (b) Спектры отражения и пропускания \mathcal{PT} -симметричной трёхслойной структуры с анизотропным средним слоем рассчитанный при $\kappa = 0.1$. (b), (d) Логарифмы собственных значений матрицы рассеяния при $\kappa = 0.1$. (e), (f) Фазовые диаграммы логарифма собственных значений матрицы рассеяния как функции от κ и λ для трёхслойной структуры с анизотропным средним слоем при $\phi = 0^\circ$. Расчёты приведены для первой (e) и второй (f) пары собственных значений.

Расположение областей нарушенной \mathcal{PT} -симметрии в этом случае показано на Рис. 3,е, ф. Диаграммы становятся сложнее в сравнении с изотропным случаем, показанным на Рис. 2, с, вследствие удвоения количества собственных значений матрицы рассеяния. Хотя расположение областей с нарушенной симметрией остается примерно тем же, наблюдается их расщепление на несколько отдельных областей, отвечающих разным поляризациям излучения. Пример вызванного анизотропией расщепления одиночной области II типа (см. крайнюю левую область на Рис. 2,а, б на две пересекающиеся области II типа приведен на Рис. 3,а, б. Это пересечение, где обе пары собственных значений не унимодулярны, соответствует длинам волн, при которых T_{xx} и T_{yy} одновременно принимают значения больше единицы (на Рис. 3,а – дважды заштрихованная область). Аналогичное наблюдение справедливо и для области I типа на Рис. 3,с, d, что соответствует второй области нарушения \mathcal{PT} -симметрии на Рис. 2, а. Более того, возможна нетривиальная ситуация, когда пересекаются области разного типа, что невозможно свести к расщеплению областей, наблюдаемых в изотропном случае.

Заключение. Полученные фазовые диаграммы позволяют определить положение областей нарушенной симметрии на разных длинах волн и проследить их эволюцию с ростом параметра неэрмитовости. На этой основе проведена классификация областей нарушения \mathcal{PT} -симметрии в изотропном и анизотропном случаях. Результаты работы расширяют наши знания об исключительных точках на системы с анизотропными материалами, что может способствовать более широкому использованию таких систем для создания устройств активной и неэрмитовой фотоники.

Литература.

1. Tkachenko V. et al. Nematic liquid crystal optical dispersion in the visible-near infrared range //Molecular Crystals and Liquid Crystals. – 2006. – Vol. 454. – №. 1. – P. 263/[665]-271/[673].
2. Barkovsky L. M., Furs A. N. Operator Methods for Describing Optical Fields in Complex Media. – 2003.
3. Barkovskii L. M., Borzdov G. N., Lavrinenko A. V. Fresnel's reflection and transmission operators for stratified gyroanisotropic media //Journal of Physics A: Mathematical and General. – 1987. – Vol. 20. – №. 5. – P. 1095.
4. Borzdov G. N., Barkovskii L. M., Lavrukovich V. I. Tensor impedance and transformation of light beams by systems of anisotropic layers II. Oblique incidence //Journal of Applied Spectroscopy. – 1976. – Vol. 25. – №. 3. – P. 1174-1178.
5. Novitsky A. et al. Unambiguous scattering matrix for non-Hermitian systems //Physical Review A. – 2020. – Vol. 101. – №. 4. – P. 043834.

Диэлектрические свойства ферроманганитов висмута

А.С. Сиротюк ^a, А.В. Баглов ^{a, b}, Л.С. Хорошко ^{a, b}, Д.В. Карпинский ^c

^a Белорусский государственный университет, 220030 Минск, Беларусь

^b Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, 220013 Минск, Беларусь

^c Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению, 220013 Минск, Беларусь
E-mail: fiz.sirotyuk@bsu.by

Введение. В настоящее время интерес материаловедов направлен на исследование фундаментальных и прикладных свойств мультиферроиков – материалов, сочетающих сегнетоэлектрическое и (ферро)магнитное упорядочение [1]. Одними из наиболее интересных представителей мультиферроиков являются ферроманганиты висмута $\text{BiFe}_x\text{Mn}_{1-x}\text{O}_3$ – твердые растворы замещения феррита и манганита висмута. В стандартных условиях BiFeO_3 является антиферромагнетиком со структурой типа перовскита. Напротив, BiMnO_3 является

орбитально-упорядоченным ферромагнетиком с моноклинной структурой. Соотношение железа и марганца в данной системе твердых растворов является определяющим фактором, ответственным за формирование магнитного упорядочения в них в широком интервале температур [2–5]. Однако, исследуются преимущественно структурные, магнитные и сегнетоэлектрические свойства как экспериментально, так и теоретически, в то время как исследованию оптических свойств таких материалов отводят недостаточно внимания.

Ранее нами была предложена модельная система для качественной и количественной оценки электронной структуры и магнитных состояний ионов железа и марганца в рамках численного квантово-механического подхода [6]. В модели предполагается, что для всех кристаллических структур, в которых могут существовать ферриты-манганиты висмута, электронная структура будет качественно схожей, что позволяет проводить ее исследование только в рамках орторомбической сингонии, следовательно, четырехкратно уменьшить число атомов при моделировании, радикально ускоряя процедуру вычислений плотности электронных состояний и заселенностей орбиталей. Целью данной работы является оценка оптических свойств ферроманганита висмута методами квантово-механического моделирования методами из первых принципов. Структура, магнитное упорядочение и состав ($\text{BiFe}_{0,5}\text{Mn}_{0,5}\text{O}_3$) взяты из нашей опубликованной работы [6].

1 Методика исследования. Диэлектрическую проницаемость в оптическом диапазоне частот рассчитывали на основе формализма Кубо-Гринвуда. Комплексный частотно-зависимый тензор оптической проводимости и тензор диэлектрической функции рассчитывали в пределе линейного отклика на возмущающее частотно-зависящее электрическое поле. В этом подходе внутризонный вклад в оптическую проводимость может быть описан исключительно гамильтонианом сильной связи $\langle 0M|\hat{H}|\vec{R}N\rangle$ и матрицей перекрытия $\langle 0M|\vec{R}N\rangle$. Межзонный вклад аналогичен случаю использования ортонормированного базиса и требует знания элементов матрицы положений $\langle 0M|\hat{r}|\vec{R}N\rangle$ для получения точной проводимости. Частотно-зависимая оптическая проводимость, $\sigma(\omega)$, определяемая формулой Кубо-Гринвуда в базисе блоховских состояний может задана как:

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{-ih}{2\pi N_k \Omega} \sum_{\vec{k}mn} \left(\frac{f_{\vec{k}m} - f_{\vec{k}n}}{\varepsilon_{\vec{k}m} - \varepsilon_{\vec{k}n}} \right) \frac{\langle \vec{k}m|\hat{j}_\alpha|\vec{k}n\rangle \langle \vec{k}m|\hat{j}_\beta|\vec{k}n\rangle}{\omega + \varepsilon_{\vec{k}m} - \varepsilon_{\vec{k}n} + i\eta}$$

Токовый оператор \hat{j}_α может быть записан как оператор импульса \hat{p}_α в атомной системе единиц. $f_{\vec{k}n}$ обозначает число заполнения блоховского состояния $\vec{k}n$, определяемого волновым вектором в импульсном пространстве k и индексом зона n с энергией $\varepsilon_{\vec{k}n}$, где распределение Ферми-Дирака используется для введения эффективной температуры. Суммирование k производится по k -точкам внутри первой зоны Бриллюэна, а общее число точек обозначается как N_k . Параметр η обычно приравнивают к нулю, но на практике является фактически настраиваемым параметром. Ω обозначает объем элементарной ячейки. За дополнительными подробностями теории мы отсылаем заинтересованного читателя к фундаментальной работе [7]. Блоховские состояния мы получали в рамках теории функционала плотности и псевдопотенциала, реализованных в пакете *OpenMX* [8–10]. Критерий сходимости расчета самосогласованного поля составлял 10^{-9} эВ/ион. Интегрирование в первой зоне Бриллюэна проводили по Γ -центрированной регулярной сетке k -точек размером $6 \times 6 \times 10$. Сетку для численного интегрирования выбирали такой, чтобы среднее значение энергии обрезания составляло около 2200 эВ для всех случаев. Псевдопотенциалы включали в себя в качестве валентных $5d$ -, $6s$ - и $6p$ -электроны для висмута, $3p$ -, $3d$ - и $4s$ -электроны для железа, $3s$ -, $3p$ -, $3d$ - и $4s$ -электроны для марганца, а также $2s$ - и $2p$ -электроны для кислорода. Моделирование проводили в рамках обобщенного градиентного приближения с обменно-корреляционного функционалом *PBE*. Для более точного учета

кулоновской корреляции d-электронов железа и марганца использовали поправку Хаббарда $U = 5,8$ эВ для железа и $U = 5,2$ эВ для марганца в упрощенном вращательно-инвариантном виде.

2 Результаты и обсуждение. Модельная структура ферроманганита висмута $\text{BiFe}_{0,5}\text{Mn}_{0,5}\text{O}_3$, полученная из BiFeO_3 , представлена на Рис. 1.

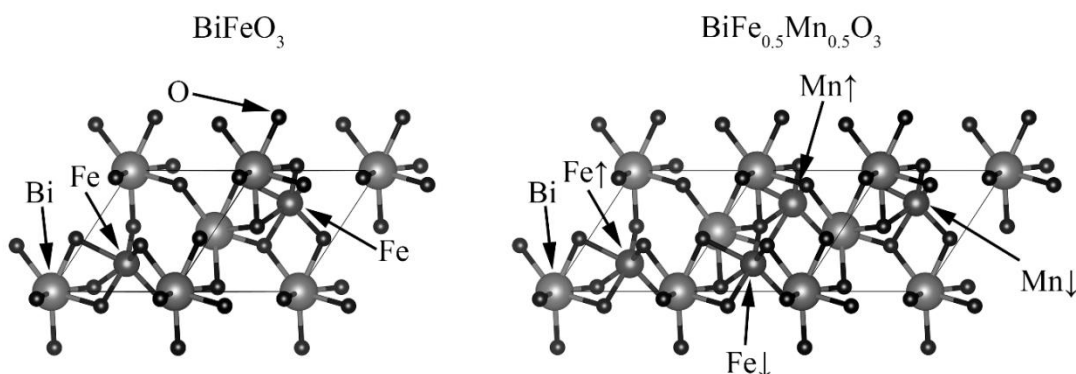


Рис. 1. Внешний вид модельных структур: элементарная ячейка орторомбического BiFeO_3 (слева); б – сверхъчейка ($2 \times 1 \times 1$) $\text{BiFe}_{0,5}\text{Mn}_{0,5}\text{O}_3$ (справа). Стрелки обозначают направление магнитного момента. Приводится согласно [6].

Рассчитанные диэлектрические свойства ферроманганита висмута $\text{BiFe}_{0,5}\text{Mn}_{0,5}\text{O}_3$ в антиферромагнитном упорядочении представлены на Рис. 2.

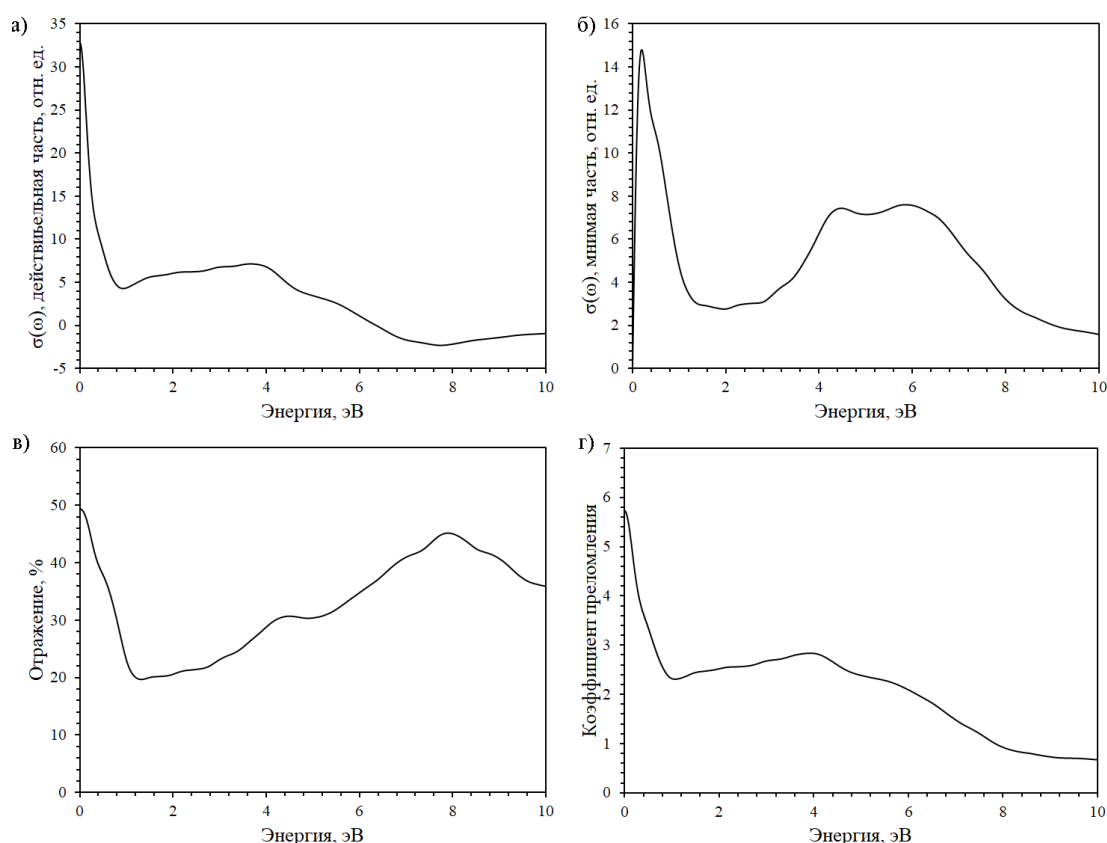


Рис. 2. Рассчитанные диэлектрические свойства ферроманганита висмута $\text{BiFe}_{0,5}\text{Mn}_{0,5}\text{O}_3$: а) действительная часть диэлектрической функции; б) мнимая часть диэлектрической функции; в) коэффициент отражения; г) коэффициент преломления.

В литературе слабо представлены результаты по исследуемому материалу, что значительно усложняет сопоставление расчетов с экспериментом. Действительная и мнимая

части диэлектрической функции характерна для полупроводников и диэлектриков (Рис. 2,а, б). Наличие пика в области 0,2-0,4 эВ связано с межзонными переходами, однако такая малая энергия является, скорее всего, некорректной. Причина этого заключается в наличии небольшого результирующего магнитного момента в веществе, являющегося следствием нарушения исходной симметрии элементарной ячейки BiFeO_3 (BiMnO_3) и несохранению равенства чисел состояний со спином вверх и вниз [6]. Из-за этого потолок валентной зоны различен для электронов со спином вверх и спином вниз, что приводит к сдвигу в спектре мнимой части диэлектрической функции. В принципе, это часто наблюдаемое явление, особенно для магнитных систем.

Решением является введение так называемого ножничного оператора (от англ. *scissor operator*), корректирующего полученные результаты [11]. Однако его введение требует дополнительных исследований, в частности знания дисперсии энергетических зон вдоль особых точек высокой симметрии, поэтому в данной работе он не вводится. Тем не менее, после пика поглощения следует достаточно широкая, около 2 эВ, область локального минимума, где число электронных состояний относительно невелико, плавно сменяющая широким (около 4 эВ) локальным максимумом, связанным с электронными состояниями висмута [6]. С спектре отражения наблюдается глобальный максимум, связанный с локализацией $3d$ -состояний ионов железа. Коэффициент преломления ведет себя типично для полупроводникового или диэлектрического материала, кроме области энергий менее 1 эВ, что обусловлено причинами, описанными выше. Его величина составляет 2,3–2,8 в области видимого излучения, что качественно согласуется с экспериментальными данными для ферроманганита висмута состава $\text{BiFe}_{0,94}\text{Mn}_{0,06}\text{O}_3$, для которого значения коэффициента преломления близко к трем [12].

Заключение. В рамках подхода Кубо-Гринвуда рассчитаны, построены и проанализированы спектральные зависимости действительной и мнимой частей диэлектрической проницаемости, коэффициенты отражения и преломления для ранее нами предложенной модельной системы – ферроманганита висмута $\text{BiFe}_{0,5}\text{Mn}_{0,5}\text{O}_3$ в антиферромагнитном упорядочении. Частотно-зависимые свойства рассчитывались в базе блоховских состояний, которые, в свою очередь были получены в рамках одноэлектронного приближения – теории функционала плотности и теории псевдопотенциала. Показано, что качественно полученные результаты соответствуют полупроводниковому (диэлектрическому) характеру материала. Показано, что в области малых энергий основную роль играют локализованные $3d$ -состояния ионов железа, а с ростом энергии возрастает роль электронных состояний ионов висмута. $3d$ -состояния ионов марганца локализуются в области энергий электронных состояний ионов висмута, поэтому на спектрах они не выделяются в виде характерных перегибов, изломов спектра. Значение коэффициента преломления количественно согласуется с экспериментальными данными. Однако, для более получения точных оптических свойств ферритов, манганитов и ферроманганитов висмута следует применять более точную структурную модель.

Благодарности. Работа частично профинансирована в рамках задания № 2.25 ГПНИ «Материаловедение, новые материалы и технологии», НИР 4 (ГБЦ 24-3064).

Литература.

1. Звездин, А.К. Неоднородное магнитоэлектрическое взаимодействие в мультиферроиках и вызванные им новые физические эффекты / А.К. Звездин, А.П. Пятаков // УФН. – 2009. – Т. 179, – №8. С. 897–904.
2. Belik, A. A. Polar and nonpolar phases of BiMO_3 : A review / A.A. Belik // J. Solid State Chem. – 2012. – Vol. 195. – P. 32–40.
3. Kharbanda, S. Multiferroic perovskite bismuth ferrite nanostructures: A review on synthesis and applications / S. Kharbanda [et al.] // J. Magn. Magn. Mater. – 2023. – V. 572. – P. 170569.
4. Moreira dos Santos, A. Orbital ordering as the determinant for ferromagnetism in biferroic BiMnO_3 / A. Moreira dos Santos [et al.] // Phys. Rev. B. – 2002. – Vol. 66. – Iss. 6. – P. 064425.

5. Karpinsky, D.V. Crystal and magnetic structure transitions in $\text{BiMnO}_{3+\delta}$ ceramics driven by cation vacancies and temperature / D. V. Karpinsky [et al.] // *Materials*. – 2021. – Vol. 14. – Iss. 19. – P. 5805.
6. Karpinsky, D.V. Structural and magnetic phase transitions in $\text{BiFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ solid solution driven by temperature / D. V. Karpinsky [et al.] // *Nanomaterials*. – 2022. – Vol. 12. – Iss. 9. – P. 1565.
7. Баглов, А.В. Электронная структура ферроманганита висмута $\text{BiFe}_{0,5}\text{Mn}_{0,5}\text{O}_3$ / А.В. Баглов [и др.] // *Известия вузов. Электроника*. – 2024. – Т. 29, – № 1. – С. 19–29.
8. Ozaki, T. Variationally Optimized Atomic Orbitals for Large-Scale Electronic Structures / T. Ozaki // *Phys. Rev. B*. – 2003. – V. 67, – Iss. 15. – P. 155108.
9. Ozaki, T. Numerical Atomic Basis Orbitals from H to Kr / T. Ozaki, H. Kino // *Phys. Rev. B*. – 2004. – V. 69, – Iss. 19. – P. 195113.
10. Ozaki, T. Efficient Projector Expansion for the Ab Initio LCAO Method / T. Ozaki, H. Kino // *Phys. Rev. B*. – 2005. – V. 72, – Iss. 4, – P. 045121.
11. Bokdam, M. Role of Polar Phonons in the Photo Excited State of Metal Halide Perovskites / M. Bokdam // *Scientific Reports*. – 2016. – V. 6. – P. 28618.
12. Uzair, M. Effect of Mn Doped on Structural, Optical, and Dielectric Properties of $\text{BiFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ for Efficient Antioxidant Activity / M. Uzair [et al.] // *ACS Omega*. – 2023. – V. 8, – Iss. 45. – P. 42390–42397.

Применение спектроскопии комбинационного рассеяния для изучения углеродных волокон

А.А. Таболич^а, В.А. Шелестова^б, В.В. Кирис^а, М.В. Бельков^а

^а *Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси, 220072 Минск, Беларусь*

^б *Институт механики металлополимерных систем им. В.А. Белого НАН Беларуси, 246050 Гомель, Беларусь*

E-mail: a.tabolich@dragon.bas-net.by

Введение. Углеродные волокна получают термической деструкцией в инертной среде или вакууме органических волокон (гидратцеллюлозы, полиакрилонитрила, нефтяных и каменноугольных пеков). В зависимости от конечной температуры термообработки получают волокна диаметром 7-10 мкм с различной степенью графитизации, количество углерода в волокне составляет 90-99 %.

Высокая прочность на разрыв, низкий удельный вес, химическая инертность и устойчивость к высоким температурам сделали углеродное волокно незаменимым материалом во многих областях промышленности. Данные свойства углеродных волокон объясняются высокой степенью ориентации атомов углерода связанных посредством прочных графитоподобных sp^2 - связей, а также устранением пор и неоднородностей в структуре волокна. При этом степень графитизации является одним из ключевых факторов влияющих на свойства волокон.

Спектроскопия комбинационного рассеяния (КР) является мощным инструментом для быстрой фазовой диагностики вещества и одним из наиболее информативных методов диагностики различных форм углерода: алмаза, графита, углеродных нанотрубок, фуллеренов и т.д., позволяя изучить колебательные, вращательные и иные моды образцов в интервале, как правило, от 200 до 4000 см^{-1} с минимальной пробоподготовкой [1]. Число и расположение линий определяется молекулярным строением вещества.

Две основные полосы в спектре КР углеродных структур G и D, полосу G даёт мода E_{2g}, соответствующая симметричным колебаниям растяжения сжатия углеродного кольца, полоса D обусловлена колебательной модой, связанной с наличием дефектов либо краевыми эффектами указывающими на нарушение структуры, таким образом отношение

интенсивностей данных полос (I_D/I_G) может использоваться для характеристики степени неупорядоченности материала [2].

К преимуществу указанного метода можно отнести:

- Неразрушающий и бесконтактный характер метода;
- Быстрота анализа (от секунд до минут);
- Возможность картирования образцов с высоким латеральным разрешением.

Анализ сдвига полос, а также изменения их полуширины и отношения интенсивностей в спектрах КР позволяет фиксировать изменения структуры углеродных материалов (УМ).

Известно, что линии или полосы в спектрах КР углеродных материалов могут смещаться в зависимости от множества факторов, главными из которых являются давление и температура.

Однако недостаточно ясно, каким образом на положение линий КР в спектрах УМ влияет размер анализируемых частиц и характер структуры вещества. С целью выяснения особенностей влияния температуры отжига на положение диагностических линий исследуемых углеродных волокон в спектрах КР проведены экспериментальные исследования шести образцов с различной температурой отжига.

1 Методика эксперимента. Исследования были проведены с использованием многофункционального комплекса Nanoflex (производства Solar LS, Беларусь) с рабочим диапазоном регистрации спектров КР $50 \div 8000 \text{ см}^{-1}$, длина волны возбуждающего лазера 488 нм. Спектральное разрешение 0,025 нм (обеспечивается спектрометром M833 с решеткой 1200 штр/мм, угол блеска решетки 600 нм, обратная линейная дисперсия 0,78 нм/мм), система регистрации Andor EMCCD, охлаждаемая до -80°C .

Исследовались углеродные волокна из гидратцеллюлозы, полученные при различных конечных температурах отжига. Образцы углеродного волокна измельчались с помощью шаровой мельницы и прессовались под давлением 7 тон в форме диаметром 1,2 см.

Рабочая поверхность исследуемого образца, полученная с помощью рабочего микрообъектива Olympus 100 \times , NA = 0,95 представлена на Рис. 1.

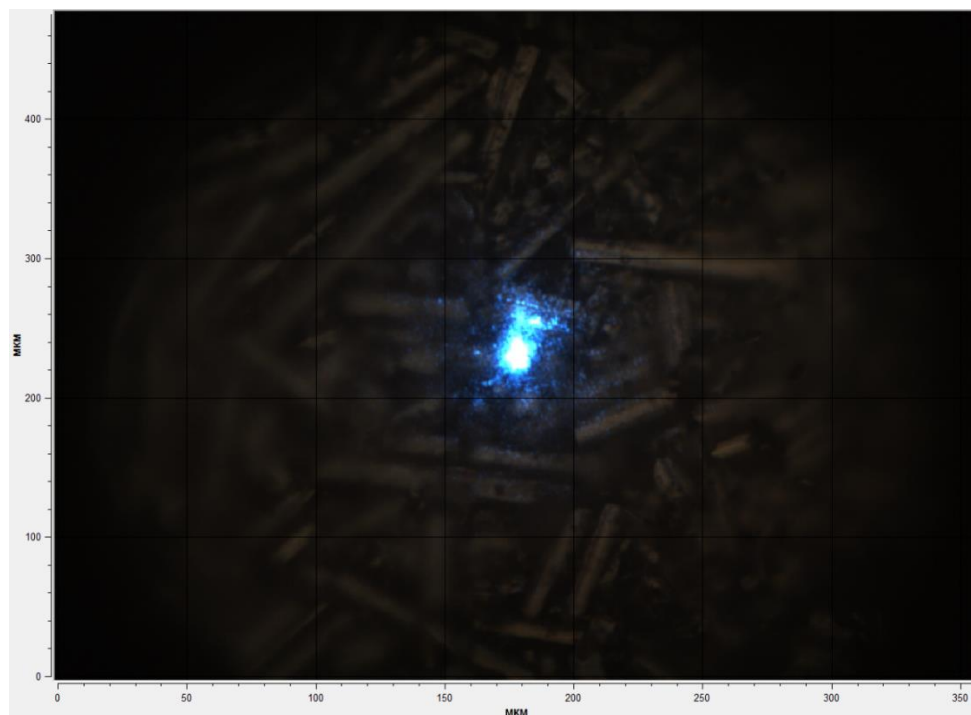


Рис. 1. Рабочая поверхность исследуемого образца.

Для большей представительности анализа регистрация спектров производилась минимум в 3 различных точках, по 10 кадров длительностью 50 секунд.

2 Результаты и обсуждение. Для извлечения из спектров КР данных о структуре sp^2 -гибридизированного углерода и информации о строении используют разные характеристики [3].

Спектры КР регистрировались в интервале от ~ 900 до ~ 1600 cm^{-1} и содержат два интенсивных не полностью разрешенных максимума – D и G полосы (Рис. 2,а). G- пик характерен для ориентированного углерода, D-пик указывает на дефекты, которые могут быть вызваны как наличием примесей, так и атомами углерода на границах графитовых кристаллитов.

Поскольку D и G полосы сильно перекрываются, для вычисления их интенсивности использовали аппроксимацию контурами Фойгта (Рис. 2,б).

Например, для оценки среднего латерального размера атомно-упорядоченных областей образца L_a широко используют отношение интенсивностей полос D и G, поскольку площадь под каждой из них представляет собой вероятность всего процесса активации с учетом квантовой неопределенности [4].

При этом используют отношение как пиковых, так и интегральных интенсивностей этих полос. В УМ при небольшом беспорядке (возмущении) углеродного остова правильной рассматривать отношение интегральных интенсивностей полос D и G, поскольку площадь под каждой из них представляет собой вероятность всего процесса активации с учетом квантовой неопределенности.

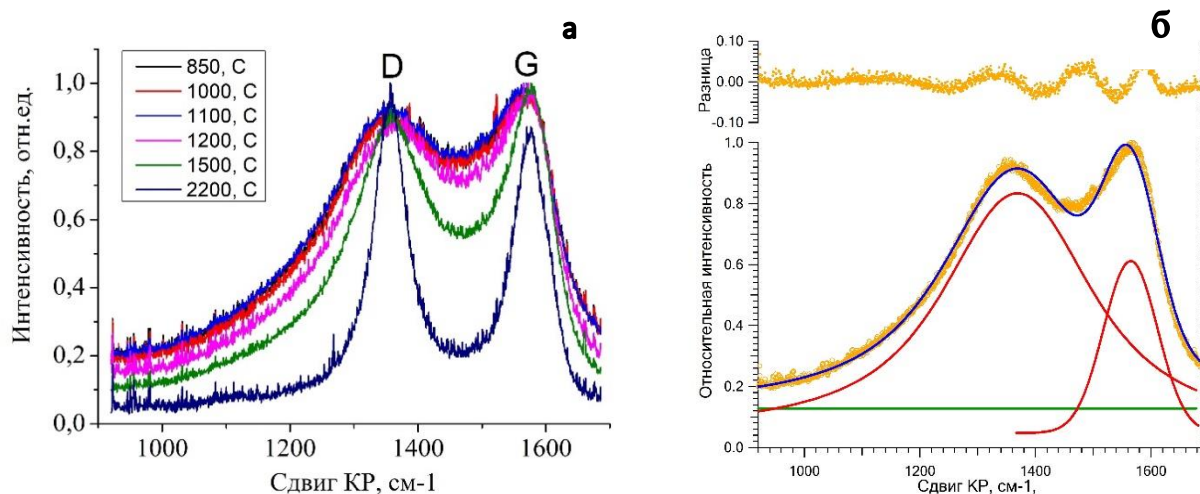


Рис. 2. Спектр комбинационного рассеяния углеродного волокна при различных температурах отжига (а) и его разложение на контуры Фойгта (б).

Ф. Туинстра и Дж. Кениг [4] исследовали КР-спектры некоторых поликристаллических графитов и установили, что в них отношение I_G/I_D обратно пропорционально L_a , определенной из спектра рентгеновской дифракции.

Из Рис. 3 и 4 видно, что существенные изменения в параметрах G и D полос углерода происходят при превышении температуры отжига в 1200 °C. Соотношение интегральных интенсивностей I_G/I_D возрастает с увеличением температуры отжига, что соответствует увеличению упорядоченной фазы в структуре УВ. Исходя из имеющихся литературных данных такие изменения с большей степенью вероятности могут быть обусловлены ростом степени графитизации углеродных волокон.

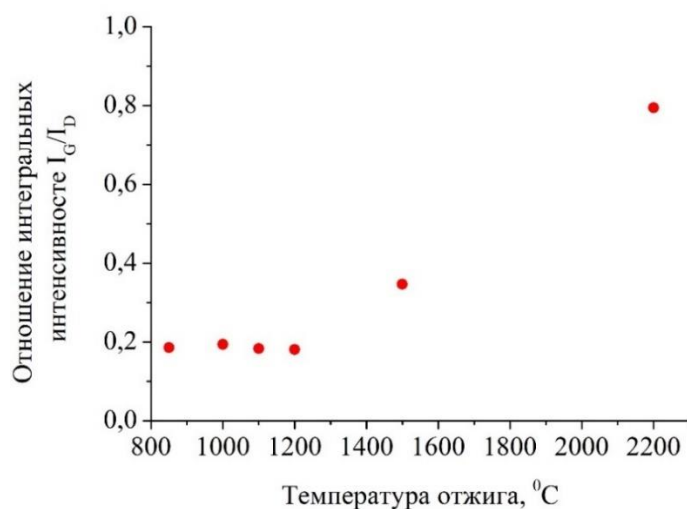


Рис. 3. Отношение интегральных интенсивности G и D полос КР спектров углеродного волокна полученного при разных температурах отжига.

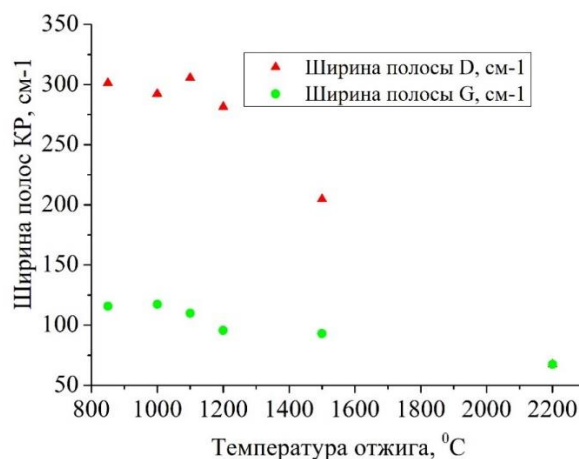


Рис. 4. Ширина G и D полос углерода в КР-спектрах углеродного волокна полученного при разных температурах отжига.

Заключение. Отмечено, что для температур отжига 850÷1200 °C разница в спектрах фактически отсутствует и значительные изменения связанные с ростом степени графитизации волокна наблюдаются при более высоких температурах.

Таким образом, показано, что спектроскопия комбинационного рассеяния может выступать в качестве инструмента контроля при производстве углеродного волокна.

Литература.

1. Ferrari A., Basko D. Raman spectroscopy as a versatile tool for studying the properties of graphene // *Nat. Nanotechnol.* – 2013. – V. 8. – P. 235–246. – doi: 10.1038/nnano.2013.46.
2. Eletskiy A. V., Iskandarova I.M., Knizhnik A. A., Krasikov D.N / Graphene: fabrication methods and thermophysical properties // *Uspekhi Fizicheskikh Nauk* 181 (3) 233 ± 268 (2011) DOI: 10.3367/UFNr.0181.201103a.0233
3. Puech P., Mariem Kandara M., Paredes G., Moulin L., Weiss-Hortala E., Kundu A., Ratel-Ramond N., Plewa J.-M., Pellenq R., Monthieux M. Analyzing the Raman spectra of graphenic carbon materials from kerogens to nanotubes: What type of information can be extracted from defect bands? // *C-Journal of Carbon Research*. 2019. Vol. 5. P. 69–88. DOI: 10.3390/c5040069.
4. Tuinstra F., Koenig J. Raman spectrum of graphite // *J. Chem. Phys.* 1970. Vol. 53, N 3. P. 1126–1130. DOI: 10.1063/1.1674108.

Исследование хемилюминесцентным методом закономерностей фотоповреждения грамотрицательных бактериальных клеток, sensibilizированных индотрикарбоцианиновым красителем

А.А. Таболич^а, А.И. Третьякова^а, Л.Г. Плавская^а, Т.С. Ананич^а, Р.К. Нагорный^а,
В.Ю. Плавский^а, Л.С. Ляшенко^б, Е.С. Воропай^б, А.П. Луговский^с

^а Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси, 220072 Минск, Беларусь

^б Белорусский государственный университет, 220030 Минск, Беларусь

^с Научно-исследовательское учреждение «Институт прикладных физических проблем имени А.Н.Севченко Белгосуниверситета», 220045 Минск, Беларусь

E-mail: a.tabolich@dragon.bas-net.by

Введение. Фотодинамическая терапия (ФДТ) нашла применение для уничтожения опухолевых клеток, а также в качестве альтернативного, многообещающего метода инактивации вирусов, бактерий и грибковой флоры [1].

Одним из перспективных классов sensibilizаторов для использования в практическом здравоохранении при реализации метода ФДТ считаются индотрикарбоцианиновые (полиметиновые) красители [2].

Как отмечалось ранее [3], грамположительные бактерии *S.aureus* высокочувствительны к воздействию полиметинового красителя ПК220 после облучения, в то время как грамотрицательные бактерии *E.coli* оказались более устойчивы к фотодинамическому воздействию, при этом механизм фотохимических процессов, инициирующих фотоповреждение при их sensibilizации индотрикарбоцианиновыми красителями, остается не выясненным.

Цель настоящей работы – изучение с помощью хемилюминесцентного анализа механизмов фотодеструкции грамотрицательных бактериальных клеток *E.coli*, sensibilizированных водорастворимым индотрикарбоцианиновым (полиметиновым) красителем ПК220 при облучении светом светодиодного источника, спектральный диапазон которого соответствует полосе поглощения мономеров исследуемого красителя.

1 Материалы и методы. Объектом исследования является разрабатываемый в НИИ прикладных физических проблем им. А.Н. Севченко БГУ водорастворимый симметричный индотрикарбоцианиновый краситель ПК220.

Повреждающее действие света исследовалось в отношении кишечной палочки – грамотрицательных бактериальных клеток *Escherichia coli (E.coli)* М-17 (производства Совместного открытого акционерного общества «Ферейн», Республика Беларусь).

Облучение взвеси клеток проводили светодиодной матрицей, работающей в непрерывном режиме с максимумом в спектре испускания в области $\lambda_{\max} = 745$ нм.

Контроль плотности мощности излучения на уровне верхней поверхности столбца жидкости осуществляли с помощью измерителя РМ100D с фотодиодным датчиком S121C (Thorlabs GmbH, Германия).

Величину фотобиологического эффекта характеризовали, контролируя собственную (не усиленную) хемилюминесценцию (ХЛ) суспензии клеток, после ее предварительного облучения.

Измерения параметров свечения клеток осуществляли на хемилюминометре Lum 5773 (ДИСофт, Россия), работающем в режиме счета фотонов; спектральная чувствительность 300 ÷ 650 нм.

Для выяснения типа активных форм кислорода, участвующих в фотохимических процессах в клетках, sensibilizированных ПК220, при воздействии излучения красной области спектра, к суспензии клеток до облучения вносили один из специфических тушителей (перехватчиков) активных форм кислорода (АФК): азид натрия – тушитель синглетного кислорода; пируват натрия – перехватчик перекиси водорода; маннитол или

диметилсульфоксид (ДМСО) – перехватчики гидроксильных радикалов, а также универсальный антиоксидант кверцетин – перехватчик супероксиданионрадикала, гидроксильных радикалов, перекиси водорода и синглетного кислорода [4].

2 Результаты и их обсуждение. Выполненные исследования показали, что интенсивность ХЛ необлученных растворов 1,5 мкМ красителя ПК220, интактной суспензии микробных клеток *E.coli* (концентрации 1×10^9 мл⁻¹), а также суспензии клеток в присутствии красителя характеризуется очень низкой величиной и практически не изменяется в процессе записи сигнала в течение 5 мин (Рис. 1, а, б).

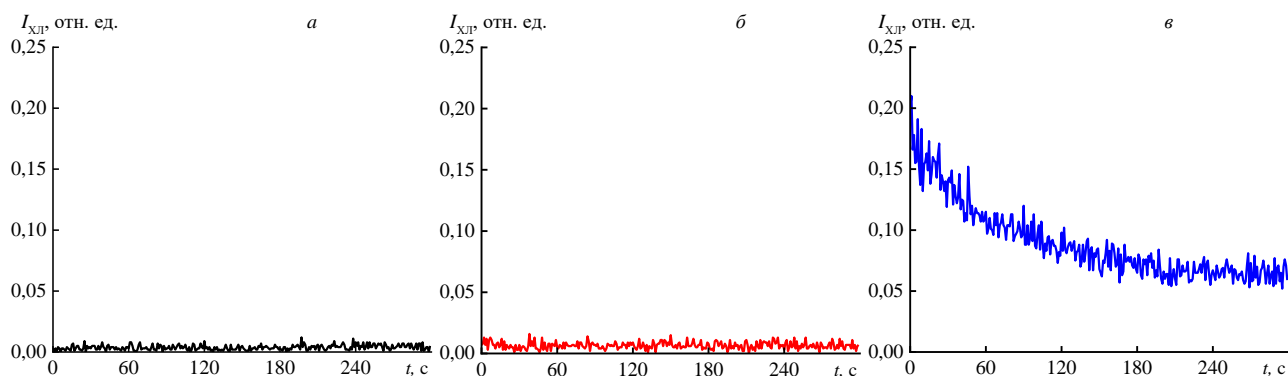


Рис. 1. Кинетические кривые изменения интенсивности хемилюминесценции суспензии клеток *E. coli* в растворе: а – в присутствии красителя ПК220 без облучения; б – после воздействия излучения в отсутствие фотосенсибилизатора ПК220; в – после воздействия излучения на суспензию клеток в присутствии красителя ПК220. Концентрация клеток 1×10^9 мл⁻¹, концентрация ПК220 1,5 мкМ; параметры светового воздействия:

$$\lambda_{\max} = 745 \text{ нм}, I = 50 \text{ мВт/см}^2, t = 3 \text{ мин}, D = 9 \text{ Дж/см}^2.$$

Иная ситуация реализуется после воздействия на суспензию клеток *E.coli*, сенсibilизированных красителем ПК220 излучения с $\lambda_{\max}=745$ нм, плотностью мощности $I = 50$ мВт/см² (энергетическая доза $D = 9$ Дж/см²) после предварительной инкубации клеток с красителем в течение времени $t = 3$ мин (Рис. 1,в). Кинетика изменения интенсивности ХЛ представляет собой ниспадающую кривую. При этом через 5 мин после начала регистрации сигнала ХЛ его интенсивность еще значительно превышает уровень необлученного контроля данной суспензии, подтверждая протекание темновых химических процессов, инициированных в исследуемой системе воздействием света.

При постоянных параметрах воздействующего излучения интенсивность светоиндуцированной ХЛ сенсibilизированных клеток заметно зависит от времени их инкубации с красителем ПК220. Оптимальное время инкубации для получения максимального сигнала хемилюминесценции составляет $t = 3$ мин.

Для проведения дальнейших исследований представляло интерес определить оптимальную концентрацию красителя ПК220 для инициирования максимального сигнала ХЛ.

В наших экспериментальных условиях светосумма ХЛ быстро увеличивается при увеличении концентрации красителя в диапазоне 0.2–1.0 мкМ, достигая максимума при $C = 1\text{--}2$ мкМ. По всей видимости, рост интенсивности сигнала на начальном этапе зависимости светосуммы ХЛ $S_{\text{ХЛ}} = f(C)$ обусловлен увеличением числа молекул красителя, взаимодействующих с микробными клетками с соответствующим ростом актов фотоповреждения клеточных структур при облучении. После достижения максимальной светосуммы дальнейшее увеличение концентрации красителя приводит к медленному снижению сигнала ХЛ.

Для выяснения механизма фотохимических процессов в отношении клеток *E.coli*, сенсibilизированных красителем ПК 220, важно продемонстрировать взаимосвязь интенсивности ХЛ с параметрами воздействующего излучения (его плотностью мощности и экспозицией).

При исследовании зависимости светосуммы ХЛ ($S_{ХЛ}$) от времени воздействия излучения на суспензию клеток *E.coli*, сенсibilизированных красителем, при постоянной интенсивности излучения $I = 50$ мВт/см², и зависимости $S_{ХЛ}$ от плотности мощности воздействующего излучения при времени воздействия $t = 3$ мин отмечено, что ход кривых зависимостей $S_{ХЛ} = f(t)$ и $S_{ХЛ} = f(I)$ несколько отличается.

Прежде всего, для зависимости $S_{ХЛ} = f(t)$ характерно быстрое увеличение ХЛ сигнала при времени воздействия $t = 1-1.5$ мин, затем скорость увеличения светосуммы ХЛ заметно падает с ростом времени воздействия до $t = 10$ мин.

Зависимость $S_{ХЛ} = f(I)$ на начальном этапе увеличения интенсивности света близка к линейной, затем по мере увеличения плотности мощности воздействующего излучения прирост светосуммы ХЛ несколько замедляется.

Тем не менее, наличие выраженной зависимости светосуммы ХЛ от энергетической дозы воздействующего излучения свидетельствует о том, что светосумма ХЛ характеризует повреждающее действие света на клетки *E.coli*, сенсibilизированные красителем ПК220.

Для выяснения типа активных форм кислорода, участвующих в фотохимических процессах в клетках *E.coli*, сенсibilизированных ПК220, при воздействии излучения красной области спектра, к суспензии клеток за 10 мин до её облучения вносили по 10 мкл одного из специфических тушителей (перехватчиков) активных форм кислорода.

Предварительные исследования показали, что добавка тушителей (перехватчиков) АФК к суспензии микробных клеток, сенсibilизированных красителем ПК220, без светового воздействия практически не сказывается на интенсивности ХЛ, то есть изменение интенсивности ХЛ в течение времени записи сигнала $t = 5$ мин соответствуют Рис. 1, а.

Однако наличие некоторых из указанных тушителей (перехватчиков) АФК в суспензии клеток, сенсibilизированных ПК220, заметно сказывается на интенсивности светоиндуцированной ХЛ по сравнению с данными, полученными для таких же суспензий, не содержащих тушителей.

Из эксперимента следует, что добавление перехватчиков гидроксильных радикалов D-маннитола или ДМСО практически не сказывается на светосумме ХЛ. В то же время добавление кверцетина приводит к снижению светосуммы светоиндуцированной хемилюминесценции, регистрируемой в отсутствие тушителей, более, чем в 3,5 раза. Добавление азида натрия – тушителя ¹O₂ перед облучением клеток снижает светосумму светоиндуцированной хемилюминесценции более чем в 1,8 раза по сравнению со светосуммой ХЛ облученных образцов в отсутствие тушителя.

Добавление перед облучением клеток перехватчика перекиси водорода (пирувата натрия) приводит к снижению в 1,4 раза интенсивности светоиндуцированной хемилюминесценции в сравнении с образцами, не содержащими тушителя.

Заключение. Выполненные исследования показали, что хемилюминесцентный метод позволяет быстро получать информацию о механизме фотоповреждения микробных клеток *E. coli*, сенсibilизированных индотрикарбоцианиновым красителем ПК220.

Синглетный кислород выступает основным интермедиатом, определяющим фотоповреждение микробных клеток *E.coli* в присутствии красителя ПК220 при воздействии излучения светодиодного источника с $\lambda_{max} = 745$ нм. Определенный вклад в фотохимическое повреждение микроорганизмов вносит также перекись водорода. Гидроксильные радикалы не вносят существенного вклада в фотоповреждение микробных клеток *E.coli*.

Снижение светосуммы хемилюминесценции с увеличением концентрации красителя может быть обусловлено несколькими причинами: экранированием самим красителем хемилюминесцентного сигнала, тушение красителем активных форм кислорода, генерируемых при фотовозбуждении ПК220, нехваткой молекулярного кислорода,

участвующего в процессах фотодеструкции микробных клеток вследствие его «выгорания» при взаимодействии с фотосенсибилизатором.

Литература.

1. Lugovski A. A., Samtsov M. P., Kaplevsky K. N., Tarasau D.S., Voropay E. S., Petrov P. T., Istomin Y.P. /Novel indotricarbocyanine dyes covalently bonded to polyethylene glycol for theranostics // J. Photochem. Photobiol. A-2016. - Vol. 316, № 1. - P. 31–36.
2. Ishchenko A. A., Syniugina A. T. /Structure and Photosensitizer Ability of Polymethine Dyes in Photodynamic Therapy:A Review//Theor. Exp. Chem. -2023. - Vol. 58, № 6. - P. 373–401.
3. Таболич, А.А. Сравнительный анализ физико-химические свойства полиметинового красителя в модельных средах с грамположительными и грамотрицательными бактериями / А.А.Таболич, Л.С.Ляшенко, А.Ю.Супоненко // тез. докл. XVIII Междунар. науч. конф. молодых ученых Молодежь в науке - 2021. В 2 ч. Ч. 2 Медицинские, физико-математические, физико-технические науки, химии и науки о Земле, 27-30 сентября 2021 г. / Нац. акад. наук Беларуси, Совет молодых ученых; ред.: В. Г.Гусаков [и др.]. – Мн, Беларуская навука 2021. – С. 184–185.
4. Владимиров Ю.А. Свободные радикалы и клеточная хемилюминесценция / Ю.А. Владимиров, Е.В. Проскура // Успехи биол. химии. - 2009. - Т. 49. - С. 341-388.

Деактивация триплетных состояний металлопорфиринов в растворах с молекулярным кислородом

А.Ю. Ильин, А.С. Старухин, Т.А. Павич

*Институт физики имени Б.И. Степанова НАН Беларуси, 220072, Минск, проспект
Независимости 68-2
E-mail: a.ilin@ifanbel.bas-net.by*

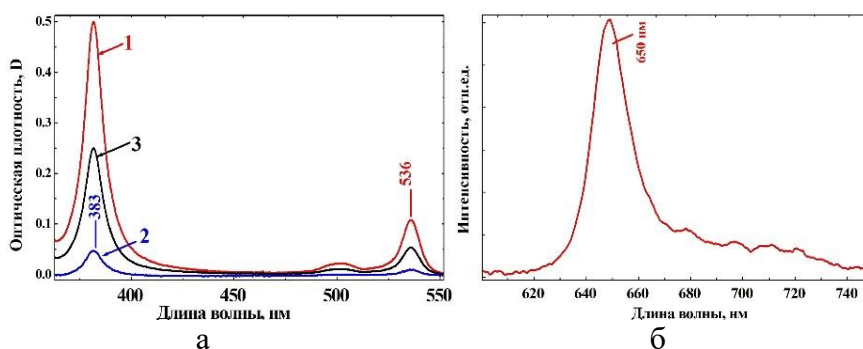
Соединения с порфириновыми макроциклами широко применяются в различных областях науки, техники и медицины. Указанные молекулярные системы широко используются для создания эффективных фотопреобразователей и элементов электронных устройств, а также применяются в качестве фотосенсибилизаторов в фотодинамической и антимикробной терапии. При фотовозбуждении порфириновых хромофоров происходит переход молекул в возбужденные синглетные состояния и затем после быстрой релаксации молекулы переходят в основное состояние [1,2].

В настоящей работе выполнены измерения времен жизни триплетных состояний для металлокомплексов 2,3,7,8,12,13,17,18-октаэтилпорфирина (М-ОЕР) и 5,10,15,20-тетрафенилпорфирина (М-ТРР), где М – Pt(II), Pd(II) в ряде органических растворителей. На Рис. 1 представлены структурные формулы исследованных соединений.



Рис. 1. Структурные формулы исследованных соединений: М-ОЕР (а) и М-ТРР (б).

Спектры поглощения были измерены на двухлучевом спектрофотометре Shimadzu UV-3600 Plus, а спектры флуоресценции, фосфоресценции исследованных соединений были получены на спектрофлуориметре Fluorolog-3 (HORIBA Scientific, США). На Рис. 2 приведены спектры поглощения и фосфоресценции Pt-OEP в толуоле (ТОЛ) при атмосферной концентрации молекулярного кислорода при температуре 293 К.



1-3 соответствуют различным концентрациям порфирина в растворителе

Рис. 2. Спектры поглощения (а) и фосфоресценции (б) для Pt-OEP в толуоле.

Для исследуемых соединений измерено время жизни фосфоресценции металлокомплексов с использованием в качестве растворителей циклогексана (ЦГ), толуола (ТОЛ), дихлорметана (ДХМ) и диметилсульфоксида (ДМСО). В Табл. 1. представлены значения дипольных моментов для вышеперечисленных растворителей и времена жизни фосфоресценции для образцов Pt-OEP.

Таблица 1. Значения времен жизни фосфоресценции для Pt-OEP в различных органических растворителях.

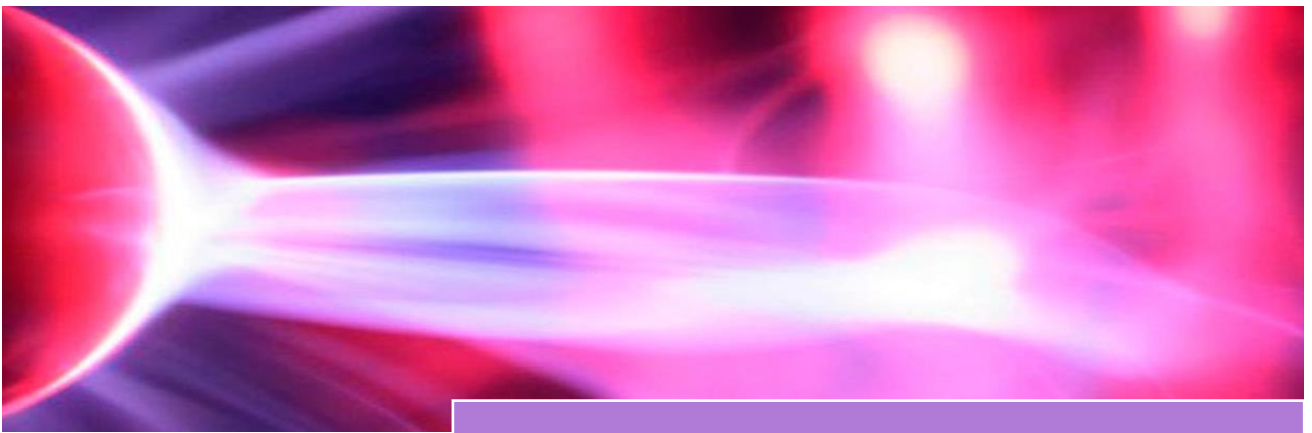
Растворитель	ЦГ	ТОЛ	ДХМ	ДМСО
Дипольный момент растворителя, D	0,12	0,37	1,8	3,96
$\tau_{\text{фосф.}}$, нс.	280	380	780	945

Из Табл. 1 видно, что увеличение времени жизни фосфоресценции металлопорфиринов хорошо коррелирует с ростом дипольных моментов используемого растворителя. Так, например, время жизни фосфоресценции Pt-OEP в ЦГ составляет 280 нс, а в ДМСО повышается до 945 нс. Приведенные данные показывают, что полярность используемого растворителя оказывает определяющее влияние на процессы дезактивации триплетных состояний металлокомплексов порфиринов с ионами Pt(II) в присутствии молекулярного кислорода.

Благодарности. Настоящая работа выполнена при финансовой поддержке гранта БРФФИ Ф23МЭ-032 и частичной поддержке ГПНИ «Конвергенция 2025», задание 3.03.10 и ГПНИ «Фотоника и электроника для инноваций», задание 1.8.

Литература.

1. Gu J., Peng Y., Zhou T., et al. // Nano Research Energy. 2022. – V. 1. – Art. – No e9120009.
2. Park J., Lee J., Jang W. // Coordination Chemistry Reviews. 2020. – V. 407. – No. 4. – P. 213157.
3. Montalti M., Credi A., Prodi L., Gandolfi M.. Handbook of Photochemistry. Materials Science, Boca Raton, SRC, Taylor & Francis Group, – 2006, – p. 542-548.



ФИЗИКА ПЛАЗМЫ И ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА

Исследование эффективности смешивания разнородных жидкостей в микрогидродинамических устройствах различной геометрии

Г.В. Бороховский, И.А. Тимощенко

Белорусский государственный университет, Физический факультет, Минск, 220006,

Беларусь

email: foofdof@gmail.com

Введение. Микрогидродинамические устройства сегодня имеют большое значение в медицине [1], например они используются для формирования защиты мРНК путем “облепливания” их различными липидами. Как известно в последнее время активно развиваются так называемые paper-based микромиксеры, однако и классические устройства остаются актуальными. Вследствие низких чисел Рейнольдса $Re \sim 1 - 10$ течения являются ламинарными. В таких ситуациях смешивание происходит в основном за счет процессов молекулярной диффузии ($D \sim 10^{-9} - 10^{-11} \text{ м}^2/\text{с}$), что оказывается крайне неэффективно. Эффективность смешивания можно незначительно повысить путем изменения как геометрии основного канала (зигзагообразные, круговые), так и входных каналов (Y, T типы). При численном решении стационарной задачи как в [2] показано, что наиболее эффективное смешивание достигается для T-образного входного канала и зигзагообразного основного канала (на 10% при длине 5000 $\mu\text{м}$). Дальнейшее повышение эффективности смешивания можно существенно повысить, используя электромагнитные или акустические поля (активные миксеры). Другой способ – это изменение геометрии или добавление в узкие части канала пористых сред, что приводит к повышению давления на входе в канал в несколько раз, но эффективность смешивания при этом повышается даже на меньших длинах основного канала.

1 Постановка задачи. В данной работе рассматриваются течения двухкомпонентной жидкости (вода, этанол) внутри микромиксеров, состоящих как из пористых сред, так и из пустого пространства. Тогда стационарные уравнения Навье-Стокса и эволюция концентраций без пористых сред запишутся в виде [2]:

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (1)$$

$$\rho(\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\nabla p \mathbf{I} + \nabla \cdot \mathbf{F}, \quad (2)$$

$$\nabla(c_i \mathbf{v}) = \nabla \cdot (D \nabla c_i) + R_i, \quad (3)$$

где \mathbf{v} – скорость, \mathbf{F} – тензор вязких напряжений, c_i – концентрация компонента i .

В случае наличия пористых сред возможно применить несколько моделей для описания. Так как $1 < Re < 10$, то хорошо применима модель Дарси-Форхеймера [3, 4], согласно которой в уравнения добавляется новый член, отвечающий за дополнительную силу сопротивления со стороны стенок пор:

$$\frac{1}{\varepsilon^2} \rho(\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = (-\nabla p \mathbf{I} + \nabla \cdot \mathbf{F}) - \left(\frac{\eta}{k} + \frac{\rho C_f}{\sqrt{k}} \nabla \cdot \mathbf{v} \right) \mathbf{v}, \quad (4)$$

$$\nabla(c_i \mathbf{v}) = \nabla \cdot ((D_D + D_E) \nabla c_i) + R_i + S_i, \quad (5)$$

где ε – пористость, k – проницаемость, C_f – коэффициент инерционного сопротивления.

Численное решение уравнений (1-5) проводилось методом конечных элементов в программном комплексе Comsol Multiphysics. Геометрия основного канала представлена 3

вариантами: прямая труба прямоугольного сечения, труба с кольцами двух видов: квадратными и круглыми. Пример геометрии с квадратными кольцами и Т-образными входными каналом приведен на Рис. 1. Угол наклона входного канала φ откладывается от оси Oy по часовой стрелке. Параметр count характеризует количество колец. Длина основного канала составляет $5000 \mu\text{m}$, а ширина – $300 \mu\text{m}$.

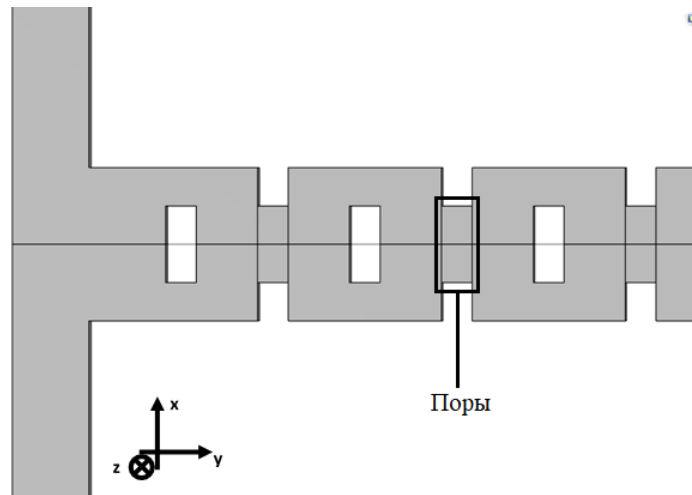


Рис. 1. Пример геометрии каналов.

2 Результаты и обсуждение. На Рис. 2 представлено установившееся распределение концентраций в миксере Т-типа, красный цвет соответствует максимально возможному значению концентрации этанола, в то время как синий цвет – его полному отсутствию, значение 0,5 (зеленый цвет) соответствует полному перемешиванию жидкости. Из распределения видно, что в начале потоки перемешивались лишь в небольшой области вблизи поверхности контакта компонентов. При проходе через кольцо можно заметить, что вблизи «внутренних» стенок возрастает смешиваемость. Это вызвано повышением давления и изменением направления течения жидкости. Первое обстоятельство усиливает процессы молекулярной диффузии, второе – конвективной. Внутри пор вступают в силу другие явления, которые будут описаны несколько ниже.

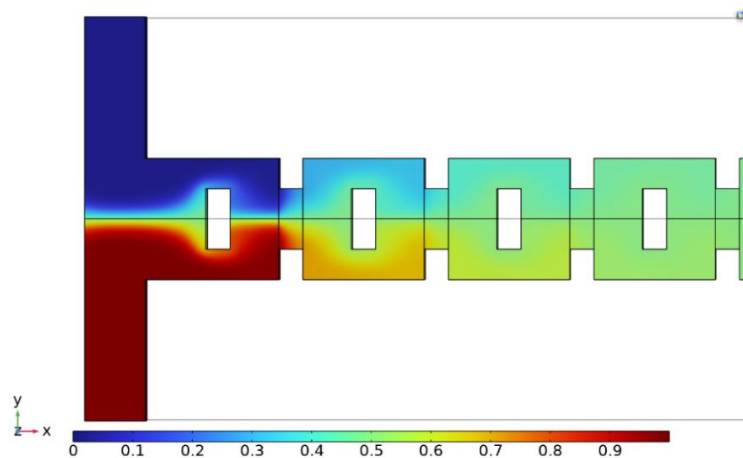


Рис. 2. Распределение отношений концентрации в канале Т-типа с кольцами и порами в основном канале. Значение 0,5 соответствует полному перемешиванию.

Далее, для оценки эффективности смешивания будем использовать распределение отношений концентраций в точке на прямой вдоль ширины канала c_2 (ось Oy , $z = 0$, $x = 5000 \mu\text{m}$) к начальной концентрации c_{02} .

Рассмотрим прямой канал Y-типа. Как уже было сказано: в следствии низких чисел Рейнольдса имеем низкие числа Пекле, значит в основном смешивание происходит за счет молекулярной диффузии. Поэтому эффективность смешивания может быть повышена за счет увеличения площади контакта компонентов и уменьшения скорости течения. Поэтому угол раствора канала не сможет существенно повлиять на смешиваемость. Что подтверждается результатом вычислительного эксперимента, представленными на Рис. 3.

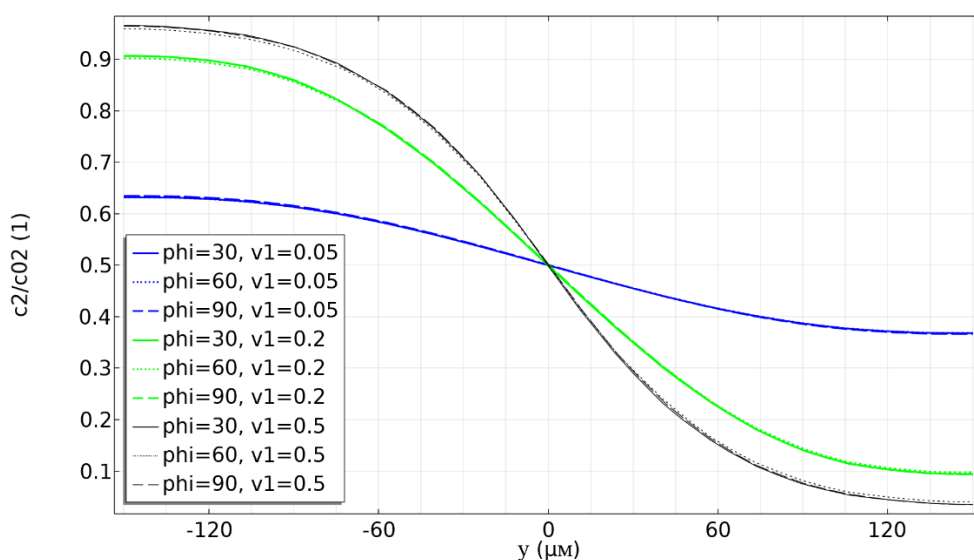


Рис. 3. Эффективность смешивания при варьировании угла раствора канала и начальной скорости. Цвет линии отвечает за скорость, а стиль за угол раствора.

Отметим, что при моделировании течений с $Re \ll 1$ ожидаемое время протекания через канал превышает время диффузного смешивания, что приводит к полному смешиванию без задействования всей длины канала. В случае пористых сред слагаемое с инерциальной составляющей в уравнении (3) можно опустить, так как деформация каналов при низких скоростях течения не существенна. Однако такие ситуации не представляют большого интереса для изучения из-за крайне низких скоростей потока.

Следующий способ повышения эффективности – это изменение формы основного канала. При наличии кольцевидных вставок (квадратные и круглые, см. Рис. 1) поток расщепляется, значит, толщина каналов становится меньше, что приводит к более плотной «упаковке» линий тока – повышается диффузное смешивание, с другой стороны из-за поддержания постоянной скорости на входе в канал и согласно закону Бернулли, внутри субканалов возрастает скорость, это может негативно сказаться на смешивании (что видно из Рис. 3), однако повышение скорости и «грубая» геометрия субканала ведет к увеличению конвективного смешивания, которое может на несколько порядков превосходить молекулярное. Внутри колец и на некотором удалении от них отношение потоков концентрации за счет диффузии показывает оказывается равным 3, что доказывает влияние более плотной «упаковки» трубок тока. Соответственно эффективность можно регулировать как шириной каждой вставки, так и количеством самих вставок (см. Рис. 4а).

Такой же эксперимент проводится с препятствиями круглой формы. Так как такая форма более обтекаема, то трубки тока упаковываются не так плотно, как в первом случае, что приводит к меньшей эффективности смешивания. Так же в ходе эксперимента выясняется, что варьирование ширины таких каналов, не приводит к существенному повышению эффективности.

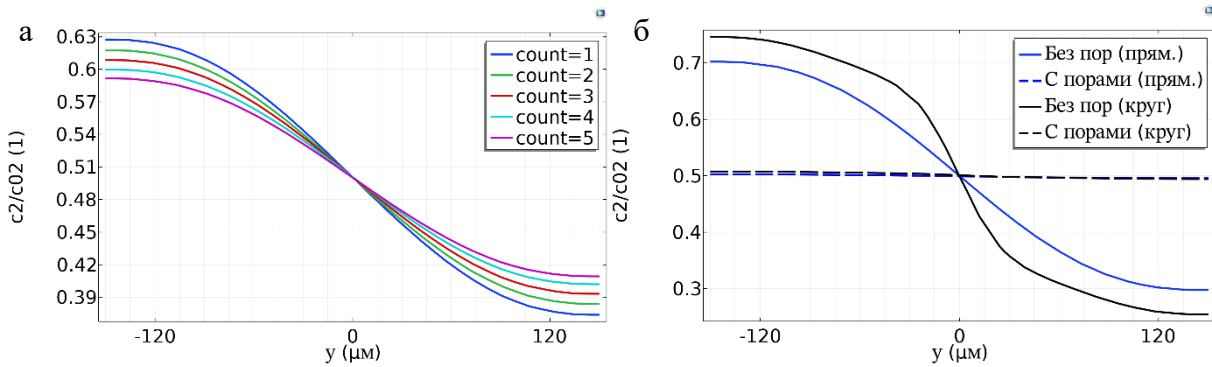


Рис. 4. Эффективность смешивания (а) при варьировании количества колец, (б) при наличии и отсутствии пористых вставок.

Наконец, третий способ повышения эффективности смешивания – наличие пористых сред. Как известно размеры и формы каналов внутри таких сред разные – это приводит к существенным сужениям и уширением трубок тока двухкомпонентной жидкости. Вдобавок внутри пор скорость течения существенно замедляется, что увеличивает время молекулярной диффузии. Еще одним фактором служит тот факт, что форма каналов может привести к повороту трубок тока т.е. часть жидкости может переместиться с одного края канала миксера в другой минуя остальную жидкость. Другими словами, в пористых средах имеет место два вида диффузии: продольная и поперечная [5].

В рассматриваемой модели, поры были добавлены в узкие участки между кольцами (см. Рис. 1), так как скорость течения там существенно выше, чем в других местах канала, что помогает уменьшать затраты по времени на протекание через такие структуры. Результаты моделирования, представленные на Рис. 4б показывают, что наличие пористых сред позволяет добиться практически полного смешивания.

Заключение. Таким образом был проведен численный эксперимент, который показал, что изменение геометрии устройств не влечет за собой существенного изменения распределения концентрации разнородных жидкостей (в экспериментах около 10%), в то время как вставка пористых структур в стационарные микрогидродинамические миксеры существенно повышает их эффективность (вплоть до $\frac{c_2}{c_{02}} \approx 0,5$), что соответствует почти полному перемешиванию. Минус такого подхода состоит в том, что при поддержке постоянной скорости на входах в канал, существенно повышается давление (в 5 раз для данных, представленных на Рис. 4б), что затрудняет производство такого рода устройств.

Литература.

1. Lee C.-Y., Fu L.-M. / Recent advances and applications of micromixers // Sensors and Actuators B: Chemical. – 2018. – Vol. 259. – P. 677-702.
2. Рудяк В. Я. / Моделирование течений в микромиксерах // Теплофизика и аэромеханика. – 2010. – Том 17, № 4. – С. 601-612.
3. Weng C.-H., Hsu P.-P., Huang A.-Y., Lin J.-L. / Paper-based microfluidics perform mixing effects by utilizing planar constricted-expanded structures to enhance chaotic advection // Sensors. – 2022. – Vol. 22, № 3. - P. 1028.
4. Cimolin F., Discacciati M. / Navier–Stokes/Forchheimer models for filtration through porous media // Applied Numerical Mathematics. – 2013. – Vol. 72. – P. 205-224.
5. Основы моделирования массопереноса в пористой среде. Часть I. Учебное пособие / К. В. Зотов, Т. Н. Кучурина. – Санкт-Петербург, 2014. – 34 с.

Источники низкотемпературной плазмы атмосферного давления для биомедицинских применений

Н.Н. Богачев^a, Л.В. Колик^a, А.С. Бакшаев^b, А.С. Конькова^a, Е.М. Конечков^a

^a *Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук, 119991 Москва, Россия*

^b *МИРЭА - Российский технологический университет, 119454 Москва, Россия
E-mail: bgniknik@yandex.ru*

Введение. За последние годы низкотемпературная плазма атмосферного давления привлекает все большее внимание научно-технического сообщества. Это связано с широкими возможностями создания и применения такой плазмы для обработки различных, как твердых, так и жидких материалов [1,2]. Большое разнообразие разработанных устройств для создания низкотемпературной плазмы атмосферного давления обусловлено развитием технических средств получения высоковольтных разрядов [3,4]. Эти различия чаще всего связаны с конфигурацией электродов и типом возбуждающего разряд электропитания. Наиболее распространенными являются разряды постоянного тока, низкочастотные (Гц-кГц), высокочастотные (МГц), СВЧ и их комбинации. В зависимости от конкретной конструкции, величины мощности передаваемой электрическому разряду и природы используемого газа, основные характеристики получаемой плазмы могут изменяться в широких пределах. Получает все большее распространение плазменная биомедицина и плазменная фармация, основанные на применении неравновесной низкотемпературной плазмы атмосферного давления с температурой газа не более 40° С (так называемой, холодной плазмы) и плазменно-обработанных жидкостей.

1 Источники плазмы для биологии и медицины. В исследованиях по применению холодной плазмы в медицине и биологии чаще всего выбираются два основных типа источников низкотемпературной плазмы: диэлектрические барьерные разряды (ДБР) и неравновесные плазменные струи атмосферного давления [5-7]. Плазменные струи стали широко применяемыми источниками холодной плазмы, поскольку они могут генерировать стабильный и контролируемый объем плазмы в окружающей среде за пределами зоны разряда. Это, например, имеет важное значение для прямой обработки холодной плазмой пораженной ткани пациента.

Традиционно используются два типа генераторов высокого напряжения для инициации и поддержки струй холодной плазмы: генератор синусоидального переменного тока высокого напряжения с частотой от 10 кГц до 1 МГц или генераторы прямоугольных импульсов высокого напряжения с длительностью импульсов в несколько микросекунд или наносекунд и частотой повторения 1-100 кГц. Амплитуда высокого напряжения может изменяться в относительно широком диапазоне от 2 до 40 кВ.

Источник холодной плазмы обычно имеет две пространственные области: - основной разрядный промежуток и плазменная струя, формируемая, как правило, протоком инертных газов. Основной разряд поддерживается между разрядными электродами и располагается полностью внутри разрядной трубки. Плазменное образование, выходящее за пределы разрядной трубки, обычно имеет форму хорошо коллимированной плазменной струи с типичной длиной, достигающей несколько сантиметров и диаметром до 10 мм [8-10].

Последние исследования генераторов холодной плазмы, использующих радиочастоты, микроволны или высоковольтные импульсы показывают, что уменьшение длительности импульсов вплоть до единиц наносекунд приводит к увеличению эффективности плазменного воздействия [11]. Основным недостатком систем низкотемпературной плазмы, основанных на плазменных струях – малая площадь взаимодействия активных компонентов с мишенью. Источники низкотемпературной плазмы, основанные на диэлектрическом барьерном разряде, позволяют получить, в зависимости от мощности и используемой геометрии, область

воздействия активных компонентов необходимого размера, однако расстояние до обрабатываемой поверхности обычно не может превышать нескольких мм.

Источники питания систем генерации холодной плазмы, используемые в медицине и биологии, должны обеспечивать стабильную работу при изменении нагрузки, которая в общем случае является нелинейной, так как обработка осуществляется короткими импульсами с высокой частотой, зависящей, кроме всего прочего от электрических параметров нагрузки. Даже при обработке простых жидкостей (вода Milli-Q, физиологический раствор) происходит изменение pH и проводимости, что влияет на параметры обрабатываемой плазмы [12]. При работе с источниками низкотемпературной плазмы необходимо обеспечивать электромагнитную совместимость с электронными приборами, использующими системы силовой электроники с микропроцессорным управлением, а это требует специального экранирования и использования фильтров для устранения помех.

2 Источники плазмы на основе пьезотрансформаторов. Последние годы усиливается интерес к созданию малогабаритных мобильных источников низкотемпературной плазмы для медицинского применения, что приводит к все более активному использованию пьезоэлектрических трансформаторов в качестве высоковольтного элемента, что позволяет обеспечить высокую эффективность получения плазменных образований на резонансных частотах.

Низкотемпературную неравновесную плазму можно генерировать электрическими разрядами практически любого типа. Генерация такой плазмы в условиях вакуума не представляет существенных трудностей даже при необходимости больших площадей обработки, но изготовление вакуумных установок требует значительных затрат и специальных конструкторских решений для плазменных реакторов. Следовательно, возникает необходимость разработки систем для генерации низкотемпературной плазмы с возможностью изменять параметры обработки различных типов поверхности при атмосферном давлении.

Использование пьезоэлектрических трансформаторов в качестве источника высокого напряжения для создания холодной плазмы атмосферного давления с контролируемыми параметрами позволяет проводить как обработку поверхности прямым пьезоразрядом с различной энергией, так и создание различных плазменно-активированных сред, а также использовать различные плазмообразующие газы.

В пьезоэлектрических трансформаторах (ПТН) используется механическая связь между их входной (первичной) и выходной (вторичной) секциями для преобразования между уровнями напряжения. РТ обладают многими потенциальными преимуществами по сравнению с обычными электромагнитными трансформаторами, такими как высокая плотность мощности (> 40 Вт/см), низкий уровень электромагнитных помех, меньший вес, улучшенную гальваническую развязку и повышенный КПД [13]. Прямой пьезоэлектрический эффект вызывает увеличение поляризационной силы и, следовательно, плотности поверхностного заряда с двух сторон пьезоэлектрического материала, когда он подвергается внешнему механическому воздействию. Этот эффект особенно силен, если механическая сила приложена в направлении вектора поляризации в предварительно поляризованном сегнетоэлектрическом материале. Обратный пьезоэлектрический эффект возникает, если механическая деформация пьезоэлектрического материала следует за напряжением, приложенным к этому материалу. Кроме того, этот эффект сильнее всего проявляется в предварительно поляризованных блоках сегнетоэлектрического материала, когда электрическое поле приложено параллельно вектору поляризации.

Идея ПТР (Рис. 1) состоит в том, чтобы объединить эти два эффекта в единую систему. К одной части (входная секция) прикладывается небольшое напряжение, вызывающее ее геометрическую деформацию (обратный пьезоэлектрический эффект). Эта часть механически связана с другой, в которой механическая деформация входной секции вызывает механическое напряжение, приводящее к генерации высокого напряжения [14]. Обычно пьезоэлектрические трансформаторы изготавливаются с использованием твердых

пьезоэлектрических материалов, таких как цирконат-титанат свинца (PZT), и, поэтому, их работа связана с резонансными модами. Это позволяет получить при использовании резонансной частоты необходимые для создания низкотемпературной плазмы напряжения, соответствующие классическим источникам, как работающим в режиме диэлектрического барьерного разряда, так и в режимах плазменной струи в различных газах.

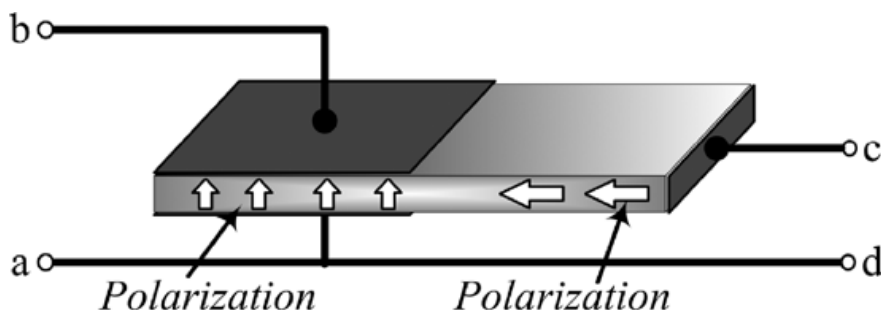


Рис.1. Общий вид пьезотрансформатора и его подключение.

За последние годы в различных странах разработаны источники холодной плазмы на основе ПТР для применения в масс-спектрометрии, обработке продуктов питания, сельском хозяйстве и т.п. Применение пьезоэлектрических трансформаторов в источниках плазмы позволяет, при использовании доступных элементов и классических схемных решений, получить эффективную обработку различных материалов и получение плазменно-активированных жидкостей с различными, заранее заданными, параметрами. Использование так называемого плазменного моста или колпачка [15,16] переводит прямой пьезоэлектрический разряд в различные виды диэлектрического барьерного разряда, с регулируемой температурой обработки.

Заключение. В работе представлен обзор источников низкотемпературной плазмы атмосферного давления для биомедицинских применений. Рассмотрены основные типы разрядов, используемых в данной области особенности конструкций источников. Особое внимание уделено компактным, энергоэффективным и универсальным источникам плазмы на основе пьезотрансформаторов.

Благодарности. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ проект № 24-29-00842.

Литература.

1. Adamovich I, et al./ The 2017 Plasma Roadmap: low temperature plasma science and technology // J Phys D Appl Phys. 2017; Vol. 50 № 32 P.323001.
2. Adamovich I. et al / The 2022 Plasma Roadmap: low temperature plasma science and technology // J. Phys. D: Appl. Phys 2022. Vol. 55 P. 373001.
3. Lu X, Bruggeman P.J, Reuter S, Naidis G, Bogaerts A, Laroussi M, Keidar M, Robert E, Pouvesle J-M, Liu D and Ostrikov K.K. /. Grand challenges in low temperature plasmas. // Front. Phys. 10:1040658. doi: 10.3389/fphy.2022.1040658
4. Plasma Physics and Engineering / Fridman A., Kennedy L.A. New York, London: Taylor & Francis. 2004. 884 p.
5. Akishev Yu. et al / Special issue on recent developments in plasma sources and new plasma regimes // J. Phys. D: Appl. Phys. 2019 Vol. 52 P. 130301. DOI 10.1088/1361-6463/ab0004
6. Brandenburg R. / Corrigendum: Dielectric barrier discharges: progress on plasma sources and on the understanding of regimes and single filaments Plasma Sources Sci. Technol. // 2017 Vol. 26 P. 053001 <https://doi.org/10.1088/1361-6595/aa6426>
7. Bruggeman P.J. et al. / Foundations of atmospheric pressure non-equilibrium plasmas // Plasma Sources Sci. Technol. 2017 26 123002 <https://doi.org/10.1088/1361-6595/aa97af>
8. Xaubet M, Baudler J-S, Gerling T, Giuliani L, Minotti F, Grondona D, von Woedtke T and Weltmann K-D 2018 Design optimization of an air atmospheric pressure plasma-jet. Plasma

- Processes Polymers 15 e1700211 DOI:10.1002/ppap.201700211
9. X.Lu et al Cold atmospheric-pressure air plasma jet: Physics and opportunities. Phys. Plasmas 28, 100501 (2021); <https://doi.org/10.1063/5.0067478>
 10. Nastuta, A.V.; Gerling, T. / Cold Atmospheric Pressure Plasma Jet Operated in Ar and He: From Basic Plasma Properties to Vacuum Ultraviolet, Electric Field and Safety Thresholds Measurements in Plasma Medicine.// Appl. Sci. 2022, 12, 644. <https://doi.org/10.3390/app12020644>
 11. Xu, H.; Liu, D.; Xia, W. / Comparison between the water activation effects by pulsed and sinusoidal helium plasma jets. // Phys. Plasmas 2018, 25, 013520.
 12. Konchekov E.M., Gusein-zade N.G., Kolik LV, Artem'ev KV, Pulish AV. Use of direct piezo-discharge in generation of plasma-activated liquid media. IOP Conf Ser: Mater Sci Eng. 2020; 848:012037
 13. Vazquez C. A. / Piezoelectric Transformers: An Historical Review// Actuators 2016, 5, 12. doi.org/10.3390/act5020012
 14. Rosen, C.A. Analysis and Design of Ceramic Transformers and Filters. Ph.D. Thesis, Syracuse University, Syracuse, NY, USA, 1956
 15. Artem'ev K.V., Bogachev N.N., Gusein-zade N.G., Dolmatov T.V., Kolik L. V., Konchekov E. M., Andreev S. E., Russ. Phys. J. 2020, 62, 2073.
 16. Timmermann, E.; Bansemer, R.; Gerling, T.; Hahn, V.; Weltmann, K.D.; Nettesheim, S.; Puff, M. / Piezoelectric-driven plasma pen with multiple nozzles used as a medical device: Risk estimation and antimicrobial efficacy. J. Phys. D Appl. Phys.2020, 54,025201.

Исследование спектральных характеристик плазмы мишеней из меди, серы и вольфрама в диапазоне мягкого рентгеновского излучения

Д.М. Безверхняя^{a, b}, А.Т. Саакян^a, В.Н. Пузырёв^a

^a ФГБУН Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия

^b Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана, Москва, Россия
E-mail: d.bezverkhnyaya@mail.ru

Введение. Актуальность данного исследования обусловлена возможностью широкого применения источников мягкого рентгеновского излучения (МРИ) в различных научно-прикладных направлениях [1-3]. В частности, применение мягкой рентгеновской микроскопии позволяет регистрировать изображения биологических объектов с высоким пространственным разрешением (15 ÷ 100 нм) [4-5]. Особый интерес представляет применение излучения в диапазоне водяного и углеродного окон, комбинация результатов исследования образца в этих двух диапазонах позволит обеспечить точную и контрастную картину структуры биологических образцов. Актуальной на сегодняшний день задачей является поиск эффективного и доступного вещества в качестве мишени для создания источника излучения в отмеченных диапазонах.

1 Описание экспериментальной установки. Исследование проводилось на установке «Канал-2» с использованием лазера на неодимовом стекле: длина волны излучения – 1,06 мкм, ширина спектра ≈ 42 Å, длительность импульса по полувысоте – 2,7 нс, плотность мощности в пятне фокусировки (Ø140 мкм) варьировалась в диапазоне 10¹² – 10¹⁴ Вт/см². Для исследования спектральных характеристик излучения плазмы в широком диапазоне длин волн 20 ÷ 600 Å, включающем мягкое рентгеновское излучение и вакуумный ультрафиолет, применялся спектрограф скользящего падения с отражающей дифракционной решёткой, обеспечивающий высокое спектральное разрешение (1,6 Å). Спектрограф был установлен на расстоянии 1 м от мишени. В качестве мишеней использовались сплошные пластины из серы, вольфрама и меди.

2 Результаты. На Рис. 1 представлены спектры мягкого рентгеновского излучения и вакуумного ультрафиолета трёх исследуемых веществ (S, W, Cu), полученных при близких значения энергии лазерного импульса. Видно, что в спектрах присутствуют как линейчатое, так и непрерывное излучение. На Рис. 2 представлены спектры МРИ мишеней из серы, вольфрама и меди в диапазоне $20 \div 100 \text{ \AA}$. Полученные спектры демонстрируют, что в диапазоне водяного окна наиболее интенсивное свечение плазмы наблюдается у серы. В диапазоне углеродного окна также имеются спектральные линии всех трёх исследуемых веществ, однако наиболее интенсивно излучает плазма меди.

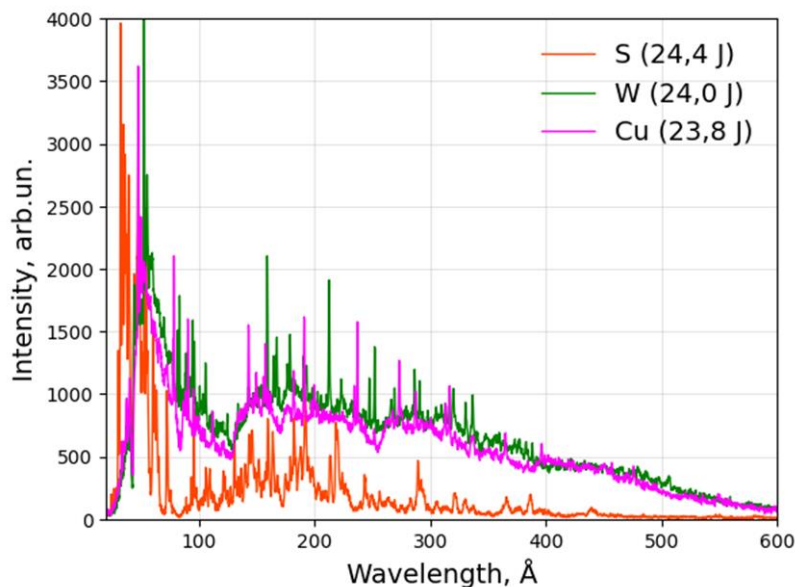


Рис. 1. Спектры мягкого рентгеновского излучения и вакуумного ультрафиолета плазмы мишеней из серы, вольфрама и меди.

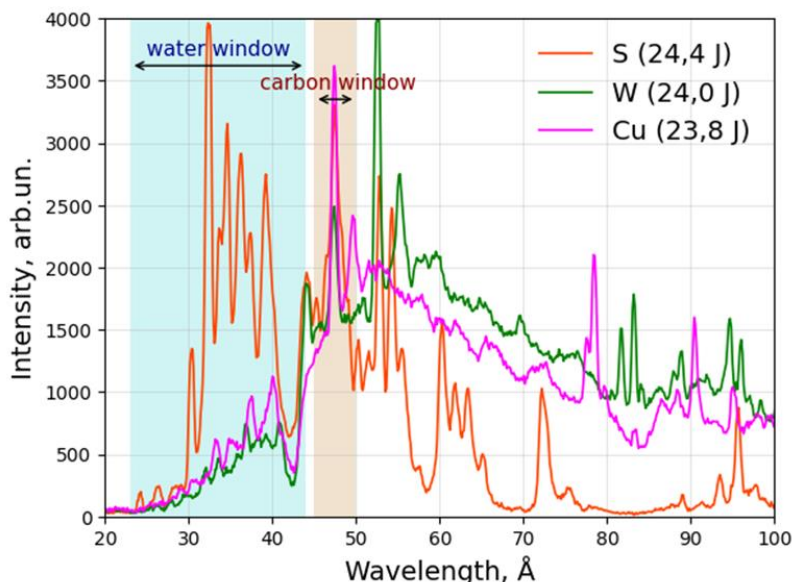


Рис. 2. Спектры мягкого рентгеновского излучения плазмы мишеней из серы, вольфрама и меди в диапазоне $30 \div 100 \text{ \AA}$.

Заключение. На основе полученных результатов можно сделать вывод, что из исследованных материалов наиболее перспективным источником мягкого рентгеновского

излучения в диапазоне водяного окна является лазерная плазма мишени из серы, интенсивность линий которой в несколько раз больше, чем у меди и вольфрама. В диапазоне углеродного окна средняя интенсивность свечения у всех трёх веществ находится примерно на одном уровне, однако наблюдается интенсивная спектральная линия излучения плазмы меди. Стоит также отметить, что в спектрах излучения плазмы меди и вольфрама начиная с 42 Å преобладает непрерывное излучение, чего нельзя сказать о сере.

Литература.

1. Loconte V., White K. L. / The use of soft X-ray tomography to explore mitochondrial structure and function //Molecular metabolism. – 2022. – Т. 57. – С. 101421.
2. Kotwaliwale N., Weckler P. R., Brusewitz G. H., Kranzler, G. A. Maness N. O. / Non-destructive quality determination of pecans using soft X-rays //Postharvest Biology and Technology. – 2007. – V. 45. – №. 3. – P. 372-380.
3. Средин В. Г., Войцеховский А. В., Ананьин О. Б., Мелехов А. П., Несмелов С. Н., Дзядух С.М. / Образование поверхностных дефектов в n-CdxHg1-xTe мягким рентгеновским излучением лазерной плазмы //Прикладная физика. – 2018. – №. 4. – С. 54.
4. Torrisi A, Wachulak P. W., Bartnik A., Węgrzyński Ł., Fok T., Fiedorowicz H. / Biological applications of short wavelength microscopy based on compact, laser-produced gas-puff plasma source //Applied Sciences. – 2020. – V. 10. – №. 23. – P. 8338.
5. Jacobsen C. / X-ray Microscopy. – Cambridge University Press, 2019.

Пространственно-угловое рассеяние лазерного излучения плазмой при облучении мишеней из алюминия и вольфрама

М.М. Захарчук, А.Т. Саакян, В.Н. Пузырёв

*Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук, Москва
E-mail: m.zaharchuk@lebedev.ru*

При взаимодействии лазерного излучения с плазмой в зависимости от рассеяния и отражения уменьшается доля лазерного излучения, которое нагревает плазму и увеличивает эффективность взаимодействия [1]. Исследование рассеянного плазмой излучения позволяет оценивать эффективность энергоклада лазерного излучения в плазму. Кроме того, по пространственно-угловой диаграмме можно судить об изотропности распространения плазменной короны, от которой в основном и происходит рассеяние излучения. При изучении воздействия излучения на мишени из различного вещества, становится также ясно, плазма, полученная ионизацией какого из них светит лучше, а какого – хуже, и как ее светимость зависит от изменяемой величины энергии лазерного излучения. Данный аспект важен, так как химический состав и структура вещества мишени влияют на спектральные характеристики и яркость свечения плазмы. В зависимости от атомного номера уровни энергии электронов в атоме вещества занимают различные позиции друг относительно друга, что приводит к увеличению или уменьшению энергии излучаемых квантов, а следовательно, и к увеличению или уменьшению яркости свечения плазмы.

В докладе приводятся результаты серии экспериментов по исследованию рассеяния лазерного излучения плазмой, которая возникает при облучении сплошных твердотельных мишеней из вольфрама (Рис.1) и алюминия (Рис.2) мощным наносекундным лазерным излучением. При длительности лазерного импульса по полувысоте в 2,7 нс плотность мощности излучения в пятне фокусировки на мишени варьировалась в пределах от $0,3 \times 10^{14}$ до $1,1 \times 10^{14}$ Вт/см². Для регистрации рассеянного плазмой лазерного излучения была применена разработанная и ранее уже использованная диагностическая система, основанная на волоконной передаче излучения [2]. При регистрации изображения на цифровой фотоаппарат

использовался специальный оптический светофильтр для спектрального выделения длины волны лазерного излучения, отсекая излучение видимого диапазона. Для мишеней из алюминия также были получены результаты без использования светофильтра, включающие как рассеянное излучение, так и собственное свечение плазмы.

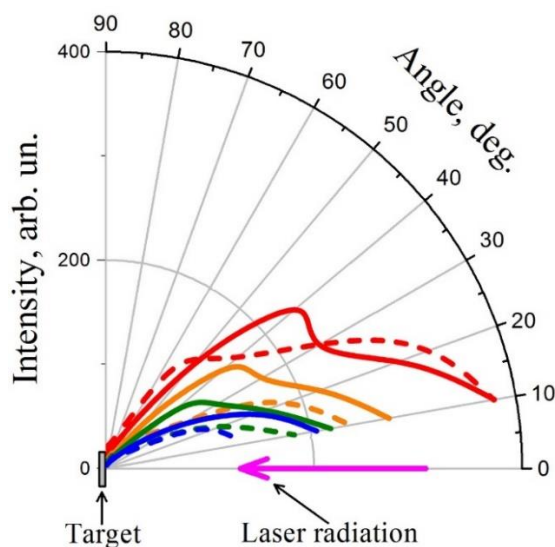


Рис.1. Диаграмма пространственно-углового рассеяния на мишени из W. Красный – 24,8 Дж, оранжевый – 20,8 Дж, зелёный – 17,4 Дж, фиолетовый – 13,8 Дж.

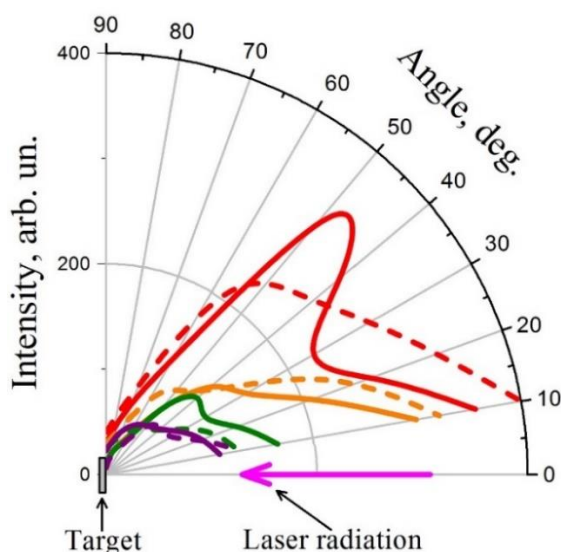


Рис.2. Диаграмма пространственно-углового рассеяния на мишени из Al. Красный – 21,6 Дж, оранжевый – 15,2 Дж, зелёный – 5 Дж, фиолетовый – 2,6 Дж.

Зафиксировано, что при увеличении энергии лазерного импульса повышается интенсивность всего рассеянного излучения для каждого из веществ мишеней. Однако с увеличением энергии лазерного импульса относительная доля рассеянного излучения уменьшается, что означает, что большая часть лазерного излучения участвует во взаимодействии с плазмой. Суммарная интенсивность рассеянного и собственного излучений плазмы оказывается в несколько раз больше, чем в случае только рассеянного излучения. Стоит также отметить, что плазменное суммарное излучение светит более изотропно, чем чистое рассеянное, и охватывает больший диапазон углов.

Литература.

1. Sheffield J. et al. Plasma scattering of electromagnetic radiation: theory and measurement techniques. – Academic press, 2010.

2. Sahakyan A., Puzyrev V. The diagnostics to study the spatial-angular distribution of radiation scattered by plasma at the "Kanal-2" facility //Optik. – 2021. – Т. 246. – С. 167807.

Низкопороговый двухплазмонный параметрический распад необыкновенной волны при монотонном профиле плотности

А.А. Наговицын, Е.З. Гусаков, А.Ю. Попов

*Физико-технический институт им А.Ф. Иоффе РАН, Политехническая 26, 194021 Санкт-Петербург, Российская Федерация
E-mail: nagovitsyn@mail.ioffe.ru*

Введение. Электрон-циклотронный резонансный нагрев (ЭЦРН) является широко используемым методом в современных установках термоядерного синтеза. Этот метод основан на введении в плазму мощного СВЧ излучения. СВЧ пучки накачки при распространении в неоднородной плазме могут распадаться на две дочерние волны вблизи точки, где удовлетворены распадные резонансные условия для частот и волновых чисел нелинейно связанных волн.

$$\omega_0 = \omega_1 + \omega_2, \quad k_0(x_d) = k_1(x_d) + k_2(x_d) \quad (1)$$

Различные сценарии этого явления, получившего название конвективной параметрической ПРН (КПРН), рассмотрены в обзоре [1]. В частности, анализ стабильности СВЧ волн, которые обычно используются для ЭЦРН в тороидальных термоядерных устройствах, предсказал чрезвычайно высокий порог для возбуждения КПРН, составляющий от десятков МВт до ГВт в зависимости от сценария распада [2].

Основываясь на выводах теоретического анализа, сформировалось представление о стабильности мегаваттных СВЧ пучков по отношению к нелинейным распадным процессам и детальной предсказуемости их поведения. Однако в недавних экспериментах с ЭЦРН были обнаружены эффекты, которые не могут быть описаны в рамках линейной теории. В частности, в ходе дополнительного нагрева было отмечено СВЧ излучение из плазмы на полущелой частоте, а также в диапазоне частот выше и ниже частоты волны накачки [3]. Эти явления наблюдались при прохождении пучка СВЧ волн через область плазмы с немонотонным профилем плотности из-за наличия магнитного острова или аномального выноса электронов из области мощного нагрева. Эти явления могут быть интерпретированы и детально описаны в рамках модели низкопороговой абсолютной ПРН, в результате которой возбуждаются дочерние волны около локального максимума плотности, когда при этом по крайней мере одна из дочерних волн оказывается локализована в области распада.

Однако, аномальные эффекты поведения при ЭЦРН наблюдались и в экспериментах с монотонными профилями фоновой плазмы и магнитного поля, где подобные локальные максимумы плотности экспериментально не наблюдались. [4,5].

В этом случае АПРН, по крайней мере в одномерной модели плазмы, возникает, если существуют две точки распада волны накачки и групповые скорости дочерних волн противоположно направлены. Тогда такое нелинейное преобразование в обеих точках распада порождает положительную обратную связь и может привести к росту дочерних волн со временем [6,7]. Эта модель остается ограниченной, поскольку в ней не учитывается конечная ширина СВЧ пучка - эффект, который может разрушить нелинейный резонатор между двумя точками распада, предсказываемый одномерной теорией [7]. В данной работе мы аналитически и численно доказываем, что АПРН СВЧ пучка конечной ширины является универсальным явлением, возникающим также при монотонных параметрах фоновой плазмы. Мы рассматриваем случай распада X2-моды на две верхнегибридные (ВГ) волны.

1 Параметрические распады волны необыкновенной поляризации на две бернштейновские волны. Рассмотрим распад необыкновенной волны накачки ω_0 на две дочерние ЭБ волны с близкими частотами $\omega_1 \approx \omega_2 \approx \omega_0/2$, распространяющиеся из точки распада в противоположные стороны. На Рис. 1 приведены дисперсионные кривые при монотонно спадающей концентрации и магнитном поле от центра плазменного шнура ($r = 0$) к периферии установки ($r = a$).

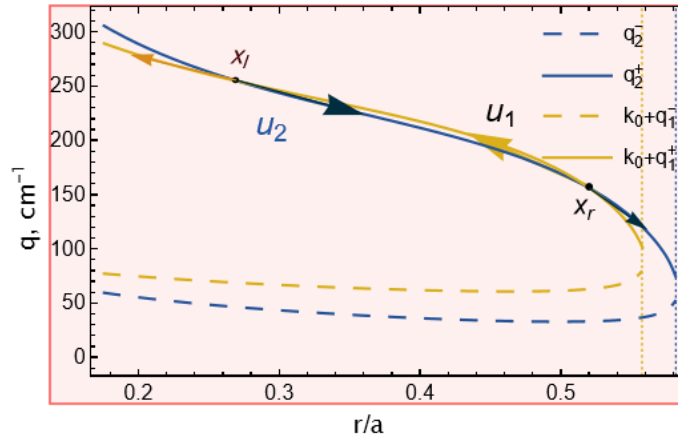


Рис. 1. Сплошными линиями – дисперсионные кривые дочерней ЭБ волны ω_1 (синим) и второй дочерней ЭБ волны ω_2 смещенной на волновое число k_0 волны накачки ω_0 . Штрихованной линией – «холодные» ветви дисперсионных кривых (волна необыкновенной поляризации). Вертикальная пунктирная линия – точка трансформации.

Как видно из Рис. 1, условия распада (1) могут выполняться в двух пространственных точках, что приводит к появлению петли положительной обратной связи – энергия дочерних волн частично возвращается в резонанс. Согласно одномерной теории, развитой в работах А.Д. Пилюя и М. Розенблюта [6,7] появление такого одномерного резонатора может приводить к росту дочерних волн во времени, если выполняется условие для коэффициента пространственного усиления при прохождении резонанса

$$Z = \frac{\gamma_0^2 l_d^2}{u^2} > 1 \tag{2}$$

где l_d это размер резонансной области, u – групповая скорость ЭБ волны, $\gamma_0 \propto \frac{\sqrt{P_0}}{w}$ коэффициент нелинейной связи, зависящий от мощности P_0 и ширины w пучка волны накачки ω_0 . Для рассматриваемого сценария распада на ЭБ волны условие возбуждения абсолютной ПРН (2) может выполняться для субмегаваттных мощностей пучка накачки – $10 \div 100$ кВт в зависимости плазменных параметров.

Однако, эта модель остается ограниченной, поскольку в ней не учитывается конечная ширина микроволнового пучка – эффект, который, вероятно, может разрушать нелинейный резонатор между двумя точками распада, предсказываемый одномерной теорией.

2 Двумерный анализ

$$\begin{cases} i \frac{\partial}{\partial t} a + iu \frac{\partial}{\partial x} a + \Lambda \frac{\partial^2}{\partial z^2} a = b\gamma_0 e^{-\frac{z^2}{w^2}} e^{i\Psi(x)} \\ -i \frac{\partial}{\partial t} b + iu \frac{\partial}{\partial x} b + \Lambda \frac{\partial^2}{\partial z^2} b = a\gamma_0 e^{-\frac{z^2}{w^2}} e^{-i\Psi(x)} \end{cases} \tag{3}$$

где a и b – амплитуды дочерних ЭБ волн, $\Psi(x) = \int^x \delta k(x') dx' \approx \frac{x}{l_d^3} \left(\frac{x^2}{3} - x_0^2 \right)$ – разность фаз в связи с отстройкой от резонанса из-за неоднородности плазменных параметров вдоль оси x , Λ – коэффициент дифракции.

При переходе в (3) к безразмерным величинам $x \rightarrow x l_d, t \rightarrow t \frac{l_d}{u}, z \rightarrow z w$ оказывается, что динамика системы определяется тремя безразмерными параметрами: x_0 , определяющий номер моды, $\bar{\Lambda} = \frac{l_d}{u} \frac{\Lambda}{w^2}$ и $\bar{\gamma}_0 = \frac{u}{l_d} \gamma_0$. В этой работе исследуется поведение решений этой системы уравнений, а именно условия, при которых проявляется экспоненциальный рост – порог неустойчивости, а также влияние параметров уравнения на инкремент этой неустойчивости.

3 Аналитические оценки порога неустойчивости. В приближении широкого пучка ($\frac{l_d}{u} \frac{\Lambda}{w^2} \ll 1$) и используя подход, описанный в [7] оказывается возможным свести (3) к уравнению

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\gamma_0^2}{2u^2 w^2} \frac{\partial^2}{\partial q_z^2} + i \frac{2\gamma_0}{u} \left(\frac{x^2}{l_d^3} + \frac{\Lambda}{2u} q_z^2 - i \frac{\delta\gamma}{u} \right) \right) B(x, q_z) = 0 \quad (4)$$

где функция $B(x, q_z)$ связана с амплитудами дочерних волн как $a, b \propto e^{\gamma t} \int B(x, q_z) \exp(iq_z z) dz$. Решение уравнения (4) находится в виде собственных мод

$$B(x, q_z) = \exp\left(-\exp\left(-i\frac{\pi}{4}\right)\sqrt{\frac{\gamma_0}{2ul_d^3}}x^2\right)\exp\left(-\exp\left(-i\frac{\pi}{4}\right)\sqrt{\frac{\Lambda w^2}{2\gamma_0}}q_z^2\right) \quad (5)$$

Правило квантования для фундаментальной моды позволяет получить выражение для инкремента неустойчивости:

$$\gamma = \gamma_0 - \frac{1}{w} \sqrt{\frac{\gamma_0 \Lambda}{2}} - \frac{1}{\sqrt{2\gamma_0}} \left(\frac{U}{l_d}\right)^{\frac{3}{2}} \quad (6)$$

Условия возбуждения порога неустойчивости в рамках использованных приближений можно получить из уравнения (6) для нулевой левой части уравнения.

4 Численное решение системы уравнений. На Рис. 2 изображено численное решение в виде двумерно локализованного экспоненциально растущего возмущения

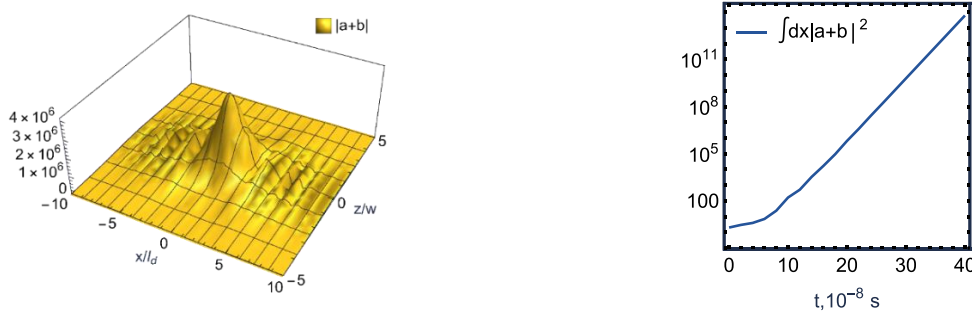


Рис. 2 Численное решение системы (3) при $\frac{l_d}{u} \gamma_0 = 1, \frac{l_d}{u} \frac{\Lambda}{w^2} = 0.125$. а) пространственное распределение модуля суммы амплитуд дочерних волн б) Экспоненциальный временной рост суммарной энергии дочерних волн.

На Рис. 3 представлено сравнение численно полученных порогов при решении изначальной системы (3) и полученных аналитически по формуле (6). Видно, что формула даёт хорошее приближение для оценки порога возбуждения неустойчивости при различных значениях коэффициентов дифракции (Λ), размеров пучка (w) и времён прохождения резонанса ($\frac{l_d}{u}$).

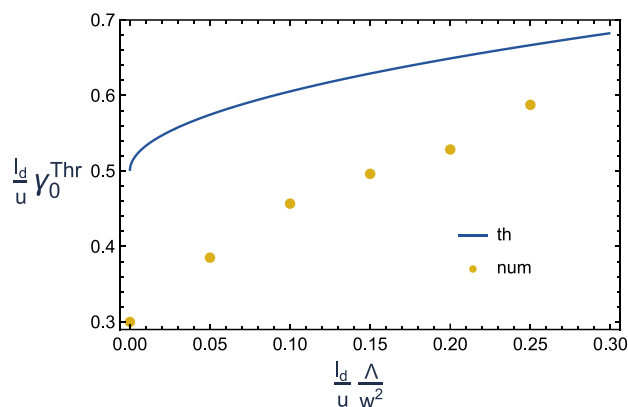


Рис. 3 На графике приведена зависимость значения порогового безразмерного коэффициента нелинейной связи от комбинации параметров $\frac{l_d}{u} \frac{\Lambda}{w^2}$.

Результаты.

– В работе была рассмотрена модель низкороговой абсолютной параметрической распадной неустойчивости (ПРН) СВЧ пучка X2 волн конечного поперечного размера при монотонном профиле плотности (служит обобщением теории Пилия-Розенблюта).

– Аналитически получено выражение для порога и инкремента двухплазменной абсолютной ПРН при учёте конечных размеров СВЧ пучка накачки.

– В результате численного решения системы уравнений в частных производных было показано наличие двумерно локализованных решений, растущих экспоненциально, что подтверждает возможность возбуждения абсолютной ПРН при монотонном профиле.

Благодарности. Результаты исследования неустойчивости получены при поддержке гранта РФФ 22-12-00010, а численные расчеты выполнены при поддержке государственного контракта ФТИ им. А.Ф. Иоффе 0034-2021-0003.

Литература.

1. Reiman, A., *Reviews of modern physics* 51.2 (1979): 311.
2. Cohen, Bruce I., et al., *Reviews of modern physics* 63.4 (1991): 949.
3. S.K. Hansen, S.K. Nielsen, J. Stober, J. Rasmussen, M. Stejner, M. Hoelzl, T. Jensen and the ASDEX Upgrade team, *Nucl. Fusion* **60**, 106008 (2020).
4. Dnestrovskij, Yu N., et al. *Plasma Physics and Controlled Fusion* 63.5 (2021): 055012.
5. J.H. Slief, R.J.R. van Kampen, M.W. Brookman, J. van Dijk, E. Westerhof, M. van Berkel, *Nucl. Fusion* **63**, 026029 (2023)
6. Rosenbluth, Marshall N. "Parametric instabilities in inhomogeneous media." *Physical Review Letters* 29.9 (1972): 565.
7. A.D. Piliya, *JETP Letters* **17**, 266 (1973).

Полноволновое моделирование волн в плазме токамака в промежуточном диапазоне частот с учетом немаквелловской функции распределения электронов

С.А. Нечаев, М.А. Ирзак

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, 194021 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: sergey.nechaev@mail.ioffe.ru

Введение. Для безындукционной генерации дополнительного тока в плазме токамака активно используются высокочастотные (ВЧ) волны промежуточного частотного (ПЧ) диапазона, такие как, например, медленные нижнегибридные (НГ) волны. Также сегодня набирает популярность метод генерации тока с помощью быстрой моды ПЧ диапазона – геликона [1]. Основным механизмом поглощения ВЧ мощности как НГ волн, так и геликонов является затухание Ландау на электронах. Хорошо известно, что взаимодействие волн ПЧ диапазона с электронами по механизму Ландау приводит к квазилинейной диффузии частиц в пространстве скоростей, из-за чего при достаточном уровне ВЧ мощности на функции распределения электронов может образоваться область «плато», характеризующаяся более уплощенным профилем [2]. Такие отклонения функции распределения от равновесной – Максвелловской функции помимо генерации дополнительного ВЧ тока приводят к изменению тензора диэлектрической проницаемости плазмы, который, в свою очередь, определяет условия распространения и поглощения волн в плазме.

Настоящая работа посвящена учету немаквелловской функции распределения электронов по скоростям при полноволновом моделировании распространения и поглощения волн промежуточного частотного диапазона в двумерно-неоднородной плазме токамака с помощью кода WaveTOP2D [3]. Учет немаквелловского распределения проводился для продольной компоненты тензора диэлектрической проницаемости, определяющей затухание Ландау на электронах. В работе с помощью модифицированного полноволнового кода с учетом немаквелловской функции распределения с плато, заданной аналитически, были проведены расчеты волн ПЧ диапазона в плазме токамаков ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН: НГ волны в плазме токамака ФТ-2, а также геликонов в плазме сферического токамака Глобус-М2 [4].

1 Описание численной модели. Полноволновой код WaveTOP2D [3] основан на численном решении волнового уравнения в плазме относительно электрического поля волны \mathbf{E} с частотой ω (зависимость поля от времени t полагается в виде $\mathbf{E} \sim e^{-i\omega t}$):

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} = \frac{\omega^2}{c^2} \left\{ \mathbf{E} + \frac{4\pi i}{\omega} \mathbf{j}^P \right\} \quad (1)$$

где c – скорость света в вакууме, \mathbf{j}^P – ток плазмы, индуцированный волной, который в локально ортогональной системе координат можно представить следующим образом:

$$j_\alpha^P = \frac{-i\omega}{4\pi} (\varepsilon_{\alpha\beta} - \delta_{\alpha\beta}) E_\beta \quad (2)$$

здесь $\varepsilon_{\alpha\beta}$ – тензор диэлектрической проницаемости плазмы, $\delta_{\alpha\beta}$ – символ Кронекера ($\alpha, \beta = 3$ соответствуют направлению постоянного магнитного поля). Электрическое поле, соответствующее одной тороидальной моде с номером n_φ , представляется в виде разложения по полоидальным модам m :

$$\mathbf{E}(\psi, \theta, \varphi) = e^{in_\varphi\varphi} \cdot \sum_m e^{im\theta} \mathbf{E}^m(\psi) \quad (3)$$

где ψ – потоковая координата магнитной поверхности ($\psi = 0$ на магнитной оси, $\psi = 1$ на границе плазмы), θ – полоидальный угол, φ – тороидальный угол. При решении волнового уравнения в коде используется метод конечных элементов.

В работе использовался следующий тензор диэлектрической проницаемости:

$$\varepsilon_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} \varepsilon & ig & 0 \\ -ig & \varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & \eta \end{pmatrix}, \quad \eta = 1 - \frac{\omega_{pe}^2}{\omega^2} \tilde{Z}_{LD}(x) \quad (4)$$

где ω_{pe} – электронная плазменная частота, компоненты ε и g брались в приближении «холодной» плазмы, а в компоненте η учитывалось затухание по механизму Ландау на электронах и произвольное распределение электронов по продольным относительно полного магнитного поля скоростям v_{\parallel} (распределение в поперечном направлении полагалось Максвелловским с тепловой скоростью v_{Te}) посредством «обобщенной» дисперсионной функции плазмы $\tilde{Z}_{LD}(x)$, вещественная и мнимая части которой определяются соотношениями:

$$Re(\tilde{Z}_{LD}(x)) = 1 + v.p. \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{u^2 \cdot h'_e(u)}{(u-x)} du, \quad Im(\tilde{Z}_{LD}(x)) = i\pi \frac{k_{\parallel}}{|k_{\parallel}|} \cdot x^2 \cdot h'_e(x) \quad (5)$$

здесь $x = \omega/(k_{\parallel}v_{Te})$, $u = v_{\parallel}/v_{Te}$, $k_{\parallel}(n_{\varphi}, m)$ – продольная относительно полного магнитного поля компонента волнового вектора, $h_e(u)$ – функция распределения электронов по скоростям u , $h'_e(u)$ – ее производная по u , а под «*v.p.*» следует понимать главное значение интеграла для особой точки $u = x$ по Коши. Необходимо отметить, что в случае Максвелловского распределения η выражается через известную классическую дисперсионную функцию плазмы $Z(x)$ [5], причем в этом случае вычисление интеграла в смысле главного значения не требуется, и вещественную часть η можно получить численно с помощью известных методов интегрирования и асимптотических формул. В настоящей работе при моделировании немаксвелловская функция распределения электронов $h_e(v_{\parallel})$ с плато задавалась аналитически. Пример аналитической функции распределения с плато приведен на Рис. 1.

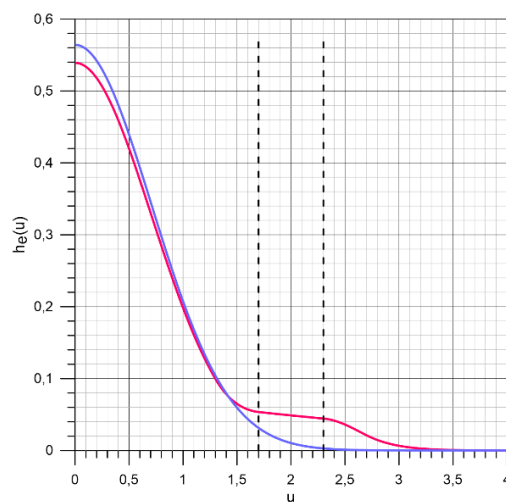


Рис. 1. Функция распределения электронов по скоростям $u = v_{\parallel}/v_{Te}$. Синим изображено распределение Максвелла, красным - немаксвелловское распределение с плато при $1,7 < u < 2,3$.

2 Результаты моделирования. Параметры моделирования НГ волны в плазме токамака ФТ-2:

1. Большой радиус $R_0 = 55$ см, малый радиус $a = 8$ см, водородная плазма.
2. Шафрановский сдвиг на оси 0.5 см, треугольность 0, вытянутость 1.
3. Плотность $n_e = (n_{e0} - n_{e1}) \cdot (1 - \psi^2) + n_{e1}$, $n_{e0} = 3 \cdot 10^{13}$ см⁻³, $n_{e1} = 3 \cdot 10^{10}$ см⁻³.
4. Температура электронов $T_e = (T_{e0} - T_{e1})(1 - \psi^2) + T_{e1}$, $T_{e0} = 1$ кэВ, $T_{e1} = 0,01$ кэВ.
5. Вакуумное тороидальное магнитное поле в центре камеры $B_0 = 22$ кГс, ток плазмы $I_p = 20$ кА, частота волны 920 МГц, номер тороидальной моды $n_\phi = 90$.
6. Положение плато $v_{\parallel} \in [c/N_{\parallel max}, c/N_{\parallel min}]$, $N_{\parallel min} = 4$, $N_{\parallel max} = 12$.

Возбуждение волны проводилось со стороны слабого магнитного поля путем задания на границе ненулевого тороидального электрического поля волны для полоидальных углов $\theta \in [-60^\circ; 60^\circ]$. Наиболее горизонтальное плато задавалось вблизи поверхности с $\psi_0 = 0,67$, а при $\psi < 0,57$ и $\psi > 0,77$ функция распределения практически совпадала с распределением Максвелла. Результаты моделирования НГ волны в токамаке ФТ-2 приведены на Рис. 2.

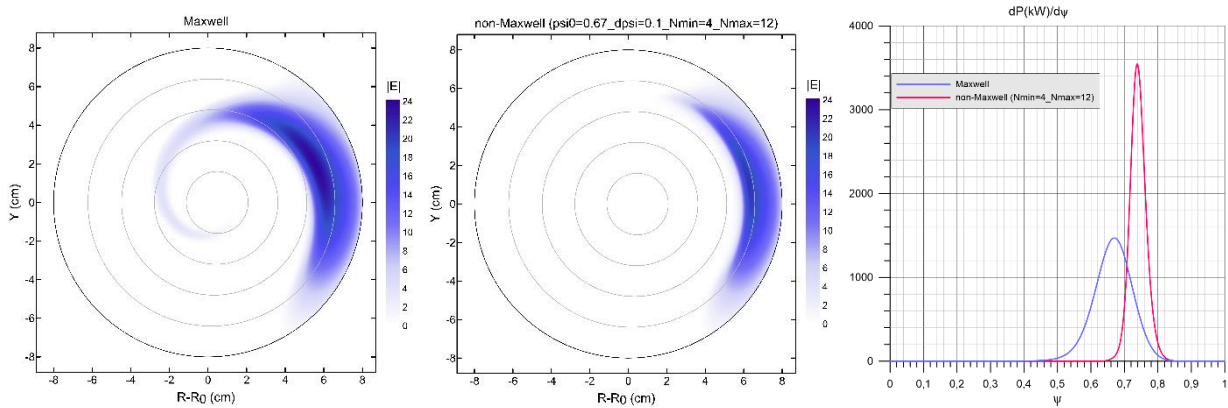


Рис. 2. Слева - распределение модуля электрического поля волны в полоидальном сечении в Максвелловском случае, в середине - то же в немаксвелловском случае, справа – профили радиального энергопоглощения (синяя кривая соответствует Максвелловскому случаю, красная - немаксвелловскому).

Параметры моделирования геликона в плазме токамака Глобус-М2:

1. Большой радиус $R_0 = 36$ см, малый радиус $a = 24$ см, дейтериевая плазма.
2. Шафрановский сдвиг на оси 3 см, треугольность 0,4, вытянутость 1,8.
3. Плотность $n_e = (n_{e0} - n_{e1}) \cdot (1 - \psi^4) + n_{e1}$, $n_{e0} = 6 \cdot 10^{13}$ см⁻³, $n_{e1} = 1 \cdot 10^{13}$ см⁻³.
4. Температура электронов $T_e = (T_{e0} - T_{e1})(1 - \psi^4) + T_{e1}$, $T_{e0} = 2$ кэВ, $T_{e1} = 0,01$ кэВ.
5. Вакуумное тороидальное магнитное поле в центре камеры $B_0 = 8$ кГс, ток плазмы $I_p = 250$ кА, частота волны 200 МГц, номер тороидальной моды $n_\phi = 14$.
6. Положение плато $v_{\parallel} \in [c/N_{\parallel max}, c/N_{\parallel min}]$, $N_{\parallel min} = 4$, $N_{\parallel max} = 8 - 16$.

Возбуждение геликонов осуществлялось со стороны слабого магнитного поля заданием ненулевой полоидальной компоненты электрического поля на границе плазмы при $\theta \in [-15^\circ; 15^\circ]$. «Наклон» функции распределения в плато выбран постоянным (примерно горизонтальное плато для всех значений ψ и θ). Левая граница плато, соответствующая меньшим продольным скоростям, варьировалась. Результаты моделирования геликонов приведены на Рис. 3.

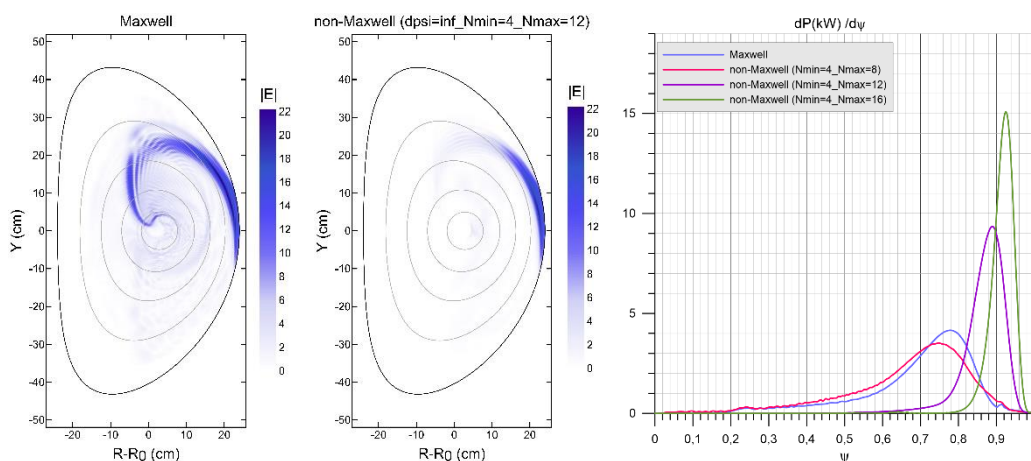


Рис. 3. Слева изображен модуль полного электрического поля волны в Максвелловском случае, в середине - то же в немаксвелловском случае с $N_{||max} = 12$, справа - профили радиального энергопоглощения (синим изображен Максвелловский случай, красным - немаксвелловский с $N_{||max} = 8$, фиолетовым - с $N_{||max} = 12$ и зеленым - с $N_{||max} = 16$).

Заключение. Выполнена модификация полноволнового кода WaveTOP2D с целью учета немаксвелловской функции распределения электронов с плато по $v_{||}$. Расчеты, проведенные с помощью новой версии кода, продемонстрировали важность учета плато и его параметров при моделировании. Для НГ волны в токамаке ФТ-2 присутствие плато приводило к заметному смещению поглощения ближе к периферии и более пикированному профилю радиального энергопоглощения. Подобное смещение согласуется с результатами расчетов НГ волн в токамаке Alcator C-Mod [6]. Аналогичное поведение поглощения наблюдалось в случае геликонов в токамаке Глобус-М2. Величина смещения к периферии и амплитуда пика радиального энергопоглощения увеличивались с уменьшением нижней границы плато ($v_{||min} = c/N_{||max}$), что связано с ростом уровня плато и появлением достаточного количества резонансных электронов в относительно холодной периферийной плазме.

Благодарности. Численная модель разработана при поддержке государственного контракта ФТИ им. А.Ф. Иоффе 0034-2021-0002, а численные расчеты выполнены при поддержке государственного контракта ФТИ им. А.Ф. Иоффе 0034-2021-0003.

Литература.

1. Вдовин В.Л. Генерация тока геликонами и НГ-волнами в современных токамаках и реакторах ИТЭР и ДЕМО. Сценарии, моделирование и антенны //Физика плазмы. – 2013. – Т. 39. – №. 2. – С. 115-115.
2. Fisch N.J. Theory of current drive in plasmas //Reviews of Modern Physics. – 1987. – Т. 59. – №. 1. – С. 175.
3. Gusakov E.Z., Dyachenko V.V., Irzak M.A., Khitrov S.A., Saveliev A.N. and Shcherbinin O.N. Lower hybrid wave excitation and propagation in the spherical tokamak Globus-M //Plasma Physics and Controlled Fusion. – 2010. – Т. 52. – №. 7. – С. 075018.
4. Minaev V.B. and Globus-M2 team. Spherical tokamak Globus-M2: design, integration, construction //Nuclear Fusion. – 2017. – Т. 57. – №. 6. – С. 066047.
5. Fried B.D., Conte S.D. The Plasma Dispersion Function //Academic Press. – 1961.
6. Valeo E.J., Phillips C.K., Bonoli P.T., Wright J.C., Brambilla M. and RF SciDAC Team. Full-wave Simulations of LH wave propagation in toroidal plasma with non-Maxwellian electron distributions //AIP Conference Proceedings. – American Institute of Physics, 2007. – Т. 933. – №. 1. – С. 297-300.

Влияние температуры поверхности катода на параметры слоя катодного падения потенциала тлеющего разряда атмосферного давления на постоянном токе в гелии

А.В. Казак, А.А. Кириллов, П.А. Иванова, Л.В. Симончик, Н.В. Томкович

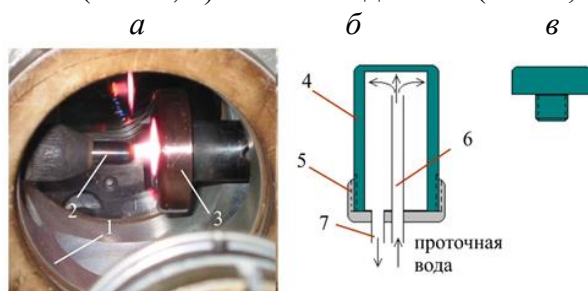
Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси, 220072 Минск, Беларусь

E-mail: m.tomkavich@ifanbel.bas-net.by

Введение. В последнее время наблюдается устойчивая тенденция перехода к тлеющим разрядам атмосферного давления (ТРАД) поскольку при их использовании не требуется дорогостоящая вакуумная техника, а также повышение давления позволяет увеличивать вкладываемую в плазму энергию, что важно для ряда приложений. Главным структурным образованием тлеющего разряда является катодный слой, основной функцией которого является генерация заряженных частиц.

1 Экспериментальная установка. Тлеющий разряд атмосферного давления (ТРАД) зажигался в герметичной охлаждаемой камере **1** (Рис. 1,а). В дюралюминиевом корпусе камеры **1** с противоположных граней расположены окна из кварцевого стекла.

Анод **2** изготовлен из закругленного вольфрамового стержня (диаметр 0,6 см, радиус закругления 0,3 см). Медный катод **3** имеет форму диска диаметром 3 см и был двух разновидностей: охлаждаемый (Рис. 1, б) и неохлаждаемый (Рис. 1,в).



1 – дюралюминиевый корпус; 2 – анод; 3 – катод; 4 – медный стакан; 5 – латунная крышка; 6, 7 – трубки водоохлаждения

Рис. 1. Разрядная камера (а) и конструкции охлаждаемого (б) и неохлаждаемого (в) катодов.

2 Результаты и обсуждение. Основные параметры ТРАД в гелии по данным работ [1-3] представлены в Табл. 1. Следует отметить, что увеличение межэлектродного напряжения примерно на 80 В в ТРАД с охлаждаемым катодом при разрядном токе 1 А по сравнению с неохлаждаемым связано с изменениями в области катодного падения потенциала.

Таблица 1. Основные параметры ТРАД в гелии.

Параметры разряда	Катод	охлаждаемый	неохлаждаемый
Ток разряда		1 А	1 А
Межэлектродный промежуток		10 мм	10 мм
Напряжение на электродах		220 В	300 В
Средняя плотность тока на катоде		2.3 А/см ²	~0.4 А/см ²
Средняя плотность тока в середине положительного столба		~20 А/см ²	~20 А/см ²
Температура газа в отрицательном свечении		600 К	1000 К
Средняя температура газа в середине положительно столба		~2300 К	~2300 К
Температура катода		~400 К	~800 К

Температура газа определялась по разрешенной вращательной полосе ($B^2\Sigma_u^+ - X^2\Sigma_g^+$) ионов азота N_2^+ [1].

2.1 *Продольные распределения температуры газа на оси разрядов.* В случае охлаждаемого катода диаметр отрицательного свечения составляет около 9 мм. Распределения температуры получены на расстоянии половины радиуса отрицательного свечения и на краю отрицательного свечения (2,5 мм и 4,5 мм от оси) (Рис. 2, а). Если катод не охлаждается, диаметр отрицательного свечения составляет ~18 мм. Продольные распределения определяли на расстояниях от оси 4,5 мм и 9 мм (Рис. 2, б). Иная ситуация в случае диффузного разряда (Рис. 2, в). Отрицательное свечение занимает всю поверхность катода, диаметр которого составляет 36 мм. Продольные распределения температуры определялись на расстояниях 8 мм и 16 мм от оси.

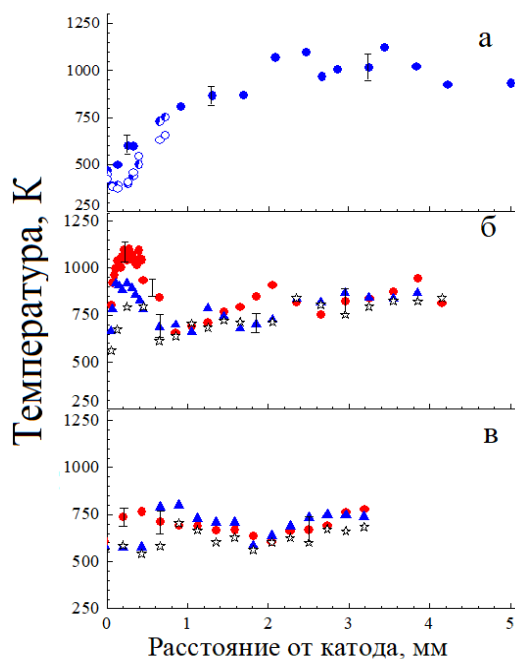


Рис. 2. Продольные профили температуры в контрагированном ТРАД с охлаждаемым (а) и неохлаждаемым катодами (б) и в диффузном режиме (в). Кружочки – осевые профили температуры, треугольники – профилям на расстоянии половины соответствующего радиуса отрицательного свечения, звездочки – краю отрицательного свечения.

Таким образом, температура газа практически не меняется вдоль поверхности катода для каждого из рассмотренных случаев (Рис. 2).

2.2 *Плотность тока на катоде.* Средняя плотность тока на катоде в контрагированном гелиевом ТРАД при токе 1 А составляет около $0,4 \text{ A/cm}^2$ для неохлаждаемого и $2,3 \text{ A/cm}^2$ для охлаждаемого катода. В диффузном ТРАД с неохлаждаемым катодом плотность тока менее $0,3 \text{ A/cm}^2$ (см. Табл. 1).

В результате перемасштабирования получим плотность тока около $4 \times 10^{-6} \text{ A/cm}^2$ в классических условиях тлеющего разряда. Приведение толщины области катодного падения $\sim 0,01 \text{ см}$ к классическим условиям разряда дает значение около 2,5 см.

Таким образом, полученные значения менее чем в два раза отличаются от плотности тока $2,2 \times 10^{-6} \text{ A/cm}^2$ и толщины катодного падения 1,3 см, соответствующих классическому тлеющему разряду с железным катодом [4]. Следовательно, параметры прикатодной области в диффузном ТРАД более или менее удовлетворяют законам скейлинга. В случае контрагированного ТРАД аналогичная ситуация наблюдается на периферии области катодного падения потенциала и рассогласование в ее центре из-за увеличения напряжения катодного падения.

2.3 *Влияние температуры катода на катодную область.* Как показано в [5], даже при малых токах разряда (порядка нескольких миллиампер) существует тепловой поток от положительного столба в прикатодную область. Было установлено, что в контрагированном гелиевом ТРАД с неохлаждаемым катодом нагрев газа в центральной части прикатодной области происходит за счет тепловыделения как из прикатодной области, так и из положительного столба, что приводит к дополнительному нагреву катода.

Нагрев газа на краю катодного слоя происходит за счет тепловыделения в этой области и дополнительного теплового потока от катода, температура поверхности которого будет сравнима с температурой поверхности в центре из-за высокой теплопроводности меди. Нагрев газа от катода можно рассматривать как внешний дополнительный источник тепла. В случае охлаждаемого катода, поскольку эффективное охлаждение обеспечивает отвод тепла, разница не имеет значения и плотность тока составляет около $2,3 \text{ А/см}^2$ по всей поверхности катода.

В [3] установлено, что нагрев катода внешним источником тепла в тлеющем разряде в нормальном режиме приводит к снижению напряжения на 20–30 В при токе 50 мА.

2.4 *Напряженность электрического поля в слое катодного падения потенциала.* Рассмотрим случаи контрагированного разряда с охлаждаемым и неохлаждаемым катодом и диффузного разряда с неохлаждаемым катодом. Изображения профилей линий HeI 492,2 нм, которые использовались для определения напряжённости электрического поля, над поверхностью катода (на расстоянии около 20 мкм) для трех разрядов, показаны на Рис. 3. Вертикальное направление указывает расстояние вдоль поверхности катода.

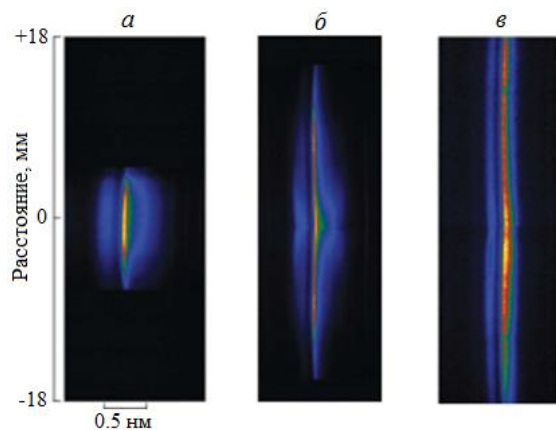


Рис. 3. Изображения профилей линий He I 492,2 нм вблизи поверхности катода: контрагированный разряд с охлаждаемым катодом (а), контрагированный (б) и диффузный (в) разряды с неохлаждаемым катодом.

В случае контрагированного разряда с охлаждаемым катодом (Рис. 3,а) полосы запрещенных и разрешенных линий практически параллельны вплоть до края области катодного падения потенциала. Это указывает на постоянное значение напряженности электрического поля вдоль поверхности катода, что было продемонстрировано в [2]. В случае контрагированного разряда с неохлаждаемым катодом (Рис. 3,б) запрещенные и разрешенные компоненты наиболее разделены на оси разряда. К краю области катодного падения они сближаются, что свидетельствует об уменьшении напряженности электрического поля. В диффузном разряде (Рис. 3,в) зоны, запрещенной и разрешенной компонент параллельны вдоль всей поверхности катода. Величина электрического поля несколько меньше, чем в контрагированном разряде.

Согласно [1, 3] напряженность электрического поля в области катодного падения потенциала в случае разряда с охлаждаемым катодом постоянна в радиальном направлении и линейно спадает в осевом направлении от 60 кВ/см на поверхности катода до нуля на

расстоянии 70 мкм от катода, что определяет толщину области катодного падения. При этом напряжение в этой области составляет около 210 В, что несколько больше классического значения 177 В для пары медь–гелий.

В случае неохлаждаемого катода напряженность электрического поля на оси линейно падает в осевом направлении также от 60 кВ/см у поверхности катода, но становится близкой к нулю на расстоянии 100 мкм от катода. Таким образом, толщина слоя катодного падения увеличивается примерно в 1,5 раза. На периферии катодного слоя напряженность электрического поля линейно падает от 20 кВ/см у поверхности катода и становится близкой к нулю на расстоянии около 100 мкм от катода. Величина падения напряжения составляет около 100 В на периферии катода и около 300 В на оси разряда. Согласно [6], в разряде с контрагированным положительным столбом (промежуток более 1 мм) тепловой поток из положительного столба в катодную область имеет место даже при токах разряда в несколько миллиампер. Этот дополнительный тепловой поток приводит к увеличению как температуры газа в области катодного падения, не связанной с напряжением катодного падения, так и толщины слоя катодного падения. В конечном итоге это приводит к увеличению межэлектродного напряжения. На периферии слоя катодного падения тепловой поток, направленный к катоду, незначителен, а температура поверхности катода остается примерно равной температуре на оси катода из-за высокой теплопроводности меди. В случае диффузного разряда, то напряженность электрического поля на катоде составляет около 20 кВ/см и одинакова по всей поверхности катода. Толщина катодного слоя составляет около 120 мкм.

Заключение. В ходе исследования показано, что тепловой поток от контрагированного положительного столба к катоду приводит к неравномерному распределению электрического поля на поверхности катода, а именно, напряженность электрического поля больше в центре и в 3 раза меньше на периферии слоя катодного падения потенциала. Это отличается от случая с охлаждаемым катодом, где напряженность электрического поля постоянна вдоль поверхности катода. При дополнительном нагреве катода внешним источником тепла межэлектродное напряжение имеет тенденцию к снижению. Параметры во всей катодной области в диффузном ТРАД и на периферии катодного падения потенциала с контрагированным положительным столбом более или менее подчиняются законам подобия. Однако эти параметры отклоняются от законов масштабирования в центре катодной области разряда с контрагированным положительным столбом из-за увеличения напряжения катодного падения потенциала.

Литература.

1. V.I. Arkhipenko [et al] / Self-sustained dc atmospheric pressure normal glow discharge in helium: from microamps to amps // *Plasma Sources Sci. Technol.*, 2009, – Vol. 18. – N. 4. – 045013, 17 pp.
2. V.I. Arkhipenko [et al] / Influence of cathode temperature on the parameters of an atmospheric pressure dc glow discharge // *Plasma Sources Sci. Technol.*, 2008, – Vol. 17. – N. 4. – 045017, 10 pp.
3. V. I. Arkhipenko, L. V. Simonchik / Effect of cathode heating and positive column contraction on the spatial distributions of parameters in cathode region // 32nd ICPIG, July, 2015, 26-31, Iasi, Romania.
4. V.I. Arkhipenko [et al] / Cathode Fall Parameters of a Self-Sustained Normal Glow Discharge in Atmospheric-Pressure Helium // *Plasma Phys. Rep.*, 2002, – Vol. 28. – N. 10. – P. 858–865.
5. D. Staack [et al.] / DC normal glow discharges in atmospheric pressure atomic and molecular gases // *Plasma Sources Sci. Technol.* – 2008. – Vol. 17. – 025013, 13 pp.
6. V.I. Arkhipenko [et al] / DC atmospheric pressure glow microdischarges in the current range from microamps up to amperes // *Eur. Phys. J. D.* – 2010. – Vol. 60, N. 3. – P. 455–463.

Баротропная неустойчивость зонального потока

М.М. Хартон

Белорусский Государственный Университет Физический Факультет, 220030 Минск,
Республика Беларусь
E-mail: makarkharton@gmail.com

Проведено численное моделирование баротропной неустойчивости зонального потока. Для этого написана программа на языке C++ с использованием библиотеки *qcustomplot* для визуализации. Баротропная неустойчивость – важный механизм, оказывающий влияние на формирование погодных явлений. Получены характерные масштабы явления, необходимые условия зарождения и развития в зональном потоке.

Под устойчивостью можно понимать способность потока подавлять возникающие в нем незначительные возмущения. Свободные возмущения, которые способны расти в данном воздушном потоке, черпая энергию из имеющихся в нем запасов, называются неустойчивыми.

Критерием неустойчивости потока можно взять теорему Рэлея, которая показывает необходимые условия возникновения неустойчивости в потоке невязкой жидкости или газа. Так необходимым условием неустойчивости будет, равенство нулю второй производной скорости по координате ортогональной к скорости.

$$u'' = 0 \quad (1)$$

Иначе говоря, неустойчивыми будут невязкие потоки с точкой перегиба профиля скорости, а устойчивыми – потоки без точки перегиба [1]. Так, например, устойчиво течение с профилем Пуазейля, а неустойчиво струйное течение. Однако при течении реальной жидкости есть вязкость, которая дестабилизирует. Так Гейзенберг показал, что течение Пуазейля может быть неустойчиво, им получена нейтральная кривая.

Качественно неустойчивость появляется в потоке при большом поперечном сдвиге скорости. При появлении флуктуации движения элемента объема в точке А перпендикулярно к направлению потока. Через какое-то время элемент приходит в точку В. Постепенно смещаются соседние элементы, которые занимают освобождающиеся места. В результате весь поток оказывается возмущенным. Молекулярная вязкость тормозит движение элементов. Чтобы начальная флуктуация смогла турбулизовать поток, элемент должен успеть дойти до точки В, в которой скорость потока существенно отлична от скорости в точке А [2].

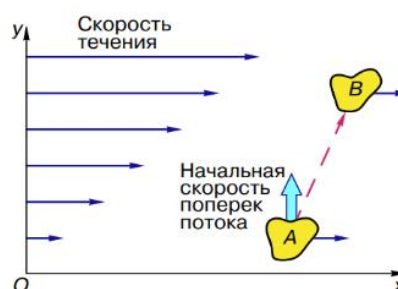


Рис. 1. Возникновение возмущений в потоке жидкости или газа.

Для численного моделирования баротропной неустойчивости воспользуемся приближением Буссинеска, в котором делаются следующие предположения [3].

1. Отклонения температуры и давления от средних значений малы. Что позволяет пользоваться линейным приближением.

$$\left| \frac{\Delta T}{T_0} \right| \ll 1 \quad \left| \frac{\Delta P}{P_0} \right| \ll 1 \quad (2)$$

$$\rho = \rho_0(1 - \beta_T \Delta T + \beta_P \Delta P) \quad (3)$$

2. Изменение плотности с давлением намного меньше, чем с температурой

$$|\beta_P \Delta P| \ll |\beta_T \Delta T| \ll 1 \quad (4)$$

$$\rho = \rho_0(1 - \beta_T \Delta T) \quad (5)$$

3. Вклад вязкой диссипации энергии и вариаций давления в энергетический баланс пренебрежимо мал.

4. Вариации температуры и давления с течением времени очень малы.

Используя это приближение и геострофичность ветра, для скорости из уравнения неразрывности получаем.

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (6)$$

Уравнение движения жидкости сильно упрощается.

$$\frac{du_i}{dt} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} \delta_{ij} + \nu (\nabla^2 u_i) \quad (7)$$

Дифференцируем уравнения движения, в 2D случае, оказывается удобным перейти к переменным вихрь и функция тока, что сокращает число уравнений и не требует поля давлений. Метод часто применяется к стационарному течению Стокса [4] и двумерным стационарным уравнениям Навье-Стокса. Функцию вихря вводят как компоненту ротора скорости, функцию тока из уравнения непрерывности [5].

Получаем параболическое уравнение переноса вихря, которое нелинейно по скорости.

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} = -u \frac{\partial \xi}{\partial x} - v \frac{\partial \xi}{\partial y} + \nu \left(\frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \xi}{\partial y^2} \right) = -\vec{u} \cdot (\nabla \xi) + \nu \nabla^2 \xi \quad (8)$$

Для функции тока получается эллиптическое уравнение.

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = \xi \text{ или } \nabla^2 \psi = \xi \quad (9)$$

Для параболического уравнения переноса вихря будем использовать одношаговую явную двухслойную противопотоковую схему (FTCS). В такой схеме односторонние разности для конвективных членов всегда берутся против потока, то есть обеспечивается их устойчивость [6]. Данная схема имеет ошибку аппроксимации $\Psi = O(\Delta t, \Delta x, \Delta y)$. Здесь $\alpha_{i,j}, \beta_{i,j}$ – учитывают направление (0 или 1), Re – число Рейнольдса.

$$\begin{aligned} \xi_{i,j}^{n+1} = & \xi_{i,j}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} u_{i,j}^n (1 - \alpha_{i,j}) (\xi_{i,j}^n - \xi_{i-1,j}^n) - \frac{\Delta t}{\Delta x} u_{i,j}^n \alpha_{i,j} (\xi_{i+1,j}^n - \xi_{i,j}^n) - \\ & - \frac{\Delta t}{\Delta y} v_{i,j}^n (1 - \beta_{i,j}) (\xi_{i,j}^n - \xi_{i,j-1}^n) - \frac{\Delta t}{\Delta y} v_{i,j}^n \beta_{i,j} (\xi_{i,j+1}^n - \xi_{i,j}^n) + \\ & + \frac{\Delta t}{Re} \left(\frac{\xi_{i+1,j}^n - 2\xi_{i,j}^n + \xi_{i-1,j}^n}{\Delta x^2} + \frac{\xi_{i,j+1}^n - 2\xi_{i,j}^n + \xi_{i,j-1}^n}{\Delta y^2} \right) \end{aligned} \quad (10)$$

Решение уравнения для функции тока осуществляется итерационно методом Якоби, так как этот метод не вносит схемной асимметрии. Разностная схема имеет ошибку аппроксимации $\Psi = O(\Delta x^2, \Delta y^2)$. Учтено, что функцию вихря на новом временном слое мы вычислили ранее.

$$\psi_{i,j}^{k+1} = \frac{1}{2} \cdot \frac{\Delta x^2 \cdot \Delta y^2}{\Delta x^2 + \Delta y^2} \cdot \left(-\xi_{i,j}^{n+1} + \frac{\psi_{i+1,j}^k + \psi_{i-1,j}^k}{\Delta x^2} + \frac{\psi_{i,j+1}^k + \psi_{i,j-1}^k}{\Delta y^2} \right) \quad (11)$$

$$u = \frac{\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j-1}}{2\Delta y}, v = -\frac{\psi_{i+1,j} - \psi_{i-1,j}}{2\Delta x} \quad (12)$$

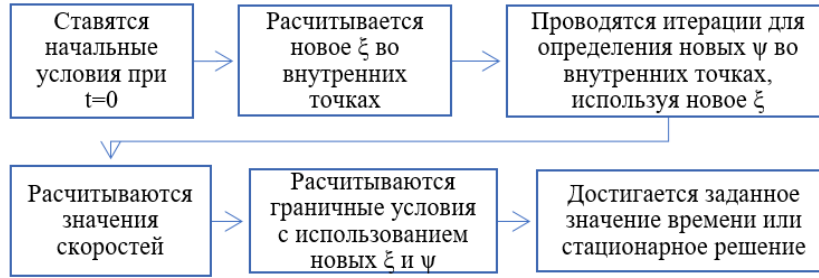


Рис. 2. Схема численного решения уравнения Навье-Стокса.

Размеры расчетной области по вертикали 4 единицы (200 км), по горизонтали 20 единиц (1000 км). Сетка с размером ячейки по ОХ и по ОУ равным 0,05 единицы (~2,5 км), шаг по времени 0,02 единицы (~0,11 часа).

$$L_0 = 50 \text{ км}, U_0 = 2,5 \frac{\text{м}}{\text{с}}, t_0 = \frac{L_0}{U_0} \approx 5,5 \text{ ч}, T = 298 \text{ К}, \nu = 0,903 \cdot 10^{-6} \frac{\text{м}^2}{\text{с}}, Re = 1,38 \cdot 10^{11}$$

Был задан горизонтальный поток, представляющий линейную комбинацию трёх профилей близких к распределению Коши. Центральный профиль имел амплитуду вдвое больше двух противоположенных ему. Такой выбор позволил создать условия большого градиента скорости и наличие точек перегиба, аналогичные струйному течению, которое непрерывно и не меняется мгновенно. Для зарождения вихрей, задано малое гармоническое возмущение [1] 5% от характерной скорости потока. На левой и правой границе заданы периодические граничные условия, а на верхней и нижней, условия не прохождения.

$$L_0 = 50 \text{ км}, U_0 = 2,5 \frac{\text{м}}{\text{с}}, t_0 = \frac{L_0}{U_0} \approx 5,5 \text{ ч}, T = 298 \text{ К}, \nu = 0,903 \cdot 10^{-6} \frac{\text{м}^2}{\text{с}}, Re = 1,38 \cdot 10^{11}$$

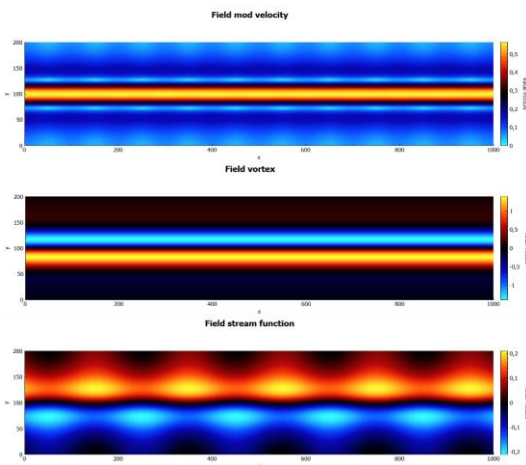


Рис. 3. Решение в момент 0 единиц.

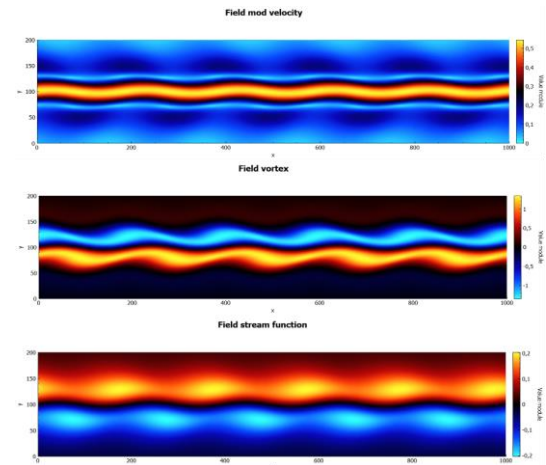


Рис. 4. Решение в момент 5 единиц.

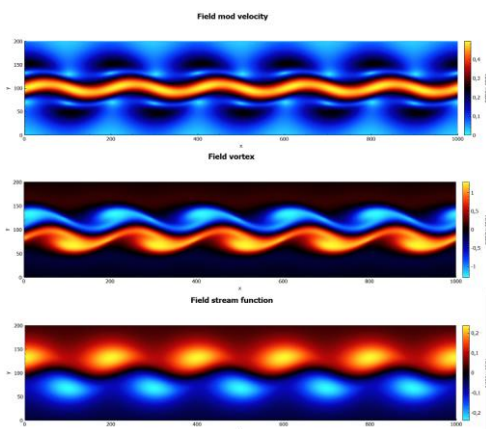


Рис. 5. Решение в момент 10 единиц.

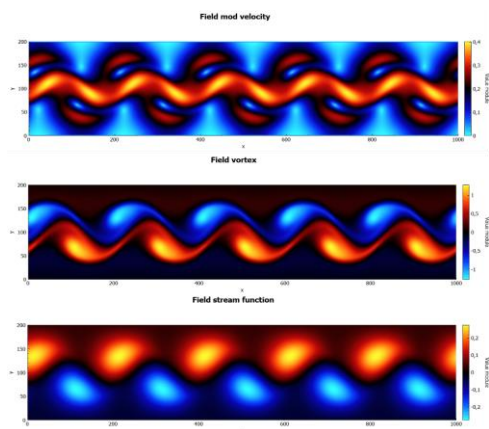


Рис. 6. Решение в момент 15 единиц.

Функция тока аналогична потенциалу скорости, однако потенциал скорости существует только в потенциальном (безвихревом) потоке, а функция тока этим условием не ограничена [5]. Однако использование переменных вихрь-функция тока затрудняет возможность обобщения этого метода на вертикальные пространственные потоки (бароклинная неустойчивость), так как не учитывает полные уравнения движения жидкости.

Рассмотрены основные условия зарождения вихрей. В первую очередь это наличие большого градиента скорости в профиле потока, нарушения в режиме течения (начальные возмущения). Также сильно влияет стремление течения иметь определенный характер ламинарный или турбулентный, что зависит от соотношения сил инерции к силе трения и характеризуется числом Рейнольдса.

Время развития в полноценные вихревые структуры примерно равно 2-3 суток, а масштаб полученных структур 30-80 км, что близко к наблюдаемому в природе [7]. Наибольшая скорость роста возмущений была достигнута при 5-6 периодах возмущений. При иных волновых числах неустойчивость развивалась с меньшей скоростью, либо не наблюдалась.

Благодарности. Автор выражает благодарность за оказание помощи в решении данной задачи *Романову Олегу Геннадьевичу*, кандидату физико-математических наук, доценту, заведующему кафедрой компьютерного моделирования физического факультета, Белорусского Государственного Университета, Минск, Республика Беларусь, romanov@bsu.by

Литература.

1. Шакина Н.П. Лекции по динамической метеорологии. / Шакина Н.П. – Москва: Триада ЛТД, 2013. – 160 с.
2. Г. М. Швед. Циркуляция атмосферы / Г. М. Швед // Соросовский образовательный журнал. – 1997, № 3. – С. 75-81.
3. Пья I. Ryzhkov, Yuri A. Gaponenko. On the Boussinesq Approximation in the Problems of Convection Induced by High-Frequency Vibration / Пья I. Ryzhkov, Yuri A. Gaponenko // Journal of Siberian Federal University. Mathematics & Physics. – 2010. – Т. 3, № 4. – С. 433-449.
4. E. Barragy, G.F. Carey. Stream function-vorticity driven cavity solution using p finite elements / E. Barragy, G.F. Carey // Computers & Fluids. – 1997. – Т. 26, № 5. – С. 453-468.
5. Иванов К.Ф., Сурков С.В. Механика жидкости и газа. Конспект лекций для студентов механических и энергетических специальностей. Часть 1 : 1 / Иванов К.Ф., Сурков С.В. – Одесса: ОГПУ, 1995. – 119 с.
6. Роуч П. Вычислительная гидродинамика / Роуч П. – Москва: Мир, 1980. – 618 с.
7. С. Ю. Ладыченко, В. Б. Лобанов. Синоптические вихри в районе залива Петра Великого по спутниковым данным / С. Ю. Ладыченко, В. Б. Лобанов // Исследование земли из космоса. – 2013, № 4. – С. 3-15.



ФИЗИКА В БИОЛОГИИ И МЕДИЦИНЕ

Перенос энергии в химически связанных бихромофорных комплексах куркумина и металлопорфиринов

В.С. Шершень, А.С. Старухин, Т.А. Павич

*Институт физики имени Б.И. Степанова НАН Беларуси, 220072, Минск, проспект
Независимости 68-2*

E-mail: v.shershan@dragon.bas-net.by

Создание новых типов химически связанных мультихромофорных комплексов, является важным научным направлением в связи с применением указанных систем в различных областях науки, техники и медицины. В частности, порфириновые макроциклы интенсивно применяются в качестве эффективных фотосенсибилизаторов в процессах генерации синлетного кислорода для использования в фотодинамической терапии онкологических заболеваний [1]. Представляется, что соединения, состоящие из порфиринового макроцикла, химически связанного с различными биологически активными природными соединениями, могут иметь широкое применение в биофизике и фотодинамической терапии. Одним из наиболее перспективных соединений представляется бихромофорный комплекс, состоящий из порфиринового макроцикла (высокоэффективного фотосинсебилизатора) и химически связанного с ним куркумина, который обладает широким набором терапевтических применений [2].

В представленной работе были синтезированы следующие соединения: Zn-5,10,15,20-(тетра-4-аминофенил) порфирин (Zn-TAPP) и Zn-5,10,15,20-(тетра-N-куркумин-4-аминофенил) порфирин (Zn-TAPP-(Curc)₄). На Рис. 1 представлены структурные формулы для перечисленных синтезированных соединений.

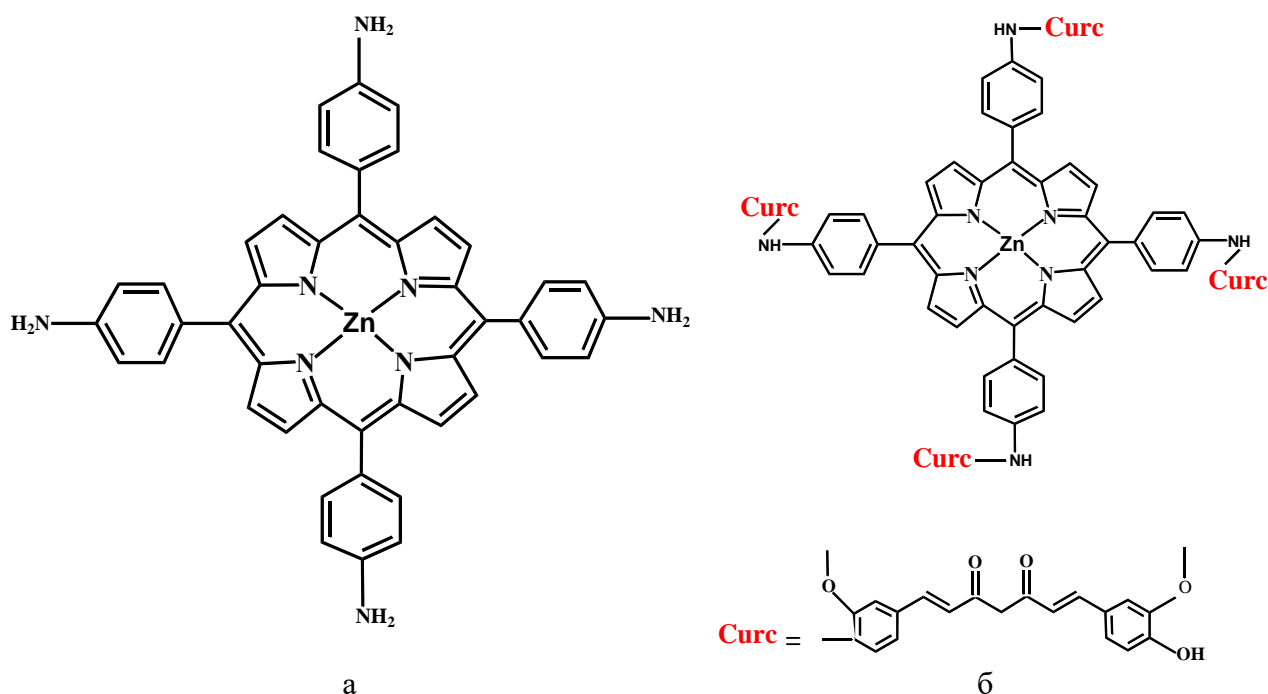


Рис. 1. Структурные формулы исследованных соединений: ZnTAPP (а) и мультихромофора с 4 куркуминами Zn-TAPP-(Curc)₄ (б).

Для синтезированных соединений были зарегистрированы спектры флуоресценции, возбуждения флуоресценции и фосфоресценции при температурах 290 и 77 К. Все спектральные измерения были выполнены на флуоресцентном спектрометре Fluorolog 3.

Спектры флуоресценции, возбуждения флуоресценции и фосфоресценции Zn-TAPP-(Curc)₄ представлены на Рис. 2.

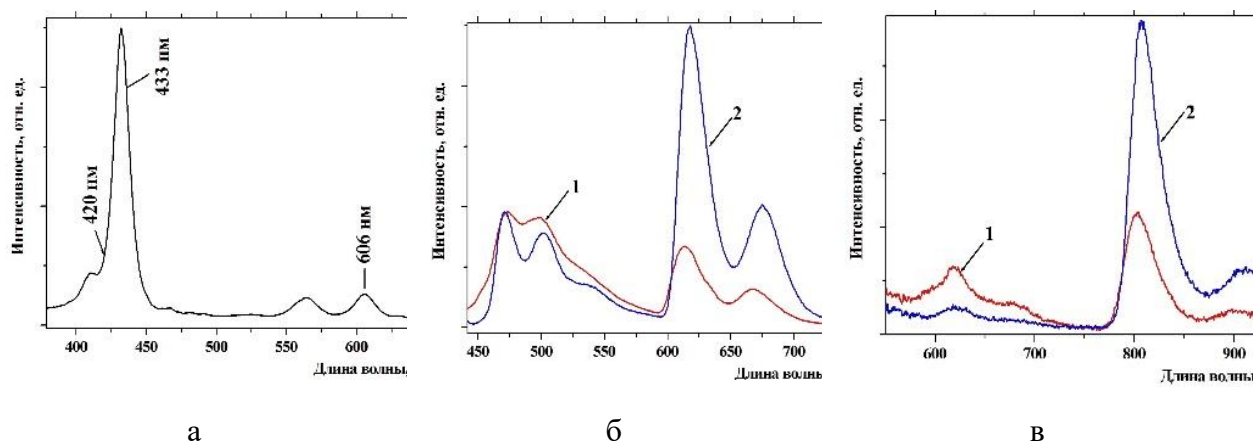


Рис. 2. Спектры возбуждения флуоресценции (а), флуоресценции (б) и фосфоресценции (в) Zn-TAPP-(Curc)₄ в этаноле при 77 К.

При возбуждении Zn-TAPP-(Curc)₄ в область полосы Core ($\lambda_{\text{возб.}}=433$ нм) в спектрах флуоресценции (Рис.2,б) проявляются полосы на 473 и 503 нм, которые относятся к свечению куркумина, а также полосы на 619 и 677 нм, соответствующие свечению Zn-TAPP. Установлено, что батохромный сдвиг полос куркумина в спектре флуоресценции Zn-TAPP-(Curc)₄ составляет около 5 нм, по сравнению с данными для куркумина [3]. В спектрах поглощения Zn-TAPP-(Curc)₄ также наблюдается длинноволновый сдвиг полос поглощения (около 10 нм) для Zn-TAPP. Следует отметить, что полоса поглощения для куркумина расположена на длине волны около 420 нм и перекрывается с интенсивной полосой Core Zn-TAPP с максимумом около 433 нм (см. Рис. 2,а). На Рис.2,б и 2,в показано, что при возбуждении Zn-TAPP-(Curc)₄ на длине волны около 433 нм (кривая 2) в основном проявляется свечение Zn-TAPP. При возбуждении Zn-TAPP-(Curc)₄ излучением около 420 нм уже более интенсивным является свечение молекул куркумина (Рис. 2,б, и 2,в, кривая 1).

Сопоставление фотофизических данных для Zn-TAPP и Zn-TAPP-(Curc)₄ позволяет установить наличие индуктивно-резонансного переноса энергии с куркуминового фрагмента на порфириновый макроцикл (Рис. 2,б и 2,в) при фотовозбуждении бихромофора в области полосы поглощения куркумина. Выполненные измерения квантовых выходов флуоресценции позволяют оценить эффективность указанного переноса энергии не выше, чем в 25%. Наличие процесса переноса энергии в совокупности с фотостабильностью исследуемых комплексов предполагает перспективность дальнейшего исследования данных веществ как кандидатов для создания эффективных фотосенсибилизаторов с широкополосным спектром возбуждения.

Настоящая работа выполнена при финансовой поддержке гранта БРФФИ Ф23МЭ-032 и частичной поддержке ГПНИ «Конвергенция 2025», задание 3.03.10 и ГПНИ «Фотоника и электроника для инноваций», задание 1.8.

Литература.

1. Krasnovsky A., jr. // Biofizika USSR 1976. V. 21. P.748.
2. K. I. Priyadarsini. Journal of Photochem. and Photobiol. C: Photochem. Rev. 2009. V. 10, P.81.
3. Starukhin, A., Gorski A. et al. // Web of Conferences. 2018. V. 190 - Art. No 04023

Роль скорости высвобождения порфириновых фотосенсибилизаторов в определении эффективности их наноразмерных фармакологических форм

И.В. Коблов^a, В. Каскех^b, И.Е. Кравченко^a, Т.Е. Зорина^a, В.П. Зорин^{a,b}

^a Белорусский государственный университет, 220030 Минск, Беларусь

^b МГЭИ им. А. Д. Сахарова БГУ, 220070 Минск, Беларусь

E-mail: iv.kablov@gmail.com

Введение. Фотодинамическая терапия (ФДТ) – это неинвазивная клинически одобренная терапевтическая процедура лечения онкологических и некоторых других заболеваний, основанная на совместном использовании чувствительных к воздействию света веществ – фотосенсибилизаторов (ФС) – и лазерного излучения определённой длины волны. Эффективность ФДТ в значительной степени определяется процессами распределения и локализации ФС в организме. Неполярные тетрапиррольные ФС обычно демонстрируют более высокую таргетность по отношению к тканям-мишеням [1], однако их применение в клинической практике связано с необходимостью решения проблемы внутривенного введения.

Использование фармакологических форм на основе различных типов наноразмерных материалов является наиболее перспективным методическим подходом, позволяющим повысить терапевтическую эффективность неполярных препаратов посредством увеличения биодоступности и улучшения растворимости, а также за счёт возможности контролируемого изменения характеристик биораспределения в организме, включая процессы накопления и выведения в клетках- и тканях-мишенях [1]. Одним из важнейших параметров, позволяющих оценивать результативность использования фармакологических форм *in vivo*, является профиль высвобождения лекарственного препарата из состава наноносителя. В настоящее время роль характеристик кинетики выхода препарата из состава наноносителей изучена недостаточно из-за существующих ограничений анализа массопереноса в сложных биологических системах.

В данной работе проведено сравнение скоростей высвобождения тетрапиррольных ФС из различных типов наноносителей (липидных и полимерных везикул, мономерных и полимерных форм циклодекстринов (ЦД), стимул-зависимых полимеров). Для этих целей использовались ранее разработанные в нашей лаборатории флуоресцентные методы регистрации кинетики выхода препаратов из наноносителей.

1 Материалы. В работе использовались тетрапиррольные ФС: мезо-тетра(гидроксифенил)хлорин (мТГФХ) и мезо-тетра(гидроксифенил)порфин (мТГФП), производства Biolitec Research (Германия), хлорин е₆ (Хл е₆), производства Frontier Scientific (США), диметиловый эфир Хл е₆ (ДМЭ), производства Белмедпрепараты (Беларусь).

Исследовали скорость выхода ФС из состава комплексов с рядом наноносителей, включая: метил-β-циклодекстрин (М-β-ЦД), полимерный карбоксиметил-β-циклодекстрин (КМ-β-ЦДПР) и полимерный β-циклодекстрин (β-ЦДПР), производства CycloLab (Венгрия); липосомальных везикул из димиристоилфосфатидилхолина (ДМФХ), производства Sigma Aldrich (США); термозависимого сополимера декстрана-поли-N-изопропилакриламида (Д-ПНА); амфифильных блочных сополимеров метокси-поли(этиленгликоль)-поли(D,L-лактид) (ППЛ) и метокси-поли(этиленгликоль)-b-поли(ε-капролактон) (ППК).

Липосомы из ДМФХ готовили на ручном экструдере Avanti Mini-Extruder, используя мембранные фильтры «Nuclepore» (Whatman, Великобритания) с порами 100 нм. Соплимер Д-ПНА был синтезирован в Киевском национальном университете им. Т. Шевченко. Процедура синтеза и свойства Д-ПНА описаны в работе [2]. Соплимеры ППЛ и ППК были получены в Институте технологий и научных исследований Бирла (Индия) и описаны в работе [3].

2 Методы. Скорость выхода ФС из состава носителей оценивали по результатам анализа кинетики перераспределения ФС между комплексами и реперными акцепторными структурами (белки сыворотки крови (БСК), липидные везикулы). Для этого использовали методы, основанные на анализе особенностей флуоресцентных свойств ФС в составе различных наноструктур.

2.1 Двухволновой метод. Установлены различия в спектрах возбуждения и испускания флуоресценции ФС в составе различных наноструктур. Эти отличия могут быть использованы для определения природы центров связывания и, соответственно, для регистрации процессов перераспределения молекул ФС между различными наноразмерными структурами. В качестве характеристического показателя k для контроля типа центров связывания молекул ФС можно использовать отношение интенсивностей флуоресценции, полученных при возбуждении на краях полосы Core. Например, при исследовании кинетики перераспределения мТГФХ между М- β -ЦД и БСК значение k (возбуждение флуоресценции длинами волн $\lambda_1 = 400$ нм и $\lambda_2 = 430$ нм) изменяется от $k = 0,65$ (мТГФХ в комплексах включения с М- β -ЦД) до $k = 1,07$ (мТГФХ, связанный с БСК). Регистрация изменений величины k позволяет контролировать в масштабе реального времени процесс миграции ФС между наноразмерными структурами: зная квантовый выход флуоресценции и коэффициенты экстинкции для ФС, находящегося в составе этих структур, можно пересчитать кривую изменения величины параметра k в кривую перераспределения молекул ФС. В случае значительных отличий поляризационных характеристик флуоресценции ФС в исследуемых и реперных комплексах оценка скорости его диссоциации из состава наноносителей может быть проведена на основании анализа изменений степени поляризации флуоресценции.

2.2 Флуоресцентные измерения. Регистрация спектрально-флуоресцентных характеристик ФС производилась на спектрофлуориметре Solar CM-2203 (Минск, Беларусь). В комплектацию прибора входят универсальный термостатируемый кюветный держатель, магнитная мешалка и съёмные поляризационные устройства. Ошибка измерения величины параметра k и значений степени поляризации флуоресценции для всех исследуемых образцов не превышала 5 %.

3 Результаты и обсуждение.

3.1 Оценка скорости высвобождения мТГФХ из комплексов с производными ЦД. Скорости выхода мТГФХ из комплексов с мономерным и полимерными ЦД определяли двухволновым флуоресцентным методом. Для этого к раствору комплексов включения мТГФХ/ЦД добавляли липосомы или БСК и следили за изменениями спектральных характеристик ФС. На основании измерений величины параметра $k = I_{400}/I_{430}$ определяли изменение доли молекул ФС, связанных с мономерным циклодекстрином. Как видно из Рис. 1, инкубирование комплексов мТГФХ/М- β -ЦД в присутствии липидных везикул, в растворах БСК и КМ- β -ЦДПР приводит к быстрому, в течении нескольких минут, перераспределению ФС из состава комплексов включения. При этом скорость выхода молекул мТГФХ из комплексов включения слабо зависит от типа и концентрации реперных структур. Аналогичные исследования комплексов мТГФХ с полимерными ЦД (КМ- β -ЦДПР и β -ЦДПР) в присутствии липидных везикул показывают медленное, на протяжении десятков минут, перераспределение, что свидетельствует о низкой скорости диссоциации ФС из полимерных ЦД. Аналогичные результаты анализа скорости выхода мТГФХ были получены с использованием методического подхода, основанного на изменении степени поляризации флуоресценции.

Таким образом, полученные данные свидетельствуют о том, что скорость диссоциации молекул мТГФХ из комплексов с полимерными ЦД существенно ниже по сравнению с мономерным М- β -ЦД.

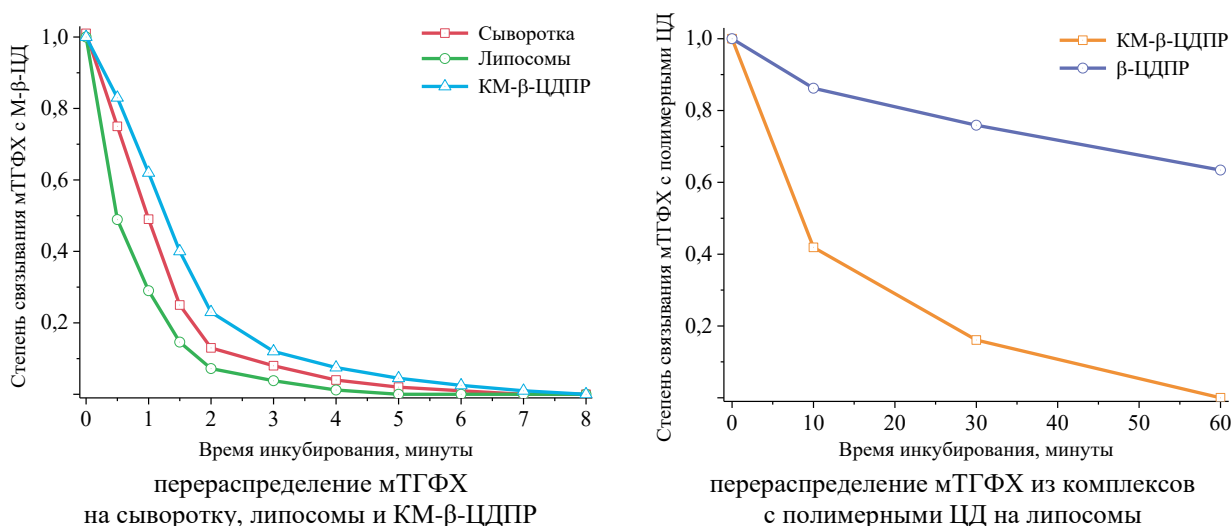
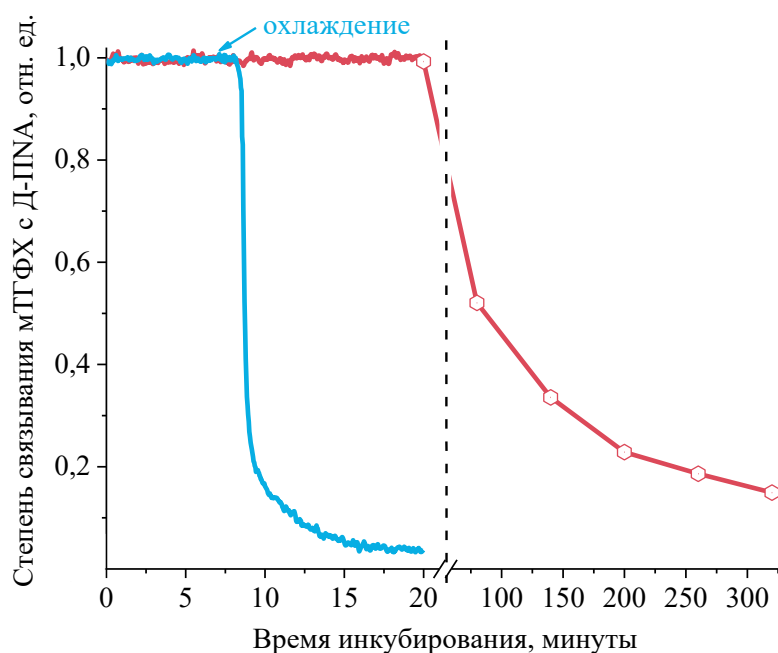


Рис. 1. Исследование кинетики перераспределения мТГФХ из комплексов с ЦД на липидные везикулы и белки сыворотки крови.

3.2 Оценка скорости высвобождения мТГФХ из состава липидных везикул. Скорость диссоциации мТГФХ из липидных везикул оценивали на основании зависимости относительного выхода флуоресценции ФС от его локальной концентрации в составе наноструктур. При малых степенях нагрузки липосом молекулами мТГФХ (ДМФХ:ФС > 1000:1) спектральные характеристики ФС имеют значения близкие к характеристикам мономерного ФС. По мере увеличения содержания ФС в составе наноносителя наблюдается снижение относительного выхода флуоресценции вследствие эффектов концентрационного тушения [4]. Степень проявления тушения зависит от локальной концентрации ФС в липосомах и снижается в случае его перераспределения на другие структуры. При смешивании сильно нагруженных мТГФХ липосом (ДМФХ:ФС = 20:1) с избытком неокрашенных липидных везикул молекулы ФС перераспределяются, причём скорость этого процесса определяет скорость увеличения интенсивности флуоресценции. Согласно полученным результатам, диссоциация мТГФХ из липидных везикул осуществляется крайне медленно. При температуре 40 °С за 4 часа из состава липидного бислоя перераспределяется не более 20 % молекул ФС. При изменении фазового состояния везикул (при температурах ниже 24 °С) скорость выхода ФС из состава липидного наноносителя снижается в несколько раз. На основании полученных результатов можно заключить, что скорость диссоциации ФС из состава липидных везикул сопоставима со скоростью их разрушения в процессе циркуляции.

3.3 Оценка скорости высвобождения хлоринов из полимерных мицелл. Кинетики выхода Хл е₆ и ДМЭ из состава мицелл ППЛ и ППК в присутствии БСК анализировали по изменению формы спектра возбуждения флуоресценции ФС. Показано, что Хл е₆ и ДМЭ очень быстро перераспределяются из мицелл ППЛ на БСК. Встроенные в мицеллы ППК Хл е₆ и ДМЭ в течение суток не перераспределяются на БСК.

3.4 Оценка скорости высвобождения мТГФХ из термозависимого сополимера. Скорость перераспределения мТГФХ и мТГФП из термозависимого полимера Д-ПНА на БСК оценивали двухволновым и поляризационным методами (Рис. 2). Показано, что перераспределение ФС из состава комплексов с Д-ПНА при температуре 40 °С осуществляется очень медленно. Изменение фазового состояния полимера при охлаждении образца до температуры 20 °С приводит к тому, что молекулы мТГФХ и мТГФП быстро выходят из полимерной матрицы и связываются с БСК.



Перераспределение мТГФХ из комплексов с Д-ПНА на транспортные белки сыворотки:
красная кривая – при температуре образца 40 °С,
синяя кривая – при охлаждении образца с 40 °С до 20 °С

Рис. 2. Исследование кинетики перераспределения мТГФХ из комплексов с сополимером Д-ПНА на белки сыворотки.

Заключение. Таким образом, скорость выхода ФС из состава комплексов с различными наноструктурными материалами изменяется в широком диапазоне значений и существенно зависит от физико-химических свойств ФС, что необходимо учитывать при прогнозировании фармакокинетического поведения ФС, вводимых в составе комплексов с наноносителями.

Благодарности. Работа выполнена при поддержке ГПНИ «Конвергенция-2025» (задание 3.03.7.2) и ГПНИ «Биотехнологии-2» (задание 1.29), гранта Министерства образования Республики Беларусь (828/09).

Литература.

1. Liu Y., Jiao T., Shen G., Yan X. / Water-Insoluble Photosensitizer Nanocolloids Stabilized by Supramolecular Interfacial Assembly towards Photodynamic Therapy // *Sci Rep.* - 2017. - Vol. 7, № 1. - P. 42978.
2. Kutsevol N., Kuziv Y., Zorin V., Kravchenko I., Zorina T., Marynin A., Bulavin L. / Evaluation of a Dextran-Poly(N-Isopropylacrylamide) Copolymer as a Potential Temperature-Dependent Nanocarrier for Photosensitizers with Different Properties // *Ukrainian Journal of Physics.* -2020. - Vol. 65, № 7. - P. 638.
3. Kumari P., Jain S., Ghosh B., Zorin V., Biswas S. / Polylactide-Based Block Copolymeric Micelles Loaded with Chlorin e6 for Photodynamic Therapy: In Vitro Evaluation in Monolayer and 3D Spheroid Models // *Molecular Pharmaceutics.* - 2017. № 11. V. 14. P. 3789-3800.
4. Kachatkou D., Sasnouski S., Zorin V., Zorina T., D'Hallewin M. A., Guillemin F., Bezdetnaya L. / Unusual Photoinduced Response of mTHPC Liposomal Formulations (Foslip) // *Photochemistry and Photobiology.* - 2009. -V. 85. - P. 719-724.



ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В ФИЗИКЕ

Температурные коэффициенты показателя преломления моноклинного кристалла берилата лантана, активированного ионами неодима

А.В. Герцова^a, К.В. Юмашев^a, Е.Е. Трусова^b, В.И. Гоман^c, Л.К. Павловский^c

^a НИЦ оптических материалов и технологий, Белорусский национальный технический университет, пр-т Независимости 65/17, Минск 220013, Беларусь

^b Кафедра технологии стекла и керамики, Белорусский государственный технологический университет, ул. Свердлова 13а, Минск 220006, Беларусь

^c Филиал Белорусского национального технического университета «Институт повышения квалификации и переподготовки кадров по новым направлениям развития техники, технологии и экономики», Партизанский пр-т, 77/10, Минск 220107, Беларусь

E-mail: kyumashev@bntu.by

Настоящая работа посвящена исследованию анизотропии термического коэффициента показателя преломления dn/dT для главных показателей преломления кристалла $\text{Nd}^{3+}:\text{La}_2\text{Be}_2\text{O}_5$ с помощью метода отклонения лазерного луча в материале с линейным градиентом температуры. Кристалл $\text{La}_2\text{Be}_2\text{O}_5$ относится к моноклинной сингонии, пространственной группе симметрии $C2/c$, и является анизотропным оптически двуосным кристаллом. Трехвалентные ионы неодима Nd^{3+} замещают в кристаллической решетке ионы трехвалентного лантана La^{3+} , которые характеризуются низкой симметрией кристаллического окружения. Параметры решетки элементарной ячейки $a = 753,56$ пм, $b = 734,76$ пм, $c = 743,87$ пм, $\beta = 91,5^\circ$. Для описания оптических свойств моноклинного кристалла используются ортогональные оси оптической индикатрисы N_p , N_m и N_g , при этом кристаллографическая ось b параллельна оси N_m , а оси N_p и N_g находятся в плоскости кристаллографических осей a - c (Рис. 1). Острый угол между направлениями осей c и N_g составляет $31,7^\circ$, а между направлениями осей a и N_p равен $33,2^\circ$ (Рис. 1).

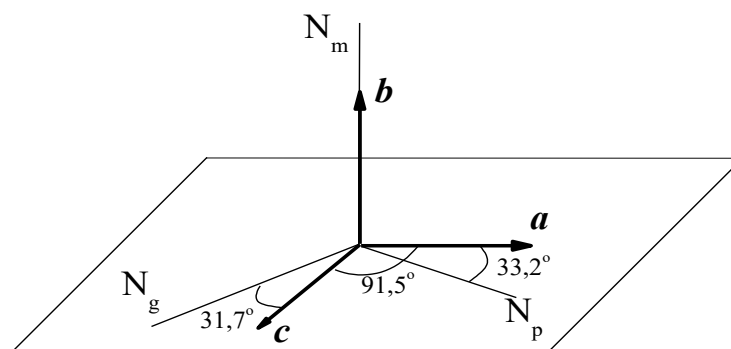


Рис. 1. Взаимная ориентация кристаллографических осей (a , b , c) и осей оптической индикатрисы (N_p , N_m , N_g) для моноклинного кристалла $\text{La}_2\text{Be}_2\text{O}_5$.

Для измерения термического коэффициента показателя преломления используется образец из кристалла 4,5 ат. % $\text{Nd}^{3+}:\text{La}_2\text{Be}_2\text{O}_5$ в форме прямоугольного параллелепипеда размером $11,4 \times 9,7 \times 8,0$ мм³ (Рис. 2). Ребра параллелепипеда параллельны кристаллографическим осям c (11,4 мм), b (9,7 мм) и a^* (8,0 мм). Направление a^* перпендикулярно плоскости, в которой лежат оси b и c . Направления кристаллографических осей в кристалле определялись с помощью дифракции рентгеновских лучей в геометрии обратного рассеяния Лауэ (с точностью $0,3^\circ$). Ориентация осей N_p и N_g на грани c - a^* образца определялась путем нахождения направлений гашения света (с точностью до $0,4^\circ$) при наблюдении образца, помещенного между скрещенными поляризаторами, в направлении оси b .

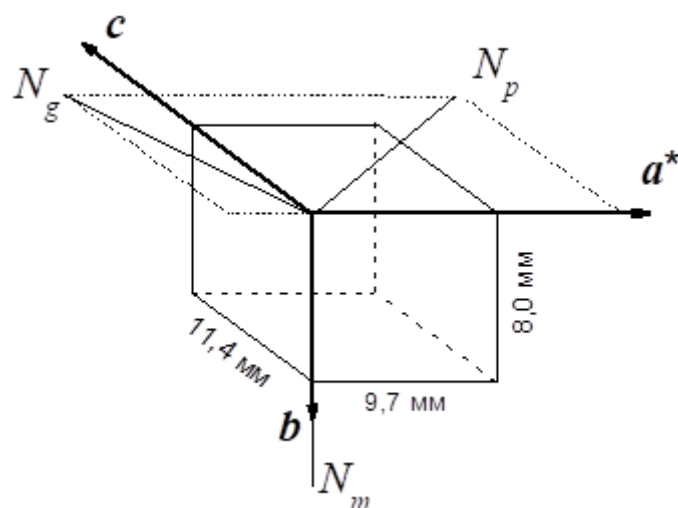


Рис. 2. Ориентация ребер образца из кристалла $\text{Nd}^{3+}:\text{La}_2\text{Be}_2\text{O}_5$, имеющего форму прямоугольного параллелепипеда, относительно кристаллографических осей (a , b , c) и осей оптической индикатрисы (N_p , N_m , N_g).

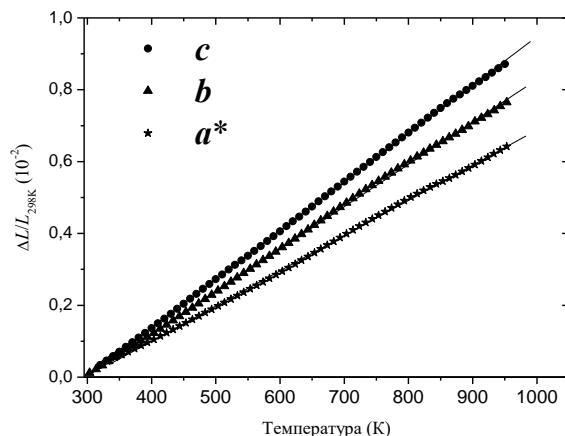
Термические коэффициенты показателя преломления измерены с помощью метода отклонения лазерного луча в материале с линейным градиентом температуры [1]. Экспериментальная установка и процедура измерений детально описаны [2]. Данный метод основан на непосредственном измерении угла отклонения θ прошедшего через образец лазерного пучка. При этом образец имеет форму прямоугольного параллелепипеда, в котором создан линейный градиент температуры в направлении, ортогональном направлению распространения излучения. Линейный температурный градиент не вызывает термически индуцированное напряжение в образце, которое может внести дополнительный вклад в изменение показателя преломления. Термический коэффициент показателя преломления для соответствующей длины волны и линейной (i -той) поляризации определяется по формуле (1):

$$\frac{dn_i}{dT} = \frac{\theta h}{\Delta T l} - (n_i - 1)\alpha_j \quad (i \neq j), \quad (1)$$

где α_j – термический коэффициент линейного расширения в направлении распространения света, n – показатель преломления, h и l – высота и длина образца, вдоль которых соответственно создается градиент температуры и распространяется излучение, ΔT – разность температур между более нагретой и более холодной гранями образца ($\Delta T > 0$). Знак угла θ определяется по направлению смещения пучка, прошедшего через образец (при смещении к более нагретой грани образца $\theta > 0$, а при смещении к более холодной грани $\theta < 0$). Измерения проведены на длине волны 632,8 нм с помощью непрерывного гелий-неонового лазера. Диаметр и расходимость лазерных пучков составляли соответственно ~ 2 мм (FWHM) и ~ 1 мрад. Разность температур ΔT составляла $(50 \pm 0,2)^\circ \text{C}$. Погрешность определения dn_i/dT была связана главным образом с ошибкой определения угла θ и коэффициента α составляла $\sim 0,7 \times 10^{-6} \text{K}^{-1}$.

Показатели преломления определены с помощью уравнений Селлмейера [3] и составили на длине волны 632,8 нм $n_p = 1,9841$, $n_m = 2,0184$ и $n_g = 2,0566$ (для поляризаций света $E//N_p$, $E//N_m$ и $E//N_g$ соответственно). Термические коэффициенты линейного расширения α_j (вдоль осей $j = c$, b и a^*) определены из зависимости изменения длины образца от температуры (температурного расширения, $\Delta L/L_{298\text{K}}$, Рис. 3). Измерения $\Delta L/L_{298\text{K}}$ выполнены с помощью горизонтального дилатометра Netzsch DIL 402 PC в диапазоне температур 298 К - 950 К. Использовался образец, показанный на Рис. 2. Скорость нагрева составляла $5^\circ \text{C}/\text{мин.}$, данные записывались в цифровом виде с интервалом в 1 минуту.

Коэффициенты α_j найдены как наклон линейной зависимости, описывающей изменение $\Delta L/L_{298K}$ с температурой: $\alpha_j = \Delta L/L_{298K}/(T - 298)$. Погрешность в определении α_j составляет $\sim 0,4 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$. Полученные значения составляют $\alpha_c = 13,5 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$, $\alpha_b = 11,8 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$, $\alpha_{a^*} = 9,8 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$. Эти величины несколько превышают приведенные ранее данные для $\alpha_c = 9,5 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$, $\alpha_b = 7,9 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ и $\alpha_a = 7,0 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ [4]. К сожалению, в [4] не указаны методика и температурный диапазон, для которого проведены измерения, поэтому достаточно трудно предположить причины такого количественного различия для коэффициентов α . Тем не менее, значения α , полученные в [4] и настоящей работе качественно согласуются друг с другом.



Символы – экспериментальные данные, прямые – аппроксимация экспериментальных данных (с помощью метода наименьших квадратов) зависимостью $\Delta L/L_{298K} = \alpha_i(T - 298)$.

Коэффициент корреляции $r = 0,9999$ (*c*), $0,9998$ (*b*), $0,9997$ (*a**).

Рис. 3. Температурное расширение $\Delta L/L_{298K}$ вдоль направлений *c*, *b* и *a** кристалла $\text{Nd}^{3+}:\text{La}_2\text{Be}_2\text{O}_5$.

Термические коэффициенты показателя преломления dn_p/dT , dn_m/dT и dn_g/dT (для поляризаций света $E//N_p$, $E//N_m$ и $E//N_g$), определенные с помощью формулы (1) с использованием литературных данных по показателям преломления и измеренным в настоящей работе температурным коэффициентам линейного расширения, приведены в Табл. 1. Для всех поляризаций света коэффициенты dn/dT являются отрицательными и составляют $dn_p/dT = -7,3 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$, $dn_m/dT = -11,9 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$, $dn_g/dT = -10,3 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$.

Таблица 1. Термические коэффициенты показателя преломления dn/dT (10^{-6} K^{-1}) для кристаллов $\text{Nd}^{3+}:\text{La}_2\text{Be}_2\text{O}_5$, $\text{KGd}(\text{WO}_4)_2$ (KGW), $\text{KY}(\text{WO}_4)_2$ (KYW) и $\text{KYb}(\text{WO}_4)_2$ (KYbW), измеренные с помощью различных методик на длине волны 632,8 нм

	Метод отклонения лазерного луча в среде с линейным градиентом температуры				Метод минимальных отклонений (используется призматический образец)				Метод минимальных отклонений с учетом изменения размеров и формы призматического образца	
	$\text{La}_2\text{Be}_2\text{O}_5$ [настоящая работа]	KGW [8]	KYW [8]	KYbW [8]	$\text{La}_2\text{Be}_2\text{O}_5^*$ [6]	KGW [9]	KYW [9]	KYbW [10]	KGW [8]	KYW [8]
dn_p/dT	-7,3	-14,4	-13,1	-11,5	+2,86	+1,1	-8,0	+31,0	-10,6	-10,1
dn_m/dT	-11,9	-9,7	-7,4	-4,1	+1,53	+6,5	+6,7	+31,0	-8,4	-7,3
dn_g/dT	-10,3	-15,7	-11,2	-9,9	-6,23	-18,2	-14,1	+73,0	-15,2	-8,4

* измерения выполнены на длине волны 1,15 мкм

Согласно феноменологической модели, разработанной для области частот, находящихся в пределах от края фононного поглощения до ширины запрещенной зоны, коэффициент dn/dT может быть представлен как сумма $dn/dT = (dn/dT)_\alpha + (dn/dT)_g$ [5]. Слагаемое $(dn/dT)_\alpha$ определяется объемным тепловым расширением и отрицательно, а слагаемое $(dn/dT)_g$ – зависимостью ширины запрещенной зоны от температуры и положительно. Эти два эффекта, описываемые указанными слагаемыми, конкурируют друг с другом, определяя в итоге положительное или отрицательное значение коэффициента dn/dT . Таким образом, отрицательные значения коэффициента dn/dT для исследуемого в настоящей работе кристалла $Nd^{3+}:La_2Be_2O_5$ обусловлены тем, что вклад в величину dn/dT эффекта теплового расширения (термический коэффициент объемного расширения равен $\alpha_{vol} = \alpha_c + \alpha_b + \alpha_{a^*} = 35,1 \times 10^{-6} K^{-1}$) доминирует над эффектом изменения ширины запрещенной зоны с температурой. Приводимые в литературе данные по термическим коэффициентам показателя преломления $Nd^{3+}:La_2Be_2O_5$ ($dn_p/dT = +2,86 \times 10^{-6} K^{-1}$, $dn_m/dT = +1,53 \times 10^{-6} K^{-1}$, $dn_g/dT = -6,23 \times 10^{-6} K^{-1}$ [6], см. Табл. 1) сильно отличаются от данных, полученных в настоящей работе. Объясняется такое расхождение, вероятнее всего, тем, что измерения в [6] выполнены с помощью метода минимальных отклонений, в котором используется образец в виде призмы, и при этом не принималось во внимание зависимость преломляющего угла призмы от температуры. Как показано в [7], для корректного измерения показателя преломления этим методом для анизотропных материалов необходимо учитывать изменение угла при вершине призмы, вызванного эффектом анизотропного теплового расширения при равномерном нагреве. В качестве примера в Табл. 1 собраны данные по коэффициентам dn/dT для трех моноклинных кристаллов двойных вольфраматов $KGd(WO_4)_2$, $KY(WO_4)_2$ и $KYb(WO_4)_2$, полученные с помощью трех различных методик: метода минимальных отклонений, метода отклонения лазерного луча в среде с линейным градиентом температуры и метода минимальных отклонений с учетом изменения размеров и формы призматического образца. Сравнение этих данных показывает, что измерения методом минимальных отклонений дают различные знаки для коэффициентов dn_p/dT , dn_m/dT и dn_g/dT . Результаты же измерений двумя другими методами дают одинаковые (отрицательные) знаки для всех коэффициентов dn/dT , хорошо согласуются друг с другом по абсолютной величине, и при этом сильно расходятся с соответствующими данными, полученными методом минимальных отклонений без коррекции на изменение преломляющего угла с температурой.

Литература

1. S. Vatik, M. C. Pujol, J. J. Carvajal, X. Mateos, M. Aguiló, F. Díaz, and V. Petrov, “Thermo-optic coefficients of monoclinic $KLu(WO_4)_2$,” *Appl. Phys. B* **95**(4), 653–656 (2009).
2. P. A. Loiko, K. V. Yumashev, N. V. Kuleshov, A. A. Pavlyuk, “Thermooptic coefficients measurements by a laser beam deviation method for the medium with linear thermal gradient,” *Devices and Methods of Measurements (In Russ.)* **1**, 70–77 (2010).
3. V.A. Pustovarov, I.N. Ogorodnikov, E.A. Ospanbekov, “Optical and electronic properties of undoped $La_2Be_2O_5$ single crystals in the far ultraviolet energy range”, *J. Opt. Soc. Am. B*, Vol. 32, No. 2, P. 241-247 (2015).
4. W.R.Rapoport, T. Chin. *Laser and Laser Related Characteristics of Nd:BEL*. SPIE Vol. 1040 High Power and Solid State Lasers II (1989), P. 19-31.
5. G. Ghosh, *Handbook of Thermo-optic Coefficients of Optical Materials with Applications*, Academic Press, London, 1998.
6. Chin T., et al.: *Athermal Nd:BEL Lasers*, *Proc. SPIE* **622** (1986) 53–60.
7. *Thermo-optic coefficients study in $KGd(WO_4)_2$ and $KY(WO_4)_2$ by a modified minimum deviation method* / P.A. Loiko, V.V. Filippov, K.V. Yumashev, N.V. Kuleshov, A.A. Pavlyuk // *Applied Optics*. – 2012. – Vol. 51, No. 15. – P. 2951–2957.
8. P.A. Loiko, K.V. Yumashev, N.V. Kuleshov, G.E.Rachkovskaya, A.A. Pavlyuk, «Thermo-optic dispersion formulas for monoclinic double tungstates $KRe(WO_4)_2$, where $Re=Gd, Y, Lu, Yb$ ». *Opt. Mater.* Vol. 33, No. 11, 1688-1694 (2011).

9. Filippov, V.V. Negative thermo-optical coefficients and athermal directions in monoclinic $\text{KGd}(\text{WO}_4)_2$ and $\text{KY}(\text{WO}_4)_2$ laser host crystals in the visible region / V.V. Filippov, N.V. Kuleshov, I.T. Bodnar // Appl. Phys. B. – 2007. – Vol. 87, No. 4. – P. 611–614.
10. Growth, optical characterization, and laser operation of a stoichiometric crystal $\text{KYb}(\text{WO}_4)_2$ / M.C. Pujol [et.al.] // Phys. Rev. B. – 2002. – Vol. 65, No. 16. – P. 165121-1–11.

Разработка алгоритмов радиопросвечивания для восстановления концентрации электронов на основе методов томографии

И.Э. Савиных

Объединенный институт проблем информатики НАН Беларуси, 220012

Минск, Беларусь

E-mail: rct.savinykh@gmail.com

Введение. Исследование структуры неоднородностей ионосферы важно для многих практических задач физики плазмы с целью изучения строения ионосферы и протекающих в ней процессов, а также для разнообразных радиофизических задач, связанных с распространением радиоволн, поскольку ионосфера как среда распространения существенным образом влияет на работу различных систем навигации, локации и связи [1].

1 Алгоритм радиотомографического восстановления на основе теоремы о проекционном срезе и обратного преобразования Фурье. Проекция является математической операцией, аналогичной физической операции получения изображения в рентгеновских лучах с помощью коллимированного источника излучения. Геометрическая схема моделирования процесса получения проекции представлена на Рис. 1 [2].

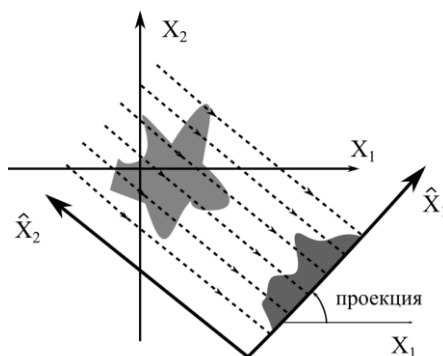


Рис. 1. Схема моделирования процесса получения проекции.

Первый шаг метода заключается в выполнении прямого дискретного преобразования Фурье каждой проекции. Функция проецирования - полное электронное содержание, определяемая формулой

$$p_{\theta}(\hat{x}_1) = \int_{-\infty}^{\infty} n[x_1(\hat{x}_1, \hat{x}_2), x_2(\hat{x}_1, \hat{x}_2)] d\hat{x}_2, \quad (1)$$

является одномерной. Если 2D-концентрация $n(x_1, x_2)$ имеет двумерный спектр Фурье $N(\Omega_1, \Omega_2)$:

$$N(\Omega_1, \Omega_2) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} n(x_1, x_2) \exp[-i(x_1\Omega_1 + x_2\Omega_2)] dx_1 dx_2, \quad (2)$$

то существует и одномерный спектр Фурье функции $p_\theta(\hat{x}_1)$, который обозначим через $S_\theta(\omega)$:

$$S_\theta(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} p_\theta(\hat{x}_1) \exp(-i\omega\hat{x}_1) d\hat{x}_1 = \\ = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} n(\hat{x}_1 \cos \theta - \hat{x}_2 \sin \theta, \hat{x}_1 \sin \theta + \hat{x}_2 \cos \theta) \exp(-i\omega\hat{x}_1) d\hat{x}_2 d\hat{x}_1 = N(\omega \cos \theta, \omega \sin \theta), \quad (3)$$

где \hat{x}_1 – абсцисса и \hat{x}_2 – ордината в повернутой (на угол θ) системе координат (Рис.1) относительно исходной системы координат (x_1, x_2) .

Таким образом, согласно формуле (3) спектр Фурье проекции, полученной под углом θ , является сечением двумерного преобразования Фурье двумерной функции концентрации $n(x_1, x_2)$ вдоль линии, проходящей через начало координат плоскости (Ω_1, Ω_2) и составляющей угол θ с на основе этих радиальных сечений.

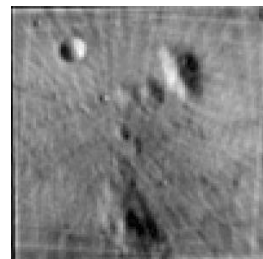
Наконец, искомую функцию двумерной концентрации $n(x_1, x_2)$ находим из восстановленного двумерного спектра Фурье $N(\Omega_1, \Omega_2)$ с помощью обратного двумерного преобразования Фурье:

$$n(x_1, x_2) = \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} N(\Omega_1, \Omega_2) \exp(i(\Omega_1 n_1 + \Omega_2 n_2)) d\Omega_1 d\Omega_2. \quad (4)$$

Проведены вычислительные эксперименты по восстановлению 2D-изображений, полученные результаты демонстрируют восстановление по радиальным линиям спектра с шагом 5 градусов.



а – исходное изображение



б – восстановленное изображение

Рис. 2. Восстановление изображения на основе теоремы о проекционном срезе и обратного преобразования Фурье

На Рис 2 представлены исходное и восстановленное изображение для оценки качества восстановления неконтрастного изображения.



а – исходное изображение



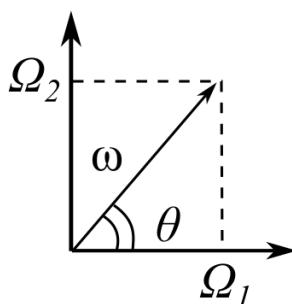
б – восстановленное изображение

Рис. 3. Восстановление изображения на основе теоремы о проекционном срезе и обратного преобразования Фурье

На Рис. 3 представлены исходное и восстановленное изображение для оценки качества восстановления контрастного высокодетализированного изображения

Алгоритм радиотомографического восстановления электронной концентрации на основании формулы обращения Радона. Для построения алгоритма восстановления на основе формулы обращения Радона, необходимо в двумерной спектральной плоскости перейти к полярным координатам (см. Рис. 4). В результате формула (4) в полярных координатах (ω, θ) принимает [2]:

$$\begin{aligned} n(x_1, x_2) &= \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\pi \int_{-\infty}^\infty N(\omega \cos \theta, \omega \sin \theta) e^{i\omega(x_1 \cos \theta + x_2 \sin \theta)} |\omega| d\omega d\theta = \\ &= \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\pi \int_{-\infty}^\infty S_\theta(\omega) e^{i\omega(x_1 \cos \theta + x_2 \sin \theta)} |\omega| d\theta d\omega. \end{aligned} \quad (5)$$


 Рис. 4. Полярные координаты (ω, θ) в двумерной частотной области (Ω_1, Ω_2) .

Внутренний интеграл в формуле (5) представляет собой обратное *одномерное* преобразование Фурье произведения $S_\theta(\omega)$ и $|\omega|$:

$$g_\theta(x_1 \cos \theta + x_2 \sin \theta) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty S_\theta(\omega) |\omega| e^{i\omega(x_1 \cos \theta + x_2 \sin \theta)} d\omega. \quad (6)$$

Соотношение (6) реализует фильтр от функции проецирования p_θ . С использованием формулы (6) вычисление искомой концентрации $n(x_1, x_2)$ по алгоритму обратной проекции, основанному на формуле обращения Радона, реализуется следующим образом [2]:

$$n(x_1, x_2) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} g_{\theta}(x_1 \cos \theta + x_2 \sin \theta) d\theta. \quad (3)$$

Путём дискретизации формулы обращения Радона (7) можно вывести алгоритмы обратной проекции. Их отличительной особенностью является возможность реализации процедуры полностью в пространственной области [2]. Дискретизация формулы обращения Радона основывается на предположении, что заданы проекции под углами $\theta_0, \theta_1, \dots, \theta_{N-1}$ и сами угловые приращения. Из формулы обращения Радона (8) следует, что искомую 2-D концентрацию $n(x_1, x_2)$ можно аппроксимировать следующим образом:

$$n(x_1, x_2) = \frac{1}{2\pi} \sum_{i=0}^{N-1} \Delta\theta_i g_i(x_1 \cos \theta + x_2 \sin \theta), \quad (4)$$

где $g_i(x_1 \cos \theta + x_2 \sin \theta) = g_i(\hat{x}_1)$ – функция в повернутой системе координат (\hat{x}_1, \hat{x}_2) , т.е. результат фильтрации согласно формуле (5).

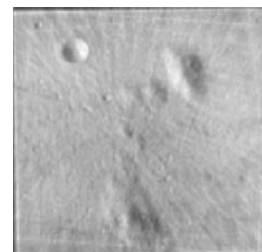
Одномерная проекция под углом θ_i пропускается через одномерный фильтр с импульсным $k(\hat{x}_1)$ и частотным $|\omega|$ откликами. Заметим, что все проекции $p_{\theta_i}(\hat{x}_1)$ ($i=0, 1, \dots, N-1$) пропускаются через один и тот же фильтр, выходом которого являются функции $g_i(\hat{x}_1)$. Как уже указывалось, в повернутой системе координат (\hat{x}_1, \hat{x}_2) , имеем, что

$$g_i(x_1 \cos \theta + x_2 \sin \theta) = g_i(\hat{x}_1). \quad (9)$$

В этой связи сигнал g_i в формуле (9) можно представить себе как двумерный сигнал, отфильтрованный по переменной \hat{x}_1 и однородный по переменной \hat{x}_2 . Поскольку операция восстановления двумерной функции начинается с одномерной функции для получения двумерной, эта операция называется *обратной проекцией*.



а – исходное изображение



б – восстановленное изображение

Рис. 5. Восстановление изображения на основе преобразования Радона.

На Рис. 5 представлены исходное и восстановленное изображение для оценки качества восстановления неконтрастного изображения.

В вычислительном эксперименте (Рис. 5) использовалось тестовое изображение размером 100 x 100 пикселей, применялся рамп-фильтр в частотной области, а так же билинейная интерполяция сетки отсчётов в Фурье-области при шаге 5 градусов.

Заключение. Таким образом, в результате были построены и программно реализованы два алгоритма вычислительной радиотомографии на основе различных способов восстановления, а именно, посредством метода обратных проекций и теоремы о срезе, для восстановления распределения электронной концентрации в ионосфере.

Благодарности. Работа выполнена в рамках договора № 9СГЗ.3-220 мероприятия 3.3 научно-технической программы Союзного государства «Разработка базовых элементов орбитальных и наземных средств в интересах создания многоспутниковых группировок малоразмерных космических аппаратов наблюдения земной поверхности и околоземного космического пространства».

Литература.

1. Куницын, В. Е. Радиотомография ионосферы / В. Е. Куницын, Е. Д. Терещенко, Е. С. Андреева. – М.: Физматлит, 2007. – 336 с.
2. Даджион Д., Мерсеро Р. Цифровая обработка многомерных сигналов: Пер. с англ.–М.: Мир, 1988.– с.412 -420.

Моделирование излучения заряженных частиц высоких энергий в ориентированных кристаллах с применением методов глубокого обучения

Н.С. Сочивко^а, В.В. Гавриловец^б

^а *Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Беларусь*

^б *Институт ядерных проблем БГУ, ул. Бобруйская, 11, 220006 Минск, Беларусь
E-mail: nikitasochivko@gmail.com*

Введение. В данной работе представлен подход к моделированию спектра излучения высокоэнергетических заряженных частиц, движущихся в ориентированных кристаллах, с использованием методов глубокого машинного обучения. Традиционно такое моделирование опирается на метод Монте-Карло, который для получения достоверной информации с высокой статистикой требует большого количества вычислительных ресурсов и времени.

Исследование основано на применении моделей глубокого обучения, в частности с архитектурой рекуррентной нейронной сети для преобразования сложных распределений, лежащих в больших данных о траекториях заряженных частиц высокой энергии и их взаимодействии с сильными электрическими полями кристаллической решетки, в характерные спектры излучения [1].

1 Рекуррентная нейронная сеть. Метод глубокого обучения для моделирования последовательных данных – это рекуррентные нейронные сети (RNN). Ключевой особенностью RNN является наличие т.н. «внутренней памяти».

Благодаря этой особенности, рекуррентная нейронная сеть способна улавливать контекст последовательности и на основании этого контекста делать предсказания. Поэтому они являются предпочтительным алгоритмом для моделирования последовательных данных, например, речи, текста, аудио и т.д. Если в качестве входных данных использовать траектории частиц, а в качестве выходных – спектры их излучения, то такая рекуррентная модель способна обучиться изменениям в траектории частицы, например выход из режима каналирования и с последующим излучением когерентного тормозного излучения, и «отобразить» такое изменение уже в виде характерного спектра.

Рекуррентные нейронные сети, как и многие другие методы глубокого обучения, были разработаны еще в 1980-х годах. Разработка алгоритма долговременной кратковременной памяти (LSTM) в 1990-х годах в сочетании с увеличением вычислительной мощности и огромных объемов данных, выдвинуло RNN на передний план. В последнее время наибольшее распространение получили сеть с LSTM и управляемый рекуррентный блок (GRU) [2].

2 Модель. Для обучения нейронной сети был подготовлен датасет из уже промоделированных траекторий из работы [3] методом Монте-Карло (МК) для электрона с энергией 855 МэВ движущегося в режиме плоскостного каналирования в плоскости (111) изогнутого кристалла кремния толщиной 15 мкм и соответствующих данным траекториям

спектров излучения фотонов в узком конусе с углом раствора 4,63 мрад для различных радиусов кривизны кристалла и угла наклона к пучку электронов. Цикл обучения представлен на Рис. 1,а Архитектура модели, изображена на Рис. 1,б и представляет собой 3 слоя GRU с числом блоков в каждом слое 64, 128, 102 соответственно. Использование GRU для данной работы было выбрано ввиду его большей производительности по сравнению с LSTM.

Механизм внутренней памяти GRU модели реализуется обновлением вектора скрытого состояния при помощи вектора вентиля обновления $\mathbf{z}_{n\Delta z}$ и вектора вентиля сброса $\mathbf{r}_{n\Delta z}$ на каждом шаге Δz промоделированной траектории следующим образом:

$$\mathbf{r}_{n\Delta z} = \sigma(\mathbf{W}_r \mathbf{x}_{n\Delta z} + \mathbf{U}_r \mathbf{E}_{(n-1)\Delta z} + b_r), \tag{1}$$

$$\mathbf{z}_{n\Delta z} = \sigma(\mathbf{W}_z \mathbf{x}_{n\Delta z} + \mathbf{U}_z \mathbf{E}_{(n-1)\Delta z} + b_z), \tag{2}$$

$$\hat{\mathbf{E}}_{n\Delta z} = \tanh(\mathbf{W}_h \mathbf{x}_{n\Delta z} + \mathbf{U}_h (\mathbf{r}_t \cdot \mathbf{E}_{(n-1)\Delta z}) + b_h), \tag{3}$$

где σ , \tanh – функции активации, \mathbf{W} , \mathbf{U} – веса и смещения b специфические для каждого $\mathbf{z}_{n\Delta z}$ и $\mathbf{r}_{n\Delta z}$. $\hat{\mathbf{E}}_{n\Delta z}$ – это значение-кандидат, которое используется для обновления скрытого состояния:

$$\mathbf{E}_{n\Delta z} = (1 - \mathbf{z}_{n\Delta z}) \cdot \mathbf{E}_{(n-1)\Delta z} + \mathbf{z}_{n\Delta z} \cdot \hat{\mathbf{E}}_{n\Delta z}, \tag{4}$$

Преобразования (1) – (4) представлены схематически на Рис. 1,с.

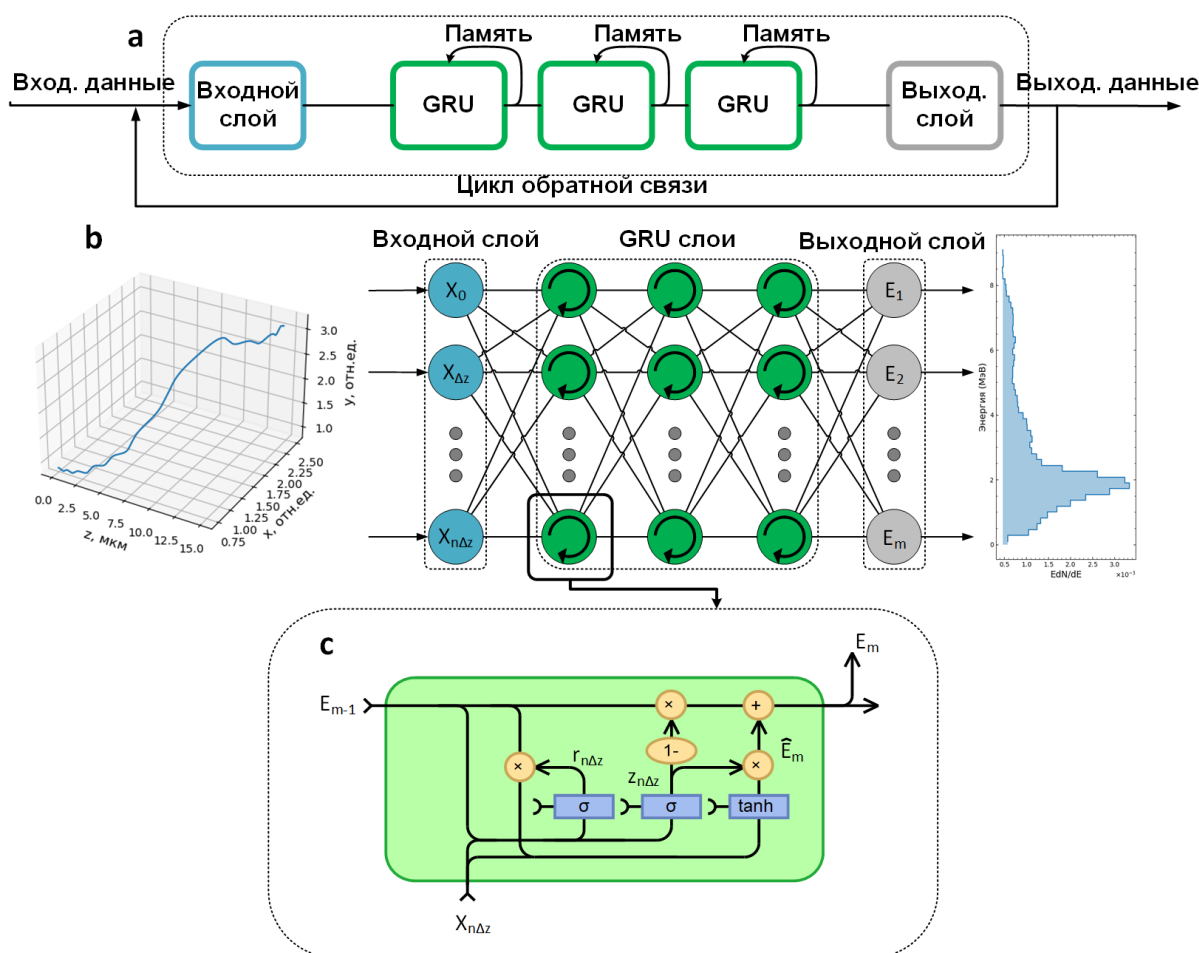


Рис. 1. Схема используемой архитектуры RNN (а), нейронная сеть принимает набор векторов \mathbf{x} , каждый из которых включает координаты частицы в кристалле и проекции ее скорости на каждом шаге Δz , а выходные данные \mathbf{E} – это пары чисел: энергетический канал и отнормированная интенсивность излучения (б), схема обновления скрытого состояния для блока GRU (с).

3 Результаты. Разработка и обучение нейронной сети выполнялось на основе библиотеки Tensorflow версии 2.13.1.

Модель обучалась на протяжении 200 эпох с соотношением 110 сек на 1 эпоху со следующими параметрами:

- Размер батча: 16 траекторий,
- Оптимизатор Adam с адаптивным темпом обучения в диапазоне $1 \cdot 10^{-4}$ - $1 \cdot 10^{-6}$,
- Функция потерь: среднеквадратичная ошибка (MSE).

Обучение выполнялось на GPU Nvidia GTX 1050 Ti. Последующее сохранение модели было выполнено в формате ONNX (Open Neural Network Exchange), ONNXruntime применялось для модели вывода. Примеры генерации спектра нейронной сетью от тестовых входных данных (не участвовавших в обучении) с различными радиусами кривизны R и углами поворота кристалла α нейронной сетью изображены на Рис. 2. На данном рисунке также представлено сравнение результатов RNN модели с Монте-Карло расчетами, что показывает их хорошую сходимость и точность.

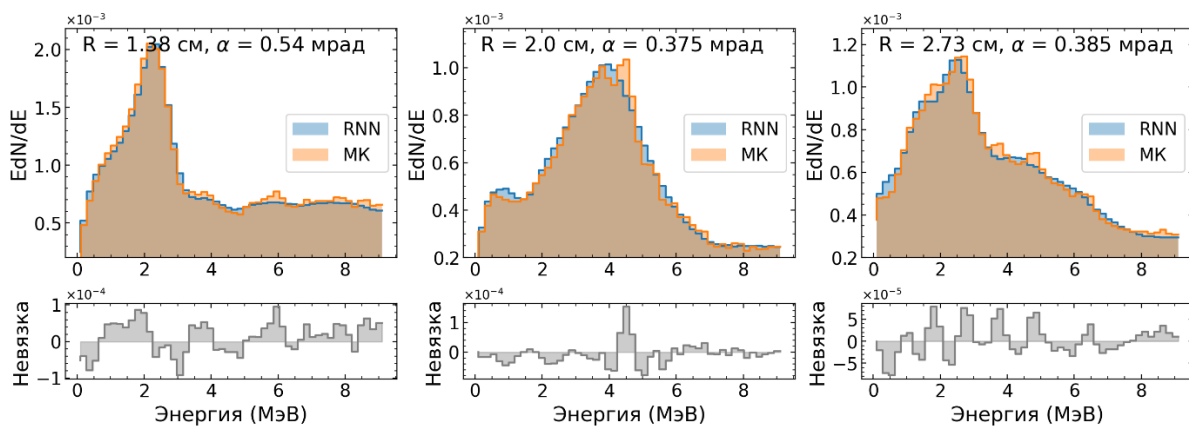


Рис. 2. Спектры излучения, промоделированные при помощи RNN и метода МК для различных параметров кристалла.

Обученная нейронная сеть моделировала спектры излучения за время 106 мс, в то время как расчет по методу Монте-Карло выполнялся за 115 с. Сравнение выполнялось на CPU Intel Core i5 8300H, что показывает прирост производительности в 1000 раз.

Литература.

1. Electromagnetic Processes at High Energies in Oriented Single Crystals / V. N. Baier, V. M. Katkov, V. M. Strakhovenko - World Scientific, 1998. - 568 с.
2. K. Cho, B. van Merriënboer, D. Bahdanau, F. Bougares, H. Schwenk, Y. Bengio / Learning Phrase Representations using RNN Encoder-Decoder for Statistical Machine Translation // Association for Computational Linguistics. – 2014.
3. L. Bandiera, A. Sytov, D. De Salvador, A. Mazzolari, E. Bagli, R. Camattari, S. Carturan, C. Durighello, G. Germogli, V. Guidi, P. Klag, W. Lauth, G. Maggioni, V. Mascagna, M. Prest, M. Romagnoni, M. Soldani, V.V. Tikhomirov, E. Vallazza / Investigation on radiation generated by Sub-GeV electrons in ultrashort Si and Ge bent crystals // The European Physical Journal C. – 2021., vol. 81, №. 4.

Связь между полным электронным содержанием ионосферы и параметрами солнечного излучения

М.О. Фомин

*Объединённый институт проблем информатики НАН Беларуси, 220072 Минск, Беларусь
E-mail: vorris43@gmail.com*

Введение. Процессы, происходящие в ионосфере, взаимосвязаны с внешним магнитным полем Земли. Так, активные процессы на Солнце помимо ионизации верхней атмосферы Земли приводят к многочисленным геофизическим последствиям: магнитным бурям, полярным сияниям и т.д.

Солнечная активность включает в себя такие явления, как солнечные пятна, солнечные вспышки, солнечный ветер и корональные выбросы массы.

Солнечные пятна – это темные области, которые образуются в фотосфере Солнца в результате интенсивного магнитного потока, поднимающегося из недр Солнца. Быстрые изменения в магнитном поле связаны с группами солнечных пятен и являются наиболее вероятными источниками значительных явлений космической погоды, таких как солнечные вспышки и корональные выбросы массы [1].

В результате солнечных вспышек от Солнца распространяется излучение, охватывающее огромный диапазон длин волн (от радиоволн до гамма-лучей) [2]. Мощное рентгеновское и ультрафиолетовое излучение солнечных вспышек оказывает влияние на ионосферу Земли.

Солнце постоянно излучает частицы, которые образуют солнечный ветер. Солнечный ветер представляет собой поток ионизированных частиц – электронов, протонов, α -частиц и более тяжёлых заряженных частиц. Различают медленный солнечный ветер до 400 км/с и быстрый свыше 400 км/с. Быстрый солнечный ветер создают корональные дыры; он отличается большей плотностью и меньшей температурой протонов, большей температурой электронов, высшими состояниями ионизации тяжёлых ионов [2].

Корональные выбросы массы (КВМ) – это выброшенные в межпланетное пространство гигантские облака ионизированного газа, которые могут достичь Земли и вызвать сильные геомагнитные бури [2].

Считалось, что сильные солнечные вспышки влияют на геомагнитное поле Земли, однако стало ясно, что единственный тип солнечной активности, имеющий причинно-следственную связь с геомагнитной активностью, заключается в КВМ, а не во вспышках. Было показано, что КВМ, выпущенные со скоростью выше 400 км/с в сторону Земли, вызывают геомагнитные эффекты. Существует множество КВМ с геомагнитными эффектами без связанных с ними вспышек, а есть вспышки без связанных с ними КВМ и без геомагнитных эффектов [2].

1 Подготовка данных и выделение событий. Основной характеристикой при изучении ионосферы является ПЭС, определяемое как интеграл от электронной плотности по пути распространения волны с поперечным сечением 1 м² между спутником и наземной станцией.

Проводя измерения спутниковых радиосигналов на двух различных частотах, можно получить оценки ПЭС по дальностным и фазовым измерениям [3]. Для получения оценки абсолютного ПЭС использован алгоритм [4] на основании результатов двухчастотных фазовых и дальностных измерений.

Используя данный алгоритм, был получен график вертикального ПЭС за 2022 год по данным приёмной станции в Докшицах. В качестве источника данных солнечных излучений в рентгеновском диапазоне был взят спутник GOES-16, а информация об приходящих частицах со спутников SOHO и WIND. На Рис.1 представлены ПЭС, рентгеновское излучение

со спутника GOES, плотность и скорость протонов со спутника SOHO, плотность и температура электронов со спутника WIND.

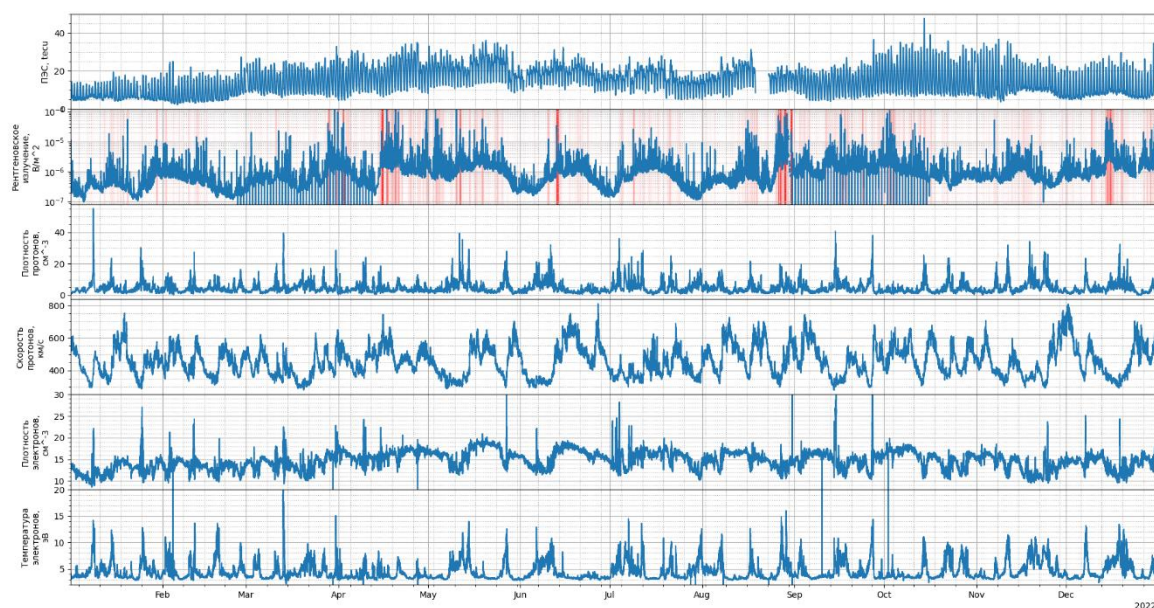


Рис. 1. ПЭС и параметры солнечного излучения за 2022 год.

Для обнаружения событий (вспышек, выбросов) был применён алгоритм, представленный в документации к датчику XRS прибора EXIS спутника GOES [5].

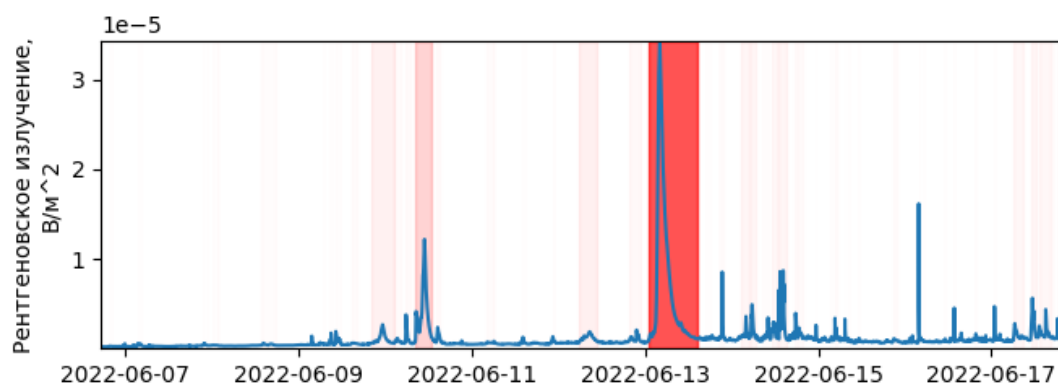


Рис. 2. Рентгеновское излучение с событиями (более весомые события имеют менее прозрачное выделение).

2 Результат. Проанализировав данные, можно выделить следующее поведение ионосферы: при резком росте изменения плотности и скорости протонов, плотности и температуры электронов в течении 2-х дней наблюдается скачок в значения ПЭС; при восстановлении параметров солнечного излучения после скачка в значениях ПЭС наблюдается спад с последующим восстановлением до прежнего уровня. На Рис. 3 представлены эти изменения. Однако не все параметры солнечного излучения были рассмотрены. Поэтому нужны дополнительные исследования.

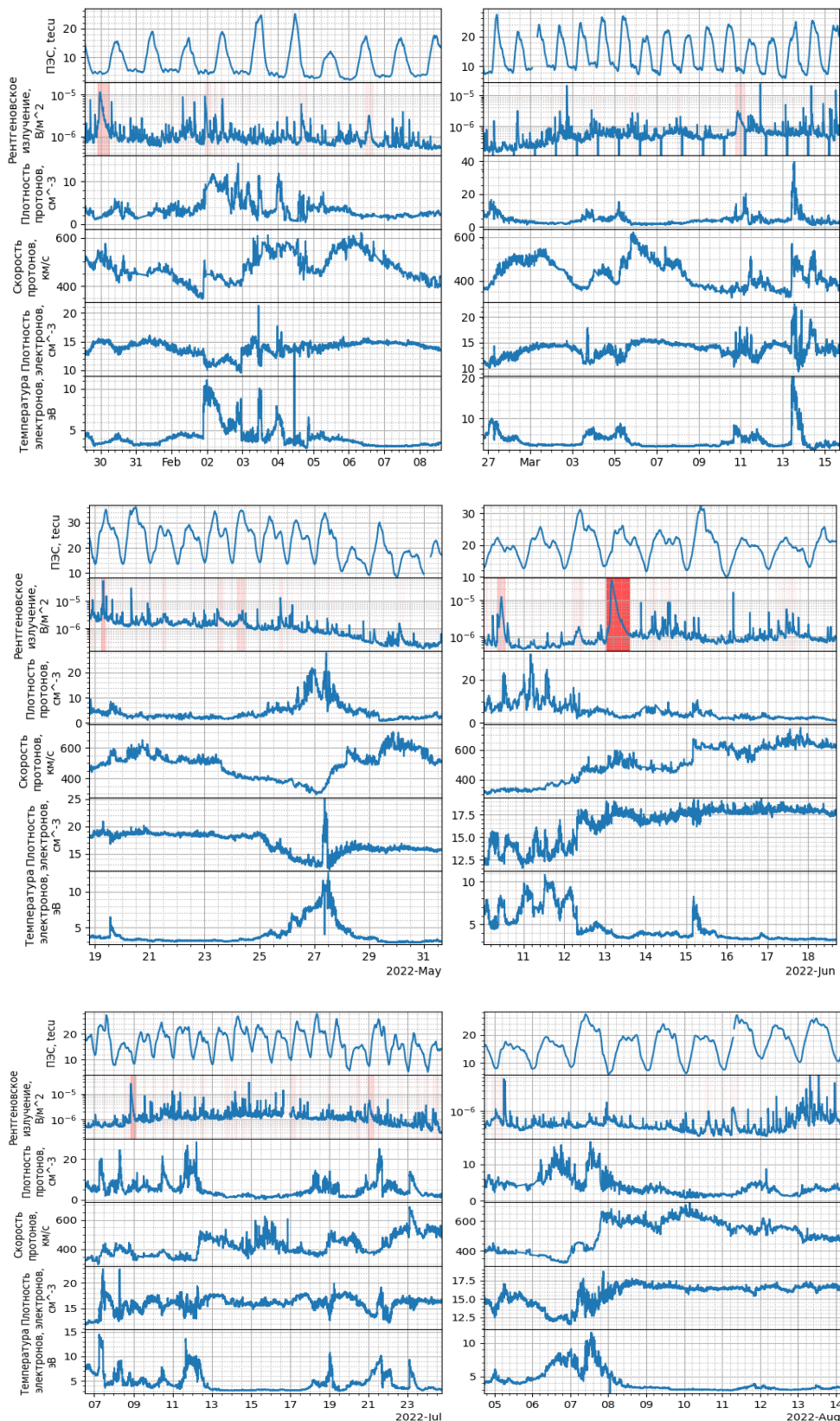


Рис. 3. Примеры отклика ионосферы.

Заключение. Собраны данные по солнечному излучению с нескольких спутников за 2022 год. Продемонстрирован отклик ионосферы на резкие изменения параметров солнечного излучения.

Литература.

1. Space Weather Prediction Center. Sunspots/Solar Cycle. – URL:

- <https://www.swpc.noaa.gov/phenomena/sunspotssolar-cycle>
2. Schwenn R. Space weather: The solar perspective //Living reviews in solar physics. – 2006. – Т. 3. – №. 1. – С. 1-72.
 3. Куницын В.Е., Терещенко Е.Д., Андреева Е.С. Радиотомография ионосферы. М.: Физматлит, 2007. 336 с.
 4. Шапкин А.С., Потапов К.О. Алгоритм оценки полного электронного содержания ионосферы // Вычислительные технологии и прикладная математика: Материалы II Международного семинара (12-16 июня 2023 г., Благовещенск). Благовещенск: Изд.-во Амурского гос. Университета, 2023. С. 225–228.
 5. Machol J., Codrescu S., Peck C. User’s Guide for GOES-R XRS L2 Products //URL: https://data.ngdc.noaa.gov/platforms/solar-spaceobserving-satellites/goes/goes16/l2/docs/GOES-R_XRS_L2_Data_Users_Guide.pdf. – 2021.

Влияние увеличения скорости передачи данных на информационные параметры волоконно-оптических динамических запоминающих устройств

К.С. Юдыцкая

Белорусский государственный университет, 220030 Минск, Беларусь

E-mail: kseniya.yudytskaya@gmail.com

Требуемые стандарты скорости и объема передаваемой информации в телекоммуникационных системах на данный момент обеспечиваются при использовании каналов связи субнаносекундного быстродействия на основе оптоволоконных линий. Для того чтобы избежать потерь информации при высокоскоростной передаче данных применяются специализированные быстродействующие буферные элементы памяти, которые могут быть представлены волоконно-оптическими динамическими запоминающими устройствами (ВОДЗУ) [1, 2].

Разработана [3] архитектура цифрового волоконно-оптического динамического запоминающего устройства со спектральным уплотнением информационных каналов. Основными факторами, влияющими на ограничение времени хранения в ВОДЗУ, является потеря мощности информационных оптических импульсов и дисперсионные эффекты в волоконных световодах, возникающие в процессе рециркуляции. Для минимизации воздействия данных эффектов и увеличения времени хранения информации в оптическом диапазоне осуществлялась 2R–регенерация (re-amplifying+re-shaping) циркулирующих информационных сигналов с помощью нелинейного оптического кольцевого зеркала (НОКЗ). Это дает возможность работать с гигагерцовыми скоростями записи информационного потока и не осуществлять промежуточное периодическое преобразование сигналов из оптического диапазона в электрический и обратно.

Количество циклов рециркуляции, после которого необходимо восстанавливать форму и длительность импульсов с помощью схемы регенерации, ограничивается условием $\tau < 0,6T_i$, где τ – длительностью циркулирующих импульсов, T_i – тактовый интервал. При выполнении данного условия величина межсимвольных помех не превышает 1 дБ при использовании амплитудной модуляции и RZ-формата кодирования.

При распространении импульсов по волокну происходит изменение их формы и длительности. Из-за совместного влияния на длительность циркулирующих оптических импульсов положительной хроматической дисперсии и фазовой самомодуляции, проявляющейся при спектральном мультиплексировании информационных каналов, на длинах волн, больших длины волны нулевой дисперсии, в одномодовых кварцевых волоконных световодах сначала наблюдается сжатие импульсов, а потом их последующее

уширение. Скорость уширения и количество циркуляций, после которого в волокне фиксированной длины наблюдается уширение импульсов до величины порядка $0,6T_i$, зависит от передаваемой по волокну мощности, скорости информационного потока и количества информационных каналов.

Согласно рекомендациям Международного союза электросвязи (ITU-T) существуют и активно применяются стандарты передачи данных по волоконно-оптическим линиям связи, обеспечивающие скорость информационного потока $V=2,5$ Гбит/с и $V=10$ Гбит/с. Установлено [4, 5], что при совместном влиянии амплитудных флуктуаций, хроматической, поляризационной модовой дисперсии, временного джиттера, межсимвольных помех время хранения при заданной вероятности ошибки $BER \leq 10^{-9}$ имеет максимум для длины оптоволоконной петли, равной 19 км. Для мощности излучения $P_{л}=10$ мВт при скорости информационного потока $V=2,5$ Гбит/с время хранения составляет $t_{хр}=38,8$ с, а при $V=10$ Гбит/с $t_{хр}=9,7$ с (Рис. 1). Положение максимума $t_{хр}$ в зависимости от длины оптоволоконной петли не зависит от мощности излучения инжекционного лазера и скорости передачи информации.

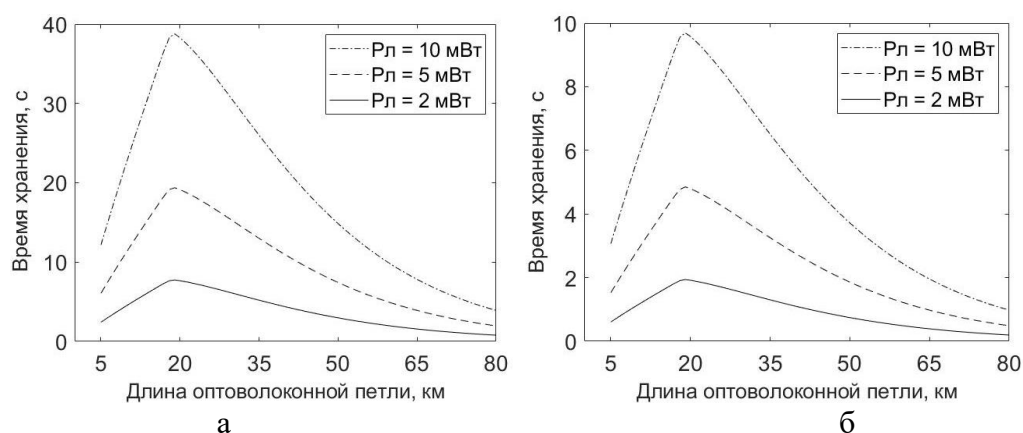


Рис. 1. Зависимости времени хранения от длины оптоволоконной петли при скорости информационного потока (а) $V=2,5$ Гбит/с и (б) $V=10$ Гбит/с.

Информационная емкость, которую можно обеспечить для конкретной конфигурации ВОДЗУ, определяется, в первую очередь, длиной волоконно-оптической линии задержки и количеством информационных каналов. Число информационных спектральных каналов ограничивается спектральной шириной усиления волоконного эрбиевого усилителя, которая составляет 35 нм, и необходимостью обеспечения спектрального интервала между информационными каналами 0,8 нм (100 ГГц) для уменьшения влияния нелинейных эффектов. В рассматриваемой схеме ВОДЗУ число информационных каналов равнялось $k=32$ и 8 каналов являлись служебными. При заданных параметрах и скорости $V=2,5$ Гбит/с можно достичь информационной емкости $W=0,9$ Мбайт, а при $V=10$ Гбит/с $W=3,7$ Мбайт для длины волоконной линии задержки $L=19$ км (Рис. 2).

В настоящее время одним из способов увеличения объема передаваемой информации в оптических телекоммуникационных системах является наращивание информационной скорости, следствием чего явился стандарт ITU-T на скорость передачи информации 40 Гбит/с по одному информационному каналу. При увеличении скорости информационного потока до $V=40$ Гбит/с эффект фазовой самомодуляции слабо влияет на сжатие импульсов в процессе их распространения.

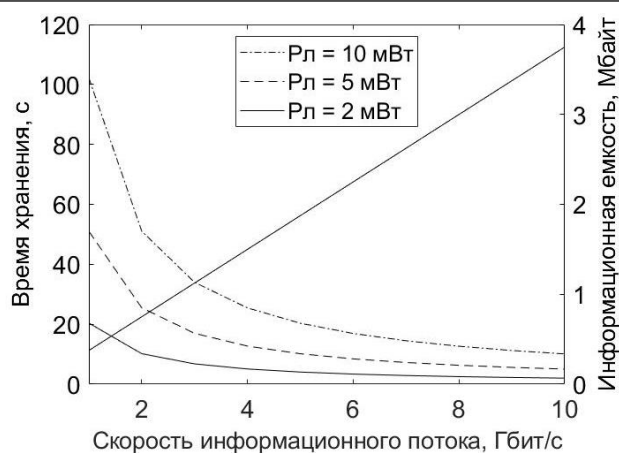


Рис. 2. Зависимость времени хранения информации и информационной емкости от скорости информационного потока.

Рис. 3 позволяет оценить количество циркуляций сигнала в волоконно-оптической петле задержки, после которого длительность циркулирующих импульсов превышает величину $0,6T_i$. Для мощности излучения $P_{л}=10$ мВт это происходит после 6 циклов рециркуляции, при $P_{л}=5$ мВт – после 8 циклов, для $P_{л}=2$ мВт – после 11 циклов.

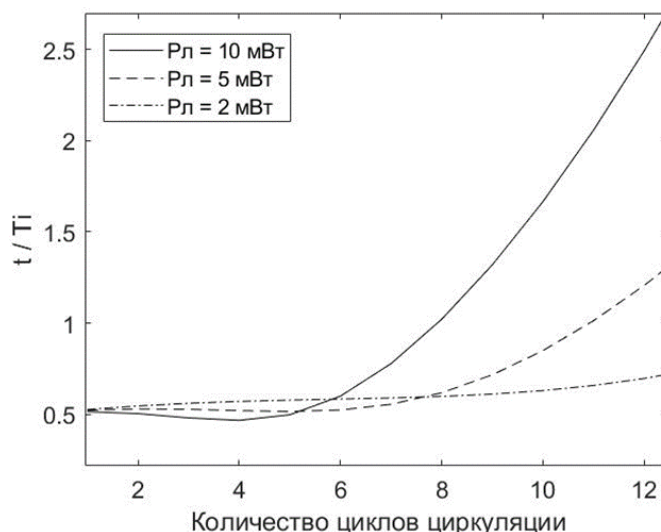


Рис. 3. Динамика длительности импульсов для различных значений мощности лазерного излучения и скорости передачи $V=40$ Гбит/с.

Более частое прохождение сигнала через систему регенерации приводит к уменьшению отношения сигнал/шум, вызванное влиянием шума эрбиевого усилителя, расположенного в петле регенерации НОКЗ. Данное явление уменьшает время хранения в ВОДЗУ при скорости передачи данных $V=40$ Гбит/с для $BER \leq 10^{-9}$ (Рис. 4).

Увеличение скорости информационного потока влечет за собой увеличение влияния дисперсионных и нелинейных эффектов, наиболее сильно проявляющихся при спектральном мультиплексировании оптических каналов. Для минимизации влияния перекрестной фазовой модуляции необходимо выполнение условия, чтобы спектральный интервал между спектральными каналами превышал шесть величин информационной скорости. Следовательно, для скорости информационного потока $V=40$ Гбит/с необходимо увеличить спектральный интервал между каналами до 2 нм, что ведет к сокращению количества информационных каналов, которые возможно разместить в ограниченной полосе усиления оптических усилителей. Это приводит к изменению информационной емкости в ВОДЗУ. В следствии введения этого ограничения число информационных каналов составляло $k=16$, а

один канал являлся служебным. При скорости информационного потока $V=40$ Гбит/с максимальная информационная емкость составляет $W=7,5$ Мбайт при длине оптоволоконной линии задержки $L=19$ км (Рис. 5).

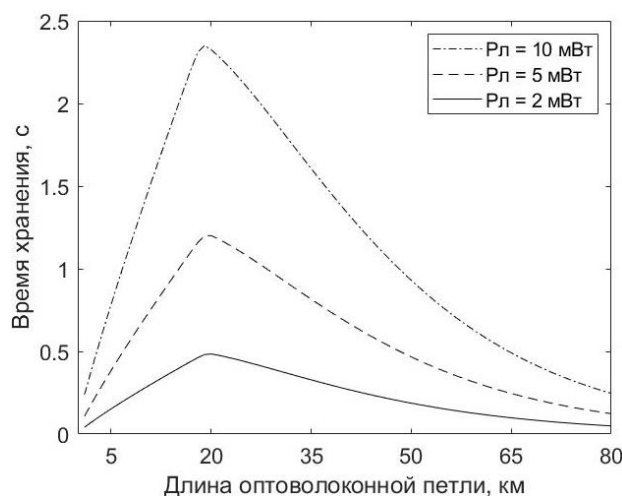


Рис. 4. Зависимости времени хранения от длины оптоволоконной петли при скорости информационного потока $V=40$ Гбит/с.

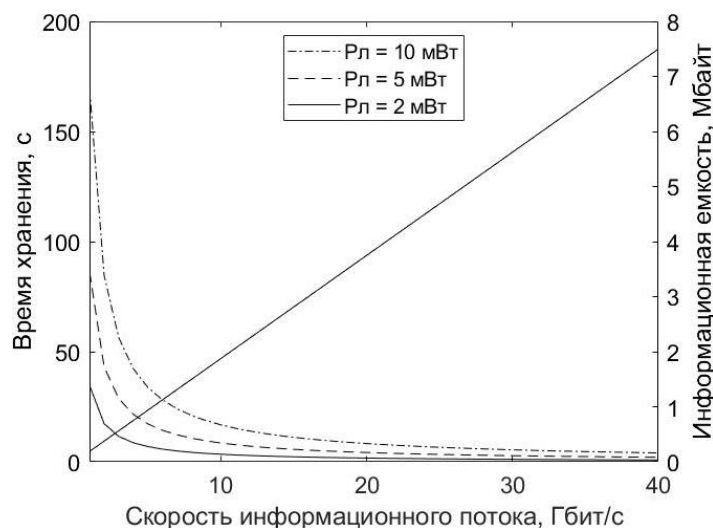


Рис. 5. Зависимость времени хранения информации и информационной емкости от скорости информационного потока.

Таким образом, информационные параметры ВОДЗУ, определяются как конструктивными особенностями запоминающего устройства, так и характеристиками информационных сигналов. Увеличение скорости передачи данных приводит к необходимости более частого восстановления формы и длительности циркулирующих импульсов для обеспечения корректного приема с заданной вероятностью ошибки $BER \leq 10^{-9}$, что влечет за собой уменьшение времени хранения. Увеличение битовой скорости делает необходимым также увеличение спектрального интервала между мультиплексируемыми каналами, что ограничивает возможность увеличения информационной емкости. Результаты проведенного моделирования позволяют осуществлять выбор стандарта скорости передачи данных, необходимого для обеспечения требуемых информационных параметров волоконно-оптических динамических запоминающих устройств.

Литература.

1. Singh, K.R. Large capacity optical router based on arrayed waveguide gratings and optical loop buffer / K.R. Singh, R. Srivastava, Y.N. Singh // Optical and Quantum Electronics. – 2009. – Vol. 41, № 2. – P. 463–480.

2. Srivastava, R. Design analysis of optical loop memory / R. Srivastava, K.R. Singh, Y.N. Singh // *Journal of Lightwave Technology*. – 2009. – Vol. 27, № 21. – P. 4821–4831.
3. Polyakov, A.V. Simulation of fiber-optic buffer loop memory with all-optical 2R regeneration / A.V. Polyakov // *Optical Memory and Neural Networks*. – 2020. – Vol. 29, № 2. – P. 100–109.
4. Поляков, А.В. Увеличение времени хранения информации оптоволоконной буферной памятью в системах лазерной космической связи / А.В. Поляков, К.С. Юдыцкая // *Прикладные проблемы оптики, информатики, радиофизики и физики конденсированного состояния: Материалы VII межд. науч.-практ. конф., Минск, 18–19 мая 2023г.* / НИИПФП им. А.Н. Севченко. – Минск, 2023г. – С. 435–436.
5. Поляков, А.В. Информационные параметры оптоволоконных устройств хранения оптической информации / А.В. Поляков, К.С. Юдыцкая // *Квантовая электроника: Материалы XIV межд. научно-технической конф., Минск, 21–23 ноября 2023г.* / БГУ, НИИПФП им. А.Н. Севченко. – Минск, 2023. – С. 298–301



ПРИБОРЫ И МЕТОДЫ ИЗМЕРЕНИЙ

Идентификация структурных изменений аморфного диоксида кремния методом рентгеноструктурного анализа

Н.С. Магонь^а, В.В. Углов^б

^а *Институт тепло- и массообмена имени А.В. Лыкова НАН Беларуси, г. Минск, Беларусь*

^б *Белорусский государственный университет, г. Минск, Беларусь*
nsmahon@hmti.ac.by

Введение. Уникальные свойства синтетического аморфного диоксида кремния (SiO_2) [1,2] позволяют использовать его в качестве оптического стекла, прозрачного в коротковолновой ультрафиолетовой области спектра (UVC) [2,3]. Структурной единицей аморфного диоксида кремния, как и кристаллического, являются тетраэдры $[\text{SiO}_4]^{4-}$, которые соединяются между собой в кольца с помощью мостикового кислорода, образуя силикатную сетку [4]. Изучение структуры стекла является важным для понимания его физических свойств. Кроме того, в следствие внешних воздействий и в результате влияния ультрафиолетового излучения могут происходить структурные изменения, которые приводят к изменению физических свойств материала [2,5], что делает недопустимым дальнейшее его использование. Рентгеноструктурный анализ является надежным методом исследования аморфных тел и позволяет определить такие структурные параметры, как межатомные расстояния, радиус первой координационной сферы, координационные числа и свободный объем [6-9]. Использование рентгеновского излучения медной трубки хотя и не позволяет надежно идентифицировать структурные данные [9], однако дает возможность оценить степень структурных изменений, произошедших в аморфном теле. В настоящей работе приведены результаты апробации данного метода на образцах синтетического аморфного диоксида кремния с неизвестными параметрами эксплуатации с целью идентификации степени дефектности каждого из них. На основании анализа первого максимума аморфного гало, произведена оценка упорядоченности структуры и изменения свободного объема. С помощью программы RAD были оценены межатомные расстояния, радиус первой координационной сферы и координационные числа исследуемых образцов. Полученные данные, в сравнении с оптическими характеристиками исследуемых стекол, позволяют сделать выводы о структурных изменениях, произошедших в образцах в следствие их эксплуатации.

1 Методика эксперимента. Было исследовано 4 образца оптических стекол марки Corning 7980, чьи спектры пропускания (Рис. 1) соответствуют литературным данным [3]. Оценка структурных изменений образцов производилась методом рентгеноструктурного анализа с помощью рентгеновского дифрактометра Rigaku Ultima IV (источник излучения Cu K_α , 8 кэВ). Обработка дифрактограмм осуществлялась с помощью программного обеспечения OriginPro 9, а также с помощью программы RAD [9].

2 Результаты исследования.

2.1 Анализ аморфных гало. Дифрактограммы исследуемых образцов оптических стекол приведены на Рис. 2,а и согласуются с литературными данными [10,11]. Первый дифракционный максимум образцов 1 и 3 смещен в область малых углов, при этом образец 1 имеет самое большое значение полной ширины на половине максимума (FWHM), а образец 2 – наименьшее, в то время как FWHM образцов 3 и 4 отличаются в пределах погрешности (Рис. 2,в). Сдвиг первого максимума аморфного гало в область малых углов и уширение пиков указывают на возрастание свободного объема в исследуемом материале [6]. Стоит отметить, что образец 2 имеет наименьшую интенсивность рассеяния в области малых углов, но при этом наибольшее пропускание в УФ области (Рис. 1), а также имеет лучшее разрешение пиков в области углов дифракции 40–90 градусов 2θ (Рис. 2,б), что свидетельствует о более упорядоченной структуре материала [11], в то время как образец 1 и, в меньшей степени, образец 3, наименее упорядоченную структуру.

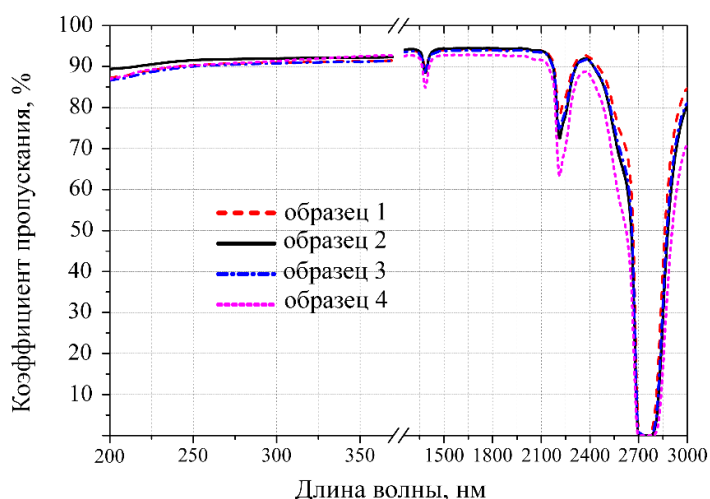


Рис.1. Спектры пропускания исследуемых образцов.

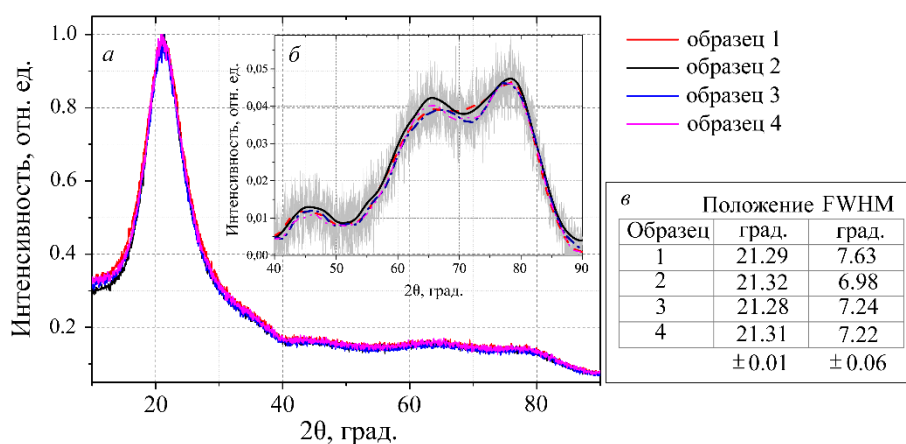


Рис. 2. (а) Дифрактограммы исследуемых образцов с (б) увеличенной областью углов 40-90 градусов 2θ и (в) характеристиками первого дифракционного максимума.

2.2. Анализ парных функций распределения. Парная функция распределения $g(r)$ или PDF – это вероятность найти какой-то атом на расстоянии r от какого-то относительного атома, взятого за точку отсчета [9]. Первый минимум кривой PDF расположен в конце первой координационной сферы [13]. Табличное значение радиуса первой координационной сферы R_1 аморфного диоксида было найдено по формуле из [8] и составило 2.21 Å. Среднее число атомов в первой координационной сфере (координационное число N) аморфного диоксида кремния было найдено как площадь первого максимума функции $4\pi r^2 g(r)$ [13]. На Рис. 3,а приведены кривые PDF исследуемых образцов, полученные с помощью программы RAD, с указанными значениями межатомных связей и расстояний в сравнении с литературными [12], а также значения координационных чисел и радиусов первой координационной сферы (Рис. 3,б).

Межатомные связи и расстояния близки к литературным, однако делать выводы об их отличии между собой не имеет смысла в связи с невысоким пространственным разрешением данного метода и отсутствием каких-либо других данных, полученных при использовании излучения медной трубки. Отличие радиуса первой координационной сферы от табличного может быть обусловлено разными факторами, один из которых может быть также связан с низким пространственным разрешением данного метода. Тем не менее, стоит отметить наибольшие значения радиуса первой координационной сферы и координационные числа для образцов 1 и 4. Большое значение координационного числа для образца 4 может быть связано с большим содержанием гидроксильных групп, что следует из наибольшей полосы поглощения при 2750 нм (Рис.1).

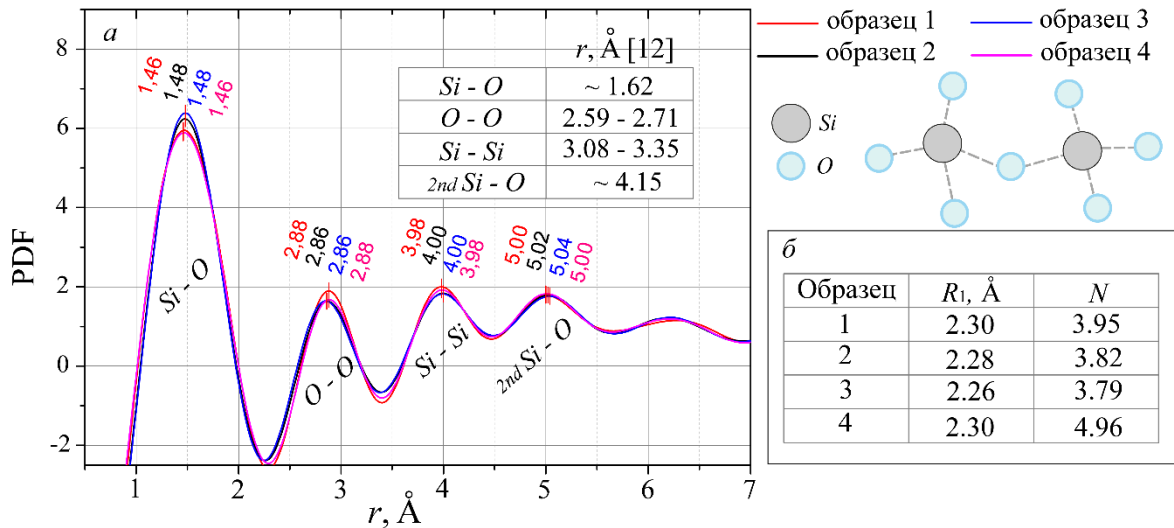


Рис. 3. (а) Функция парного распределения исследуемых образцов с указанием определенных межатомных связей и расстояний в сравнении с литературными значениями [12]; (б) определенные радиусы первой координационной сферы и координационные числа исследуемых образцов.

Заключение. Анализируя полученные результаты, можно заключить, что ухудшение пропускания в УФ области оптического стекла связано с разупорядочением структуры. Известно, что при внешнем воздействии, например, температурных флуктуаций, вызванных давлением или излучением, может происходить сдвиг атомов из 1-й координационной сферы вследствие разрыва связей (образование конфигуранов) [13]. Образец 2, имеющий наибольший коэффициент пропускания в УФ области, имеет более упорядоченную структуру, один из наименьших радиус первой координационной сферы и наименьший свободный объем (избыточное пространство для сдвига атомов). С другой стороны, образец 1 выглядит наиболее деградированным, на что указывает наименее упорядоченная структура и наибольший свободный объем. Образцы 3 и 4 имеют схожие параметры, основное отличие которых вероятно вызвано содержанием большего количества гидроксильных групп в материале.

Таким образом использование рентгеновского излучения медной трубки позволяет оценить структурные изменения, произошедшие в аморфном материале. В дальнейшем планируется апробация метода на большем количестве образцах аморфного диоксида кремния с известной контролируемой степенью деградации.

Литература.

1. Modern Inorganic Synthetic Chemistry. Chapter 19 - Chemical preparation of advanced ceramic materials / Guo J., Li J., Kou H. – Elsevier, 2011. – P. 429-454.
2. Основы радиационного оптического материаловедения / В. И. Арбузов – СПб: СПбГУ ИТМО, 2008. – 284 с.
3. Corning HPFS product brochure. Corning, 2015.
4. Yadav A. K., Singh P. / A review of structure of oxide glasses by raman spectroscopy // RSC Advances. –2015. – Vol. 83. – 24 p.
5. Moll J., Dewa P. / Laser resistance of fused silica for microlithography: experiments and models // Optical Microlithography XV, Proceedings of SPIE. –2002. – Vol. 4691. – P.1734-1741.
6. Структурный анализ жидкостей и аморфных тел / А. Ф. Скрышевский. – М.: Высш. школа, 1980. – 328 с.
7. Abrosimova G. [et. al.] / Changes in the structure of amorphous alloys under deformation by high-pressure torsion and multiple rolling // Materials. – 2023. – Vol. 16, № 1321. – P. 1-17.
8. Лабораторные работы по рентгеноструктурному анализу. Часть 2 /А.С. Макаров [и др.]. – Воронеж: ВГПУ, 2018. – 109 с.

9. Petkov V. / Pair distribution functions analysis // Characterization of Materials. - 2012. - P. 1–12.
10. Lee T. K. [et al] / The dependence of N₂ carrier gas flow rate on deposition rate and density changes of porous silica preform synthesized by eco-friendly octamethylcyclotetrasiloxane // Phys. Status Solidi A. – 2019. – Vol. 216, 1900289. - P. 1-5.
11. Nandanwar R., Singh P., Haque F.Z. / Synthesis and characterization of SiO₂ nanoparticles by sol-gel process and its degradation of methylene blue // American Chemical Science Journal. – 2015. – Vol. 5, № 1. – P. 1-10.
12. Biswas R. K. / Study of short range structure of amorphous Silica from PDF using Ag radiation in laboratory XRD system, RAMAN and NEXAFS // Journal of Non-Crystalline Solids. – 2018. – Vol. 488. – P. 1-9.
13. Ojovan M. I., Louzguine-Luzgin D.V. / Revealing structural changes at glass transition via radial distribution functions // J. Phys. Chem. B. - 2020. – Vol. 124. – P. 3186-3194.

ТЕА лазер, генерирующий в ближнем и среднем ИК диапазоне

С.С. Шавель, В.А. Горобец, С.Б. Бушук

*ГНПО «Оптика, оптоэлектроника и лазерная техника», Минск, Беларусь
E-mail: shavel_s07@mail.ru*

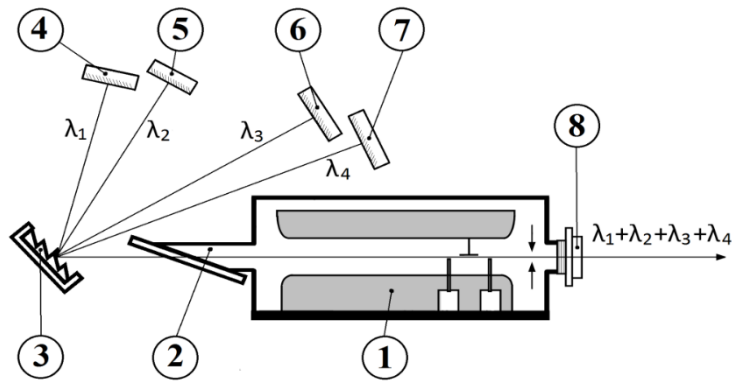
Введение. В настоящее время существует устойчивый интерес к разработке источников лазерного излучения для применения в прикладной спектроскопии и лидарной технике (выполнение условия «замороженной» атмосферы). Особенно интересны области 1-4 мкм и 8-12 мкм, принадлежащих ближнему и среднему ИК диапазонам, где существуют достаточно широкие окна прозрачности атмосферы, свободные от поглощения парами воды.

Одним из путей решения этой проблемы может стать использование электронных переходов инертных газов (например Хе, Кг, Аг, Не) в дополнение к генерации на колебательно-вращательных переходах молекул СО₂ [1]. Генерация одновременного излучения в указанных диапазонах с качеством, соответствующим газовым лазерам (высокая выходная мощность, низкая расходимость и спектрально узкие линии) была успешно получена для неселективного резонатора [2].

1 Описание установки. Для получения генерации в ближнем и среднем ИК диапазонах использовался ТЕА-лазер (Transversely Excited Atmospheric pressure laser – лазер с поперечным возбуждением при атмосферном давлении) с быстрым (несколько десятков наносекунд) вводом энергии в активную среду, разработанный в ГНПО «Оптика, оптоэлектроника и лазерная техника» НАН Беларуси для спектроскопических исследований и дистанционного газоанализа [3]. Благодаря быстрому вводу энергии лазер может работать как на молекулах СО₂, так и на электронных переходах инертных газов.

Для получения спектральных линий генерации была применена оптическая схема резонатора, выполненная по неавтоколлимационной схеме с использованием дифракционной решетки и дополнительных зеркал (Рис. 1).

Генерация для каждой их 4-х линий формируется в своем резонаторе, а на выходе присутствует четырехволновое излучение в двух спектральных диапазонах 1÷4 мкм и 8÷12 мкм. При необходимости можно организовать отдельный вывод излучения для каждого из каналов через 00' порядки. При этом используется комбинированная газовая смесь, содержащая помимо молекул СО₂ инертные газы, например, Хе:СО₂:Не = 1:1:100.



1 – разрядная камера; 2 – окно Брюстера; 3– дифракционная решетка; 4, 5, 6, 7 – отражающие зеркала резонатора; 8 – выходное зеркало резонатора

Рис. 1. Оптическая схема лазера.

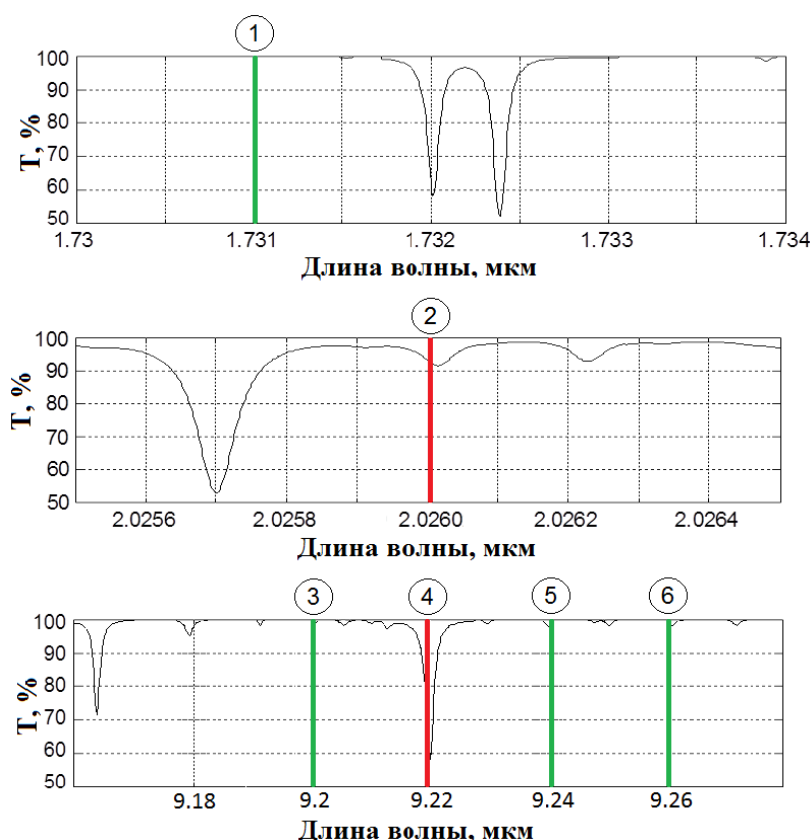
Газовая смесь, обычно используемая в ТЕА CO_2 -лазерах, похожа на смесь, применяемую для получения генерации в инертных газах в диапазоне 1 - 4 мкм, наличием большого количества гелия. Известно также, что присутствие небольшого количества инертных газов в рабочей смеси CO_2 -лазера только улучшает выходные параметры генерации за счет лучшего расселения нижнего лазерного уровня и смещения в оптимальную сторону параметра E/N [4]. Удаление из смеси азота, хотя и уменьшает выходную энергию импульсов, но часто используется на практике для уменьшения длительности импульсов за счет ликвидации так называемого «азотного хвоста» [5].

В ТЕА лазере использовалась система электропитания с малой индуктивностью. Возбуждение активной среды, как и в ТЕА-лазере, описанном в [6], происходит между профилированными электродами длиной 70 см и шириной 3 см. Межэлектродный промежуток составляет 2 см. Питание цепи основного и вспомогательных разрядов осуществляется от батареи малоиндуктивных конденсаторов общей емкостью 0,2 мкФ, заряжаемых до ~20 кВ.

Эффективная УФ-преионизация организовывалась за счет боковых искровых разрядов, которая позволяла получать импульсы высокого напряжения с крутым передним фронтом, а также была способна гораздо быстрее, со скоростью ≥ 300 Дж/мкс, вводить энергию при высокой однородности разряда. Это принципиально важно для создания инверсии в инертных газах (на неионизированных атомах типа Xe I, Kr I, Ar I и т.д.) для достижения устойчивого разряда в широком диапазоне варьирования состава активной среды. Длительности электрических импульсов как на полувысоте, так и передних и задних фронтов были относительно короткими, и не превышали 200 нс.

2 Применение лазера. С использованием спектральных линий одновременной генерации ТЕА лазера, генерирующего излучение одновременно на нескольких спектральных линиях в ближнем и среднем ИК диапазоне, можно создать чувствительный газоанализатор, позволяющий проводить измерения в условиях «замороженной» атмосферы. Линии генерации, пригодные для использования в газоанализаторе и спектр пропускания атмосферы в диапазонах генерации лазера приведены на Рис. 2.

Генерация в селективном резонаторе лазера в диапазоне 1÷4 мкм была представлена мощными линиями ксенона $5d[3/2]_1^0 - 6p[3/2]_1$ ($\lambda = 2,026$ мкм) и $5d[3/2]_1^0 - 6p[5/2]_2$ ($\lambda = 1,731$ мкм), а в диапазоне 8÷12 мкм резонатор настраивался на пары линий из набора: 9(R34) ($\lambda = 9,200$ мкм), 9(R30) ($\lambda = 9,219$ мкм), 9(R26) ($\lambda = 9,239$ мкм) и 9(R24) ($\lambda = 9,249$ мкм). Выбор линий был проведен на основе расчетов спектра пропускания атмосферы с помощью базы данных HITRAN для проведения эффективного определения содержания в атмосфере таких газов, как CO_2 , и NH_3 . На Рис. 2, где приведен график пропускания атмосферы в соответствующих линиях генерации областях спектра, вертикальными цветными линиями обозначены on-lines – красным цветом и возможные off-lines – зеленым.



- (1) – $5d [3/2]_01 - 6p[5/2]_2$ ($\lambda = 1,731$ мкм); (2) – $5d[3/2]_01-6p[3/2]_1$ ($\lambda = 2,026$ мкм);
 (3) – $9(R34)$ ($\lambda = 9,200$ мкм); (4) – $9(R30)$ ($\lambda = 9,219$ мкм);
 (5) – $9(R26)$ ($\lambda = 9,239$ мкм); (6) – $9(R24)$ ($\lambda = 9,249$ мкм)

Рис. 2. Результаты расчета пропускания атмосферы вблизи линий генерации ксенона.

Из Рис. 2 видно, что линия $5d [3/2]_01 - 6p[5/2]_2$ ($\lambda = 1,731$ мкм) может быть использована в качестве *off*-линии, так как не имеет совпадений с линиями поглощения присутствующих в атмосфере газов. Вместе с тем, линия $5d[3/2]_01-6p[3/2]_1$ ($\lambda = 2,026$ мкм) может быть использована как *on*-линия для измерения концентрации CO_2 . Расчеты показали, что при таком выборе линий и длине трассы 250 м, возможно осуществлять измерения газов с минимально обнаружимой концентрацией C_{\min} 200 ppm и 300 ppb для CO_2 и NH_3 , соответственно.

Заключение. Применение многоволнового лазера позволит создать чувствительный газонализатор для детектирования такого важного «парникового газа» как углекислый, и опасного загрязнителя атмосферы – аммиака. При этом за счет многоволновой генерации точность и экспрессность измерений обеспечивается при проведении измерений выполнением условия «замороженной» атмосферы.

Литература

1. Н.Г. Басов, В.В. Баранов, В.А. Данилычев и др. / О влиянии E/N на энергетические характеристики лазеров высокого давления с накачкой электронным пучком на смесях He-Ar, Kr, Xe // Квантовая электроника, – 1986. – т.13., №3. – с.488-492.
2. Козлов В. Л., Кугейко М. М. / Прозрачномеры-газоанализаторы на двухволновом полупроводниковом лазере // Приборы и методы измерений. – 2011. – №. 2 (3). – С. 5-12.
3. С. С. Шавель, В. А. Горобец, И.Н. Пучковский, С.Б. Бушук. / ТЕА лазер, генерирующий в нескольких спектральных диапазонах // Журнал прикладной спектроскопии. – 2023. – Т. 90, № 6. – С. 835-842.
4. Churakov .V.V, A. Gorobets and V.O.Petukhov / Effective oscillation of a CW CO_2 laser in the range of 11 μm (0111-1110 band) // Infrared Physics, – 1989. – V.29, No 2-4. – P.339-341.

5. Андреев Ю.М., Воеводин В.Г., Гейко П.П., Горобец В.А., Ланская О.Г., Петухов В.О., Солдаткин Н.П., Тихомиров А.А. / Лидарные системы и их оптико-электронные элементы // Под общей редакцией чл.-кор. РАН М.В. Кабанова. Томск: Изд-во Института оптики атмосферы СО РАН, 2004. 526 с.
6. В.А. Горобец, В.О. Петухов, С.Я. Точицкий, В.В. Чураков. / Перестраиваемый по линиям обычных и нетрадиционных полос TE CO₂ лазер для лидарных систем // Квантовая электроника, т.22, № 5, 1995, с. 514-518.
4. Churakov V.V, A. Gorobets and V.O.Petukhov / Effective oscillation of a CW CO₂ laser in the range of 11 μm (0111-1110 band) // Infrared Physics, – 1989. – V.29, No 2-4. – P.339-341.
5. Андреев Ю.М., Воеводин В.Г., Гейко П.П., Горобец В.А., Ланская О.Г., Петухов В.О., Солдаткин Н.П., Тихомиров А.А. / Лидарные системы и их оптико-электронные элементы // Под общей редакцией чл.-кор. РАН М.В. Кабанова. Томск: Изд-во Института оптики атмосферы СО РАН, 2004. 526 с.
6. В.А. Горобец, В.О. Петухов, С.Я. Точицкий, В.В. Чураков. / Перестраиваемый по линиям обычных и нетрадиционных полос TE CO₂ лазер для лидарных систем // Квантовая электроника, т.22, № 5, 1995, с. 514-518.

Содержание

ОПТИКА, ЛАЗЕРНАЯ ФИЗИКА И ОПТИЧЕСКИЕ ТЕХНОЛОГИИ

<i>Анискевич В.Э., Лизурчик А.Д.</i> Твердотельный лазер с поперечной накачкой для систем лазерной очистки	4
<i>Бакей И.К.</i> Методы улучшения качества цифровых изображений для проведения экспертных исследований	7
<i>Балыкин И.В., Рыжевич А.А.</i> Влияние имитатора атмосферы на положение оси бесселева светового пучка, сформированного из гауссова пучка, прошедшего через имитатор	9
<i>Балыкин И.В., Рыжевич А.А., Смехович О.А., Яроцкая М.С., Визгин А.П., Циркун Т.Д.</i> Программа для расчета траекторий микрочастиц в переменном четырехлучевом световом поле.....	11
<i>Даденков И.Г.</i> Исследование фотохромного эффекта в кристаллах силленитов, индуцированного лазерными импульсами на разных длинах волн.....	15
<i>Ерёмченко Е.А.</i> Экспериментальное определение порогов графитизации монокристалла синтетического алмаза под воздействием импульсного лазерного излучения	17
<i>Ефимова Т.А.</i> Анализ перспективности применения наночастиц золота и серебра для micro-LED дисплеев	21
<i>Жигар Е.В.</i> Апробация возможностей спектроскопии диффузного отражения при исследовании спектральных свойств пищевых продуктов.....	24
<i>Кабанова О.С., Рушинова И.И.</i> Поляризационные свойства двумерной дифракционной решетки на основе бинарной ориентации нематического жидкого кристалла.....	27
<i>Кудрявцев А.С.</i> Применение методов машинного обучения в волоконно-оптических системах	30
<i>Пантелеева Е.П., Мельникова Е.А.</i> Электрически управляемая жидкокристаллическая линза Френеля для определения топологического заряда фазового сингулярного пучка.....	33
<i>Липский С.А., Романов О.Г.</i> Численное моделирование процесса плавления тонких металлических пленок в рамках двухтемпературной модели	35
<i>Лахмицкий Н.В., Чижевский В.Н.</i> Фантомные резонансы в оптоэлектронном искусственном импульсном нейроне.....	38
<i>Смоляков А.А., Чижевский В.Н.</i> Формирование фантомных изображений с использованием вертикально-излучающих лазеров	42
<i>Славинский И.Ю., Анискевич В.Э., Чернышев А.И.</i> Использование волоконных лазеров для удаления с поверхности стали коррозионного слоя	45
<i>Чернышев А.И., Славинский И.Ю.</i> Мощностные и пространственные характеристики излучения промышленных волоконных лазеров ИК диапазона	49
<i>Яськов А.С.</i> Оценка применимости устройства для юстировки источников оптического излучения основанного на методе параллакса	52

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА И ФИЗИКА ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ, АСТРОФИЗИКА

<i>Анциух М.А., Леоник П.А., Пешко И.А.</i> Минимизация времени смешивания в решетках Руднера-Левитова оптимизацией начального состояния	57
<i>Бурый А.В., Ивашкевич А.В.</i> Нерелятивистская частица со спином 2 в магнитном поле.....	60
<i>Головнев А.В., Семенова А.Н., Вандеев В.П.</i> Гравитационные волны в теории относительности Хаяши-Ширафуджи	64
<i>Жук Е.А., Галинская Д.С., Малевич А.Е., Пищевич Г.А.</i> Строение, конформации и торсионные ИК спектры молекулы HSSOH.....	66
<i>Bury A.V., Ivashkevich A.V., Semenyuk O.A.</i> Massless Stueckelberg field and the gauge degrees of freedom	68
<i>Ковалева Е.Е., Малевич А.Э., Пищевич Г.А.</i> Туннельное расщепление некоторых колебательных уровней энергии а катионе $^+SH_3$ и радикале GeH_3	71
<i>Kurhuzava A.</i> Diffusion spectra of ultrarelativistic shell radiation depending on the initial energy distribution in the shell.....	74
<i>Комаров С.О.</i> Электромагнитное излучение заряда, движущегося вблизи черной дыры Шварцшильда.....	77
<i>Петров Ю.С., Комаров С.О.</i> Реконструкция движения звезды в поле Шварцшильда с использованием производной функции красного смещения её излучения	80
<i>Савенок А.В., Комаров С.О.</i> Эволюция поляризации электромагнитного излучения от источника, движущегося в окрестности чёрной дыры Шварцшильда	84
<i>Пешко И.А.</i> Смешивание в цепочках волноводов с потерями	87
<i>Синегрибов Д.В., Андреев В.В., Серенкова И.А.</i> Ограничения на параметры дополнительного нейтрального тяжелого бозона на ускорителе CLIC	90
<i>Хартон М.М., Новицкий А.В.</i> Влияние хиральности полуметаллов Вейля на рассеивающие свойства цилиндров	95

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ, НАНОСТРУКТУР И МАТЕРИАЛОВ

<i>Жойдик А.А., Козич А.В., Баглов А.В., Хорошко Л.С.</i> Адсорбция азота на монослое ReS_2 : квантово-механическое моделирование	100
<i>Королев Д.С., Матюнина К.С., Никольская А.А., Крюков Р.Н., Белов А.И., Михайлов А.Н., Сушков А.А., Павлов Д.А., Тетельбаум Д.И.</i> Состав, структура и фотолюминесцентные свойства ионно-синтезированных нановключений оксида галлия.....	102
<i>Зелковский Е.А., Карпилова Е.С., Радюк Д.В.</i> Электрофизические свойства серебряно-графеновых наночастиц с комплексом метилпропилфенилпропановой кислоты для микроволновой терапии опухолевой ткани шейки матки	104

<i>Лихачев А.А., Баранова М.С., Данилюк А.Л.</i> Метод вложения в моделях эффективной среды для учёта взаимодействия электромагнитного излучения с наноккомпозитом	108
<i>Пилипович А.С.</i> Квантово-химическое исследование Тиофлавина Т в основном и электронно-возбужденном состоянии	111
<i>Лишко Е.В., Баглов А.В., Хорошко Л.С., Мигас Д.Б., Тиванов М.С.</i> Кристаллическая структура объемного и двумерного перовскита (Rb)Sr ₂ Nb ₃ O ₁₀	115
<i>Волынец Н.И., Мисюк Ф.Ю., Горохов Г.В., Городецкий Д.В.</i> Влияние гамма-лучей ⁶⁰ Со на диэлектрическую проницаемость полимерных композиционных материалов	119
<i>Орловский А.В., Новицкий А.В.</i> Резонансный перенос энергии вблизи двухслойной РТ-симметричной среды	122
<i>Римский Г.С., Желудкевич А.Л.</i> Влияние термобарической обработки на кристаллическую структуру и магнитные характеристики твердых растворов MnZn _{1-x} Cr _x Sb	126
<i>Романович М.Г.</i> Исключительные точки \mathcal{PT} -симметричных структур с изотропным и анизотропным дефектным слоем	129
<i>Сиротюк А.С., Баглов А.В., Хорошко Л.С., Карпинский Д.В.</i> Диэлектрические свойства ферроманганитов висмута.....	132
<i>Таболитч А.А., Шелестова В.А., Кирис В.В., Бельков М.В.</i> Применение спектроскопии комбинационного рассеяния для изучения углеродных волокон	136
<i>Таболитч А.А., Третьякова А.И., Плавская Л.Г., Ананич Т.С., Нагорный Р.К., Плавский В.Ю., Ляшенко Л.С., Воронай Е.С., Луговский А.П.</i> Исследование хемилюминесцентным методом закономерностей фотоповреждения грамотрицательных бактериальных клеток, сенсibilизированных индотрикарбощианиновым красителем	140
<i>Ильин А.Ю., Старухин А.С., Павич Т.А.</i> Деактивация триплетных состояний металлопорфиринов в растворах с молекулярным кислородом	143

ФИЗИКА ПЛАЗМЫ И ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА

<i>Бороховский Г.В., Тимощенко И.А.</i> Исследование эффективности смешивания разнородных жидкостей в микрогидродинамических устройствах различной геометрии	146
<i>Богачев Н.Н., Колик Л.В., Бакшаев А.С., Конькова А.С., Кончечков Е.М.</i> Источники низкотемпературной плазмы атмосферного давления для биомедицинских применений	150
<i>Безверхняя Д.М., Саакян А.Т., Пузырёв В.Н.</i> Исследование спектральных характеристик плазмы мишеней из меди, серы и вольфрама в диапазоне мягкого рентгеновского излучения.....	153
<i>Захарчук М.М., Саакян А.Т., Пузырёв В.Н.</i> Пространственно-угловое рассеяние лазерного излучения плазмой при облучении мишеней из алюминия и вольфрама.....	155
<i>Наговицын А.А., Гусаков Е.З., Попов А.Ю.</i> Низкопороговый двухплазмонный параметрический распад необыкновенной волны при монотонном профиле плотности.....	157
<i>Нечаев С.А., Ирзак М.А.</i> Полноволновое моделирование волн в плазме токамака в промежуточном диапазоне частот с учетом немаксвелловской функции распределения электронов	161

<i>Казак А.В., Кириллов А.А., Иванова П.А., Симончик Л.В., Томкович Н.В.</i> Влияние температуры поверхности катода на параметры слоя катодного падения потенциала тлеющего разряда атмосферного давления на постоянном токе в гелии.....	165
<i>Хартон М.М.</i> Баротропная неустойчивость зонального потока	169

ФИЗИКА В БИОЛОГИИ И МЕДИЦИНЕ

<i>Шершень В.С., Старухин А.С., Павич Т.А.</i> Перенос энергии в химически связанных бихромофорных комплексах куркумина и металлопорфиринов	174
<i>Коблов И.В., Каскех В., Кравченко И.Е., Зорина Т.Е., Зорин В.П.</i> Роль скорости высвобождения порфириновых фотосенсибилизаторов в определении эффективности их наноразмерных фармакологических форм	176

ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В ФИЗИКЕ

<i>Герцова А.В., Юмашев К.В., Трусова Е.Е., Гоман В.И., Павловский Л.К.</i> Температурные коэффициенты показателя преломления моноклинного кристалла берилата лантана, активированного ионами неодима	181
<i>Савиных И.Э.</i> Разработка алгоритмов радиопросвечивания для восстановления концентрации электронов на основе методов томографии	185
<i>Сочивко Н.С., Гавриловец В.В.</i> Моделирование излучения заряженных частиц высоких энергий в ориентированных кристаллах с применением методов глубокого обучения	189
<i>Фомин М.О.</i> Связь между полным электронным содержанием ионосферы и параметрами солнечного излучения.....	192
<i>Юдыцкая К.С.</i> Влияние увеличения скорости передачи данных на информационные параметры волоконно-оптических динамических запоминающих устройств	195

ПРИБОРЫ И МЕТОДЫ ИЗМЕРЕНИЙ

<i>Магонь Н.С., Углов В.В.</i> Идентификация структурных изменений аморфного диоксида кремния методом рентгеноструктурного анализа	201
<i>Шавель С.С., Горобец В.А., Бушук С.Б.</i> ТЕА лазер, генерирующий в ближнем и среднем ИК диапазоне	204

Научное издание

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

**XI Международная школа-конференция молодых
учёных и специалистов**

Современные проблемы физики – 2024

Минск, 24 – 26 апреля 2024



Сборник научных трудов

Подписано к печати 18.04.2024.
Формат 60x84/16. Бумага офсетная.
Печать цифровая. Усл. печ. л. 12,3.
Тираж 60. Заказ 977.

Отпечатано с готового оригинал макета в ООО «Ковчег»
Свидетельство о государственной регистрации издателя,
изготовителя, распространителя печатных изданий
№ 1/381 от 01.07.2014.

ул. Л. Беды, 11/1-205, 220040 г. Минск.
Тел./факс: (8017) 379 19 81
e-mail: kovcheg_info@mail.ru