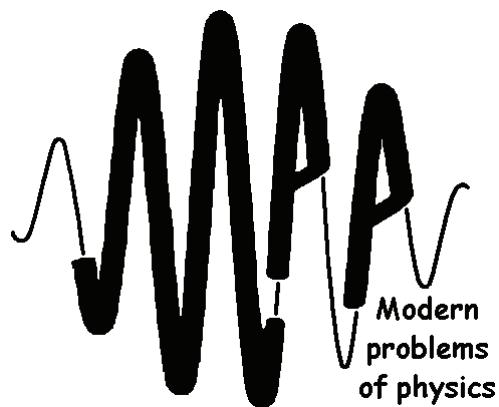


Национальная академия наук Беларусь
Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларусь
Белорусский республиканский фонд фундаментальных исследований
Белорусское физическое общество



Конференция молодых учёных и специалистов

Современные проблемы физики

Минск, 10-12 июня 2008

Сборник научных трудов конференции

Под редакцией
В. В. Машко
В. З. Зубелевича

Минск, 2008

«Современные проблемы физики», конф. молодых учёных и специалистов (2008 ; Минск). Конференция молодых учёных и специалистов «Современные проблемы физики» – 2008 , 10–12 июня 2008 г. [Текст] : [сб. науч. тр. конф.] / под ред. В. В. Машко, В. З. Зубелевича. Минск : Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси, 2008. – 224 с. ; 21 см. – В надзаг. : Национальная академия наук Беларуси, Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси, Белорусский республиканский фонд фундаментальных исследований, Белорусское физическое общество. – 70 экз.

Издание включает материалы по докладам конференции молодых учёных и специалистов «Современные проблемы физики», прошедшей с 10 по 12 июня 2008 г. в Доме отдыха «Исльчи» вблизи дер. Раков Минского р-на. Тематика конференции охватила разделы: физическая и нелинейная оптика; лазерная физика и спектроскопия; теоретическая физика и физика фундаментальных взаимодействий; физика наноструктур; оптические приборы, материалы и технологии; физика полимеров и органических соединений, лазеры в биологии и медицине. Издание может представлять интерес для научных работников и аспирантов, занимающихся исследованиями в области современных направлений физики и их применений для решения практических задач.

Конференция молодых учёных и специалистов

Современные проблемы физики

Минск, 10-12 июня 2008

Программный комитет

Председатель: В. В. Кабанов, Минск, ИФ НАН Беларуси

Зам. председателя: В. В. Машко, Минск, ИФ НАН Беларуси

П. А. Апанасевич, Минск, ИФ НАН Беларуси
В. Н. Белый, Минск, ИФ НАН Беларуси
Е. С. Воропай, Минск, БГУ
С. В. Гапоненко, Минск, ИФ НАН Беларуси
Б. М. Джагаров, Минск, ИФ НАН Беларуси
Н. С. Казак, ИФ НАН Беларуси

В. С. Камышников, Минск, БелМАПО
С. Я. Килин, Минск, ИФ НАН Беларуси
Ю. А. Курочкин, ИФ НАН Беларуси
С. А. Тихомиров, ИФ НАН Беларуси
О. Н. Третинников, Минск, ИФ НАН Беларуси
А. П. Чайковский, Минск, ИФ НАН Беларуси

Организационный комитет

Председатель: В. В. Машко, Минск, ИФ НАН Беларуси

Уч. секретарь: А. В. Малинка, Минск, ИФ НАН Беларуси

В. З. Зубелевич, Минск, ИФ НАН Беларуси
А. В. Буцень, Минск, ИФ НАН Беларуси
С. Г. Русов, Минск, ИФ НАН Беларуси
П. В. Павлов, Минск, ИФ НАН Беларуси
Ю. Г. Василевский, Минск, ИФ НАН Беларуси

А. Г. Рябцев, Минск, БГУ
Е. А. Невар, Минск, ИФ НАН Беларуси
Д. Н. Бусько, Минск, ИФ НАН Беларуси
Г. И. Курило, Минск, ИФ НАН Беларуси

ОГЛАВЛЕНИЕ

ПРЕДИСЛОВИЕ	8
СЕКЦИЯ: ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА И ФИЗИКА ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ	9
КРАСНОЕ СМЕЩЕНИЕ ПРОИЗВОЛЬНО ДВИЖУЩЕГОСЯ ИСТОЧНИКА В ПОЛЕ НЕВРАЩАЮЩЕЙСЯ ЧЕРНОЙ ДЫРЫ	
А. Л. Бобрик	10
ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ СОЛИТОНОВ В РАМКАХ СЛАБО НЕЛОКАЛЬНОЙ МОДЕЛИ ШРЕДИНГЕРА С НЕЛИНЕЙНОСТЯМИ ТРЕТЬЕГО И ПЯТОГО ПОРЯДКОВ	
М. А. Молчан	16
АНАЛИТИЧЕСКОЕ ВЫРАЖЕНИЕ ДЛЯ КИНЕТИЧЕСКОГО КОЭФФИЦИЕНТА ДИФФУЗИИ РЕШЕТОЧНОГО ФЛЮИДА НА ДИНАМИЧЕСКИ НЕУПОРЯДОЧЕННОЙ РЕШЕТКЕ С ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНЫМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ МЕЖУЗЕЛЬНЫХ БАРЬЕРОВ	
Я. Г. Грода	21
ДИФФУЗИЯ ЛЕНГМЮРОВСКОГО РЕШЕТОЧНОГО ГАЗА НА СТАТИЧЕСКИ НЕУПОРЯДОЧЕННОЙ РЕШЕТКЕ С ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНЫМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ БАРЬЕРОВ	
В. С. Вихренко, Я. Г. Грода	26
ВЛИЯНИЕ ХАРАКТЕРА МЕЖЧАСТИЧНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА ДИФФУЗИОННЫЕ СВОЙСТВА РЕШЕТОЧНОГО ФЛЮИДА НА СТАТИЧЕСКИ НЕУПОРЯДОЧЕННОЙ РЕШЕТКЕ С ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНЫМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ МЕЖУЗЕЛЬНЫХ БАРЬЕРОВ	
Я. Г. Грода	30
ПРОСТРАНСТВО-ВРЕМЯ АНОМАЛИИ "ПИОНЕРОВ"	
И. А. Сивцов.....	35
ПОИСК И ИДЕНТИФИКАЦИЯ ЭФФЕКТОВ Z' -БОЗОНОВ НА ЭЛЕКТРОН- ПОЗИТРОННОМ КОЛЛАЙДЕРЕ	
Н. В. Карпенко.....	42
МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗЛУЧЕНИЯ ПУЛЬСАРА, ДВИЖУЩЕГОСЯ В ПОЛЕ ЧЕРНОЙ ДЫРЫ	
А. Н. Тарасенко	47
ГРАВИТАЦИОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В ЭЛЕКТРОДИНАМИКЕ	
А. Н. Егоров, А. Н. Сердюков	53
НОВЫЕ АНАЛИТИЧЕСКИЕ ИНСТАНТОННЫЕ РЕШЕНИЯ ДЛЯ СКАЛЯРНЫХ ПОЛЕВЫХ ТЕОРИЙ С ВЫРОЖДЕННЫМ ВАКУУМОМ	
Р. Г. Шуляковский	58

СЕКЦИЯ: ФИЗИЧЕСКАЯ И НЕЛИНЕЙНАЯ ОПТИКА	64
САМОСИНХРОНИЗАЦИЯ МОД ПРИ КАСКАДНОЙ ВКР ГЕНЕРАЦИИ СТОКСОВЫХ КОМПОНЕНТ	
Д. Н. Бусько, В. А. Лисинецкий, Р. В. Чулков	65
ЭЛЕКТРОУПРАВЛЯЕМАЯ МОДУЛЯЦИЯ СВЕТА ПОЛИМЕРНЫМИ ПЛЕНКАМИ С МЕЛКИМИ КАПЛЯМИ ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА	
П. Г. Максименко, А. В. Конкович, В. А. Лойко	69
ПРИБЛИЖЕННЫЙ МЕТОД РАСЧЕТА ПОКАЗАТЕЛЕЙ ОСЛАБЛЕНИЯ КАПСУЛИРОВАННОГО ПОЛИМЕРОМ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО СЛОЯ	
П. Г. Максименко, А. В. Конкович, В. А. Лойко	74
ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МИКРОСТРУКТУРИРОВАННЫХ СВЕТОВОДОВ	
А. Д. Пряников, Д. А. Гапонов.....	79
СЕКЦИЯ: ЛАЗЕРНАЯ ФИЗИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ	81
ТЕРМООПТИЧЕСКИЕ ИСКАЖЕНИЯ ЛАЗЕРНОГО АКТИВНОГО ЭЛЕМЕНТА ИЗ КРИСТАЛЛА Nd ³⁺ :KGW	
П. А. Лойко, К. В. Юмашев	82
ОЦЕНКА ТЕРМОЛИНЗЫ В КВАЗИНЕПРЕРЫВНОМ ТВЕРДОТЕЛЬНОМ ЛАЗЕРЕ С ВКР-САМОПРЕОБРАЗОВАНИЕМ И МОЩНОЙ ДИОДНОЙ НАКАЧКОЙ	
А. А. Кононович	87
ВКР ЛАЗЕР НА КРИСТАЛЛЕ КГВ С НЕУСТОЙЧИВЫМ ТЕЛЕСКОПИЧЕСКИМ РЕЗОНАТОРОМ	
В. А. Лисинецкий	92
ГЕНЕРАЦИЯ МОЩНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В БЛИЖНЕМ ИК-ДИАПАЗОНЕ В ТВЕРДОТЕЛЬНЫХ ВКР ЛАЗЕРАХ	
В. А. Лисинецкий, Д. Н. Бусько	97
УСИЛЕНИЕ ВКР ИЗЛУЧЕНИЯ ПЕРВОЙ СТОКСОВОЙ КОМПОНЕНТЫ С МАЛОЙ РАСХОДИМОСТЬЮ В КРИСТАЛЛЕ НИТРАТА БАРИЯ	
В. А. Лисинецкий	102
ЛАЗЕРНЫЙ СПЕКТРАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ СТРОИТЕЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ЦЕМЕНТА	
В. Ю. Гуринович, В. В. Кирис	107
ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОБЩЕГО СОДЕРЖАНИЯ УГЛЕРОДА В ПОЧВАХ СОВРЕМЕННЫМИ МЕТОДАМИ ЛАЗЕРНОГО СПЕКТРАЛЬНОГО АНАЛИЗА	
В. В. Кирис	111
ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ РАСТВОРОВ ОРГАНИЧЕСКИХ КРАСИТЕЛЕЙ ПРИ ОРИЕНТАЦИОННОЙ РЕЛАКСАЦИИ РАСТВОРИТЕЛЯ	
А. Н. Козловский, И. А. Дремук	116
СИГНАЛЫ ОДНОИМПУЛЬСНОГО ЯДЕРНОГО ЭХА В МАГНИТОУПОРЯДОЧЕННЫХ СРЕДАХ В НЕРЕЗОНАНСНЫХ УСЛОВИЯХ ВОЗБУЖДЕНИЯ	
В. С. Кузьмин, В. М. Колесенко, Е. П. Борботко	121

ИЗУЧЕНИЕ СВЯЗИ ОПТИЧЕСКИХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ ВИННЫХ ДИСТИЛЛЯТОВ С ВОЗРАСТОМ ИХ ВЫДЕРЖКИ	
Е. И. Незальзова, Е. А. Скорбанова, Б. С. Гаина	126
 СЕКЦИЯ: ЛАЗЕРЫ В БИОЛОГИИ И МЕДИЦИНЕ 130	
СЕЛЕКТИВНОСТЬ ФОТОСЕНСИБИЛИЗИРОВАННОГО ПОВРЕЖДЕНИЯ КЛЕТОК КОСТНОГО МОЗГА ПРИ ОНКОГЕМАТОЛОГИЧЕСКИХ ЗАБОЛЕВАНИЯХ	
Д. А. Афанасенко, В. П. Савицкий, В. П. Зорин	131
МОРФОЛОГИЯ МОНОНУКЛЕАРОВ ДЛЯ ЗАДАЧИ ИДЕНТИФИКАЦИИ КЛЕТОК ПО ДАННЫМ СВЕТОРАССЕЯНИЯ	
О. А. Грицай, Г. И. Рубан, В. А. Лойко, Н. В. Гончарова	134
 СЕКЦИЯ: ФИЗИКА НАНОСТРУКТУР 138	
РАСПРОСТРАНЕНИЕ РАБИ-ВОЛН В НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ НАНОСТРУКТУРАХ	
Г. Я. Слепян, Е. Д. Ерчак, С. А. Максименко	139
МОРФОЛОГИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОСТРУКТУР ОКСИДА ЦИНКА, СИНТЕЗИРОВАННЫХ МЕТОДОМ ПОГРУЖЕННОГО РАЗРЯДА В ЖИДКОСТИ	
Д. А. Лопатик, Е. А. Невар, Е. А. Быкова	144
ИЗУЧЕНИЕ НАНОСТРУКТУРНЫХ СОСТОЯНИЙ В ПЛАТИНЕ, ИНИЦИРОВАННЫХ ИОННЫМ ОБЛУЧЕНИЕМ	
Е. В. Медведева, В. А. Ивченко	149
ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ВОДОРАСТВОРИМЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК CdSe/ZnS С БЕЛКАМИ ПЛАЗМЫ	
В. А. Решетов, В. П. Зорин.....	153
РЕЗОНАНСНЫЕ МЕТОДЫ ДЛЯ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ	
В. А. Карпович, Г. Я. Слепян, О. В. Филипенок	158
 СЕКЦИЯ: ФИЗИКА ПОЛИМЕРОВ И ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ..... 163	
ВЛИЯНИЕ СОСТАВА ЖИДКИХ СЦИНТИЛЛЯТОРОВ НА ОТНОШЕНИЕ «ПИК/ДОЛИНА» ПРИ РЕГИСТРАЦИИ ИОНИЗИРУЮЩИХ ИЗЛУЧЕНИЙ	
Т. Е. Горбачева, Ю. Т. Выдай, В. М. Шершуков, В. А. Тарасов, А. И. Бедрик, Е. Я. Кожурова, Д. А. Елисеев	164
ОБРАЗОВАНИЕ ПЕРВОГО СУПЕРВИТКА В КОЛЬЦЕВОЙ ЗАМКНУТОЙ МОЛЕКУЛЕ ДНК	
А. В. Ширко, А. Н. Камлюк, В. Б. Немцов	168
УПАКОВКА ДНК НА БЕЛКОВЫЙ КОМПЛЕКС ПОД ДЕЙСТВИЕМ СЛЕДЯЩЕЙ СИЛЫ	
А. Н. Камлюк, С. А. Борисевич, А. В. Ширко	173
МЕХАНИЗМЫ ВОССТАНОВЛЕНИЯ МЕНАДИОНА И АКТИВАЦИЯ КИСЛОРОДА В КЛЕТКАХ ГЛИОМЫ	
Н. Г. Крылова, Т. А. Кулагова, Г. Н. Семенкова.....	177

СЕКЦИЯ: ОПТИЧЕСКИЕ ПРИБОРЫ, МАТЕРИАЛЫ И ТЕХНОЛОГИИ.....	182
ОЦЕНКА ПРЕДЕЛЬНОЙ ЭФФЕКТИВНОСТИ МНОГОПЕРЕХОДНЫХ СОЛНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ	
Г. Л. Зыков, А. Л. Зыков	183
ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК ИНТЕГРАЛЬНО- ОПТИЧЕСКОГО ФИЛЬТРА НА ОСНОВЕ ОДНО- И ДВУХКОЛЬЦЕВЫХ МИКРОРЕЗОНАТОРОВ	
Г. Л. Зыков, А. Л. Зыков	188
ИСПОЛЬЗОВВАНИЕ ТРИАНГУЛЯЦИОННОГО ЛАЗЕРНОГО СКАНЕРА ДЛЯ СОЗДАНИЯ ТРЕХМЕРНЫХ МОДЕЛЕЙ	
Е. О. Котяшёв, И. А. Корнеева	194
СВЕТОСОБИРАНИЕ В ДЕТЕКТОРЕ МАММОГРАФА	
В. П. Гаврилюк, В. Ю. Педаш, А. С. Раевский	198
ЭЛЕКТРОДИНАМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ НАБЛЮДЕНИЯ ПОЛЯРИЗАЦИОННОЙ СЕЛЕКТИВНОСТИ ДНК	
А. П. Балмаков, И. В. Семченко	203
ДИФФУЗИОННЫЙ ВОЛНОВОД Cr:ZnSe НА ZnSe	
Е. Л. Барсукова, Л. И. Постнова, В. И. Левченко.....	208
АДАПТИВНЫЙ СЕНСОР ВОЛНОВОГО ФРОНТА С МАТРИЦЕЙ ГОЛОГРАФИЧЕСКИХ МИКРОЛИНЗ	
А. А. Голобородько, В. П. Данько, В. Н. Курашов, Д. В. Поданчук, Н. С. Сутягина.....	212
ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ОБЪЕМНЫХ АКУСТИЧЕСКИХ ВОЛН С ВРАЩАЮЩИМСЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКИМ ПОЛЕМ В КЕРАМИКЕ НА ОСНОВЕ ТИТАНАТА БАРИЯ	
С. А. Хахомов, И. В. Семченко, С. Д. Барсуков	215
АЛФАВИТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ АВТОРОВ	222
ПРИМЕРЫ ОФОРМЛЕНИЯ ССЫЛОК ПО ГОСТ 7.1-2003.....	224

Предисловие

Очередная, ставшая традиционной после возобновления в 2004 г. конференция молодых ученых и специалистов «Современные проблемы физики» проведена с 10 по 12 июня 2008 г. в доме отдыха «Ислочь» под Раковом. Конференция организована во многом силами Совета молодых ученых Института физики им. Б.И. Степанова НАН Беларуси.

Участниками представлено около 50 устных и стендовых докладов по 7 тематическим разделам, охватывающим довольно широкий круг проблем современной физики от фундаментальных взаимодействий до практических приложений в медицине, приборостроении и др. областях.

Основная часть докладов конференции отражена в настоящем сборнике в виде статей. Сюда не вошли лекции, прочитанные молодым ученым по приглашению Оргкомитета известными физиками С.В. Гапоненко («Принципы и перспективы нанофотоники»), С.Я. Килиным («Квантовая информатика и квантовые компьютеры»), Ю.А. Курочкиным («Новые математические методы описания поляризации пучков электромагнитных волн») и вызвавшие большой интерес слушателей. Доклады конференции сопровождались оживленным обсуждением и дискуссией.

Конференция явилась значимым событием для молодых ученых-физиков Беларуси, дала им возможность в ходе тесного общения обсудить актуальные проблемы науки и места молодежи в ней, обменяться новыми идеями, расширить научный кругозор.

В. В. Машко

СЕКЦИЯ:
ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА И ФИЗИКА
ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ

КРАСНОЕ СМЕЩЕНИЕ ПРОИЗВОЛЬНО ДВИЖУЩЕГОСЯ ИСТОЧНИКА В ПОЛЕ НЕВРАЩАЮЩЕЙСЯ ЧЕРНОЙ ДЫРЫ

А. Л. Бобрик

*Белорусский государственный университет, физический факультет,
кафедра теоретической физики, ул. Бобруйская 5, 220050 Минск, Беларусь*

Проблема поиска гравитационных волн является одной из актуальных проблем современной теории гравитации. Гравитационные волны до сих пор не были обнаружены современными гравитационными антеннами из-за слабости гравитационного взаимодействия, а также из-за отсутствия достаточно интенсивных источников излучения вблизи от Земли. На данный момент имеется только косвенное доказательство существования гравитационных волн, основанное на наблюдаемом уменьшении со временем периода обращения двойной звезды PSR1913+16, которое связывают с гравитационным излучением [1].

Предполагается, что двойные системы из компактных объектов (чёрных дыр или нейтронных звёзд) в поле сверхмассивной чёрной дыры в центре нашей галактики могут быть источниками гравитационных волн достаточно высокой интенсивности. Для возможности их обнаружения необходимо знание движения компактных объектов в двойной системе. Информацию о движении можно получить, исследуя электромагнитное излучение таких систем, теоретическому исследованию которого и посвящается данная работа.

Исследуя излучение двойной системы, мы можем рассматривать излучение компактных объектов по отдельности, считая, что закон движения каждого из них задан в некотором общем виде. Сформулируем математическую модель для задачи.

Сверхмассивная чёрная дыра в системе предполагается незаряженной и невращающейся, а возмущение метрики пространства - времени, вносимое наличием двойного объекта, можно считать пренебрежимо малым. Таким образом, пространство - время в рассматриваемой задаче описывается метрикой Шварцшильда:

$$ds^2 = \frac{1}{1 - \frac{2M}{r}} dr^2 + r^2(d\theta^2 + \sin^2 \theta d\varphi^2) - (1 - \frac{2M}{r})c^2 dt^2 \quad (1)$$

Величина M связана с массой черной дыры: $M = \frac{Gm}{c^2}$. Для сверхмассивной чёрной дыры в центре нашей галактики значения массы и гравитационного радиуса равны соответственно $2.6 \cdot 10^6$ масс Солнца, $7.7 \cdot 10^8$ м. Для компактного объекта типичные значения

массы и радиуса составляют соответственно порядка одной массы Солнца и порядка 10^4 м . Следовательно, объект можно рассматривать как точечный источник. Поскольку рассматривается сверхмассивная чёрная дыра, кривизна пространства - времени в области движения источника достаточно мала, поэтому можно пользоваться приближением геометрической оптики. Источник считается изотропным и, без ограничения общности, монохроматическим. Наблюдатель расположен бесконечно далеко (при всех расчётах, кроме расчёта времени хода луча от источника к наблюдателю) в направлении $\theta = 0$. Зависимости амплитуды и частоты, воспринимаемые наблюдателем как функции его собственного времени, являются экспериментально измеряемыми величинами.

В приближении геометрической оптики электромагнитное излучение распространяется по изотропным геодезическим, т.е. по линиям, удовлетворяющим:

$$\frac{d^2 x^i}{d\lambda^2} + \Gamma^i_{kj} \frac{dx^k}{d\lambda} \frac{dx^j}{d\lambda} = 0, \quad (2)$$

где Γ^i_{kj} – коэффициенты связности. Решение системы (2) существенно упрощается ввиду

того, что имеются два интеграла движения $E = (1 - \frac{2M}{r}) \frac{cdt}{d\lambda}$, $L = r^2 \frac{d\theta}{d\lambda}$, которые условно

можно называть соответственно энергией и моментом импульса. Из них удобно составить

величину $D = \frac{L}{E}$, которая называется прицельным параметром орбиты и имеет смысл, по-

добный смыслу прицельного параметра лучей в плоской метрике. Используя интегралы движения, пространственную часть уравнений (2) можно свести к виду:

$$\left(\frac{dr}{d\theta} \right)^2 = \frac{r}{D^2} (r^3 - D^2 r + 2MD^2), \quad \varphi = \text{const} \quad (3)$$

Все орбиты, испущенные из каждого заданного положения источника, могут быть заданы с помощью D и двух логических параметров. Среди таких орбит наибольший интерес представляют орбиты, приходящие к наблюдателю.

Условие прихода луча света к наблюдателю можно сформулировать в виде следующего уравнения:

$$2\pi m - \theta_M = \pm \int \frac{D dr}{\sqrt{r(r^3 - D^2 r + 2MD^2)}} \quad (4)$$

В уравнении (4) θ_M – координата θ источника в момент испускания луча, m – некоторое целое число, интеграл берётся вдоль хода луча, причём с таким знаком, чтобы правая часть (4) была положительна на любом участке интегрирования. Можно показать, что существует бесконечное число решений уравнения (а следовательно и изображений источника), что связано с тем, что луч, идущий к наблюдателю, может совершать неограниченное число оборотов вокруг чёрной дыры. Однако, можно показать, что интенсивность излучения, соответствующего изображению будет быстро спадать с ростом числа оборотов, которые совершает луч на пути к наблюдателю. Тем не менее, несколько изображений будут достаточно яркими для того, чтобы их мог измерить наблюдатель. Поскольку положение источника задаётся как функция его собственного времени τ , уравнение (4) неявно определяет D также как функцию τ . Нужно отметить, что правая часть уравнения (4) сводится к эллиптическим интегралам.

Каждому лучу соответствует время прихода t_∞ луча к наблюдателю, которое задаётся уравнением:

$$c(t_\infty - t_M) = \pm \int \frac{r^2 dr}{(1 - \frac{2M}{r}) \sqrt{r(r^3 - D^2 r + 2MD^2)}}. \quad (5)$$

Здесь t_M – момент испускания луча, а знак берётся по тому же правилу, что и в (4). Нужно отметить, что уравнение (5) определяет неявно время прихода луча в виде $t_\infty(\tau)$.

Расчёт частоты воспринимаемого наблюдателем излучения можно провести, исходя из выражений $u_i u^i = -c^2$, $u_i k^i = -w_0$, $k_i k^i = 0$ для 4-скорости u^i источника и волнового 4-вектора k^i испускаемого луча. При этом w_0 – частота излучения в системе источника. В результате можно получить следующее выражение:

$$w_\infty = \frac{w_0 c}{v_M^0 (1 - \sqrt{1 - \frac{1}{1 - \frac{2M}{r_M}} \frac{c^2 + r_M^2 \sin^2 \theta_M (v_M^\varphi)^2}{(v_M^0)^2} \cos(\zeta - \zeta_u)})}. \quad (6)$$

В данном выражении величины ζ , ζ_u определяются из условий:

$$\operatorname{tg} \zeta_u = \frac{1}{r_M} \sqrt{1 - \frac{2M}{r_M}} \frac{v_M^r}{v_M^\theta}, \quad |\operatorname{tg} \zeta| = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{2M}{r_M}}} \sqrt{\frac{r_M^2}{D^2} - \left(1 - \frac{2M}{r_M}\right)}. \quad (7)$$

Здесь v_M^0 , v_M^ϕ , v_M^r – соответствующие компоненты 4-скорости источника, r_M , θ_M – координаты источника в момент испускания. При нахождении величин ζ , ζ_u из (7) необходимо учитывать то, что их разность соответствует углу между 3-скоростью источника и волновым 3-вектором луча в точке испускания.

Значительный вклад в зависимость (6) даёт эффект, подобный эффекту Доплера в специальной теории относительности. Так, если пространственная компонента скорости источника имеет направление, близкое к пространственной компоненте касательного вектора к траектории луча ($\zeta \approx \zeta_u$), наблюдателем будет восприниматься излучение, смещённое в синюю область спектра, а если пространственная часть скорости будет направлена в противоположную сторону ($\zeta \approx \zeta_u + \pi$), то излучение будет иметь смещение в красную область. Частоты, соответствующие лучам, совершающим большое число оборотов в одну сторону вокруг чёрной дыры, будут иметь близкие значения, поскольку параметр D для всех них будет отличаться очень незначительно. Обратим также внимание на тот факт, что в выражении (7) частота приходящего излучения линейно зависит от частоты испускаемого излучения.

Расчёт функции интенсивности излучения, воспринимаемого наблюдателем, от его собственного времени можно провести, используя “закон сохранения числа фотонов”, рассмотрев узкую трубку света, приходящего к наблюдателю. Расчёт даёт следующее выражение для интенсивности:

$$I_\infty = A \left| \frac{df}{dD} \right|^{-1} \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{2M}{r_M}} \sqrt{r_M^2 - D^2 \left(1 - \frac{2M}{r_M}\right)}} \left(\frac{w_\infty}{w_0} \right)^3 \left| \frac{d\tau}{dt_\infty} \right| \frac{1}{|y(\infty)|}. \quad (8)$$

Причём $y(\infty)$ – это предельное значение решения следующей задачи Коши:

$$\left\{ \begin{array}{l} y'' + \frac{2 - \frac{D^2}{r^2} (1 - \frac{M}{r})}{r (1 - \frac{D^2}{r^2} (1 - \frac{2M}{r}))} y' + \frac{D^2}{r^4 (1 - \frac{D^2}{r^2} (1 - \frac{2M}{r}))} y = 0 \\ y|_{r_M} = 0, y'|_{r_M} = \frac{1}{r_M \sqrt{1 - \frac{D^2}{r_M^2} (1 - \frac{2M}{r_M})} \sqrt{1 - \frac{2M}{r_M}}} \end{array} \right. \quad (9)$$

Нужно отметить, что выражение (9) записано для лучей, испущенных изначально в сторону возрастающих r . Если луч испущен в сторону убывающих r , в начальном условии для y необходимо брать y' с другим знаком, а в точке поворота луча сшить решения условиями одинаковости y и противоположности по знаку y' .

В формуле (8) I_∞ представляет собой интенсивность излучения, воспринимаемого удалённым наблюдателем как функцию времени источника, A от собственного времени не зависит, все остальные величины в формуле, вообще говоря, зависят, а f – полное изменение координаты θ луча на пути от источника к наблюдателю. Множитель

$\left| \frac{df}{dD} \right|^{-1}$ соответствует отношению расхождения луча вблизи источника к расхождению луча при больших r в плоскости движения луча, представляется в виде квадратур и рассчитывается численно. Так, для орбит, достаточно отличающихся от радиальных, малым изменениям D соответствуют большие изменения f и, как следствие, интенсивность таких лучей невелика в сравнении с лучами, идущими по орбитам, близким к радиальным. Отсюда ясно, почему с ростом числа оборотов, которое делает луч вокруг чёрной дыры перед приходом к наблюдателю, соответствующая интенсивность стремится к нулю. Второй множитель в (8), содержащий корень, связан частично с первым, устанавливая связь между dD и расхождением луча в локальной системе источника. Последний множитель

$\frac{1}{|y(\infty)|}$ определяет отношение уширений луча вблизи источника и вдали от него аналогично, как это было для первого множителя, но на этот раз уширение рассматривается в направлении, перпендикулярном плоскости движения. Отметим, что из (8) видно, что зависимость I_∞ от интенсивности источника линейна. Таким образом, мы делаем важный вывод, что форма спектра излучения источника не изменяется при приходе к наблюдателю. Изменяется только масштаб вдоль осей частот и амплитуд.

Подводя итоги, в ходе работы было получено полное решение прямой задачи об электромагнитном излучении заданного изотропного источника в поле чёрной дыры. Дальнейшим этапом работы будет рассмотрение реальных двойных систем, вычисление гравитационного излучения этих систем, а также влияние излучения на движение компактных объектов. Конечным этапом исследования будет определение изменения наблюдаемых характеристик электромагнитного излучения, обусловленного гравитационным излучением двойной системы.

Литература

1. R. A. Hulse, J. H. Taylor. J. Astrophys. **195**, L51 (1975).
2. H. Stephani. Relativity **3-rd** ed, 416 (2004).

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ СОЛИТОНОВ В РАМКАХ СЛАБО НЕЛОКАЛЬНОЙ МОДЕЛИ ШРЕДИНГЕРА С НЕЛИНЕЙНОСТЯМИ ТРЕТЬЕГО И ПЯТОГО ПОРЯДКОВ

М. А. Молчан

*Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларусь, пр. Независимости 68, 220072
Минск, Беларусь, m.moltschan@dragon.bas-net.by*

Ключевым моментом в понимании динамики солитонных систем является изучение взаимодействия между солитонами (уединенными волнами). В рамках интегрируемых моделей столкновения солитонов являются эластичными [1], а поведение цепочек из N солитонов с практически равными амплитудами и скоростями сводится к анализу интегрируемой модели Тоды с N узлами [2-4]. Для неинтегрируемых систем, которые не допускают точного аналитического описания, динамика солитонных систем может быть достаточно сложной. Фрактальные структуры в процессе рассеяния солитонов были обнаружены для целого класса обобщенных нелинейных уравнений Шредингера (ОНУШ) [5].

В данной работе исследуется динамика двух слабо взаимодействующих солитонов в нелинейной слабо нелокальной среде. В качестве модели используется ОНУШ со слабо нелокальными нелинейностями третьего и пятого порядков. Вследствие наличия нелокальности и нелинейности пятого порядка, которая не предполагается малой, уравнение является неинтегрируемым. С практической точки зрения данная модель описывает распространение импульсов в оптоволокне с жидким ядром [6]. На основе уравнений, описывающих эволюцию параметров солитонов, выводится условие квази-эквидистантного распространения солитонов (компенсация неинтегрируемостей), которое затем проверяется численным моделированием.

Распространение солитонов в нелокальной среде с нелинейностями третьего и пятого порядков описывается нелинейным уравнением Шредингера

$$iu_t + \frac{1}{2}u_{xx} + u \int_{-\infty}^{+\infty} dx' R_3(x-x') |u(x',t)|^2 + \delta u \int_{-\infty}^{+\infty} dx' R_5(x-x') |u(x',t)|^4 = 0, \quad (1)$$

где u – комплексная огибающая импульса, $R_{3,5}(x)$ – нормированные симметричные функции отклика среды, $\int dx R_{3,5}(x) = 1$, δ – параметр пятой нелинейности, причем $\delta > 0$ ($\delta < 0$) соответствует фокусирующей (дефокусирующей) среде.

В пределе слабой нелокальности уравнение (1) сводится к возмущенному локально-му ОНУШ

$$iu_t + \frac{1}{2}u_{xx} + u|u|^2 + \delta u|u|^4 = -\gamma_3 u(|u|^2)_{xx} - \delta \gamma_5 u(|u|^4)_{xx}, \quad (2)$$

где $\gamma_{3,5} = \frac{1}{2} \int dx x^2 R_{3,5}(x) \ll 1$ – положительные константы.

Невозмущенное уравнение (2) ($\gamma_3 = \gamma_5 = 0$) имеет точное солитонное решение [7]:

$$u(x, t) = \Phi(y, \eta) \exp(2iVt + i\sigma), \quad (3)$$

где

$$\begin{aligned} \Phi(y, \eta) &= 2\eta \left(\frac{2B}{B + \cosh(4\eta y)} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad B = \left(1 + \frac{32}{3} \eta^2 \delta \right)^{-\frac{1}{2}}, \\ y &= x - 2Vt - x_0, \quad \sigma = 2(\eta^2 + V^2) - \sigma_0. \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь η – амплитуда солитона, V – скорость, x_0 и σ_0 – соответственно, начальное положение центра масс солитона и начальная фаза. Функция $\Phi(y, \eta)$ является действительной, поэтому для дефокусирующей среды ($\delta < 0$) возникает естественное ограничение на параметры δ и η :

$$1 - \frac{32}{3} \eta^2 |\delta| > 0. \quad (5)$$

Далее предполагается, что в процессе распространения изменение претерпевают лишь параметры солитонов η, V, x_0 и σ_0 , в то время как профили описываются той же функциональной зависимостью (4) (адиабатическое приближение). Система уравнений, описывающая эволюцию параметров, имеет следующий вид [8]:

$$\begin{cases} P_\eta \Delta \eta_t = 128\eta^3 B e^{-2\eta \Delta \xi} \sin \Delta \varphi, \\ P \Delta V_t = -128\eta^4 B e^{-2\eta \Delta \xi} \cos \Delta \varphi, \\ \Delta \xi_t = 2\Delta V, \\ \Delta \varphi_t = 4\eta \Delta \eta (1 + \tilde{F}), \end{cases} \quad (6)$$

где $\Delta \eta$ – разность амплитуд солитонов, η – средняя амплитуда, ΔV – относительная скорость, $\Delta \xi$ и $\Delta \varphi$ – расстояние между солитонами и относительная фаза, соответственно. Функция \tilde{F} и мощность солитона P определяются выражениями

$$\tilde{F} = -64\eta^2 \frac{B}{1-B} \left\{ \gamma_3 \left(1 - \frac{P}{4\eta} \right) - \frac{8}{15} \gamma_5 \delta \frac{\eta^2}{1-B^2} \left[B^2 (44 + B^2) - (14 + 31B^2) \frac{P}{4\eta} \right] \right\},$$

$$P = \int_{-\infty}^{+\infty} dy \Phi^2(y, \eta) = \frac{4B\eta}{\sqrt{B^2-1}} \ln \frac{\sqrt{B+1} + \sqrt{B-1}}{\sqrt{B+1} - \sqrt{B-1}} \quad (\delta < 0),$$

$$P = \frac{8B\eta}{\sqrt{1-B^2}} \arctan \sqrt{\frac{1-B}{1+B}} \quad (\delta > 0), \quad P_\eta = 4B^2.$$

Система (6) с помощью величин $\psi = \Delta\varphi$, $\zeta = -2\eta\Delta\xi$ и $\tau = 16\eta^2 \sqrt{2\eta B/P} t$ может быть сведена к двум дифференциальным уравнениям второго порядка

$$\begin{cases} \zeta_{\tau\tau} = e^\zeta \cos \psi, \\ \psi_{\tau\tau} = (1 + \tilde{F})(1 + \varepsilon)e^\zeta \sin \psi. \end{cases} \quad (7)$$

Присутствие параметра $\varepsilon = P/(\eta P_\eta) - 1$ приводит к неинтегрируемости системы (7) и уравнения (2) и связано с наличием в уравнении (2) члена с нелинейностью пятого порядка, в то время как функция \tilde{F} появляется вследствие нелокального характера рассматриваемой модели. При $\varepsilon = \tilde{F} = 0$ система (7) и уравнение (2) являются интегрируемыми. С другой стороны, интегрируемость системы (7) может быть обеспечена следующим ограничением на параметры η и δ :

$$(1 + \tilde{F})(1 + \varepsilon) = 1. \quad (8)$$

В этом случае асимптотическое поведение солитонов определяется известными решениями системы (7) [5]. Следует отметить, что уравнение (2) при этом остается неинтегрируемым и речь идет лишь об эффективной компенсации неинтегрируемостей.

На рисунках 1 и 2 представлен вид функции $(1 + \tilde{F})(1 + \varepsilon)$ для случая дефокусирующей ($\delta < 0$) и фокусирующей ($\delta > 0$) среды. Для дефокусирующей среды $(1 + \tilde{F})(1 + \varepsilon) < 1$ для всех допустимых значений параметров и компенсация неинтегрируемостей невозможна. Интегрируемость (7) может быть достигнута в фокусирующей среде, т.к. в этом случае существуют решения уравнения (8) (рисунок 2).

Для проверки возможности компенсации неинтегрируемостей уравнение (2) было проинтегрировано численно для $\delta = 0.08$, $\gamma_3 = \gamma_5 = 0.02$, начальной разности амплитуд солитонов $\Delta\eta = 0.02$, нулевой начальной скорости $\Delta V = 0$ и разности фаз между солитонами $\Delta\varphi = \pi$. Средняя амплитуда была найдена из уравнения (8) $\eta = 0.547292$.

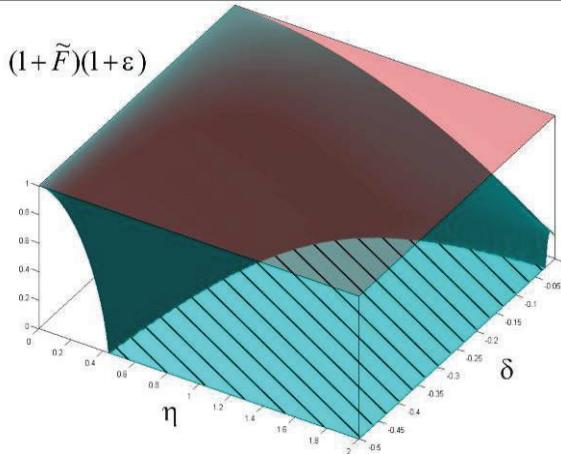


Рис. 1. Вид функции $(1 + \tilde{F})(1 + \varepsilon)$ в пространстве параметров (δ, η) в случае дефокусирующей среды ($\delta < 0$). Заштрихованная область соответствует запрещенной зоне, для которой нарушается условие (4) и не существует решений в виде солитонов (3).

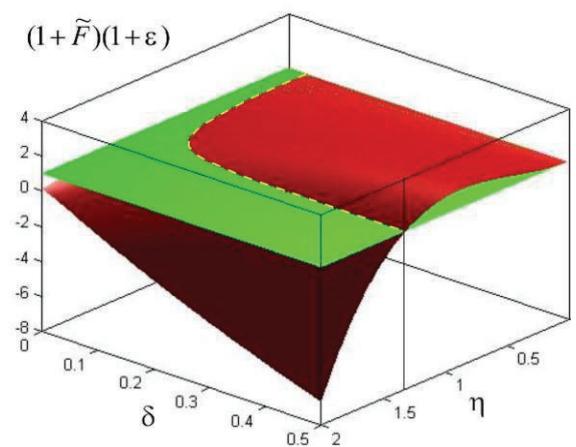


Рис. 2. Вид функции $(1 + \tilde{F})(1 + \varepsilon)$ в пространстве параметров (δ, η) в случае фокусирующей среды ($\delta > 0$). В данном случае возможна компенсация нелокальностей, т.к. существуют значения δ и η , удовлетворяющие (8) (пунктирная кривая).

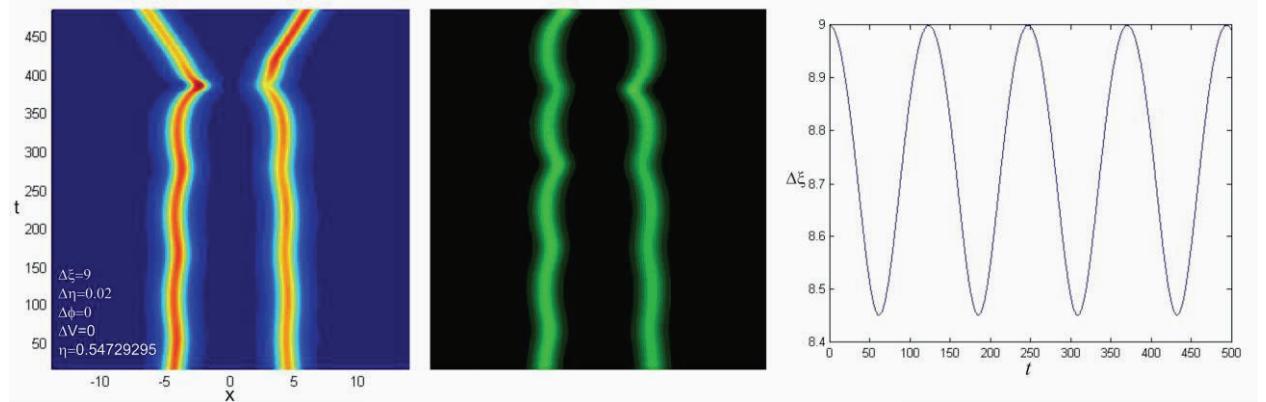


Рис. 3. Динамика системы из двух солитонов. Слева: разрушение квази-эквидистантного распространения в локальной среде $\gamma_3 = \gamma_5 = 0$. Посередине: восстановление режима связанный распространения в нелокальной среде $\gamma_3 = \gamma_5 = 0.02$ при выполнении условия (8). Справа: изменение расстояния между солитонами, найденное аналитически из системы (7) при $\varepsilon = \tilde{F} = 0$. Начальная конфигурация на всех рисунках: $\Delta\eta = 0.02$, $\Delta V = 0$, $\Delta\varphi = \pi$, $\eta = 0.547292$.

Данная начальная конфигурация параметров в интегрируемом случае $\varepsilon = \tilde{F} = 0$ соответствует квази-эквидистантному распространению солитонов (режим связанный распространения). В случае локальной среды присутствие члена с нелинейностью пятого порядка ($\varepsilon \neq 0$) разрушает связное состояние и солитоны разлетаются (рисунок 3, слева). На рисунке 3 (посередине) показаны треки солитонов в нелокальной среде, при этом па-

раметр среды δ и средняя амплитуда η связаны соотношением (8). В данном случае имеет место эффективная компенсация нелокальностей, ведущая к восстановлению режима квази-эквидистантного распространения. На рисунке 3 (справа) показано изменение расстояния между солитонами, найденное аналитически из системы (7) в интегрируемом случае ($\varepsilon = \tilde{F} = 0$) [5]. Сравнение данных результатов с динамикой солитонов в рамках неинтегрируемой модели позволяет сделать вывод об эквивалентности неинтегрируемого случая и интегрируемого при выполнении условия (8). Следует, однако, отметить неустойчивость режима распространения солитонов в случае компенсации нелокальностей. На рисунке 4 показано разрушение режима связанного состояния при отклонении средней амплитуды на 2% от ее значения, найденного из (8). Это накладывает жесткие ограничения на точность контроля параметров для получения связанных состояний.

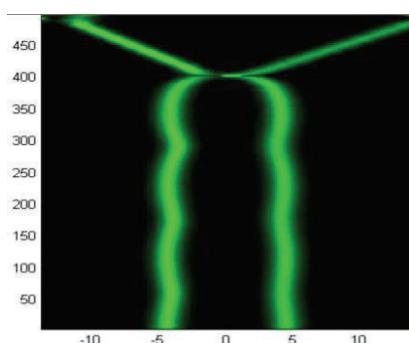


Рис. 4. Разрушение режима связанного распространения при отклонении амплитуды от ее точного значения, найденного из (8), на 2%.

В заключение, в данной работе была проанализирована динамика двух солитонов в рамках неинтегрируемой модели, основанной на слабо нелокальном ОНУШ с нелинейностями третьего и пятого порядков. Были получены уравнения эволюции параметров солитонов и на их основе предсказана возможность получения квази-эквидистантного распространения путем соответствующего подбора параметров среды и солитонов. Результаты численно моделирования хорошо согласуются с теоретическими предсказаниями.

Литература

3. L. A. Takhtadjan, L. D. Faddeev. Hamiltonian Approach to Soliton Theory. – Berlin: Springer, 1984.
4. J. M. Arnold. Phys. Rev. E **60**, 979 (1999).
5. V. S. Gerdjikov, E. V. Doktorov, J. Yang. Phys. Rev. E **64**, 056617 (2001).
6. E. V. Doktorov, N. P. Matsuka, V. M. Rothos. Phys. Rev. E **69**, 056607 (2004).
7. Y. Zhu, J. Yang. Phys. Rev. E **75**, 036605 (2007).
8. R. Altkorn, M. Duval Malinsky, R. P. Van Duyne, T. Koev. Appl. Spectrosc. **55**, 373 (2001).
9. L. Khaykovich, B. A. Malomed. Phys. Rev. A **74**, 023607 (2006).
10. E. V. Doktorov, M. A. Molchan. J. Phys. A: Math. Theor. **41**, 315101 (2008).

АНАЛИТИЧЕСКОЕ ВЫРАЖЕНИЕ ДЛЯ КИНЕТИЧЕСКОГО КОЭФФИЦИЕНТА ДИФФУЗИИ РЕШЕТОЧНОГО ФЛЮИДА НА ДИНАМИЧЕСКИ НЕУПОРЯДОЧЕННОЙ РЕШЕТКЕ С ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНЫМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ МЕЖУЗЕЛЬНЫХ БАРЬЕРОВ

Я. Г. ГРОДА

*Белорусский государственный технологический университет,
ул. Свердлова 13а, 220006 Минск, Беларусь, groda@bstu.unibel.by*

Многие технологически важные электрохимические процессы в твердых телах, интеркаляционных соединениях, суперионных проводниках и ионных кристаллах сопровождаются контролируемым диффузией массопереносом. Построение микроскопических моделей таких систем наталкивается на значительные трудности, обусловленные наличием процессов, характеризующихся различающимися на порядки величины характерными временами. Общим для этих моделей является наличие несущей подсистемы, миграция частиц которой существенно затруднена, и подсистемы лабильных частиц. Несущая подсистема создает потенциальный рельеф с четко выраженным минимумами и энергетическими барьерами между ними, в котором способны перемещаться частицы лабильной подсистемы. Период колебаний частиц вблизи минимумов потенциального рельефа составляет десятые доли пикосекунды, тогда как время оседлой жизни частиц на несколько порядков больше. Проследить за динамикой движения частиц на столь больших промежутках времени достаточно сложно. Для упрощения задачи могут быть использованы дискретные модели решеточного флюида [1, 2]. В таких моделях особый интерес представляют диффузионные характеристики лабильных частиц и тесно связанная с ними электропроводность.

В реальных твердых телах отсутствует строгая периодичность в расположении частиц. Более того, в ряде случаев отклонения от периодичности настолько велики (аморфные и стеклообразные состояния, легированные полупроводники и т. д.), что именно эти отклонения определяют основные кинетические свойства тел. В простейшем случае неупорядоченность системы можно описать в рамках модели решеточного флюида, рассматривая нерегулярности энергетического рельефа несущей системы при регулярном расположении ее узлов. При этом можно вести речь о системах с динамической и статической неупорядоченностью. В первом случае величины межузельных барьеров зависят не только от положения узлов, но и изменяются с течением времени. В статическом варианте модели барьеры «замораживаются» и не изменяются с течением времени.

Ранее в работах [3–4] с помощью методов компьютерного моделирования и аналитических приближений было изучено взаимовлияние симметричных особенностей несущей системы, межчастичных взаимодействий и концентрации лабильных частиц на их диффузионные характеристики при равномерном распределении высот межузельных барьеров. В настоящей работе рассматривается решеточный флюид на неупорядоченной плоской квадратной решетке с экспоненциальном распределении высот межузельных барьеров.

Рассматриваемая в работе модель представляет собой систему n частиц, расположенных в узлах регулярной одно-, двух- либо трехмерной решетки, содержащей N узлов. Состояние узла i определяется числом заполнения $n_i=1$ или 0 в зависимости от того, занят узел частицей или вакантен. Заполнение узла более чем одной частицей запрещено. Частицы, находящиеся в ближайших решеточных узлах, могут взаимодействовать друг с другом с энергией J ($J<0$ соответствует притяжению между частицами, а $J>0$ – отталкиванию, $J=0$ отвечает случаю ленгмюровского (невзаимодействующего) решеточного газа), так что энергия системы

$$U_N = \frac{1}{2} J \sum_{i \neq j}^N n_i n_j . \quad (1)$$

Для перехода из занимаемого узла j в ближайший вакантный узел i частице необходимо преодолеть энергетический барьер u_{ij} :

$$u_{ij} = \varepsilon_{ij} - J \sum_{k(j)} n_k , \quad (2)$$

где суммирование выполняется по узлам k , являющимся ближайшими соседями узла j , ε_{ij} – энергетический барьер между узлами i и j , выбираемый случайным образом в соответствии с заданным распределением $v(\varepsilon)$. В дальнейшем будет рассмотрена система, описываемая экспоненциальным распределением высот межузельных барьеров

$$v(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon_0} \exp\left(-\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}\right), \quad (3)$$

где ε_0 – средняя величина межузельного барьера.

В случае произвольной решеточной системы, в которой возможны переходы только между ближайшими узлами, пренебрегая влиянием эффектов памяти и пространственной дисперсии, для коэффициента кинетической диффузии может быть записано следующее соотношение [5]

$$D_J = \frac{zwa^2}{2d}, \quad w = c^{-1} \left\langle w_{ij} n_j (1 - n_i) \right\rangle, \quad (4)$$

где z – число ближайших соседних узлов на решетке выбранного типа; w – средняя частота прыжков частицы; a – расстояние между узлами решетки (длина прыжка); $c=n/N$ – равновесное значение концентрации частиц; d – размерность пространства; w_{ij} – частота термоактивированных перескоков частицы из узла j в узел i в пределе низких концентраций

$$w_{ij} = v \exp(-\beta u_{ij}); \quad (5)$$

v – частота, имеющая порядок частоты колебаний частицы вблизи узла решетки и определяющая временную шкалу диффузионных процессов.

В мультипликативном приближении [4], когда усреднения по распределению частиц и по распределению барьеров выполняются независимо друг от друга, частота перескока, определяемая соотношением (4), может быть представлена в следующем виде

$$w = c^{-1} v \left\langle \exp(-\beta \varepsilon_{ij}) \right\rangle \left\langle n_j (1 - n_i) \exp(\beta J \sum_{k(j)} n_k) \right\rangle. \quad (6)$$

Последний сомножитель, входящий в соотношение (6), совпадает с аналогичным выражением для случая решеточного флюида на упорядоченной решетке [5]

$$\left\langle \exp(\beta J \sum_{k(j)} n_k) n_j (1 - n_i) \right\rangle = \exp(\beta \mu) P(0; 0), \quad (7)$$

где μ – равновесное значение химического потенциала системы и концентрации частиц, соответственно; $P(0; 0)$ – вероятность двум ближайшим узлам быть вакантными.

Первое среднее в (6) при распределении вида (3) также может быть легко вычислено

$$\left\langle \exp(-\beta \varepsilon_{ij}) \right\rangle = \int_0^\infty \exp(-\beta \varepsilon) \frac{1}{\varepsilon_0} \exp\left(-\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}\right) d\varepsilon = \frac{1}{1 + \varepsilon_0 \beta}. \quad (8)$$

Окончательное выражение для кинетического коэффициента диффузии в случае экспоненциального распределения принимает вид

$$D_J = D_0 \frac{\exp(\beta \mu)}{c} P(0; 0) \frac{1}{1 + \beta \varepsilon_0} , \quad D_0 = \frac{za^2}{2d} v. \quad (9)$$

Полученное соотношение может рассматриваться как обобщение соотношения Жданова [7] для кинетического коэффициента диффузии решеточного флюида на упорядоченной решетке на случай неупорядоченной системы и отличается от него наличием мно-

жителя вида (8). Входящие в него равновесные значения химического потенциала и функции вероятности могут быть вычислены с помощью диаграммного [8] или самосогласованного диаграммного приближений [9]. Указанные приближенные подходы позволяют определять с достаточной степенью точности равновесные характеристики решеточных систем на решетках произвольной геометрии.

При рассмотрении невзаимодействующих частиц на решетке (ленгмюровский газ) оба указанных приближенных подхода приводят к следующим выражениям для равновесных значений концентрации, химического потенциала и функции вероятности:

$$\frac{\exp(\beta\mu)}{c} P(0;0) = 1 - c. \quad (10)$$

Выражение (9) при этом существенно упрощается и принимает вид

$$\frac{D_J}{D_0} = \frac{1-c}{1+\beta\varepsilon_0}, \quad D_0 = \frac{za^2}{2d}v. \quad (11)$$

Наряду с описанным выше аналитическим рассмотрением процесса диффузии решеточного флюида на неупорядоченной решетке может быть проведено прямое компьютерное моделирование процесса диффузии по методу Монте-Карло. С этой целью может использоваться модифицированный алгоритм Метрополиса [4] в сочетании с периодическими граничными условиями.

Проведенное на рис. 1 сопоставление результатов аналитического определения кинетических коэффициентов диффузии и результатов моделирования неупорядоченных решеток по методу Монте-Карло показывает, что соотношение (11) позволяет с высокой точностью определять диффузионные характеристики решеточного флюида на динамически неупорядоченных решетках. В отличие от этого, при статической неупорядоченности для решеточного флюида на плоской квадратной решетке соотношение (11) приводит к завышенному значению кинетического коэффициента диффузии. Это объясняется тем, что для статически неупорядоченных систем усреднение по случайному распределению барьеров усложняется необходимостью учета геометрических особенностей решетки и при произвольных температурах не может быть выполнено аналитически.

Имеющие место различия между динамически и статически неупорядоченными системами особенно хорошо заметны при низкой температуре и быстро уменьшаются с ее ростом. Также можно отметить, что в высокотемпературном пределе соотношение (11) переходит в соотношение Жданова для кинетического коэффициента диффузии решеточного газа.

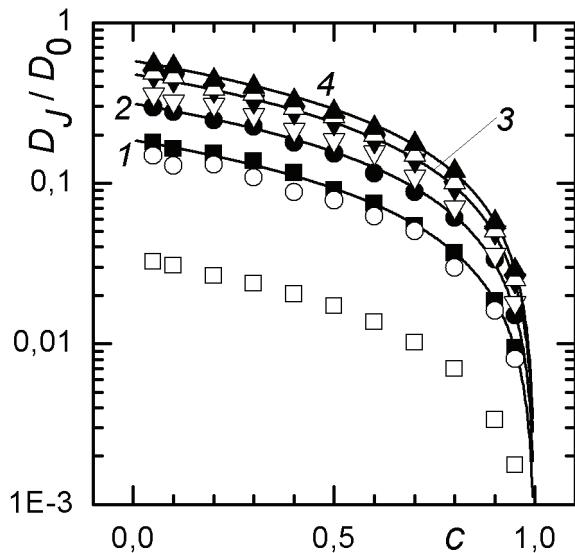


Рис. 1. Зависимость кинетического коэффициента диффузии от концентрации. Темными точками представлены результаты МКМ в случае динамической неупорядоченности, светлыми – статической неупорядоченности, линиями – результаты аналитических расчетов. 1 – $k_B T / \epsilon_0 = 0,23$; 2 – $k_B T / \epsilon_0 = 0,45$; 3 – $k_B T / \epsilon_0 = 0,913$; 4 – $k_B T / \epsilon_0 = 1,36$.

Таким образом, подводя итог, можно утверждать, что предлагаемое соотношение вида (9) оказывается вполне пригодным для изучения диффузии в динамически неупорядоченных решетках. В тоже время статически неупорядоченные системы нуждаются в более детальном рассмотрении.

Работа выполнена при поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (грант №08М–29).

Литература

1. W. R. McKinnon, Haering R. R. *Modern Aspects in Electrochemistry*. New York: Plenum Press, 1983. P. 235.
2. M. D. Levi, D. Aurbach. *Electrochim. Acta*. **45**, 185 (1999).
3. П. Аргиракис, Е. Арапаки, Я. Г. Грода. Труды БГТУ, сер. VI. **XIV**, 26 (2006).
4. П. Аргиракис, Я. Г. Грода, С. В. Дубинин. Труды БГТУ, сер. VI. **XV**, 33 (2007).
5. P. Argyrakis, S. V. Dubinin, Ya. G. Groda, V. S. Vikhrenko. *Solid State Ionics*. **179**, 143 (2008).
6. G. S. Bokun, Ya. G. Groda, C. Uebing, V. S. Vikhrenko. *Physica A*. **296**, 83 (2001).
7. V. P. Zhdanov. *Surf. Sci.* **149**, L13 (1985).
8. V. S. Vikhrenko, Ya. G. Groda, G. S. Bokun. *Phys. Let. A*. **286**, 127 (2001).
9. G. S. Bokun, Ya. G. Groda, V. V. Belov, V. S. Vikhrenko, C. Uebing. *Eur. Phys. Journ. B*. **15**, 297 (2000).

ДИФФУЗИЯ ЛЕНГМЮРОВСКОГО РЕШЕТОЧНОГО ГАЗА НА СТАТИЧЕСКИ НЕУПОРЯДОЧЕННОЙ РЕШЕТКЕ С ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНЫМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ БАРЬЕРОВ

В. С. Вихренко, Я. Г. Гроды

*Белорусский государственный технологический университет,
ул. Свердлова 13а, 220006 Минск, Беларусь, groda@bstu.unibel.by*

В работе [1] в рамках мультиплекативного приближения было получено выражение для кинетического коэффициента диффузии решеточного флюида на неупорядоченной решетке с экспоненциальным распределением высот межузельных барьеров следующего вида:

$$D_J = D_0 \frac{\exp(\beta\mu)}{c} P(0;0) \frac{1}{1 + \beta\varepsilon_0}, \quad D_0 = \frac{za^2}{2d} v, \quad (1)$$

где $\beta = 1/k_B T$ – обратная температура; k_B – постоянная Больцмана; T – температура; z – число ближайших соседних узлов на решетке выбранного типа; w – средняя частота прыжков частицы; a – расстояние между узлами решетки (длина прыжка); d – размерность пространства; v – частота, имеющая порядок частоты колебаний частицы вблизи узла решетки и определяющая временную шкалу диффузионных процессов; $c = n/N$ – равновесное значение концентрации частиц; μ – равновесное значение химического потенциала системы; $P(0;0)$ – вероятность двум ближайшим узлам быть вакантными; ε_0 – средняя величина межузельного барьера.

Дальнейшее изучение процесса диффузии в рассматриваемых неупорядоченных системах показало, что, как и в случае равномерного распределения высот межузельных барьеров [2], мультиплекативное приближение оказывается применимым лишь в случае динамически неупорядоченных систем. Для случая статической неупорядоченности необходим дополнительный учет геометрических особенностей самой решетки.

Так, например, в случае одномерных систем со статической неупорядоченностью исходная решетка оказывается разделенной на части энергетическими барьерами, чья высота существенно выше средней. Относительно большая высота этих барьеров затрудняет переход частиц между отдельными частями решетки и проявляется в снижении коэффициента диффузии. Очевидно, что полученное в мультиплекативном приближении выражение для кинетического коэффициента диффузии не учитывает разделения решетки на подобные подсистемы и не может использоваться для определения кинетического коэффициента диффузии для статически неупорядоченных систем, по меньшей мере, при низ-

ких температурах.

Наиболее характерной особенностью кинетического коэффициента диффузии, определяемого в соответствии с соотношением (1), является его неаррениусовская зависимость от обратной температуры. В то же время, при статической неупорядоченности зависимость логарифма кинетического коэффициента диффузии D_J от обратной температуры, полученная в ходе моделирования диффузационного процесса по методу Монте-Карло и представленная на рис. 1, в области температур $T < 0,6 \varepsilon_0/k_B$ близка к линейной, что говорит о незначительном отклонении от аррениусовского поведения кинетического коэффициента диффузии данной системы в отличие от случая динамической неупорядоченности.

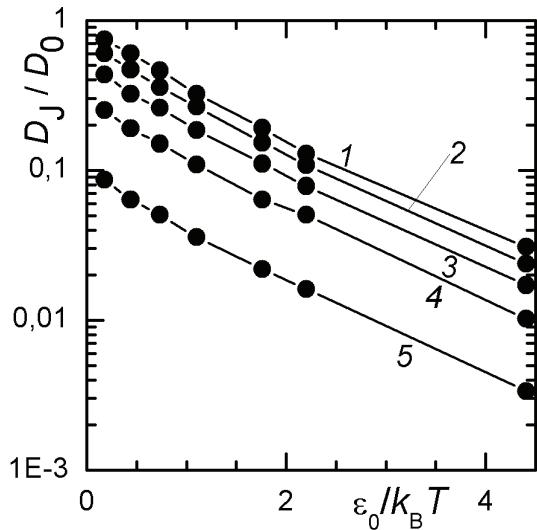


Рис. 1. Зависимость от обратной температуры кинетического коэффициента диффузии легмюровского решеточного газа на плоской квадратной решетке с экспоненциальным распределением высот межузельных барьеров. 1 – $c = 0,1$; 2 – $c = 0,3$; 3 – $c = 0,5$; 4 – $c = 0,7$; 5 – $c = 0,9$.

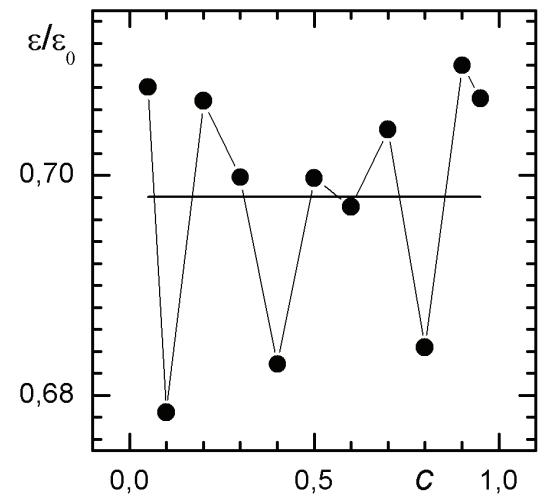


Рис. 2. Зависимость от концентрации средней энергии активации кинетической диффузии легмюровского решеточного газа на плоской квадратной решетке с экспоненциальным статическим распределением межузельных барьеров.

Это позволяет оценить энергию активации кинетической диффузии. Ее зависимость от концентрации представлена на рис. 2, из которого следует, что, как и в рассмотренном ранее случае статически неупорядоченных решеток с равномерным распределением барьеров [2], энергия активации, найденная в температурном интервале $0,22 \div 0,57 \varepsilon_0/k_B$, незначительно флюктуирует вокруг значения $\varepsilon \approx 0,698 \varepsilon_0$, что соответствует энергии переколяционного перехода ε_P , определяемой из соотношения

$$\int_0^{\varepsilon_P} v(\varepsilon) d\varepsilon = c_P, \quad (2)$$

где c_p – порог перколяции в задаче связей для решетки выбранного типа. В рассматриваемом случае плоской квадратной решетки $c_p = 0,5$ и $\varepsilon_p = \varepsilon_0 \ln 2 \approx 0,693 \varepsilon_0$. По мере увеличения температуры энергия активации увеличивается и достигает своего предельного значения ε_0 , следующего из дифференцирования логарифма правой части соотношения (1) по обратной температуре.

Таким образом, полученные результаты позволяют утверждать, что, как и для систем с равномерным распределением межузельных барьеров [2, 3], при экспоненциальном распределении диффузии в различных температурных областях должна описываться в рамках различных подходов. Так, при высоких температурах влияние геометрических особенностей решетки на кинетическую диффузию частиц не существенно и коэффициент диффузии определяется средним значением энергии барьеров согласно соотношению

$$D_J = D_0 \exp(-\beta \varepsilon_0) \frac{\exp(\beta \mu)}{c} P(0; 0), \quad (3)$$

тогда как при низких температурах важное значение приобретает энергия перколяции и следует использовать соотношение

$$D_J = D_0 \exp(-\beta \varepsilon_p) \frac{\exp(\beta \mu)}{c} P(0; 0). \quad (4)$$

При промежуточных температурах можно использовать, по аналогии с равномерным распределением барьеров, интерполяционное соотношение следующего вида

$$D_J = D_0 \exp(-\beta \varepsilon) \frac{\exp(\beta \mu)}{c} P(0; 0), \quad (5)$$

где

$$\varepsilon = \eta \varepsilon_p + (1 - \eta) \varepsilon_0, \quad 0 \leq \eta \leq 1, \quad (6)$$

причем коэффициент η изменяется от единицы при предельно низких температурах до нуля при высоких.

Учитывая, что в высокотемпературном пределе $k_B T \gg \varepsilon_0$ $(1 + \beta \varepsilon_0)^{-1} \approx \exp(-\beta \varepsilon_0)$, при температурах $k_B T < 0,9 \varepsilon_0$ к удовлетворительным результатам приводят соотношения (5), (6) с $\eta = 0,8$, а при более высоких температурах может применяться выражение (3).

При предельно низких температурах энергия активации равна ε_p , однако при этом необходимо учитывать в виде префактора долю доступных узлов c_p , принадлежащих перколяционному кластеру. По мере увеличения температуры увеличивается как доля дос-

тупных узлов, так и энергия барьеров, преодолеваемых частицами со значимой частотой. В целом конкуренция этих двух факторов отражается упомянутым выше интерполяционным соотношением (6), соответствующим при $\eta = 0,8$ энергии активации $\varepsilon \approx 0,75\varepsilon_0$ (рис. 2). При температурах $k_B T \geq 0,9\varepsilon_0$ энергия активации становится близкой к ε_0 ($\eta = 0$).

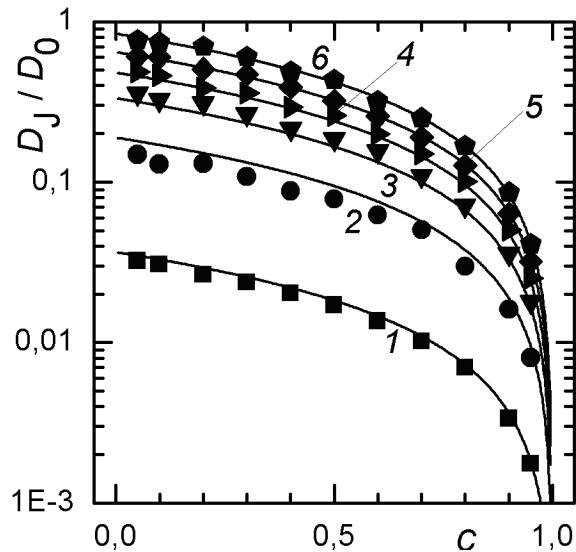


Рис. 3. Зависимость от концентрации кинетического коэффициента диффузии легмюровского решеточного газа на плоской квадратной решетке с экспоненциальным распределением межузельных барьеров. Точками представлены результаты МКМ, линиями – результаты использования соотношения (5). 1 – $k_B T / \varepsilon_0 = 0,23$ ($\eta = 0,8$); 2 – $k_B T / \varepsilon_0 = 0,45$ ($\eta = 0,8$); 3 – $k_B T / \varepsilon_0 = 0,91$ ($\eta = 0$); 4 – $k_B T / \varepsilon_0 = 1,36$ ($\eta = 0$); 5 – $k_B T / \varepsilon_0 = 2,27$ ($\eta = 0$); 6 – $k_B T / \varepsilon_0 = 5,67$ ($\eta = 0$).

Работа выполнена при поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (грант №08М–29).

Литература

1. Я. Г. Гродя. Сб. науч. тр. Конференции молодых ученых и специалистов «Современные проблемы физики» – 2008, Минск: Ин-т физики НАН Беларуси, 2008, С. 21.
 2. P. Argyrakis, S. V. Dubinin, Ya. G. Groda, V. S. Vikhrenko. Solid State Ionics. **179**, 143 (2008).
 3. Ю. Ю. Тарасевич. Перколяция: теория, приложения, алгоритмы. Москва, 2002.
 4. П. Аргиракис, В. С. Вихренко, Я. Г. Гродя. Труды БГТУ, сер. VI. XVI, в печати (2008).

ВЛИЯНИЕ ХАРАКТЕРА МЕЖЧАСТИЧНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА ДИФФУЗИОННЫЕ СВОЙСТВА РЕШЕТОЧНОГО ФЛЮИДА НА СТАТИЧЕСКИ НЕУПОРЯДОЧЕННОЙ РЕШЕТКЕ С ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНЫМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ МЕЖУЗЕЛЬНЫХ БАРЬЕРОВ

Я. Г. Гроды

*Белорусский государственный технологический университет,
ул. Свердлова 13а, 220006 Минск, Беларусь, groda@bstu.unibel.by*

В работах [1, 2] предложены выражения для оценки кинетического коэффициента диффузии решеточного флюида на решетке с экспоненциальным распределением высот межузельных барьеров, имеющие вид для системы с динамической неупорядоченностью

$$D_J = D_0 \frac{\exp(\beta\mu)}{c} P(0;0) \frac{1}{1+\beta\varepsilon_0}, \quad D_0 = \frac{za^2}{2d} v, \quad (1)$$

а в случае статически неупорядоченных решеток

$$D_J = D_0 \exp(-\beta\varepsilon) \frac{\exp(\beta\mu)}{c} P(0;0), \quad (2)$$

где

$$\varepsilon = \eta\varepsilon_p + (1-\eta)\varepsilon_0, \quad 0 \leq \eta \leq 1, \quad (3)$$

$\beta = 1/k_B T$ – обратная температура; k_B – постоянная Больцмана; T – температура; z – число ближайших соседних узлов на решетке выбранного типа; w – средняя частота прыжков частицы; a – расстояние между узлами решетки (длина прыжка); d – размерность пространства; v – частота, имеющая порядок частоты колебаний частицы вблизи узла решетки и определяющая временную шкалу диффузионных процессов; $c=n/N$ – равновесное значение концентрации частиц; μ – равновесное значение химического потенциала системы; $P(0;0)$ – вероятность двум ближайшим узлам быть вакантными; ε_0 и ε_p – средняя величина межузельного барьера и энергии перколяционного перехода, соответственно. Последняя величина легко может быть определена из следующего соотношения

$$\int_0^{\varepsilon_p} v(\varepsilon) d\varepsilon = c_p, \quad (4)$$

где c_p – порог перколяции в задаче связей для решетки выбранного типа, а коэффициент η , входящий в соотношение (3), изменяется от единицы при предельно низких температу-

рах до нуля при высоких.

Нетрудно видеть, что выражение для случая статической неупорядоченности (2) имеет вид интерполяционного соотношения между приближением переколяционного пути и соотношением Жданова для упорядоченной решетки с межузельным барьером, равным среднему значению ε_0 , отвечающим низкотемпературными пределами, соответственно. В этой связи представляется интересным рассмотреть возможность применения данного соотношения, в сочетании с диаграммными приближениями [8, 9] для определения равновесных характеристик, в случае систем с взаимодействием ближайших соседей.

На рис. 1 представлены зависимости от концентрации кинетического коэффициента диффузии решеточного флюида с притяжением и отталкиванием ближайших соседей на статически неупорядоченной плоской квадратной решетке с экспоненциальным распределением высот межузельных барьеров. Здесь же проводится сопоставление результатов моделирования с результатами аналитических расчетов согласно соотношению (2) с $\eta = 0$, т.е. в соответствии с соотношением

$$D_J = D_0 \exp(-\beta \varepsilon_0) \frac{\exp(\beta \mu)}{c} P(0; 0), \quad (5)$$

отражающим высокотемпературный предел (2). При этом, как было отмечено выше, входящие в это соотношение равновесные значения химического потенциала и функции вероятности определяются с помощью диаграммных приближений.

Проведенное сопоставление результатов показало, что для системы с притяжением между частицами, как и в случае невзаимодействующего решеточного газа [2], соотношение (5) в сочетании с диаграммным приближением позволяет с высокой точностью оценить кинетический коэффициент диффузии. Фактически различия между этими двумя подходами проявляются лишь в ближайшей окрестности критической точки ($T/T_c = 1,05$, кривая 2 на Рис. 1а) и по величине не превышают погрешность моделирования. При этом следует отметить, что аналитические вычисления при температуре ниже критической отвечают нестабильным однофазным состояниям. Однако эта нестабильность достаточно слабая и позволяет получать разумное соответствие между результатами различных методов [5]. В то же время для систем с отталкиванием существенные различия между результатами моделирования и аналитического рассмотрения наблюдаются уже при температуре $T/T_c = 1,20$, где моделирование показывает заметное снижение кинетического коэффициента диффузии (рис. 1б).

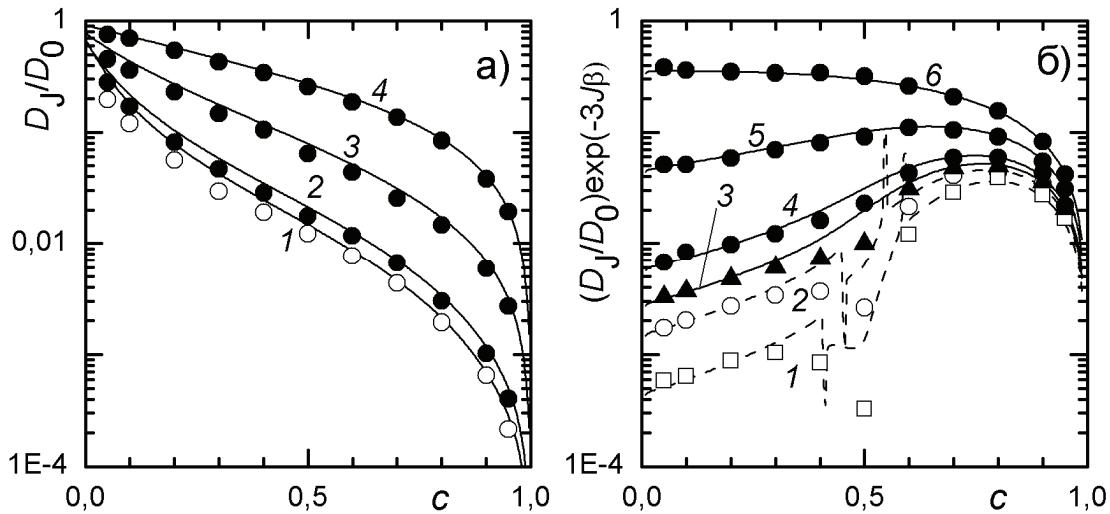


Рис. 1. Зависимость от концентрации кинетического коэффициента диффузии решеточно-го флюида с притяжением (а) и отталкиванием (б) ближайших соседей на статически не-упорядоченной плоской квадратной решетке с экспоненциальным распределением высот барьеров. Точками представлены результаты МКМ, сплошной линией – результаты при-менения соотношения (5) совместно с диаграммным (а) и самосогласованным диаграмм-ным (б) приближениями. а) 1 – $T/T_c = 1,05$; 2 – $T/T_c = 1,2$; 3 – $T/T_c = 2,0$; 4 – $T/T_c = 6,0$; б) 1 – $T/T_c = 0,8$; 2 – $T/T_c = 0,95$; 3 – $T/T_c = 1,05$; 4 – $T/T_c = 1,2$; 5 – $T/T_c = 2,0$; 6 – $T/T_c = 6,0$.

Такое поведение кинетического коэффициента диффузии может быть объяснено тем, что соотношение (5), как и соотношение Жданова, является, по сути, приближенным выражением для коэффициента кинетической диффузии, в котором не учитываются эф-фекты памяти [5]. В то же время специфическим свойством системы с отталкиванием ближайших соседей является наличие в ней при температуре ниже критической упорядо-ченной $c(2\times 2)$ -фазы, в которой частицы при концентрации 0,5 располагаются по решетке в шахматном порядке (с точностью до тепловых флюктуаций). Очевидно, что миграция частиц в такой упорядоченной фазе затруднена, что и проявляется в снижении коэффици-ента диффузии, а отдельные прыжки частицы сильно коррелированы, т. е. влияние эф-фектов памяти на миграцию частиц существенно.

Зависимости кинетического коэффициента диффузии от обратной температуры, по-строенные в логарифмическом масштабе, приведены на рис. 2.

Данные зависимости носят ярко выраженный аррениусовский характер как при при-тяжении, так и при отталкивании между частицами. Существенно неаррениусовское пове-дение имеет место лишь в случае системы с отталкиванием ближайших соседей при тем-пературе ниже критической для концентрации 0,5, т. е. в области существования в системе упорядоченной $c(2\times 2)$ -фазы и связанным с ней резким снижением коэффициента диффу-зии.

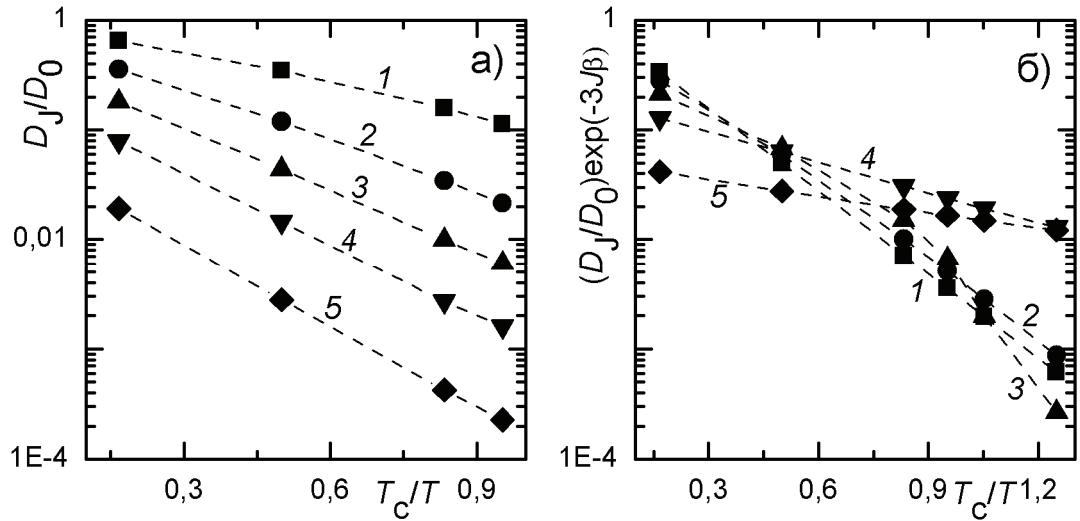


Рис. 2. Зависимость от обратной температуры кинетического коэффициента диффузии решеточного флюида с притяжением (а) и отталкиванием (б) ближайших соседей. 1 – $c = 0,1$; 2 – $c = 0,3$; 3 – $c = 0,5$; 4 – $c = 0,7$; 5 – $c = 0,9$.

Результаты оценки средней энергии активации систем представлены на Рис. 3.

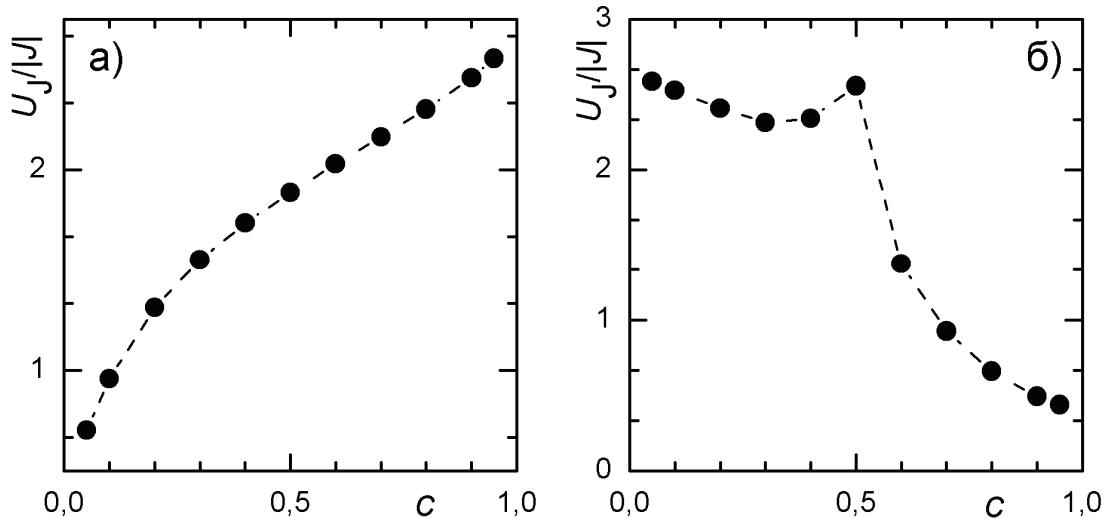


Рис. 3. Зависимость от концентрации энергии активации кинетической диффузии решеточного флюида с притяжением (а) и отталкиванием (б) ближайших соседей.

Анализ данной зависимости показывает, что в случае системы с притяжением (рис. 3а) высота активационного барьера монотонно увеличивается с ростом концентрации частиц. Такое поведение зависимости может быть объяснено тем, что с ростом числа частиц на решетке увеличивается, во-первых, число решеточных узлов, занятых частицами, а значит, недоступных для перехода в них других частиц, а во-вторых, усиливается влияние межчастичного взаимодействия на миграцию частиц – в системе с притяжением между частицами следует учитывать тот факт, что частица, взаимодействующая с

большим числом других частиц, является более связанный, и ее диффузия затруднена. Как и следовало ожидать, для системы с отталкиванием при концентрации 0,5 имеет место резкое возрастание активационного барьера (см. рис. 3б).

Сопоставление результатов компьютерного моделирования и аналитических расчетов показало, что соотношение (5) в сочетании с диаграммным приближением может использоваться для изучения диффузионных свойств взаимодействующего решеточного газа на статически неупорядоченной плоской квадратной решетке с экспоненциальным распределением барьеров. При этом получаемые с его помощью результаты не уступают по точности результатам компьютерного моделирования диффузионных процессов в решеточном газе по методу Монте-Карло для систем с притяжением между ближайшими соседями. В случае систем с отталкиванием имеющее место расхождение результатов обусловлено тем, что соотношение (5) получено в пренебрежении влиянием эффектов памяти на диффузионные свойства системы, тогда как влияние этих эффектов на миграцию частиц в данных системах является существенным ввиду наличия в ней при температуре ниже критической упорядоченной фазы.

Также сопоставление соотношений (2) и (5) позволяет утверждать, что выход на высокотемпературный предел происходит достаточно рано, и фактически при температурах $T > T_c$ решеточная система может рассматриваться как упорядоченная решетка с эффективным барьером равным среднему барьеру в экспоненциально неупорядоченной системе.

Работа выполнена при поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (грант №08М-29).

Литература

1. Я. Г. Гродя. Сб. науч. тр. Конференции молодых ученых и специалистов «Современные проблемы физики» – 2008, Минск: Ин-т физики НАН Беларуси, 2008, С. 21.
2. В. С. Вихренко, Я. Г. Гродя. Сб. науч. тр. Конференции молодых ученых и специалистов «Современные проблемы физики» – 2008, Минск: Ин-т физики НАН Беларуси, 2008, С. 26.
3. V. S. Vikhrenko, Ya. G. Groda, G. S. Bokun. Phys. Let. A. **286**, 127 (2001).
4. G. S. Bokun, Ya. G. Groda, V. V. Belov, V. S. Vikhrenko, C. Uebing. Eur. Phys. Journ. B. **15**, 297 (2000).
5. G. S. Bokun, Ya. G. Groda, C. Uebing, V. S. Vikhrenko. Physica A. **296**, 83 (2001).

ПРОСТРАНСТВО-ВРЕМЯ АНОМАЛИИ "ПИОНЕРОВ"

И. А. Сивцов

*Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости 68, 220072
Минск, Беларусь, i.siutsou@dragon.bas-net.by*

Космические аппараты "Пионер 10/11" были запущены в начале 1970-ых годов для исследования внешних планет Солнечной системы. После прохождений Юпитера и Сатурна они вышли на гиперболические траектории и в настоящее время покидают Солнечную систему. Из-за применённой схемы стабилизации аппаратов собственным вращением, которая снижает необходимость в манёврах двигателями, данные космические корабли представляют собой уникальные инструменты для проверки точности предсказаний небесной механики. Погрешность измерения ускорений аппаратов на временных интервалах порядка дней составляет примерно 10^{-10} м/с².

Следение за "Пионер 10/11" велось посредством определения доплеровского сдвига переизлучённого аппаратами радиосигнала. Затем полученные данные фитируются для получения параметров орбиты — сравниваются с теоретически расчитанными на основании ППН-приближения величинами, изначально рассчитывавшимися программой ODP (Лаборатория реактивного движения, НАСА, США), исходившей из планетных эфемерид DE405.

Неожиданно оказалось, что после того, как гелиоцентрическое расстояние превысило 10 а. е., возникло систематическое расхождение между экспериментальными и теоретическими данными [1]. Это отклонение может быть описано как простое постоянное по величине ускорение, направленное к Солнцу, $a_p \sim 8 \cdot 10^{-10}$ м/с². В пределах экспериментальных ошибок величина ускорения является одинаковой для всех изученных аппаратов: "Пионер 10/11", "Galileo" и "Ulysses", на любых расстояниях от Солнца [2].

Такое совпадение может быть вызвано общим гравитационным — метрическим — происхождением данного ускорения. Однако в то же время нет свидетельств, что такое же ускорение испытывают внешние планеты и другие объекты Солнечной системы — включение такой дополнительной силы в расчеты эфемерид разрушает их совпадение с радио- и оптическими наблюдениями [3,4].

Ситуация кажется противоречивой, но на самом деле таковой не является, так как траектории "Пионеров" сильно отличаются по характеру от планетных орбит. Аппараты покидают Солнечную систему практически радиально, в то время как планеты движутся по почти круговым орбитам.

Целью исследования было определение такой сферически-симметричной метрики, чтобы радиальное движение в ней воспроизводило аномалию "Пионеров", но аномальное ускорение не проявлялось в круговых движениях планет, и последующее определение типа материи, которая могла бы создавать такое пространство-время в рамках общей теории относительности. Потенциальная возможность такого подхода была отмечена в серии работ [5–7], но их авторы не анализировали круговое движение.

Выберем интервал в наиболее общем виде с 3 метрическими функциями τ , ρ и σ

$$ds^2 = e^{\tau(r)}dt^2 - e^{\rho(r)}dr^2 - e^{\sigma(r)}r^2(d\theta^2 + \cos^2\theta d\varphi^2), \quad (1)$$

а затем определим калибровочное соотношение между ними для максимального упрощения получаемых соотношений. Радиальное движение пробного тела в таком пространстве-времени полностью определяется сохранением удельной энергии $g_{tt} \frac{dt}{ds} = e^{\tau(r)}u^0 = k = const$ и длины 4-скорости $e^{\tau(r)}u^{0^2} - e^{\rho(r)}u^{1^2} = \varepsilon, \varepsilon = 0$ или 1 для электромагнитных сигналов и массивных тел, соответственно:

$$\frac{dt}{dr} = \frac{e^{\frac{\rho(r)-\tau(r)}{2}}}{\sqrt{1-\varepsilon e^{\tau(r)}/k^2}}. \quad (2)$$

Опишем теперь процедуру доплеровского слежения в данном пространстве-времени. В приближении геометрической оптики доплеровский сдвиг пропорционален отношению скалярных произведений 4-скоростей источника и приёмника со светоподобным волновым вектором сигнала, параллельно перенесённым вдоль его мировой линии:

$$\frac{v_r}{v_e} = \frac{s_e}{s_r} = \frac{\vec{u}_r \cdot \vec{k}_r}{\vec{u}_e \cdot \vec{k}_e}, \quad (3)$$

где v_r и v_e — полученная и излучённая частоты, измеренные с помощью стандартных атомных часов наблюдателями на соответствующих мировых линиях,

s_r и s_e — собственное время одного цикла колебаний сигнала,

u_r и u_e — 4-скорости приёмника и источника,

k_r и k_e — касательный светоподобный волновой вектор сигнала, параллельно перенесённый вдоль его пути.

Так как при обработке данных доплеровского слежения за аппаратами "Пионер 10/11" были учтены все известные отклонения земного атомного времени от эфемеридного, вызванные в том числе и движение Земли по орбите, мы можем ограничиться простой

моделью, в которой источник и приёмник сигнала фиксирован на постоянном расстоянии от центра на линии, соединяющей Солнце и радиально движущееся тело, отражающее (или, как в случае космических аппаратов, усиливающее и ретранслирующее) сигнал.

Таким образом, сигнал излучается с "зафиксированной" Земли при $r = r_0$, получается космическим кораблём в точке $r = r$, усиливается, в точности ретранслируется обратно на Землю и там в конце концов сравнивается по частоте с частотой изначального сигнала.

Как легко показать, полученная на Земле частота ν_r связана с излучённой ν_e как

$$\nu_r = \nu_e \frac{1 - \sqrt{1 - e^{\tau(r)}/k^2}}{1 + \sqrt{1 - e^{\tau(r)}/k^2}} = \nu_e e^{-\tau(r)} \left(k - \sqrt{k - e^{\tau(r)}} \right)^2. \quad (4)$$

В результате получается, что частота зависит лишь от $e^{\tau(r)}$ и в данных доплеровского слежения не содержится информации о пространственной части метрики. Более того, можно определить $e^{\tau(r(t))}$, но из-за неизвестного вида функции $r(t)$ точная радиальная зависимость этого метрического коэффициента остаётся невосстановимой.

Дифференцирование и интегрирование данных по времени не спасает положения. Например, интегрирование эквивалентно другому, радарному методу слежения — по времени обратного прихода сигнала, но не приводит к расширению объёма получаемых данных. Из экспериментальных данных всегда можно определить такую $e^{\tau(r)}$, чтобы получить любую свободно заданную траекторию $r(t)$, а поперечный метрический коэффициент $e^{\sigma(r)}$ вообще ничем при этом не лимитируется.

Однако известно, что приблизительно круговые орбиты объектов внешней Солнечной системы не возмущаются ускорением, аналогичным аномальному ускорению "Пионеров". Это даёт возможность полного определения метрической структуры, так как угловая скорость кругового движения ($\theta = 0, \phi = \omega t$) в рассматриваемом пространстве-времени определяется отношением радиальных производных временного и поперечного пространственного метрических коэффициентов

$$\omega^2 = \frac{(e^{\tau(r)})'}{(r^2 e^{\sigma(r)})'}. \quad (5)$$

Вспоминая уравнение радиального движения (2), заключаем, что наибольшее упрощение достигается в световых или, как их ещё называют, нулевых координатах $\tau(r) \equiv \rho(r)$:

$$\frac{dt}{dr} = \frac{1}{\sqrt{1 - \varepsilon e^{\tau(r)}/k^2}}, \quad (6)$$

в которых константа k связана со скоростью v аппарата на пространственной бесконечности (если она имеет такой же характер, как и в пространстве Минковского) как $k^2 = (1 - v^2)^{-1}$. Траектория космического корабля $r(t)$ восстанавливается из времени посылки t_e и приёма сигнала t_r : $t = \frac{t_r + t_e}{2}$, $r = r_0 + \frac{t_r - t_e}{2}$, а наблюдаемое красное смещение

$$z(t) = \frac{\nu_e - \nu_r}{\nu_e} = \frac{\Delta \nu}{\nu_e} = \frac{2\sqrt{1 - e^{\tau(r(t))}/k^2}}{1 + \sqrt{1 - e^{\tau(r(t))}/k^2}} = \frac{2}{(1 - e^{\tau(r(t))}/k^2)^{-1/2} + 1}, \quad (7)$$

может быть непосредственно преобразовано во временной метрический коэффициент

$$e^{\tau(r(t))} = k^2 \left[1 - \left(\frac{z(t)}{2 - z(t)} \right)^2 \right]. \quad (8)$$

Остающийся поперечный пространственный компонент метрики определяется зависимостью угловой скорости ω от радиальной координаты r

$$\omega^2(r) = \frac{(e^{\tau(r)})'}{(r^2 e^{\sigma(r)})'} \Rightarrow r^2 e^{\sigma(r)} = r_0^2 e^{\sigma(r_0)} - \int_{r_0}^r \frac{4k^2 z(r) z'(r)}{(2 - z(r))^3 \omega^2(r)} dr, \quad (9)$$

которая для искомого пространства-времени должна совпадать с таковой для пространства-времени Шварцшильда (или быть очень близкой к ней). Таким образом, отталкиваясь от метрики Шварцшильда, можно найти такие её возмущения, чтобы круговое движение осталось невозмущённым при появлении в радиальном движении малых отклонений — аномалии "Пионеров".

Интервал пространства-времени Шварцшильда в световых координатах имеет следующий вид

$$ds^2 = \frac{W(e^{\frac{r}{r_g} - 1})}{1 + W(e^{\frac{r}{r_g} - 1})} (dt^2 - dr^2) - r_g^2 \left[1 + W(e^{\frac{r}{r_g} - 1}) \right]^2 (d\theta^2 + \cos^2 \theta d\varphi^2), \quad (10)$$

где $W(x)$ — так называемая мультипликативная логарифмическая или функция Ламберта W : $W(x)e^{W(x)} = x$.

Аномалия "Пионеров" представляет собой линейное по эфемеридному времени ET отклонение экспериментально полученной частоты возвращённого сигнала ν_r от теоретической "модельной" ν_m

$$\frac{d}{d\text{ET}} (\nu_r - \nu_m) = -\nu_e \frac{2a_p}{c}, \quad (11)$$

где $a_p \sim 8 \cdot 10^{-10} \text{ м/с}^2$ — аномальное ("unmodelled") ускорение [2]. Эфемеридное время является наиболее точным астрономическим приближением ко "времени на пространственной бесконечности", которое может отличаться от временной координаты рассматриваемой метрики t только постоянным множителем, весьма близким к единице.

Аккуратно разлагая в ряд по возмущениям красного смещения $z(r(t))$ выражение для временного метрического коэффициента (8) и рассматривая порядки получающихся выражений, приходим к выводу, что в пределах экспериментальной точности можно ограничиться следующим выражением

$$\delta e^{\tau(r)} \simeq -\frac{z(r) \delta z(r)}{2} = a_p z(r) \Delta t(r), \quad (12)$$

где Δt есть время, прошедшее с момента "включения" аномалии.

Оказывается, что хотя возмущение временного метрического коэффициента в рассматриваемом приближении и нелинейно по r

$$\delta e^{\tau(r)} = 2a_p \left(r + \frac{r_g}{v^2} \left[1 - \sqrt{1 + \frac{r_g}{r v^2}} \operatorname{arcsinh} \left(\sqrt{\frac{r}{r_g}} v \right) \right] - C \sqrt{v^2 + \frac{r_g}{r}} \right), \quad (13)$$

но для известных параметров движения "Пионеров 10/11" отклонения от линейности лежат намного ниже достигнутой экспериментальной точности, что иллюстрируется рисунком 1, который показывает также разницу между данным рассмотрением и "наивным" подходом, когда ко временному метрическому коэффициенту просто добавляют член гравитационного потенциала, линейно зависящий от радиуса и дающий в ньютоновской гравитации ускорение аномалии "Пионеров". Как можно видеть, разница в основном заключается в наклоне графиков, которые сами по себе практически линейны. Более того, расчёт показывает, что относительные отклонения от линейности падают с увеличением r , так что линейное приближение $\delta e^{\tau(r)} \simeq 2\eta a_p (r - r_0)$ достаточно точно воспроизводит аномальное ускорение. Единственным различием между данным более точным и "наивным" подходом оказывается наличие в возмущении коэффициента η , который всегда меньше 1.

Теперь из известной угловой скорости движения планет $\omega(r)$ и отклонений красного смещения $\delta z(t)$ можно найти возмущение поперечного пространственного компонента метрики, оставляющее неизменным круговые орбиты:

$$\delta e^{\sigma(r)} = \frac{4a_p\eta r_g^2}{r^2} \int_{r_0}^r \left(1 + W(e^{\frac{r}{r_g}-1})\right)^3 dr \simeq \frac{4a_p\eta r_g^2}{r^2} \int_{r_0}^r \left(\frac{r}{r_g}\right)^3 dr = \frac{4a_p\eta(r^4 - r_0^4)}{r^2 r_g}. \quad (14)$$

Отметим присутствие гравитационного радиуса r_g в ответе. В результате эффект аномалии "Пионеров" можно воспроизвести возмущениями пространства-времени Шварцшильда, но нельзя — возмущениями пространства-времени Минковского! Следовательно, гравитационное происхождение аномалии можно согласовать с принципом эквивалентности, в отличие от утверждений некоторых авторов [3, 4].

Теперь можно было бы найти такие уравнения гравитационного поля, которые давали бы найденную метрику вне сферически-симметричного источника, по крайней мере в приближении слабого поля, но этот путь автору кажется бесперспективным. Вместо этого найдём тензор энергии-импульса материи, окружающей сферически-симметричный источник и дающей такую метрику в ОТО. Так как в масштабах Солнечной системы эффекты космологической постоянной пренебрежимо малы, можно использовать уравнения Эйнштейна в форме $G_{ij} = R_{ij} - \frac{1}{2}Rg_{ij} = \kappa T_{ij}$, $\kappa = 8\pi G/c^4$, которые приводят к тому, что алгебраический тип тензора энергии-импульса на пространственной бесконечности оказывается соответствующим идеальной жидкости с положительным давлением

$$p \rightarrow 12\frac{a_p\eta}{kr_g} > 0, \text{ но отрицательной плотностью энергии } \rho \rightarrow -36\frac{a_p\eta}{kr_g} < 0.$$

Интересно отметить, что соотношение между p и ρ имеет с точностью до знака тот же вид, что и для ультрарелятивистской жидкости: вместо $p = \rho/3$ в нашем случае асимптотически получается $p = -\rho/3$. Таким образом, материя, которая могла бы генерировать подобное гравитационное поле, нарушает условия энергодоминантности, что представляется сильным аргументом в пользу негравитационного источника аномалии "Пионеров".

Предложенная модель должна быть тщательно проверена исследованиями типа "Grand-fit" [8, 9], но прямые измерения с космических аппаратов, специально предназначенных для проверки ОТО в масштабах Солнечной системы являются предпочтительными [10–12].

Автор благодарит участников семинара Лаборатории теоретической физики за стимулирующие дискуссии и замечания, а также хотел бы выразить признательность создателю пакета RGTC С. Бонаносу.

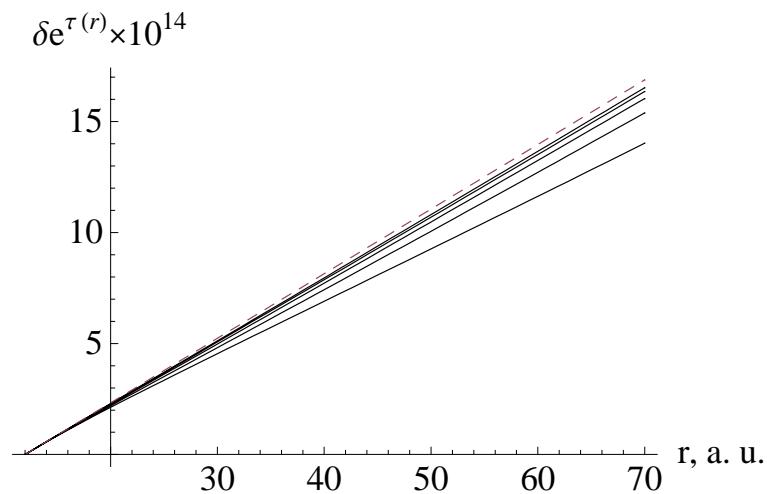


Рис. 1. Возмущения метрики $\delta e^{\tau(r)}$ для объяснения аномалии "Пионеров" при v от 5 км/с до 50 км/с с шагом в 5 км/с (сплошные линии снизу вверх) при сшивке метрики со шварцшильдовской на 12 а. е. Для сравнения дан результат "наивного" подхода (штриховая линия)

Литература

1. John D. Anderson, et al. Phys. Rev. Lett., **81**, 2858 (1998).
2. John D. Anderson, et al. Phys. Rev. **D**, **65**, 082004 (2002).
3. Lorenzo Iorio and Giuseppe Giudice. New Astronomy, **11**, 600 (2006).
4. Lorenzo Iorio. Found. of Physics, **37**, 897 (2007).
5. M.-T. Jaekel and S. Reynaud. Class. Quant. Gravity, **22**, 2135 (2005).
6. M.-T. Jaekel and S. Reynaud. Class. Quant. Gravity, **23**, 777 (2006).
7. M.-T. Jaekel and S. Reynaud. Class. Quant. Gravity, **23**, 7561 (2006).
8. E. V. Pitjeva. Astronomy Letters, **31**, 340 (2007).
9. E. M. Standish. In American Institute of Physics Conference Series, vol. 977, 254, 2008.
10. SAGAS Collaboration. ArXiv e-prints, arXiv:0711.0304v3 [gr-qc], 2007.
11. LATOR Collaboration. ArXiv e-prints, arXiv:gr-qc/0506104v3, 2005.
12. The Pioneer Explorer Collaboration. ArXiv e-prints, arXiv:gr-qc/0506139v1, 2005.

ПОИСК И ИДЕНТИФИКАЦИЯ ЭФФЕКТОВ Z' -БОЗОНОВ НА ЭЛЕКТРОН-ПОЗИТРОННОМ КОЛЛАЙДЕРЕ

Н. В. Карпенко

*Белорусский государственный университет, физический факультет,
кафедра Теоретической физики, ул. Бобруйская 5, 220050 Минск, Беларусь*

Введение. Стандартная модель сильных и электрослабых взаимодействий элементарных частиц (СМ) достигла поистине впечатляющих успехов в описании экспериментальных данных во всем интервале достижимых на сегодняшний день энергий. Современный феноменологический статус СМ базируется в основном на всестороннем исследовании процессов, включающих лептонные, лептон-адронные и адрон-адронные взаимодействия. В частности, результаты экспериментов, выполненных на электрон-позитронном коллайдере LEP1, по прецизионному определению констант связи промежуточных векторных бозонов с фермионами прекрасно согласуется с теоретическими предсказаниями СМ с точностью порядка 0,1%.

Тем не менее, СМ не может претендовать на роль всеобъемлющей теории в силу ряда причин. В частности, она содержит большое число свободных параметров и не дает ответа на ряд фундаментальных вопросов, связанных, например, с проблемой иерархии масс частиц, числом поколений и т.д. Поэтому было бы вполне естественным сделать предположение о существовании более фундаментальной теории, низкоэнергетический предел которой совпадает со СМ. Среди кандидатов, которые в состоянии решить, по крайней мере, часть проблем, стоящих перед СМ, выделяется довольно значительный класс теорий с расширенным калибровочным сектором. К ним относятся, например, лево-право симметричные модели, альтернативные лево-право симметричные модели, E_6 -модели и т.д. Общим для многих из этих моделей является предсказание новых физических объектов и явлений на масштабе энергий более 1 ТэВ в частности, связанных с существованием новых нейтральных (Z') или заряженных (W^{\pm}) векторных бозонов, фермионов и скалярных частиц. В работе будут рассмотрены эффекты «новой» (нестандартной) физики в частности, новый нейтральный калибровочный Z' -бозон на будущем электрон-позитронном международном линейном коллайдере ILC с $\sqrt{s} = 0,5\text{TeV}$ и $L_{\text{int}} = 100\text{fb}^{-1}$. На их основе будут определены статистическая значимость процессов по отношению к Z' -бозону с 95%-ой доверительной вероятностью и порог идентификации для Z' -бозонов с 95%-ой доверительной вероятностью.

Процессы и наблюдаемые. Одним из наиболее естественных каналов для поиска

эффектов, индуцируемых Z' -бозоном, является процесс аннигиляционного рождения пары фермионов:

$$e^+ + e^- \rightarrow f + \bar{f}, \quad (1)$$

где $f = \mu, \tau, c, b$.

Для этих процессов Z' -бозон дает вклад в наблюдаемые уже в броуновском приближении.

Общий вид лагранжиана L_{NC} взаимодействия нейтральных токов фермионов, обусловленных обменом γ -, Z -, Z' -бозонами, можно представить в форме:

$$-L_{NC} = e J_\gamma^\mu A_\mu + g_Z J_Z^\mu Z_\mu + g_{Z'}^\mu J_{Z'}^\mu Z'_\mu, \quad (2)$$

где $e = \sqrt{4\pi\alpha_{e.m.}}$; калибровочные константы Z -, Z' -бозонов определяются, соответственно, как $g_Z = e/s_W c_W$ ($s_W^2 = 1 - c_W^2 \equiv \sin^2 \theta_W \approx 0,23$), и $g_{Z'}$.

Дифференциальное сечение рассматриваемого процесса для поляризованных начальных пучков может быть представлено в виде:

$$\frac{d\sigma}{d \cos \theta} = \frac{3}{8} [(1 + \cos \theta)^2 \sigma_+ + (1 - \cos \theta)^2 \sigma_-]. \quad (3)$$

Это выражение может быть записано в терминах спирального сечения $\sigma_{\alpha\beta}$ ($\alpha, \beta = L, R$):

$$\sigma_+ = \frac{1}{4} [(1 - P_e)(1 + P_e) \sigma_{LL} + (1 + P_e)(1 - P_e) \sigma_{RR}], \quad (4)$$

$$\sigma_- = \frac{1}{4} [(1 - P_e)(1 + P_e) \sigma_{LR} + (1 + P_e)(1 - P_e) \sigma_{RL}], \quad (5)$$

где

$$\sigma_{\alpha\beta} = N_C \sigma_{pt} |M_{\alpha\beta}|^2 \quad (6)$$

и $P_e (P_{\bar{e}})$ продольные поляризации электрона (позитрона), $P_e \leq 1$, $P_{\bar{e}} \leq 1$, $\sigma_{pt} = \frac{4\pi\alpha^2}{3s}$,

$N_c = 3$ для кварков и $N_c = 1$ для лептонов. Спиральная амплитуда может быть записана:

$$M_{\alpha\beta} = Q_e Q_f + g_\alpha^e g_\beta^f \chi_Z + g_\alpha^{e'} g_\beta^{f'} \chi_{Z'} \quad (7)$$

где $\chi_{Z(Z')} = s/(s - M_{Z(Z')}^2 + iM_{Z(Z')}\Gamma_{Z(Z')})$ пропагаторы $Z(Z')$ и $g_L^f = (I_{3L}^f - Q_f s_W^2)/(s_W c_W)$ и

$g_R^f = -Q_f s_W^2 / s_W c_W$ лево- и правосторонние константы фермионного взаимодействия в СМ, где $s_W^2 = 1 - c_W^2 \equiv \sin^2 \theta_W$ и Q_f фермионные электрические заряды.

Для модели E_6 константы $g_L^{f'}$, $g_R^{f'}$ представлены в табл.1, а для модели LR – в табл.2., где $g_{Z'} = g_Z s_W / e$, $A = \cos \beta / 2\sqrt{6}$, $B = \frac{\sqrt{10}}{12} \sin \beta$.

Табл. 1 Константы $g_L^{f'}$, $g_R^{f'}$ для модели E_6 .

Фермионы (f)	v	e	u	d
$g_L^{f'}/g_{Z'} e$		$3A+B$	$3A+B$	$-A+B$
$g_R^{f'}/g_{Z'} e$		0	$A-B$	$A-B$

Табл. 2 Константы $g_L^{f'}$, $g_R^{f'}$ для модели LR.

Фермионы (f)	v	e	u	d
$g_L^{f'}/g_{Z'} e$	$\frac{1}{2\alpha_{LR}}$	$\frac{1}{2\alpha_{LR}}$	$-\frac{1}{6\alpha_{LR}}$	$-\frac{1}{6\alpha_{LR}}$
$g_R^{f'}/g_{Z'} e$	0	$\frac{1}{2\alpha_{LR}} - \frac{\alpha_{LR}}{2}$	$-\frac{1}{6\alpha_{LR}} - \frac{\alpha_{LR}}{2}$	$-\frac{1}{6\alpha_{LR}} - \frac{\alpha_{LR}}{2}$

Рассматриваемыми наблюдаемыми являются:

1. Неполяризованное сечение:

$$\sigma_{unpol} = \int_{-1}^1 \frac{d\sigma(P_e = P_{\bar{e}} = 0)}{d \cos \theta} d \cos \theta = \frac{1}{4} [\sigma_{LL} + \sigma_{LR} + \sigma_{RR} + \sigma_{RL}]. \quad (8)$$

2. Ассимметрия вперед-назад:

$$A_{FB} = \frac{\sigma_{FB}}{\sigma_{unpol}} = \frac{3}{4} \frac{\sigma_{LL} - \sigma_{LR} + \sigma_{RR} - \sigma_{RL}}{\sigma_{LL} + \sigma_{LR} + \sigma_{RR} + \sigma_{RL}}. \quad (9)$$

где

$$\sigma_{FB} = \sigma_F - \sigma_B = \left(\int_{-1}^0 - \int_0^1 \right) \frac{d\sigma(P_e = P_{\bar{e}} = 0)}{d \cos \theta} d \cos \theta. \quad (10)$$

3. Лево-правая асимметрия (с двумя поляризованными пучками):

$$A_{LR} = \frac{\sigma_{LL} + \sigma_{LR} - \sigma_{RR} - \sigma_{RL}}{\sigma_{LL} + \sigma_{LR} + \sigma_{RR} + \sigma_{RL}}. \quad (11)$$

4. Лево-правая асимметрия вперед-назад (с двумя поляризованными пучками):

$$A_{LR,FB} = \frac{3}{4} \frac{\sigma_{LL} - \sigma_{LR} - \sigma_{RR} + \sigma_{RL}}{\sigma_{LL} + \sigma_{LR} + \sigma_{RR} + \sigma_{RL}}. \quad (12)$$

Количественный анализ. Если при энергии центра масс в 500 ГэВ оказывается, что все наблюдения согласуются с СМ, мы можем вывести нижние границы на массы дополнительного Z' -бозона сравнением измеренных наблюдаемых с предсказаниями различных моделей.

На Рис. 1, 2 показаны нижние границы на массы Z' -бозонов, полученные с помощью метода, основанного на функции χ^2 , при учете всех наблюдаемых.

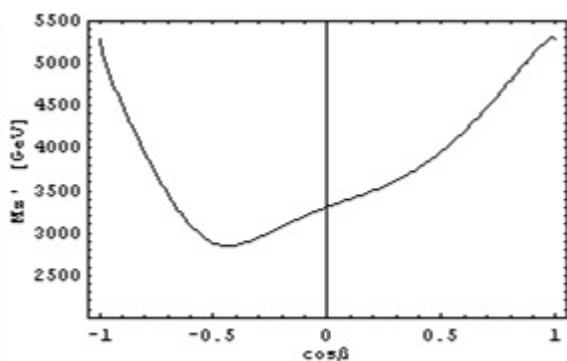


Рис. 1. Порог обнаружения Z' -бозонов для комбинированного χ^2 при учете всех рассматриваемых процессов для класса моделей E_6 .

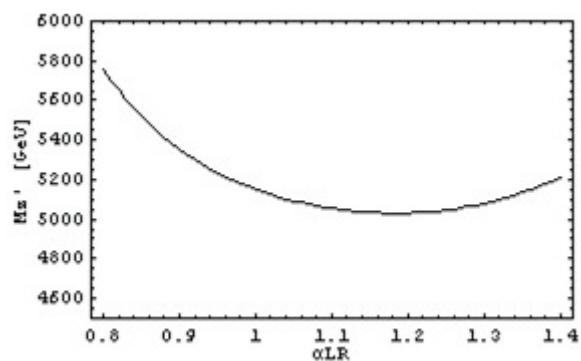


Рис. 2. Порог обнаружения Z' -бозонов для комбинированного χ^2 при учете всех рассматриваемых процессов для класса моделей LR.

Из рисунков видно, что повышение чувствительности за счет наличия продольной поляризации весьма умеренное для E_6 моделей. Для LR моделей продольная поляризация позволит раздвинуть массовый предел Z' -бозона еще на 1,2 ТэВ для определенных значений α_{LR} . На рис. 3 изображена поверхность порога идентификации Z' -бозонов для ком-

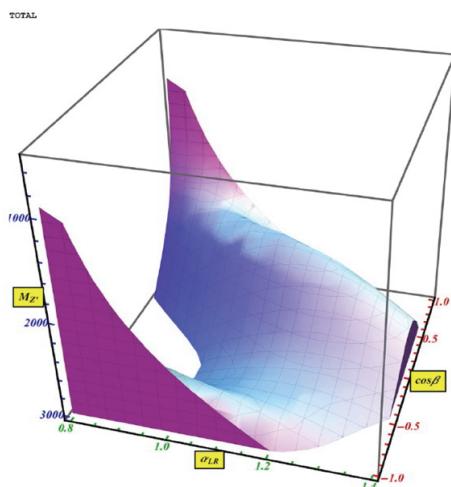


Рис. 3. Порог идентификации Z' -бозонов для комбинированного χ^2 при учете всех рассматриваемых процессов

бинированного χ^2 при учете всех рассматриваемых процессов. Таким образом, получаем массу в 2050 ГэВ, при которой модели E_6 и LR могут быть различимы на 95%-ном уровне достоверности.

Выводы. Рассмотрены эффекты «новой» (нестандартной) физики, в частности, новый нейтральный калибровочный Z' -бозон на будущем электрон-позитронном международном линейном коллайдере ILC с энергией $\sqrt{s} = 0,57\text{TeV}$ и интегральной светимостью $L_{\text{int}} = 100\text{fb}^{-1}$. На их основе определен порог рождения Z' -бозона на 95%-ном уровне достоверности. Определен порог идентификации для Z' -бозонов величиной 2050 ГэВ, при котором модели E_6 и LR могут быть различимы на 95%-ном уровне достоверности.

В заключение автор выражает благодарность своему научному руководителю проф. А. А. Панкову.

Литература

1. S. Riemann, Fortran program Zefit Version 4.2; D. Bardin et al., Comput. Phys. Commun. 133 (2001) 229, hep-ph/9908433.
2. M. Consoli, W. Hollik, F. Jegerlehner, CERN-TH-5527-89, Presented at Workshop on Z . Physics at LEP.
3. G. Altarelli, R. Casalbuoni, D. Dominici, F. Feruglio, R. Gatto, Nucl. Phys. B 342 (1990) 15.
4. A. Djouadi, A. Leike, T. Riemann, D. Schaile, C. Verzegnassi, Z. Phys. C 56 (1992) 289.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗЛУЧЕНИЯ ПУЛЬСАРА, ДВИЖУЩЕГОСЯ В ПОЛЕ ЧЕРНОЙ ДЫРЫ

А. Н. Тарасенко

Белорусский государственный университет, физический факультет, кафедра теоретической физики, ул. Бобруйская 5, 220050 Минск, Беларусь, tarasenk@tut.by

Введение. Проверка общей теории относительности в сильном поле остается важной задачей физики. Перспективным для этих целей может оказаться изучение объектов, движущихся в поле сверхмассивной черной дыры, которая, как считается, расположена в центре нашей Галактики. Один из эффектов, который возникает при движении светящегося объекта в поле черной дыры – это появление многих изображений одного источника. Кроме того, возможна гравитационная фокусировка излучения.

Для объектов, расположенных далеко от черной дыры (на расстояниях $r \gg r_g$, где r_g – гравитационный радиус черной дыры), расчет подобных эффектов проводился и ранее (например, в [1]). В данной работе ставится цель рассчитать излучение источника¹, который находится на произвольном расстоянии от черной дыры. Кроме того, мы не предполагаем изотропности излучения источника, так что результаты применимы к большому классу светящихся объектов. Обычные звезды не могут находиться на расстояниях порядка гравитационного радиуса от черной дыры, так как разрушаются приливными силами. Поэтому применять полученные результаты следует скорее для пульсаров, что и объясняет название работы.

Остановимся на используемых приближениях. Черную дыру считаем шварцшильдовской, то есть незаряженной и невращающейся, и покоящейся. Для выполнения последнего условия необходимо, чтобы масса черной дыры была много больше массы движущегося вокруг нее источника. Источник считается движущимся под действием только сил гравитации, хотя это и не принципиально для расчетов. Излучение источника рассматриваем в рамках геометрической оптики. Это условие выполняется, по крайней мере, для первых нескольких лучей (с наименьшим числом оборотов $|n|$), поскольку гравитационный радиус черной дыры r_g много больше длины волны для всего доступного наблюдений диапазона.

Основные этапы решения. Решение задачи состоит из нескольких этапов. Вначале мы находим закон движения источника. Гравитационное поле, в котором движется источник, задается метрикой Шварцшильда:

$$ds^2 = \left(1 - \frac{r_g}{r}\right) c^2 dt^2 - \frac{dr^2}{1 - r_g/r} - r^2 (d\theta^2 + \sin^2 \theta d\varphi^2). \quad (1)$$

Мировая линия источника является времениподобной геодезической в метрике Шварцшильда.

Уравнение геодезической

$$\frac{Du^i}{ds} = 0, \quad (2)$$

где u^i – 4-скорость источника,

$$u^i = \frac{dx^i}{ds}. \quad (3)$$

Геодезическую можно охарактеризовать четырьмя параметрами: два параметра определяют плоскость, в которой лежит орбита источника, оставшиеся два параметра \tilde{E} и \tilde{L} имеют смысл удельных энергии и момента импульса (более подробно геодезические в метрике Шварцшильда рассматриваются в [2], [3]). Удобно выбрать систему координат так, чтобы плоскость орбиты совпадала с плоскостью $\theta=\pi/2$. Тогда параметры \tilde{E} и \tilde{L} будут связанными с компонентами 4-скорости:

$$\begin{aligned} u_0 &= \tilde{E}, \\ u_3 &= -\tilde{L}. \end{aligned} \quad (4)$$

Знание четырех параметров геодезической, а также начального положения источника, достаточно, чтобы найти его закон движения.

Далее нужно в каждый момент времени построить лучи, которые будут испущены источником в точке S и будут приняты наблюдателем в точке P (Рис. 1а). Мировые линии световых лучей являются изотропными геодезическими. Как и времениподобные геодезические, их можно охарактеризовать четырьмя параметрами: $\theta_0, \varphi_0, \omega_0, b$. Два из них, θ_0 и φ_0 , задают плоскость Π_1 , в которой лежит траектория луча. В качестве θ_0 и φ_0 мы будем использовать координаты точки A_1 (Рис. 1а), такой, что для любой точки M плоскости Π_1 $\angle MBA_1 = \pi/2$; остальные параметры имеют следующий смысл: ω_0 – частота света на бесконечности, b – прицельный параметр, то есть минимальное расстояние от черной дыры до луча при отсутствии гравитационного поля.

Параметры θ_0 и φ_0 находятся из условия, что плоскость Π_1 проходит через точки S, P, B . Прицельный параметр b определяется из условий, что луч проходит через точки S и P .

¹ Какие именно параметры излучения планируется найти, мы уточним далее.

Так как уравнение траектории луча

$$r = r(\Phi) \quad (5)$$

может быть явно найдено через эллиптические функции, то задача нахождения b сводится к решению системы уравнений

$$r(0) = r_s, \quad r(\Delta\Phi + 2\pi n) = \infty. \quad (6)$$

Здесь r_s – координата источника, она находится как решение его уравнений движения; $\Delta\Phi = \angle SBP$; слагаемое $2\pi n$ введено, чтобы учесть, что луч может совершить произвольное число оборотов n вокруг черной дыры. n может быть произвольным положительным или отрицательным целым числом, оно нумерует лучи (Рис. 1b).

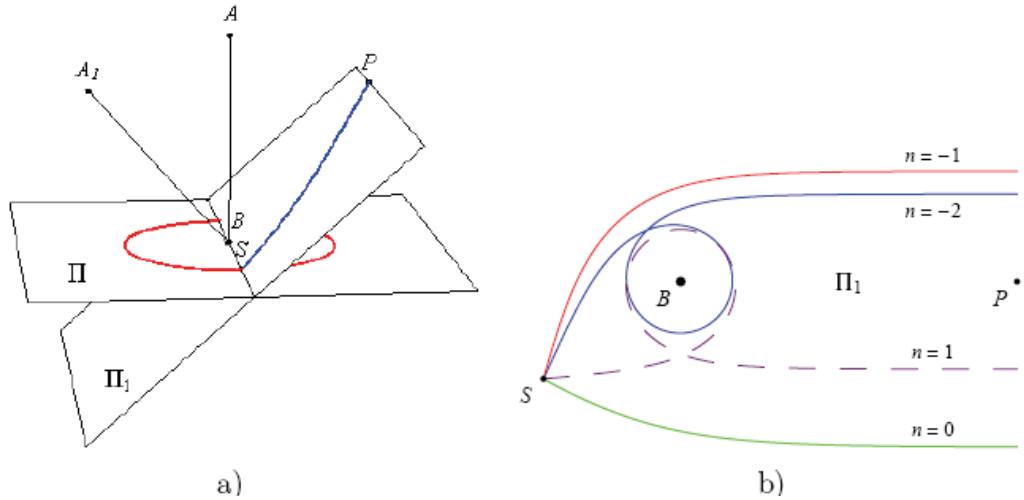


Рис. 1. а) Рассматриваемая система. Источник света находится в точке S , наблюдатель – в P , черная дыра – в B . Π – плоскость орбиты источника, Π_1 – светового луча, б) Траектории лучей с разными n .

После того, как построены лучи, которые будут приняты наблюдателем, для каждого из них находятся следующие параметры: красное смещение, время прихода луча к наблюдателю и коэффициент усиления. Красное смещение определяется как

$$z = \frac{\lambda_P}{\lambda_s} - 1, \quad (7)$$

где λ – длина волны, индекс P показывает, что величина измеряется наблюдателем в точке P , s – источником в точке S . Под коэффициентом усиления понимается отношение принятой силы света к испущенной:

$$K = \frac{I_P}{I_s}, \quad (8)$$

сила света – это энергия, излученная в единицу времени в единичный телесный угол.

Если выразить параметры излучения с помощью их определений через параметры движения луча и источника, можно прийти к следующим выражениям:

$$\begin{aligned}
 z &= \frac{\tilde{E}}{1 - \frac{r_g}{r_s}} \pm \frac{1}{1 - \frac{r_g}{r_s}} \sqrt{1 - \frac{b^2}{r_s^2} \left(1 - \frac{r_g}{r_s}\right)} \times \\
 &\quad \sqrt{\tilde{E}^2 - \left(1 - \frac{r_g}{r_s}\right) \left(1 + \frac{\tilde{L}^2}{r_s^2}\right) - \frac{b\tilde{L}}{r_s^2} \cos \theta_0} - 1, \\
 t_P &= \frac{1}{c} \int_0^s (1+z) ds, \\
 K &= \frac{\left| b \frac{\delta b}{\delta \Phi_P} \right|}{r_s^2 \sin \Delta \Phi (1+z)^4 \sqrt{1 - \frac{b^2}{r_s^2} \left(1 - \frac{r_g}{r_s}\right)}}.
 \end{aligned} \tag{9}$$

Анализ результатов. Анализируя выражения (9), можно найти пределы, в которых заключены параметры излучения источника. Такой анализ приводит для красного смещения к тому, что для финитных движений²

$$2 - \sqrt{2} \leq 1 + z \leq 2 + \sqrt{2}. \tag{10}$$

Максимальное и минимальное значения достигаются (в пределе) в периастре орбиты с $\tilde{E} = 1$, $\tilde{L} = 2r_g$, для лучей, которые испускаются соответственно против и по движению источника. Из положительности $1+z$ следует, что время приема луча – возрастающая функция времени его испускания. Коэффициент усиления (и поэтому сила света) может изменяться от нуля до бесконечности. В бесконечность он обращается в те моменты времени, когда источник, наблюдатель и черная дыра находятся на одной прямой ($\sin \Delta \Phi = 0$). Если рассмотреть источник конечных размеров, то для него сила света будет оставаться конечной.

Применение результатов для пульсара. Проиллюстрируем метод расчета излучения на примере модельного пульсара. Пульсар будем предполагать источником со следующим законом излучения: сила света зависит только от угла γ между направлением магнитного момента (магнитной осью) и направлением излучения, сама магнитная ось вращается с постоянной угловой скоростью Ω вокруг оси вращения, составляя с ней по-

стоянnyй угол α . Предполагая отсутствие внешних моментов сил, ось вращения пульсара будем считать параллельно переносимой вдоль мировой линии источника.

Рассмотрим пульсар, который движется по круговой орбите радиуса $r=5r_g$. Наблюдатель находится в точке

$$\theta_P = \frac{3\pi}{8}, \quad \varphi_P = 0. \quad (11)$$

Найдем форму импульсов, которые будут приняты наблюдателем (Рис. 2). При отсутствии поля импульсы имели бы одинаковую высоту и следовали бы через равные промежутки времени.

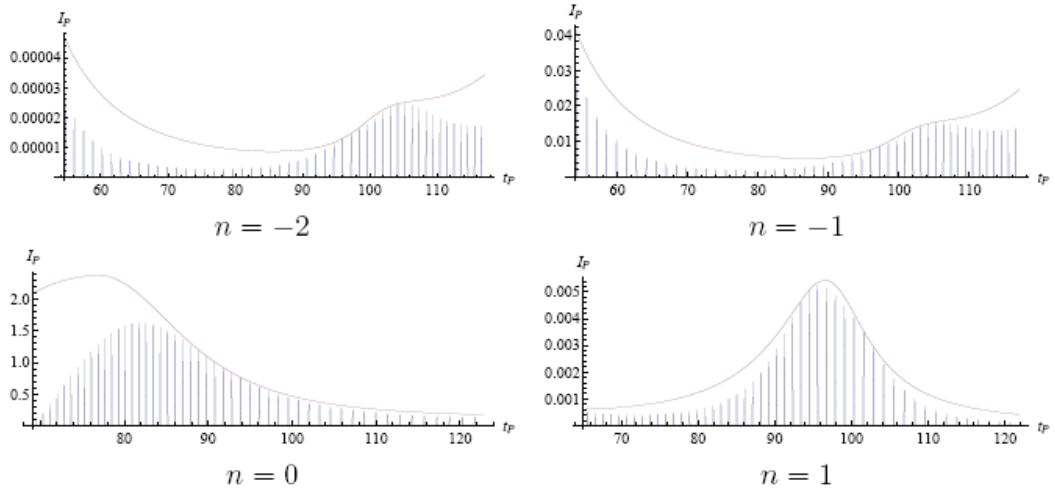


Рис. 2. Сила света различных изображений пульсара в зависимости от момента приема. Сплошной линией показан коэффициент усиления. Единица измерения времени r_g/c , силы света – сила света при отсутствии поля.

Заключение. В качестве итога работы можно сказать следующее: излучение точечного источника в поле черной дыры наблюдается как дискретный набор изображений. Все изображения видны на одной прямой, причем изображения с большим номером $|n|$ ближе к черной дыре. Сила света изображений быстро убывает с ростом $|n|$, но резко возрастает в моменты, когда источник находится точно за или перед черной дырой.

Для наблюдений важно найти такие особенности излучения источника в сильном поле, которые позволяют его обнаружить. Такими особенностями будут, во-первых, дополнительные изображения уже открытых источников, таких, как S-звезд, обнаруженных вблизи центра Галактики [4]. Во-вторых, излучение близкого к черной дыре пульсара должно быть промодулировано на двух частотах: на частоте, характерной для излучения пульсара, и частоте обращения пульсара вокруг черной дыры. Кроме того, можно ожи-

² и для орбит, не уходящих под сферу Шварцшильда

дать, что описанные эффекты проявятся в излучении самой черной дыры, точнее говоря, аккрецирующего на нее вещества.

Литература

1. V. Bozza, L. Mancini. *Astrophys. J.* 627, 790-802 (2005).
2. С. Чандraseкар. Математическая теория черных дыр, Москва, 1986.
3. И. Д. Новиков, В. П. Фролов. Физика черных дыр, Москва, 1986.
4. F. Eisenhauer et al. *Astrophys. J.* 628, 246-259 (2005).

ГРАВИТАЦИОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В ЭЛЕКТРОДИНАМИКЕ

А. Н. Егоров, А. Н. Сердюков

Гомельский государственный университет им. Ф. Скорины, кафедра оптики, ул. Советская 104, Гомель, 246019, Беларусь, yegorov@tut.by

В монографии [1] развивается релятивистская полевая модель тяготения, которая трактуется как калибровочно-инвариантная теория линейного скалярного поля. Учет взаимодействия частицы с полем тяготения в этой модели осуществляется посредством мультиплекативного подключения полевой функции U к функции Лагранжа свободной частицы. Таким образом, функция Лагранжа классической частицы в поле тяготения принимает вид

$$L = mc^2 \sqrt{1 - v^2/c^2} U^2. \quad (1)$$

Уравнение Эйлера-Лагранжа

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial v_i} = \frac{\partial L}{\partial x_i} \quad (2)$$

может быть представлено в виде $\frac{d}{dt} \frac{m\mathbf{v}}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} = \frac{m}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \left(\mathbf{g} + \frac{1}{c^2} \mathbf{v} \times \mathbf{v} \times \mathbf{g} - \frac{1}{c} \eta \mathbf{v} \right)$, где

$$\mathbf{g} = -\nabla \Phi, \quad (3)$$

$$\eta = \frac{1}{c} \frac{d\Phi}{dt} \quad (4)$$

– наблюдаемые гравитационного поля – силовые характеристики или напряженности, $\Phi = 2c^2 \ln U$ – его потенциал.

В соотношениях (3-4) полевые функции Φ или U определены через наблюдаемые \mathbf{g} , η неоднозначно, а именно с точностью до преобразований

$$\begin{aligned} \Phi &\rightarrow \Phi' = \Phi + \lambda, \\ U &\rightarrow U' = U e^{\lambda/2c^2} \end{aligned} \quad (5)$$

с произвольной константой λ .

При этом с преобразованием (5) сопряжено масштабное преобразование функции Лагранжа (1)

$$L \rightarrow L' = L e^{\lambda/c^2}, \quad (6)$$

относительно которого уравнение движения (2) остается инвариантным (постоянный

множитель e^{λ/c^2} просто сокращается).

Расширяя теорию, будем следовать сформулированному в [1] принципу мультиплексивного подключения гравитационного взаимодействия к функции Лагранжа и принципу калибровочной инвариантности теории. Таким образом, функция Лагранжа частицы, взаимодействующей одновременно с двумя полями – электрическим и гравитационным – можно принять выражение

$$L = \left\{ -mc^2 \sqrt{1 - v^2/c^2} + \frac{q}{c} \mathbf{A}^{(0)} \mathbf{v} - q\varphi^{(0)} \right\} U^2, \quad (7)$$

где $\mathbf{A}^{(0)}$ и $\varphi^{(0)}$ – потенциалы электромагнитного поля без учета гравитационного взаимодействия.

Прежде чем собрать уравнения движения на основе (7), целесообразно перейти к новым полевым переменным – «комбинированным» электромагнитным потенциалам

$$\begin{cases} \mathbf{A} = \mathbf{A}^{(0)} U^2 \\ \varphi = \varphi^{(0)} U^2 \end{cases}, \quad (8)$$

и записать функцию Лагранжа в виде

$$L = -mc^2 \sqrt{1 - v^2/c^2} U^2 + \frac{q}{c} \mathbf{A} \mathbf{v} - q\varphi. \quad (9)$$

Благодаря этому, при выборе функции Лагранжа в форме (9) выполняется условие калибровочной инвариантности уравнения (2) так как соблюдается масштабное преобразование (6) для всего выражения (9). Из (8) следует, что с преобразованием (5) сопряжено преобразование электромагнитных потенциалов

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &\rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} e^{\lambda/c^2}, \\ \varphi &\rightarrow \varphi' = \varphi e^{\lambda/c^2}. \end{aligned} \quad (10)$$

При подстановке (9) в уравнение Эйлера-Лагранжа (2) получим уравнение движения частицы в электромагнитном и гравитационном полях:

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{mU^2 \mathbf{v}}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} = mU^2 \mathbf{g} \sqrt{1 - v^2/c^2} - q \left(\nabla \varphi + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A} \right) + \frac{q}{c} \mathbf{v} \times \nabla \times \mathbf{A}. \quad (11)$$

Аналогично Максвелловской электродинамике, введем обозначения напряженности электрического и индукции магнитного полей:

$$\mathbf{E} = -\nabla\varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}, \quad (12)$$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}. \quad (13)$$

Из уравнения движения частицы (11) можем выделить силу Лоренца:

$$\mathbf{F}_\lambda = q\mathbf{E} + \frac{q}{c}\mathbf{v} \times \mathbf{B}.$$

Те же самые результаты могут быть получены из (7) прямой подстановкой в (2) без использования замены (8), при этом расчеты будут не слишком сложными, но громоздкими.

С учетом (10) калибровочные преобразования для характеристик поля (12), (13) определяются как $A'_\mu = A_\mu e^{\lambda/c^2}$, $\mathbf{E}' = \mathbf{E} e^{\lambda/c^2}$, $\mathbf{B}' = \mathbf{B} e^{\lambda/c^2}$.

Поступая как и в классической электродинамике, мы формально можем найти первую пару уравнений Максвелла, применив операцию ротора к выражению напряженности электрического поля в присутствии гравитационного и операцию дивергенции к выражению магнитной индукции:

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}, \quad (14)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0. \quad (15)$$

Введя тензор электромагнитного поля

$$B_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu, \\ (B_{\mu\nu}) = \begin{pmatrix} \mathbf{B} & -i\mathbf{E} \\ i\mathbf{E} & 0 \end{pmatrix}, \quad (16)$$

аналогичный тензору из классической электродинамики, и получив дуальный тензор по формуле $B_{\mu\nu}^\times = -\frac{i}{2} e_{\mu\nu\rho\sigma} B_{\rho\sigma}$, можем (14) и (15) записать в виде $\partial_\mu B_{\mu\nu}^\times = 0$.

Далее, для получения второй пары уравнений Максвелла, воспользуемся лагранжианом полной системы связанных полей и массивных заряженных частиц:

$$L = -\mu c^2 \sqrt{1 - v^2/c^2} U^2 - \frac{1}{16\pi} B_{\mu\nu}^2 U^{-2} - \frac{c^4}{2\pi G} (\partial_\mu U)^2 + \frac{1}{c} A_\mu j_\mu.$$

Уравнение Эйлера-Лагранжа для нахождения уравнений поля запишем в виде $\partial_\mu \frac{\partial L}{\partial (\partial_\mu A_\nu)} = \frac{\partial L}{\partial A_\nu}$. При подстановке получим $B_{\mu\nu} U^{-2} = -\frac{4\pi}{c} j_\mu$. Учитывая, что

$B_{\mu\nu}U^{-2} = H_{\mu\nu}$, где

$$(H_{\mu\nu}) = \begin{pmatrix} -\mathbf{H} & -i\mathbf{D} \\ i\mathbf{D} & 0 \end{pmatrix}, \quad (17)$$

$$\mathbf{H}U^2 = \mathbf{B}, \quad (18)$$

$$\mathbf{D}U^2 = \mathbf{E}, \quad (19)$$

вторая пара уравнений Максвелла с учетом гравитационного взаимодействия запишется в

$$\text{виде соотношения } H_{\mu\nu} = -\frac{4\pi}{c} j_\mu.$$

Применяя "обычное" преобразование электромагнитного потенциала (помня о том, что потенциалы содержат экспоненту) $A_\mu \rightarrow A'_\mu = A_\mu + \partial_\mu f$, легко проверить, что компоненты тензора (17) являются калибровочно инвариантными. Аналогично и второй тензор (16) электромагнитного поля остается инвариантным.

Электромагнитные волны в поле тяготения. Запишем систему уравнений Максвелла с учетом гравитации в трехмерном виде, исключая заряды и токи:

$$\begin{cases} \nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B} \\ \nabla \mathbf{B} = 0 \\ \nabla \times \mathbf{H} = \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{D} \\ \nabla \mathbf{D} = 0 \end{cases}. \quad (20)$$

Используя «материальные» уравнения (18), (19) преобразуем систему (20) к виду

$$\begin{cases} \nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B} \\ \nabla \mathbf{B} = 0 \\ \nabla \times \mathbf{H} + \frac{1}{c^2} \mathbf{g} \times \mathbf{B} = \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{E} \\ \nabla \mathbf{E} + \frac{1}{c^2} \mathbf{g} \mathbf{E} = 0 \end{cases} \quad (21)$$

Применяя операцию ротора к первому и третьему уравнениям системы (21) и полагая, что гравитационное поле однородно, после преобразований получим уравнения электромагнитных волн в поле тяготения:

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \frac{1}{c^2} \mathbf{g} \nabla \right) \mathbf{B} = 0, \quad (22)$$

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \frac{1}{c^2} \mathbf{g} \nabla \right) \mathbf{E} = 0. \quad (23)$$

Решение этих уравнений, как обычно, ищем в виде $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{kr} - \omega t)}$, $\mathbf{B} = \mathbf{B}_0 e^{i(\mathbf{kr} - \omega t)}$. При под-

становке в (22), (23) получим $\left(\mathbf{k}^2 - \frac{\omega^2}{c^2} + i \frac{\mathbf{kg}}{c^2} \right) \mathbf{E}_0 = 0$, $\left(\mathbf{k}^2 - \frac{\omega^2}{c^2} + i \frac{\mathbf{kg}}{c^2} \right) \mathbf{B}_0 = 0$. Для того,

чтобы эти уравнения выполнялись тождественно, необходимо приравнять мнимую и действительную части выражения в скобках, при этом вектор \mathbf{k} должен быть комплексным:

$$\mathbf{k} = \mathbf{K} + i\mathbf{N}. \text{ При решении получим } \mathbf{K} = \sqrt{\frac{4\omega^2 c^2 - \mathbf{g}^2}{4c^4}}, \mathbf{N} = -\frac{\mathbf{g}}{2c^2}.$$

Литература

1. А. Н. Сердюков. Калибровочная теория скалярного гравитационного поля. Гомель: ГГУ, 2005.
2. G. Nordström. Ann. d. Phys. 42, 533 (1913)
3. G. Nordström. Phys. Zeitschrift. 13, 1126 (1912)
4. G. Nordström. Ann. d. Phys. 40, 856 (1913)
5. Л. Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Теория поля. М.: Наука, 1988.
6. М. А. Наймарк. Линейные представления группы Лоренца. М.: Физматгиз, 1961.
7. W. E. Thirring. Ann. of Phys. 16, 96 (1961)
8. Ю. В. Барышев. Гравитация. 2, 20 (1996)

НОВЫЕ АНАЛИТИЧЕСКИЕ ИНСТАНТОННЫЕ РЕШЕНИЯ ДЛЯ СКАЛЯРНЫХ ПОЛЕВЫХ ТЕОРИЙ С ВЫРОЖДЕННЫМ ВАКУУМОМ

Р. Г. Шуляковский

*Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларусь, пр. Независимости 68, 220072
Минск, Беларусь; shul@ifanbel.bas-net.by*

Дано краткое методическое введение в инстантонную физику. Рассмотрены двумерные скалярные полевые модели с нетривиальным потенциалом в ограниченных пространственных областях. Получены точные аналитические инстантонные решения для таких моделей и солитонные решения для аналогичных 3-мерных систем.

1. Инстантоны в классической теории

Инстантонами принято называть нетривиальные решения уравнений Лагранжа – Эйлера с мнимой временной переменной (см., например [1]). При переходе к мнимому времени физическое пространство Минковского (4-мерное пространство со скалярным произведением $x_0y_0 - \vec{x} \cdot \vec{y}$) вследствие замены $x_0 \rightarrow -ix_0$, $y_0 \rightarrow -iy_0$ формально становится абстрактным 4-хмерным евклидовым пространством со скалярным произведением $-(x_0y_0 + \vec{x} \cdot \vec{y})$ (общий знак «минус» несуществен и может быть здесь опущен). При этом, уравнения Лагранжа – Эйлера приобретают новый вид и, естественно, могут приводить к новым решениям (в том числе инстантонным), не сводящимся к старым путём формальной замены $t \rightarrow -it$.

Простейший инстантон появляется в одномерной механической задаче с двумерным потенциалом (рис. 1):

$$L = \frac{1}{2} \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 - V(x), \quad V(x) = \lambda(x^2 - \rho^2)^2, \quad (1)$$

где L – функция Лагранжа, λ и ρ – вещественные положительные константы (масса частицы равна единице). Хорошо известные классические уравнения движения

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \frac{dV}{dx} = 0 \quad (2)$$

при переходе к мнимому времени принимают следующий вид:

$$\frac{d^2x}{d\tau^2} - \frac{dV}{dx} = 0, \quad (3)$$

где $\tau = it$. Формально задачу в евклидовом пространстве можно рассматривать как задачу в пространстве Минковского с «перевёрнутым» потенциалом (рис. 2).

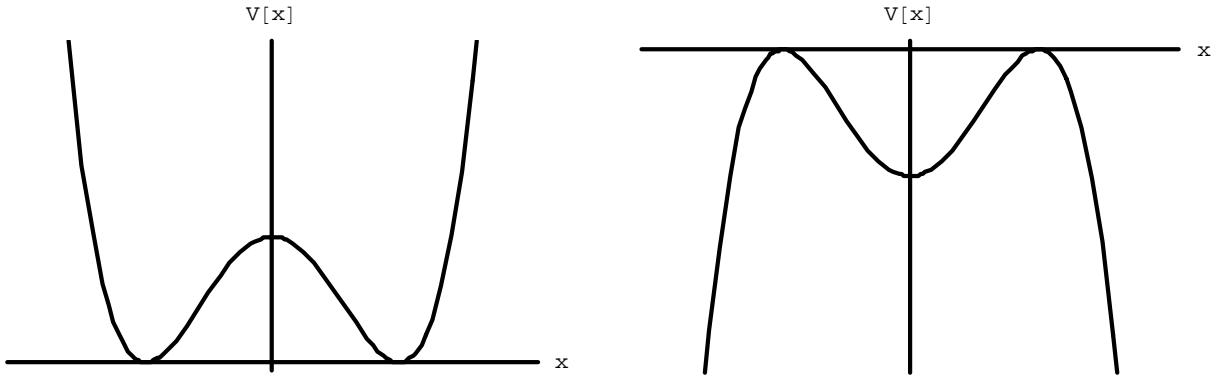


Рис. 1. Исходный потенциал задачи в пространстве Минковского.

Рис. 2. «Перевёрнутый» потенциал в евклидовом варианте задачи.

К физике исходной задачи эта аналогия отношения не имеет, но она полезна, так как позволяет использовать физическую интуицию, хорошо работающую для анализа простых механических задач, и легко классифицировать все «евклидовые» решения. Инстантонные решения

$$x^{inst}(\tau) = \pm \tanh[\rho \sqrt{2\lambda}(\tau - \tau_0)]\rho \quad (4)$$

соответствует движению из одного максимума «перевёрнутого» потенциала рис. 2 в другой за бесконечное время. Тривиальные решения $x(\tau) = \pm \rho$ и решения с бесконечным действием (соответствующие движению из точек $\pm \rho$ на $\pm \infty$) инстантонами считать не принято.

2. Инстантоны и туннелирование

Инстантонные решения, не имеющие физического смысла в классических теориях и моделях, широко применяются в квантовых задачах для описания процессов туннелирования. При этом целесообразно использовать формализм фейнмановских интегралов по траекториям – схему квантования, альтернативную (и эквивалентную в то же время) канонической процедуре [2]. В фейнмановском подходе любая квантово-механическая амплитуда вероятности $\langle x_2 | \exp(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_2 - t_1)) | x_1 \rangle$ (где \hat{H} – оператор Гамильтона рассматриваемой системы) перехода из состояния с определённым значением координаты в момент времени t_1 $| x_1 \rangle$ в аналогичное состояние $| x_2 \rangle$ в момент времени t_2 вычисляется как функциональный интеграл по всем возможным классическим траекториям с определёнными граничными условиями $x(t_1) = x_1$, $x(t_2) = x_2$, с весом $\exp(\frac{i}{\hbar} S[x(t)])$, где $S[x(t)]$ –

классическое действие:

$$\langle x_2 | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_2 - t_1)\right) | x_1 \rangle = \int_{x_1}^{x_2} [Dx(t)] e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]} \quad (5)$$

Существенно, что фейнмановская формулировка квантовой теории оперирует классическими понятиями (траектория, действие) и не требует введения операторов и волновых функций.

На практике при вычислении амплитуды (5) удобнее иметь дело не с осциллирующей экспонентой, а со спадающей. Этого можно добиться переходом к «мнимому времени» $\tau = it$, при этом показатель экспоненты изменится следующим образом:

$$\frac{i}{\hbar} S[x(t)] = \frac{i}{\hbar} \int \left(\frac{1}{2} \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 - V(x) \right) dt \rightarrow -\frac{1}{\hbar} \int \left(\frac{1}{2} \left(\frac{dx}{d\tau} \right)^2 + V(x) \right) d\tau \equiv -\frac{1}{\hbar} S_E[x(t)], \quad (6)$$

где $S_E[x(t)]$ принято называть евклидовым действием. После проведения вычислений в евклидовом пространстве необходимо сделать обратный переход к пространству Минковского.

Теперь отчётливо видно, какую роль будут играть инстантоны в квантовой теории: они, как классические решения, минимизирующие евклидово действие, будут давать главный вклад в амплитуды квантовых переходов между состояниями, разделёнными потенциальным барьером. В простейшем случае (одномерный двуямный потенциал, лагранжиан (1)) евклидова квантово-механическая амплитуда перехода между состояниями, построенными на основе классических состояний $x(-\infty) = +\rho$ и $x(+\infty) = -\rho$ с экспоненциальной точностью в главном (квазиклассическом) приближении есть:

$$\int_{x(-\infty)=\rho}^{x(+\infty)=-\rho} [Dx(\tau)] e^{-\frac{1}{\hbar} S_E[x(\tau)]} \propto \exp\left(-\frac{i}{\hbar} S_E[x^{inst}(\tau)]\right) = \exp\left(-\frac{4\rho^3 \sqrt{2\lambda}}{3\hbar}\right), \quad (7)$$

где в показателе экспоненты стоит евклидово действие на инстантоне (4).

3. Инстантоны в квантовой теории поля

Использование метода инстантонов не приводит к каким-либо существенным упрощениям при решении задач квантовой механики. Однако в современных теориях фундаментальных взаимодействий – квантовых теориях калибровочных полей – использование этих евклидовых решений в ряде случаев оказывается не только полезным, но и единственным возможным и именно в квантовой теории поля инстантоны играют наиболее важную роль.

Первое инстанционное решение было получено А.М. Поляковым и коллегами для чистой $SU(2)$ калибровочной теории Янга–Миллса [3] (так называемый BPST-инстантон). В работе авторов это решение было названо «псевдочастицей», так как оно локализовано в четырёхмерном евклидовом пространстве и выглядит подобно статическому солитону. Термин «инстантон» принадлежит ‘т Хофту [4], исследовавшему роль евклидовых решений в физически содержательных калибровочных теориях. Им было показано, что вероятность туннельного перехода между вакуумными состояниями чрезвычайно мала и составляет по порядку величины 10^{-10} для сильных взаимодействий и 10^{-160} для электрослабых. Ясно, что это обусловлено огромным потенциальным барьером между основными (вакуумными) состояниями. Потенциально возможные туннельные переходы требуют для своего осуществления огромной флуктуации энергии и, по соотношению неопределённостей Гейзенberга, идут очень быстро – мгновенно, отсюда и предложенное название: «instanton» от английского «instant» («мгновенный»).

Казалось бы, при таких малых вероятностях переходов можно забыть о туннелировании в физически содержательных теориях, однако как было показано В. А. Рубаковым и М. Е. Шапошниковым [5], инстантоны могли иметь определяющее значение в формировании в первые минуты после Большого Взрыва асимметрии вещества и антивещества во Вселенной (то есть при очень больших температурах). Другой аспект – индуцированное инстантонами спонтанное нарушение киральной инвариантности в сильных взаимодействиях, объясняющее на феноменологическом уровне ряд эффектов сильных взаимодействий (в частности, помогающее ответить на вопрос, почему нуклон «тяжёлый», а пион «лёгкий»³); см. обзор [6]. Имеются аргументы в пользу возможности наблюдения инстантных событий в столкновениях элементарных частиц больших энергий [7, 8], что особенно актуально в связи со скорым стартом эксперимента по столкновению протонов с рекордной энергией в системе центра масс (14 ТэВ) на ускорителе LHC (“Large Hadron Collider”) ЦЕРНе.

4. Инстантоны в двумерных полевых моделях

Большое значение инстантонов для физики элементарных частиц и квантовой теории поля обусловило появление большого числа обзоров и учебников, полностью или частично посвящённых инстантонной физике (наиболее известные: [1, 5, 6, 9-11]). Однако во всех их имеется некоторый методический провал: изложение инстантонного метода, как правило, начинается с одномерной квантово-механической задачи (1), а затем сразу про-

исходит «прыжок» к калибровочным теориям: либо сразу к теориям Янга-Миллса [1, 6, 11], либо к простейшей калибровочной модели с инстантонами – двумерной абелевой модели Хиггса [5, 9, 10]. В то же время простейшие полевые теории – скалярные двумерные теории с классически вырожденным вакуумом (модель синус-гордона и модель с двумяным потенциалом) не рассматриваются. Это понятно, так как туннельные процессы (инстантоны) запрещены общей теоремой Деррика-Хобарта [12] (см., также, [9]). Физически этот запрет объясняется тем, что вакуумные туннельные переходы невозможны из-за бесконечности энергетического барьера между соседними вакуумами (так как рассматривается пространственная область бесконечна: $-\infty < x < +\infty$). Однако, это запрет можно обойти если рассматривать систему в ограниченном пространственном объёме. Исследованию таких случаев и посвящён настоящий раздел статьи.

1) Рассмотрим 2-мерную скалярную модель синус-Гордона,

$$L = (1/2) \partial_\mu \varphi \partial_\mu \varphi - V(\varphi), \quad V(\varphi) = \lambda(1 - \cos(\rho\varphi)), \quad \mu = 0,1, \quad (8)$$

при чём $-l/2 \leq x \leq l/2$. Для нахождения инстантонов запишем уравнение поля в евклидовом пространстве и ограничимся поиском пространственно-однородных решений:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial \tau^2} = \frac{\partial V}{\partial \varphi} \quad (9)$$

Это уравнение легко интегрируется:

$$\varphi^{inst}(\tau, x) = \pm (4/\rho) \arctan \left(e^{(\tau - \tau_0)\rho\sqrt{\lambda}} \right). \quad (10)$$

Вычислим евклидово действие для таких решений:

$$S[\varphi^{inst}(\tau, x)] = 8\sqrt{\lambda}l/\rho. \quad (11)$$

Отметим, что инстантонные решения (10) с точностью до обозначений совпадают со статическими кинковыми решениями модели (8), а действие (11) – с энергией статического кинка.

2) Рассмотрим теперь модель склярного поля с двумяным потенциалом:

$$L = (1/2) \partial_\mu \varphi \partial_\mu \varphi - V(\varphi), \quad V(\varphi) = \lambda(\varphi^2 - \rho^2)^2, \quad \mu = 0,1, \quad (12)$$

при чём $-l/2 \leq x \leq l/2$. Инстантонные решения и евклидово действие имеют вид:

³ отношение массы протона к массе пиона примерно равно 7 к 1, в то время как согласно наивной кварковой модели оно должно быть 3:2

$$\varphi^{inst}(\tau, x) = \pm \tanh((\tau - \tau_0)\rho\sqrt{2\lambda}); \quad (13)$$

$$S[\varphi^{inst}(\tau, x)] = 4\sqrt{2\lambda}\rho^3l/3. \quad (14)$$

Недостатком моделей (8) и (11) при ограничении $-l/2 \leq x \leq l/2$ является отсутствие лоренц-инвариантности.

3) Хорошо известно, что инстанционные решения 2-мерных моделей формально совпадают со статическими солитонами аналогичных 3-мерных моделей. Поэтому основываясь на найденных решениях (10) и (13) можно автоматически записать солитонные решения соответственно для модели синус – Гордона и модели с двумя потенциалом в трёхмерном пространстве-времени ($-l/2 \leq x \leq l/2$, $-\infty < y, t(\tau) < +\infty$):

$$\varphi^{sol}(\tau, x, y) = \pm(4/\rho) \arctan\left(e^{(y-y_0)\rho\sqrt{\lambda}}\right); \quad (15)$$

$$\varphi^{sol}(\tau, x) = \pm \tanh((y - y_0)\rho\sqrt{2\lambda}). \quad (16)$$

Значения энергий солитонов формально совпадают со значениями евклидовых действий (11) и (14).

Исходя из статических решений (15) и (16) можно, в принципе, записать аналогичные зависящие от времени решения путём перехода к движущейся относительно оси y системы координат.

Работа выполнена при поддержке БРФФИ (проект Ф07Д-002).

Литература

1. А.И. Вайнштейн и др., УФН, 136/4, 553 (1982).
2. Р.Фейнман, А.Хибс. Квантовая механика и интегралы по траекториям. Москва. Мир, 1968.
3. A. Belavin, A. Polyakov, A. Schwarz and Yu. Tyupkin, Phys. Lett. B59, 85 (1975).
4. G. t'Hooft, Phys. Rev. Lett. 37, 8 (1976).
5. B.A. Рубаков, М.Е. Шапошников, УФН 166, 493 (1996).
6. T. Schaefer, E. Shuryak. Rev.Mod.Phys. 70, 323 (1998).
7. S. Moch, A. Ringwald, F. Schrempp, Nucl. Phys. B507, 134 (1997); A Ringwald, F. Schrempp, Phys. Lett. B438, 217 (1998); Phys. Lett. B495, 249 (1999); Phys. Lett. B503, 331 (2001).
8. V.Kuvshinov, A.Kuzmin, R.Shulyakovskiy, Act. Phys. Pol. B33, 1721 (2002); V.Kuvshinov, A.Kuzmin, R.Shulyakovskiy, Phys. Rev. E67, 015201-1 (2003). В.И. Кашкан, В.И. Кувшинов, Р.Г. Шуляковский. Ядерная физика, 65, N5, 956 (2002).
9. Р. Раждараман. Солитоны и инстантоны в квантовой теории поля. Москва. Мир, 1985.
10. В.А. Рубаков. Классические калибровочные поля. Москва. Эдиториал УРСС, 1999.
11. Д.И. Дьяконов, В.Ю. Петров. Материалы XXVI Зимней Школы ЛИЯФ, 8 (1991).
12. G.H. Derrick, J. Math. Phys. 5, 1252 (1964); R. Hobart. Proc. Phys. Soc. 82, 201 (1963).

СЕКЦИЯ:
ФИЗИЧЕСКАЯ И НЕЛИНЕЙНАЯ ОПТИКА

САМОСИНХРОНИЗАЦИЯ МОД ПРИ КАСКАДНОЙ ВКР ГЕНЕРАЦИИ СТОКСОВЫХ КОМПОНЕНТ

Д. Н. Бусько, В. А. Лисинецкий, Р. В. Чулков.

*Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости 68, 220072
Минск, Беларусь d.busko@dragon.bas-net.by*

Вынужденное комбинационное рассеяние (ВКР) известно как нелинейный процесс, используемый для преобразования частоты лазерного излучения. Генерация стоксовых компонент различного порядка позволяет получить излучение на ряде длин волн, находящихся в более длинноволновой области спектра, чем излучение накачки. Использование ВКР лазеров (комбинационно-активная среда помещается в резонатор, образованный двумя или более зеркалами) позволяет снижать порог ВКР преобразования за счет накопления излучения в резонаторе, улучшать пространственные характеристики пучка, а также эффективно генерировать стоксовые компоненты высокого порядка.

При каскадной ВКР генерации стоксовых компонент накачкой для стоксовой компоненты высокого порядка является излучение предыдущей стоксовой компоненты. Так, накачкой для второй стоксовой компоненты является первая стоксова компонента, вторая стоксова компонента, в свою очередь, является накачкой для третьей стоксовой компоненты и тд. Для эффективной генерации стоксовых компонент высокого порядка необходимо использовать резонатор с высоко отражающими зеркалами, что обеспечивает накопление в резонаторе энергии стоксовых компонент низшего порядка. При этом спектр генерируемого в таком резонаторе излучения стоксовых компонент обладает модовой структурой, соответствующей собственным продольным модам этого резонатора. Ранее на примере жидких и газообразных сред было показано, что возможна синхронизация этих мод. Это достигалось при помощи дополнительного модулятора [1], рассеяния Мандельштама-Бриллюэна [2] или при генерации ВКР в среде, помещенной в резонатор многомодового лазера [3].

В этой работе мы экспериментально и теоретически показали, что самосинхронизация мод в высокодобротном резонаторе ВКР лазера возможна при когерентной накачке без каких-либо дополнительных внешних причин.

Принципиальная схема экспериментальной установки показана на Рис. 1. В качестве накачки использовалось излучение второй гармоники ($\lambda=532$ нм) одночастотного Nd:YAG лазера, работающего в режиме пассивной модуляции добротности.

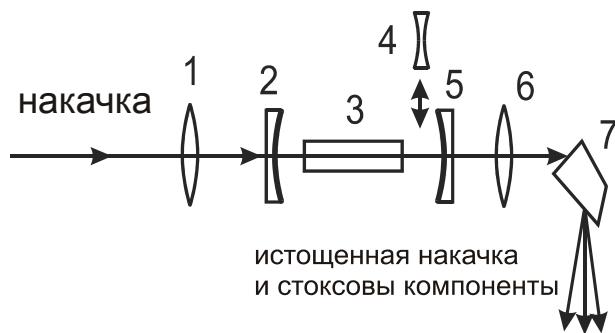


Рис. 1. Принципиальная схема экспериментальной установки, где 1 – фокусирующая линза, 2 – входное зеркало, 3 – комбинационно-активный кристалл, 4 – отрицательная линза, 5 – выходное зеркало, 6 – коллимирующая линза, 7 – призма Пеллин-Брока

Длительность импульса накачки составляла 12 нс. Излучение фокусировалось в кристалл нитрата бария, находящийся в резонаторе, образованном двумя сферическими зеркалами. Для снижения потерь на торцы кристалла было нанесено антиотражающее покрытие. Входное зеркало резонатора полностью пропускало излучение накачки и имело максимальное отражение на длинах волн четырех стоксовых компонент. Для генерации второй ($\lambda = 563$ нм) и четвертой ($\lambda = 685$ нм) стоксовых компонент использовались зеркала, максимально отражающие стоксовые компоненты более низких порядков и 93-95 % энергии генерируемой компоненты. Длина резонатора составляла 19.5 см и 18 см при генерации второй и четвертой стоксовых компонент, соответственно. Измерения временных характеристик излучений проводились при помощи аналогового осциллографа с полосой пропускания 5 ГГц и быстрого фотодетектора.

Экспериментально полученные осциллограммы излучения второй и четвертой стоксовых компонент представляют собой эквидистантную последовательность коротких импульсов (см. Рис. 2, 3). Интервал следования импульсов соответствует времени полного обхода излучения по резонатору (1.56 нс для второй стоксовой компоненты, 1.46 нс для четвертой стоксовой компоненты).

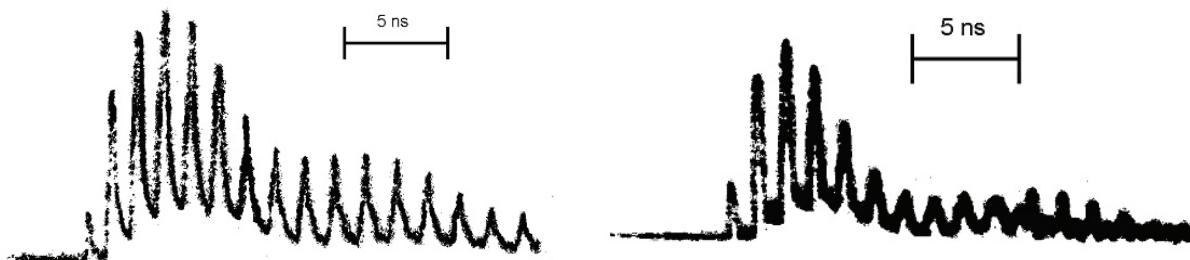


Рис. 2. Осциллограмма импульса второй стоксовой компоненты

Рис. 3. Осциллограмма импульса четвертой стоксовой компоненты

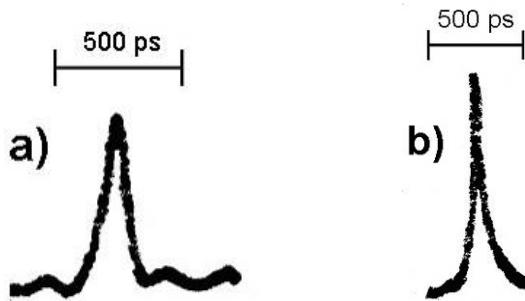


Рис. 4. Осциллограммы наиболее коротких зарегистрированных импульсов второй (a) и четвертой (b) стоксовых компонент

Увеличение базы резонатора ведет к соответствующему увеличению периода следования импульсов в последовательности, что позволяет предположить, что в ВКР лазере происходит синхронизация мод.

Длительность отдельных импульсов в последовательности варьировалась в диапазоне от 115 пс до 500 пс при генерации второй и в диапазоне от 50 пс до 260 пс при генерации четвертой стоксовой компоненты. Осциллограммы наиболее коротких зарегистрированных импульсов показаны на Рис. 4.

Чтобы понять механизм синхронизации мод в ВКР лазере мы провели численный расчет каскадной генерации 5 стоксовых компонент, распространяющихся как в попутном, так и в обратном направлениях в резонаторе ВКР лазера, состоящего из двух зеркал и помещенной между ними комбинационно-активной среды. Расчеты, проведенные при условиях, близких к экспериментальным, показали, что в процессе генерации происходит самосинхронизация мод. (Рис. 5, 6).

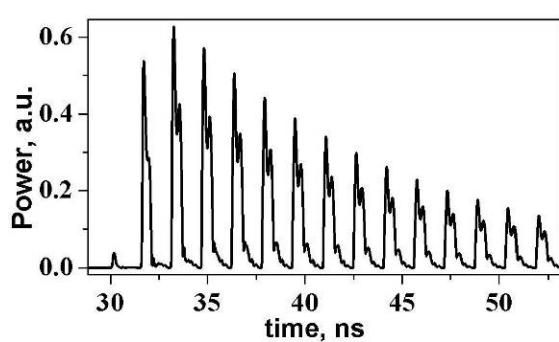


Рис. 5. Осциллограмма расчетного импульса второй стоксовой компоненты в линейном масштабе

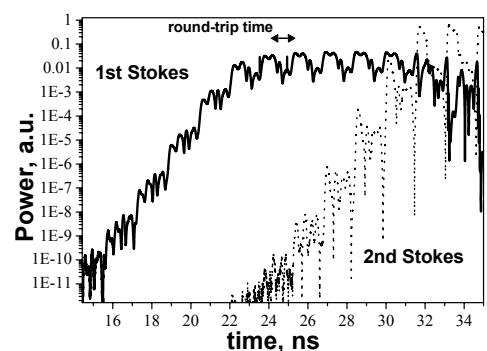


Рис. 6. Осциллограмма рассчитанных импульсов первой и второй стоксовых компонент в логарифмическом масштабе

Причину самосинхронизации мод в ВКР лазере с каскадной генерацией стоксовых компонент можно объяснить следующим образом. Излучение первой стоксовой компо-

ненты, генерируемое в высокодобротном резонаторе, обладает модовой структурой, обусловленной резонатором ВКР лазера. Это проявляется в виде межмодовых биений интенсивности (см. Рис. 6). Эти биения происходят с периодом, равным времени обхода по резонатору, являясь, таким образом, синхронной накачкой для второй стоксовой компоненты, в результате чего происходит синхронизация мод. Стоит отметить, что возникновение генерации третьей стоксовой компоненты приводит к нарушению механизма самосинхронизации мод для второй стоксовой компоненты и разрушению ее импульсной структуры.

При каскадном механизме генерации вынужденного комбинационного рассеяния импульсы во второй стоксовой компоненте в свою очередь являются синхронной накачкой для третьей стоксовой компоненты. Если зеркала резонатора имеют высокий коэффициент отражения на длине волны этой стоксовой компоненты, для нее также может быть получена самосинхронизация мод. Из результатов расчетов следует, что если резонатор имеет низкую добротность на длине волны генерируемой стоксовой компоненты, то синхронизация мод также наблюдается, однако импульсы в последовательности при этом значительно удлиняются. Из приведенных рассуждений следует, что самосинхронизация мод в ВКР лазере по описанному механизму может быть получена на любой стоксовой компоненте, кроме первой.

Также проведенные расчеты показали, что длительность отдельных импульсов в генерируемой последовательности сильно зависит от времени поперечной релаксации среды. Снижение этого времени с 25 пс до 5 пс вызвало уменьшение длительности импульсов с 50 пс до 10 пс.

Таким образом, проведено экспериментальное и теоретическое исследование самосинхронизации мод при каскадной генерации нескольких стоксовых компонент в твердотельном ВКР лазере. Показано, что при использовании высокодобротного резонатора возможна самосинхронизация мод без каких-либо внешних причин на стоксовой компоненте любого порядка, кроме первого.

Литература

1. R. H. Pantell et.al., *Appl. Phys. Lett.*, 1966, vol.9, No.3, pp. 104-106.
2. Н. Н. Жуков и др., *ЖЭТФ*, 1983, Т.85, Вып 1(7), стр.50-56.
3. N. V. Kravtsov, N. I. Naumkin, *Квантовая электроника*, 1979, Т.6, №2, стр. 375-377.
4. V. A. Lisinetskii, I. I. Mishkel', R. V. Chulkov, A. S. Grabtchikov, P. A. Apanasevich, H.-J. Eichler, and V. A. Orlovich, *J. Nonlinear Opt. Phys. Mater.*, 2005, vol. 14, pp. 107-114.

ЭЛЕКТРОУПРАВЛЯЕМАЯ МОДУЛЯЦИЯ СВЕТА ПОЛИМЕРНЫМИ ПЛЕНКАМИ С МЕЛКИМИ КАПЛЯМИ ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА

П. Г. Максименко, А. В. Конкович, В. А. Лойко

¹Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости 68, 220072 Минск, Беларусь, r.maksimenko@dragon.bas-net.by

Введение

Капсулированные полимером жидкокристаллические (КПЖК) пленки представляют большой интерес для исследователей и разработчиков различных устройств для управления световыми потоками видимого и инфракрасного диапазона [1-6]. Они являются весьма перспективным материалом для создания электрооптических устройств на основе жидкокристаллов (ЖК) для модуляции прошедшего излучения. КПЖК пленки представляют собой полимерные пленки со специальным образом внедренными в них каплями различных ЖК, находящиеся между двумя прозрачными пластинками с нанесенными на них прозрачными электродами. Под действием внешних электрического или магнитного полей молекулы ЖК внутри капель изменяют свою ориентацию, меняя тем самым оптические свойства КПЖК пленки. На этом основывается принцип действия этих материалов. КПЖК пленки обладают рядом свойств, которые не характерны для монодоменных жидкокристаллических пленок. Например, при начальной хаотической ориентации капель ЖК, пленки могут осуществлять поляризационно-независимый сдвиг фазы прошедшего излучения [7, 8]. КПЖК пленки с наноразмерными каплями ЖК обладают высоким пропусканием и позволяют управлять поляризацией прошедшего излучения видимой и инфракрасной области при помощи внешнего электрического поля [9, 10].

Нами исследовано прохождение света через КПЖК пленку с наноразмерными непоглощающими нематическими каплями, равномерно распределенными в толще полимера. Рассмотрены сферические капли с биполярной конфигурацией молекул ЖК, обладающих положительной оптической анизотропией. В соответствие каждой капле ставится единичный вектор (директор ЖК капли), который задает направление ее оптической оси (направление преимущественной ориентации молекул ЖК в капле). Предполагается, что капли в пленке частично ориентированы в отсутствие внешнего управляющего поля. Степень ориентационного упорядочения молекул ЖК в капле и капель в пленке описывается при помощи концепции многоуровневых параметров порядка. Поскольку размеры капель существенно меньше длины волны падающего излучения в полимере, и показатели преломления ЖК близки к показателю преломления полимера, рассеяние света на одиночной капле

ЖК рассматривается в приближении Рэлея-Ганса [11]. Многоократное рассеяние света в пленке учитывается при помощи интегрального уравнения Фолди-Тверского [12], которое обобщается на векторный случай. При помощи данной модели, подробно описанной в работе [9], исследовано изменение состояния поляризации прошедшего излучения в зависимости от напряженности приложенного к пленке электрического поля и степени ориентационной упорядоченности ЖК капель в слое. Особое внимание в данной работе уделено условиям, при которых свет на выходе пленки имеет линейную или круговую поляризацию.

Основные соотношения

Рассмотрим КПЖК пленку, которая освещается плоской линейно поляризованной монохроматической волной перпендикулярно своей поверхности. Выберем лабораторную систему координат (ЛСК) таким образом, что ее ось z перпендикулярна плоскости слоя, а ось x совпадает с направлением преимущественной ориентации директоров ЖК капель в плоскости слоя в отсутствие управляющего поля. Необыкновенная и обыкновенная компоненты прошедшей волны могут быть выражены следующим образом:

$$E_{e,o} = a_{e,o} \cos \Phi_{e,o}, \quad (1)$$

где $a_{e,o}$ – амплитуды, $\Phi_{e,o}$ – фазы необыкновенной и обыкновенной волн, соответственно [9]:

$$a_{e,o} = \exp\left(-\frac{1}{2} \gamma_{e,o} l\right) \begin{pmatrix} \cos \alpha \\ \sin \alpha \end{pmatrix}, \quad (2)$$

$$\Phi_{e,o} = \frac{k l c_v}{6 \varepsilon_p} \left(2 \varepsilon_o + \varepsilon_e - 3 \varepsilon_p + 2(\varepsilon_e - \varepsilon_o) S S_d S_{x,y} \right). \quad (3)$$

Здесь α – угол поляризации падающего света; γ_e и γ_o – показатели ослабления КПЖК слоем необыкновенной и обыкновенной волн, соответственно; l – толщина КПЖК пленки; k – модуль волнового вектора падающего излучения в окружающем каплю полимере; c_v – объемная концентрация ЖК в образце; ε_e и ε_o – диэлектрические проницаемости ЖК для необыкновенной и обыкновенной волн, соответственно; ε_p – диэлектрическая проницаемость полимера; S – молекулярный параметр порядка ЖК; S_d – параметр порядка ЖК капли; S_x и S_y – компоненты тензора параметра порядка КПЖК слоя. Тензор параметра порядка в выбранной ЛСК имеет диагональный вид. Его компоненты S_x , S_y и S_z численно характеризуют степень ориентационной упорядоченности директоров ЖК капель относительно осей этой СК.

Под действием приложенного к пленке электрического поля молекулы ЖК внутри капель изменяют свою ориентацию. Известно, что капли с биполярной конфигурацией во внешнем поле свою конфигурацию не изменяют [13], поэтому параметр порядка капли очень слабо зависит от поля. В рамках данной модели мы считаем его постоянной величиной. Однако вследствие переориентации молекул ЖК происходит поворот директора ЖК капли и изменение степени ориентационной упорядоченности капель в слое. Компоненты тензора параметра порядка, поэтому, определяются напряженностью внешнего управляющего поля и начальной ориентацией директоров ЖК капель [14].

Показатели ослабления КПЖК слоя могут быть аналитически выражены через характеристики слоя и падающего излучения [15]:

$$\gamma_{e,o} = \frac{Nk^4}{16\pi} g \left(\frac{2\epsilon_o + \epsilon_e - 3\epsilon_p + 2(\epsilon_e - \epsilon_o)SS_d S_{x,y}}{3\epsilon_p} \right)^2, \quad (4)$$

где N – концентрация капель ЖК в слое; g – функция, зависящая от размеров и формы капель.

Поляризация прошедшего света

Разность фаз между необыкновенной и обыкновенной компонентами определяется на основании выражения (3):

$$\Delta\Phi = \frac{lkc_v}{3} \frac{(\epsilon_e - \epsilon_o)}{\epsilon_p} \frac{\sin(2\varphi_d^{\max})}{2\varphi_d^{\max}} (1 - S_z) SS_d. \quad (5)$$

Здесь φ_d^{\max} – угол максимального отклонения директоров капель от оси x при отсутствии внешнего электрического поля.

При помощи выражения (1) можно показать, что свет на выходе пленки будет иметь в общем случае эллиптическую поляризацию. При этом эллиптичность (отношение малой полуоси эллипса поляризации к большой) равна:

$$\eta = \sqrt{\frac{(a_e \sin \xi)^2 + (a_o \cos \xi)^2 - a_e a_o \sin 2\xi \cos \Delta\Phi}{(a_e \cos \xi)^2 + (a_o \sin \xi)^2 + a_e a_o \sin 2\xi \cos \Delta\Phi}}, \quad (6)$$

где ξ – азимут (угол между осью x и большой осью эллипса поляризации), определяемый из уравнения:

$$\operatorname{tg} 2\xi = 2 \frac{a_e a_o}{a_e^2 - a_o^2} \cos \Delta\Phi. \quad (7)$$

Прошедшее излучение будет иметь линейную поляризацию, если выполняется условие $\Delta\Phi = \pi n$, где n – целое число. Тогда при помощи выражений (2), (4), (5) и (7) можно найти угол, под которым будет поляризован прошедший свет относительно оси x :

$$\operatorname{tg} \xi_{lin} = (-1)^{n-1} \exp \left(\frac{-k^3 n g}{8\pi \langle V \rangle} \left(\frac{c_\varepsilon}{3\varepsilon_p} + \frac{2n\pi\varphi_d^{\max}}{lk c_v \sin(2\varphi_d^{\max})} \right) \right) \operatorname{ctg} \alpha, \quad (8)$$

$$c_\varepsilon = 2\varepsilon_o + \varepsilon_e - 3\varepsilon_p - (\varepsilon_e - \varepsilon_o) SS_d. \quad (9)$$

Здесь $\langle V \rangle$ – средний объем ЖК капли. Можно показать, что при размерах капель, значительно меньших длины волны падающего света, угол ξ_{lin} линейно зависит от угла поляризации α , а именно: $\xi_{lin} = \alpha$ для четных и $\xi_{lin} = \pi - \alpha$ для нечетных n .

Для того чтобы прошедший свет имел круговую поляризацию, требуется выполнение двух условий: $\Delta\Phi = \pi(n + 1/2)$ и $a_e = a_o$. Можно показать, что второе условие выполняется, когда падающий свет поляризован под углом:

$$\operatorname{tg} \alpha_{circ} = \exp \left(\frac{-k^3 g (n + 1/2)}{16\pi \langle V \rangle} \left(\frac{c_\varepsilon}{3\varepsilon_p} + \frac{\pi (n + 1/2) \varphi_d^{\max}}{lk c_v \sin(2\varphi_d^{\max})} \right) \right). \quad (10)$$

Также условиям круговой поляризации удовлетворяет угол $\alpha'_{circ} = \pi - \alpha_{circ}$.

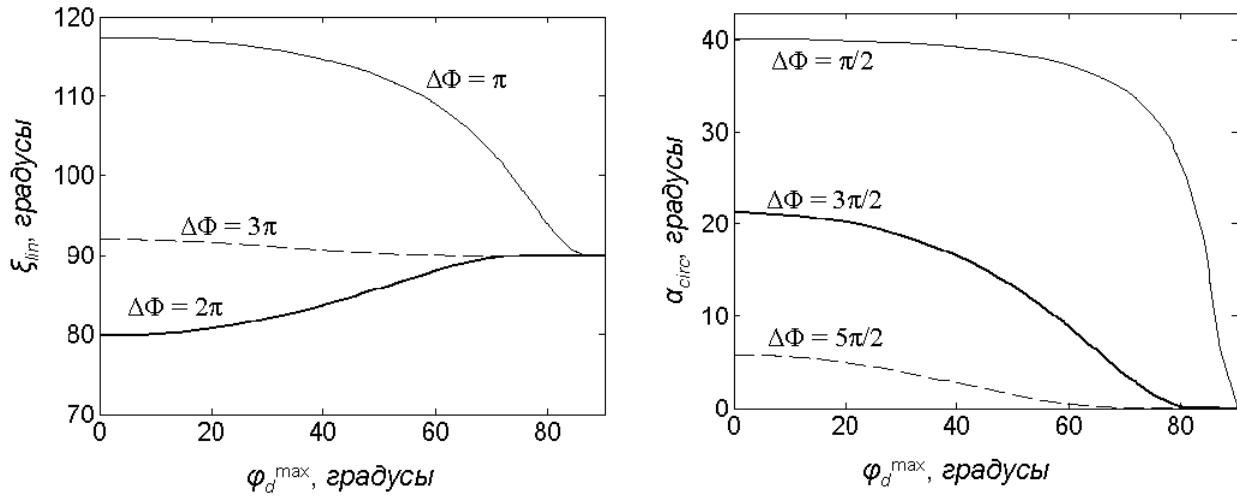


Рис. 1. Зависимость угла линейной поляризации прошедшего света ξ_{lin} (справа) и угла α_{circ} , при котором реализуется круговая поляризация прошедшего света (слева), от угла φ_d^{\max} при различных значениях разности фаз между необыкновенной и обычной волнами.

На Рис. 1 приведены результаты расчетов углов ξ_{lin} и α_{circ} , соответственно, в зависимости от угла φ_d^{\max} , который характеризует степень упорядоченности директоров ЖК капель в плоскости пленки. Средний радиус ЖК капель в пленке принят равным 0,1 μm .

Расчеты выполнены для КПЖК пленок с положительной оптической анизотропией ЖК, поэтому угол α_{circ} не превышает 45° .

Заключение

В данной работе исследовано изменение состояния поляризации излучения, прошедшего КПЖК пленку с мелкими каплями ЖК. Определены условия, при которых прошедший свет будет иметь круговую или линейную поляризацию. Получено выражение, связывающее характеристики КПЖК пленки и падающей волны с углом поворота плоскости поляризации. Показано, что существует два угла поляризации падающей волны, при которых прошедшая будет иметь круговую поляризацию, найдены формулы для вычисления этих углов. Мы предполагаем, что по данным измерения углов ζ_{lin} и α_{circ} можно определить размер и форму ЖК капель в пленке.

Результаты работы могут быть использованы при разработке различных устройств для модуляции световых потоков на основе КПЖК и при прогнозировании их свойств.

Литература

1. V. Verbrugge, J.-L. De Bougrenet de la Tocnaye, and L. Dupont. Opt. Comm. 215, 353 (2003).
2. E. Scherschener, C.D. Perciante, E.A. Dalchiele, et al. Appl. Opt. 45, 3482 (2006).
3. S. Gottardo, S. Cavalieri, O.V. Yaroshchuk, et al. Phys. Rev. Lett. 93, 263901 (2004).
4. I. Drevensek-Olenik, M. Copic, M.E. Sousa, et al. J. of Appl. Phys. 100, 033515 (2006).
5. H. Ren, Y.-H. Fan, Y.-H. Lin, et al. Opt. Comm. 247, 101 (2005).
6. L. McKenna, L.S. Miller, and I.R. Peterson. Polymer 45, 6977 (2004).
7. P.J.W. Hands, A.K. Kirby, and G.D. Love. Proc. of SPIE 5894, 193 (2005).
8. V.A. Loiko and A.V. Konkolovich. JETP 96, 489 (2003).
9. V.A. Loiko, A.V. Konkolovich, and P.G. Maksimenko. J. of the SID 14, 595 (2006).
10. I. Moreno, J.L. Martinez, and J.A. Davis. Appl. Opt. 46, 881 (2007).
11. Г. Ван де Хюлст. Рассеяние света малыми частицами, Москва, 1961.
12. А. Исимару. Распространение и рассеяние волн в случайно-неоднородных средах, Москва, 1994.
13. P.S. Drzaic. Liquid crystals dispersions, New-York, 1995.
14. J.R. Kelly and P. Palfy-Muhoray. Mol. Cryst. and Liq. Cryst. 243, 11 (1994).
15. В.А. Лойко, П.Г. Максименко, А.В. Конкович. Опт. и спектр. 105, 853 (2008).

ПРИБЛИЖЕННЫЙ МЕТОД РАСЧЕТА ПОКАЗАТЕЛЕЙ ОСЛАБЛЕНИЯ КАПСУЛИРОВАННОГО ПОЛИМЕРОМ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО СЛОЯ

П. Г. Максименко, А. В. Конкович, В. А. Лойко

*Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларусь, пр. Независимости 68, 220072
Минск, Беларусь, p.maksimenko@dragon.bas-net.by*

Введение

Исследованию капсулированных полимером жидких кристаллов (КПЖК) в последние время уделяется все больше внимания. Жидокристаллические ячейки на их основе представляют собой полимерный слой, помещенный между двумя прозрачными пластинками с нанесенными на них прозрачными электродами [1]. В слой внедрены капли жидких кристаллов (ЖК). Под действием внешнего электрического поля молекулы ЖК в каплях изменяют свою ориентацию, меняя тем самым оптические характеристики ЖК капель и КПЖК пленки в целом, например, показатели преломления для обыкновенного и необыкновенного лучей. Такая особенность открывает широкие возможности для применения КПЖК пленок в различных областях науки и техники. На их основе можно создавать новые типы оптических элементов и устройств: линз [2], отражателей [3], фильтров [4], модуляторов световых потоков [5], и, прежде всего, дисплеев для отображения оптической информации [6].

Одним из наиболее распространенных способов изучения КПЖК пленок для создания на их основе оптоэлектронных устройств является рассеяние света. Особые структурные и оптические свойства КПЖК (оптическая анизотропия, сложная внутренняя структура ЖК капель и др.) приводят к существенным усложнениям решения задач распространения и рассеяния света. Поэтому необходимы поиск и разработка приближенных методов для решения прямой и обратной задач рассеяния.

В данной работе исследовано ослабление света КПЖК слоем с мелкими (по сравнению с длиной волны падающего излучения в полимере) каплями ЖК. В работе предлагается метод расчета и оценки показателей ослабления излучения полимерными пленками с низкой концентрацией мелких непоглощающих капель ЖК. Задача определения показателей ослабления КПЖК пленок усложнена тем, что неизвестен закон, в соответствии с которым ориентированы молекулы ЖК внутри капли и сами капли в слое. Метод основывается на приближении Рэлея-Ганса [7], при помощи которого определяется амплитудная матрица рассеяния света отдельной капли жидкого кристалла. Считается, что в пленке

реализуется режим независимого рассеяния [8]. Для определения степени ориентационного упорядочения оптических осей (директоров) молекул ЖК в каплях и самих капель в полимерном слое используется концепция многоуровневых параметров порядка [9-11]. Такой подход позволяет количественно описывать степень упорядочения молекул и капель ЖК, не зная точный закон, по которому ориентированы их директора. При помощи разработанного метода проанализированы показатели ослабления излучения КПЖК пленкой с биполярными сферическими ЖК каплями.

Амплитудная матрица рассеяния

Рассмотрим биполярную каплю ЖК, освещаемую плоской монохроматической линейно поляризованной световой волной. Каждый малый элемент объема капли переизлучает электромагнитную волну, упавшую на него. В дальней зоне эти волны складываются с учетом разности фаз, возникающей из-за различного расположения рассеивающих элементов объема в пространстве. Таким образом, излучение распространяется под углами, которых не было в падающей волне (происходит рассеяние света) с измененным состоянием поляризации.

Амплитудная матрица рассеяния света каплей определяется следующим образом [7]:

$$\begin{pmatrix} \overline{E_s} \cdot \overline{e_{\parallel}^s} \\ \overline{E_s} \cdot \overline{e_{\perp}} \end{pmatrix} = \frac{\exp(ikr)}{-ikr} \begin{pmatrix} S_{\parallel,\parallel} & S_{\parallel,\perp} \\ S_{\perp,\parallel} & S_{\perp,\perp} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \overline{E_i} \cdot \overline{e_{\parallel}^i} \\ \overline{E_i} \cdot \overline{e_{\perp}} \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где $\overline{E_i}$ – электрический вектор падающей волны; $\overline{E_s}$ электрический вектор волны, рассеянной каплей в направлении $\overline{e_s}$; r – расстояние от центра капли до точки наблюдения; k – модуль волнового вектора падающей волны в окружающем полимере; $\overline{e_{\perp}}$, $\overline{e_{\parallel}^i}$, $\overline{e_{\parallel}^s}$ – единичные векторы в направлениях $\overline{e_i} \times \overline{e_s}$, $\overline{e_{\perp}} \times \overline{e_i}$, $\overline{e_{\perp}} \times \overline{e_s}$, соответственно.

Элементы амплитудной матрицы рассеяния света на одиночной ЖК капле равны:

$$S_{mn} = \frac{-ik^3}{4\pi} f \left[\left(\frac{\varepsilon_{do}}{\varepsilon_p} - 1 \right) \overline{e_m^s} \cdot \overline{e_n^i} + \frac{\Delta\varepsilon_d}{\varepsilon_p} \left(\overline{e_m^s} \cdot \overline{e_d} \right) \left(\overline{e_n^i} \cdot \overline{e_d} \right) \right], \quad (2)$$

$$f = \frac{4\pi}{a^3} (\sin aR - aR \cos aR), \quad (3)$$

$$a = k \sqrt{2(1 - \overline{e_i} \cdot \overline{e_s})}, \quad (4)$$

$$\varepsilon_{do} = \frac{2\varepsilon_o + \varepsilon_e - \Delta\varepsilon_d}{3}, \quad (5)$$

$$\Delta\varepsilon_d = (\varepsilon_e - \varepsilon_o) SS_d, \quad (6)$$

где \bar{e}_d – единичный вектор в направлении преимущественной ориентации молекул ЖК в отдельной капле (так называемый директор ЖК капли); $m, n = \parallel, \perp$; R – радиус ЖК капли; ε_e и ε_o – диэлектрические проницаемости ЖК для необыкновенного и обыкновенного лучей, соответственно; ε_p – диэлектрическая проницаемость полимера; S – параметр порядка ЖК; S_d – параметр порядка ЖК капли.

Показатели ослабления

Рассмотрим КПЖК пленку, освещаемую плоской волной в направлении, задаваемом полярным и азимутальным углами θ_i и φ_i . Без ограничения общности выберем лабораторную систему координат таким образом, что ее ось z перпендикулярна плоскости КПЖК слоя, а единичный вектор $\langle \bar{e}_d \rangle$, который указывает направление преимущественной ориентации директоров ЖК капель в слое, лежит в плоскости xz .

Используя элементы амплитудной матрицы рассеяния (2), можно найти дифференциальное сечение рассеяния света на одиночной капле ЖК [12]:

$$d\sigma/d\Omega = (kR)^{-2} \sigma_G / \pi \left(\left| S_{\parallel,\parallel} \bar{e} \cdot \bar{e}_\parallel^i + S_{\parallel,\perp} \bar{e} \cdot \bar{e}_\perp^i \right|^2 + \left| S_{\perp,\parallel} \bar{e} \cdot \bar{e}_\parallel^i + S_{\perp,\perp} \bar{e} \cdot \bar{e}_\perp^i \right|^2 \right), \quad (7)$$

где \bar{e} – единичный вектор, указывающий направление поляризации падающей волны; σ_G – геометрическое сечение капли в плоскости, перпендикулярной падающей волне.

В режиме независимого рассеяния показатели ослабления связаны с дифференциальными сечениями рассеяния следующим образом [8]:

$$\gamma_{e,o} = N \int_{4\pi} \left\langle d\sigma/d\Omega \left(\bar{e} = \bar{e}_{e,o} \right) \right\rangle \sin \theta_s d\theta_s d\phi_s. \quad (8)$$

Здесь N – концентрация капель ЖК в пленке; угловые скобки означают усреднение по размерам капель и ориентациям их директоров; единичные вектора \bar{e}_e и \bar{e}_o указывают направление поляризации необыкновенной и обыкновенной волн, соответственно; θ_s и φ_s – полярный и азимутальный углы, задающие направление рассеяния света.

Вычисления по формуле зачастую (8) осложняются тем, что закон, по которому ориентированы капли ЖК в пленке, известен лишь в редких случаях. Для того, чтобы получить удобные для использования аналитические выражения для показателей ослабления, воспользуемся приближением эффективной амплитудной матрицы рассеяния.

Эффективные показатели ослабления света

Приближение эффективной амплитудной матрицы рассеяния заключается в том, что

реальный слой, содержащий различные по размерам и ориентациям капли ЖК заменяется “эффективным” слоем с одинаковыми каплями, обладающими средними оптическими характеристиками. Чтобы найти амплитудную матрицу рассеяния света такими каплями, необходимо усреднить элементы (2) по размерам капель и ориентациям их директоров.

Зависимость элементов амплитудной матрицы рассеяния от размера капель определяется функцией f (формула (3)). Предположим, что ЖК капли распределены по размерам в соответствии с гамма-распределением [13] с параметром распределения μ . В результате усреднения получим:

$$\langle f \rangle = \frac{4\pi}{a^3 (t^2 + 1)^{\frac{\mu}{2}}} \left(\sin(\mu \arctan t) - \frac{t\mu}{\sqrt{t^2 + 1}} \cos((\mu + 1) \arctan t) \right), \quad (9)$$

где $t = a \langle R \rangle / \mu$; $\langle R \rangle$ – средний радиус ЖК капель.

Для описания ориентационной упорядоченности капель ЖК, введем тензор параметра порядка КПЖК слоя [11]. В выбранной лабораторной системе координат он будет являться диагональным. Компоненты тензора параметра порядка численно характеризуют ориентационную упорядоченность директоров капель ЖК относительно соответствующих осей лабораторной системы координат. С их помощью можно описывать изменение упорядоченности директоров капель, не зная явных выражений для ее зависимости от приложенного к пленке управляющего поля.

Для нахождения эффективных показателей ослабления слоя, необходимо интегрировать выражения для дифференциальных сечений рассеяния по полному телесному углу. Чтобы упростить задачу, можно вычислять дифференциальные сечения рассеяния как полусумму дифференциальных сечений рассеяния при двух предельных расположениях векторов \bar{e}_i , \bar{e}_s и $\langle \bar{e}_d \rangle$, при которых эти сечения принимают минимальное и максимальное значения. В случае нормального падения света выражения для эффективных показателей ослабления слоя записываются в виде:

$$\gamma_{e,o}^{eff} = \frac{Nk^4}{16\pi} \left(\frac{\epsilon_{do}}{\epsilon_p} - 1 + \frac{\Delta\epsilon_d}{3\epsilon_p} (1 + 2S_{x,y}) \right)^2 \int_0^\pi \langle f \rangle^2 (\cos^2 \theta_s + 1) \sin \theta_s d\theta_s. \quad (10)$$

Относительные погрешности эффективных показателей ослабления для необыкновенной и обычновенной волн совпадают. Анализ показывает, что для слоев с частично ориентированными каплями погрешность не превышает 30%. Эффективными показателями ослабления удобно пользоваться при расчетах характеристик состояния поляризации

прошедшего КПЖК пленку света (эллиптичности и азимута). Расчеты показывают, что использование эффективных показателей ослабления при расчете эллиптичности вносит погрешность менее 1%.

Заключение

Предложенный в работе метод анализа и расчета показателей ослабления света КПЖК пленкой удобен для практического применения, поскольку он не требует знания точного закона распределения директоров капель в слое. Результаты позволяют анализировать характеристики излучения в зависимости от структуры и морфологии пленки. Они необходимы для определения состояния поляризации прошедшего света. Предложенный метод позволяет решать обратную задачу рассеяния: определять параметры пленок с мелкими каплями ЖК по характеристикам прошедшего излучения.

Полученные результаты необходимы для количественной характеризации различных электрооптических устройств с контролируемыми оптическими характеристиками, например, оптических фильтров на основе ЖК, перестраиваемых поляризаторов, фазовых модуляторов и различных устройств для отображения информации, создаваемых на основе капсулированных полимером ЖК пленок с мелкими ЖК каплями.

Литература

1. P.S. Drzaic. *Liquid crystals dispersions*, New-York, 1995.
2. H. Ren, D.W. Fox, B. Wu, et al. *Opt. Expr.* 15, 11328 (2007).
3. N.Y. Ha, Y. Takanishi, K. Ishikawa, et al. *Opt. Expr.* 15, 1024 (2007).
4. A.E. Fox, K. Rai, and A.K. Fontecchio. *Appl. Opt.* 46, 6277 (2007).
5. R. James, F.A. Fernandez, S.E. Day, et al. *JOSA A* 24, 2464 (2007).
6. J. Lee, S.C. Meissner, and R.J. Sudol. *Opt. Expr.* 15, 8609 (2007).
7. Г. Ван де Хюлст. *Рассеяние света малыми частицами*, Москва, 1961.
8. А.П. Иванов, В.А. Лойко, В.П. Дик. *Распространение света в плотноупакованных дисперсных средах*, Минск, 1988.
9. F. Simoni. *Nonlinear optical properties of liquid crystals*, New York, 1997.
10. J.R. Kelly and P. Palfy-Muhoray. *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* 243, 11 (1994).
11. V.A. Loiko, A.V. Konkolovich, and P.G. Maksimenko. *J of the SID* 14, 595 (2006).
12. S. Zumer and J.W. Doane. *Phys. Rev. A* 34, 3373 (1986).
13. O.A. Aphonin, Y.V. Panina, A.B. Pravdin, et al. *Liq. Cryst.* 15, 395 (1993).

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МИКРОСТРУКТУРИРОВАННЫХ СВЕТОВОДОВ

А. Д. Пряников, Д. А. Гапонов

*Научный центр волоконной оптики РАН,
ул. Вавилова 38, 119333 Москва, Российская Федерация, pryamikov@fo.gpi.ru*

В последние годы, микроструктурированные световоды (МС) различных типов привлекают большое внимание. Связано это с наличием у них многих интересных оптических свойств, благодаря которым они находят широкое применение в нелинейной волоконной оптике и лазерной физике [1]. В частности, МС оболочка которого представляет из себя фотонный кристалл, состоящий из стержней заполненных воздухом и гексагональной упаковкой, за счет своих волноводных свойств позволяет сдвигать длину волны нулевой дисперсии в диапазон близкий к видимой области спектра. Другим важнейшим свойством такого МС является наличие так называемого режима “бесконечной” одномодовости [2]. При этом режиме, во всем диапазоне пропускания МС, наблюдается распространение только одной основной моды. Это свойство широко используется для создания фемтосекундных волоконных лазеров, когда требуются одномодовые МС с большими значениями площадей основной моды $\sim 500 \mu\text{m}^2$ и выше. В нашей работе исследовался другой тип МС, оболочка которого состоит из диэлектрических стержней с гексагональной упаковкой (рис. 1), имеющих более высокий показатель преломления, чем окружающая их матрица из кварца. Достигается это в основном, введением в состав стержня германия в определенном процентном соотношении. Если механизмом локализации излучения в сердцевине МС, оболочки которого состоит из стержней, заполненных воздухом, является полное внутреннее отражение от оболочки, имеющей меньший усредненный показатель преломления, чем сердцевина, то в случае МС с оболочкой из германатных стержней основным механизмом локализации излучения в сердцевине является конструктивная интерференция, возникающая при отражении распространяющегося излучения от стержней оболочки. При этом, спектр пропускания такого МС характеризуется наличием фотонных запрещенных зон, в которых излучение хорошо локализуется в сердцевине, в то время как в узких спектральных областях между ними локализация отсутствует ввиду больших волноводных потерь (рис. 2). Связано это с возбуждением собственных мод стержней оболочки, которые можно рассматривать как волноводы со ступенчатым профилем показателя преломления. МС с оболочкой из германатных стержней обладают рядом преимуществ по сравнению с МС с оболочкой из стержней, заполненных воздухом. В частности, их изго-

твление значительно легче в технологическом плане, также их использование значительно удобнее при сварке истыковке волокон, что немаловажно для создания полностью волоконных лазерных систем. Критерием “бесконечной” одномодовости в случае МС с оболочкой из стержней, заполненных воздухом, является соотношение $d/\Lambda < 0.45$, где d – диаметр стержней, Λ – расстояние между их центрами.

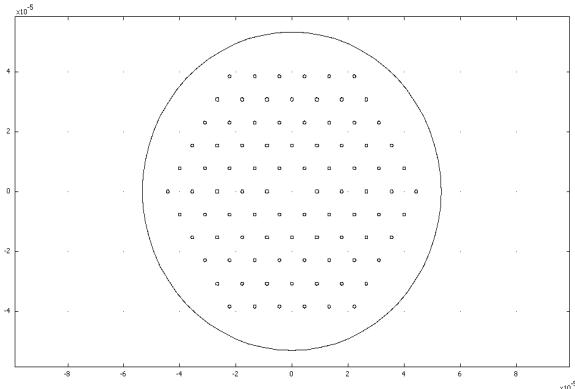


Рис. 1. Структура поперечного сечения МС оболочки которого состоит из германатных стержней

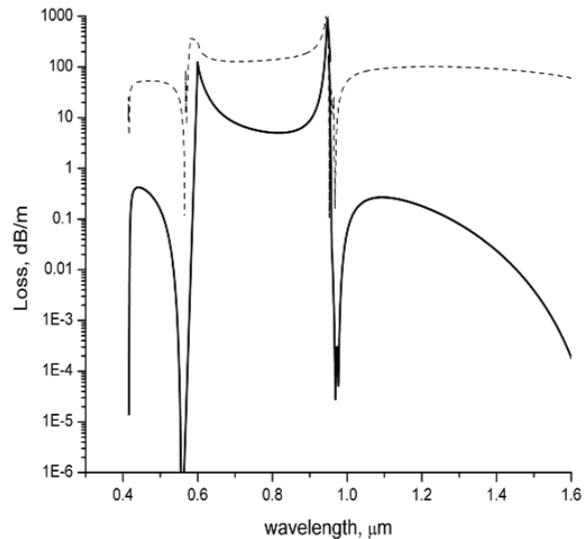


Рис. 2. Структура запрещенных зон первой (сплошная линия) и второй моды (штриховая линия) сердцевины МС с оболочкой из германатных стержней, $d/\Lambda = 0.12$, $\Lambda = 21.7 \mu m$

В случае МС с оболочкой, состоящей из германатных стержней “бесконечную” одномодовость получить нельзя, исходя из того, что ранее она объяснялась на основе механизма полного внутреннего отражения в соответствующем типе МС [2]. Однако, нам удалось показать, что при малых значениях $d/\Lambda < 0.4$ в них также наблюдается “бесконечно” одномодовый режим распространения основной моды. На рис. 2 показаны потери первой и второй моды такого МС. Во всех запрещенных зонах вторая мода не локализуется в сердцевине, ввиду больших волноводных потерь.

Литература

1. P. St. J. Russell, Journal of Lightwave Technology, vol. 24, n. 12, pp. 4729 – 4749, 2006.
2. T. A. Birks, J. C. Knight, P. St. J. Russell, Optics Letters, vol. 22, pp. 961 – 963 (1997).

**СЕКЦИЯ:
ЛАЗЕРНАЯ ФИЗИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ**

ТЕРМООПТИЧЕСКИЕ ИСКАЖЕНИЯ ЛАЗЕРНОГО АКТИВНОГО ЭЛЕМЕНТА ИЗ КРИСТАЛЛА Nd³⁺:KGW

П. А. Лойко¹, К. В. Юмашев²

¹Белорусский государственный университет, физический факультет, кафедра лазерной физики и спектроскопии, пр. Независимости 4, 220050 Минск, Беларусь

²НИИ ОМТ БНТУ, пр. Независимости 65, корп. 17, 220013 Минск, Беларусь

Целью настоящей работы является экспериментальное исследование характеристик термической линзы, наводимой в активном элементе лазера на Nd³⁺:KGd(WO₄)₂ (Nd³⁺:КГВ), вырезанного вдоль кристаллографической оси *b*.

Твердотельные лазеры являются в настоящее время одним из наиболее широко используемых типов лазеров. Основная особенность твердотельного лазера состоит в том, что его резонатор в процессе работы испытывает значительные изменения своих свойств из-за появления термооптических неоднородностей в активном элементе при его неравномерном нагреве в процессе накачки. В подавляющем большинстве случаев термооптически возмущенный элемент можно с хорошей степенью приближения моделировать линзой, оптическая сила которой зависит от средней мощности накачки. В этом случае говорят, что в активном элементе наводится термическая линза (термолинза).

Кристалл Nd³⁺:КГВ обладает рядом преимуществ по сравнению с кристаллом иттрий-алюминиевого граната, легированного ионами неодима (Nd³⁺:ИАГ), – широко используемого материала для активных элементов твердотельных лазеров. Он дает возможность получать более высокие концентрации примесных ионов Nd³⁺ (до 8 at.-%), что приводит к увеличению эффективности и понижению порога генерации, обладает большей лучевой стойкостью [1-2]. Кроме этого, благодаря высокому значению эффективной кубической по полю нелинейности ($\chi^{(3)} \sim 10^{-12}$ ед. СГСЕ) кристалл Nd³⁺:КГВ может использоваться при ВКР-преобразовании частоты излучения лазера [3].

Термооптические эффекты отрицательно сказываются на работе лазера – ухудшаются как пространственные, так и энергетические характеристики выходного излучения. Параметры термической линзы в активном элементе из кристалла Nd³⁺:КГВ – ее знак, оптическую силу, астигматизм – в настоящее время не представляется возможным определить теоретически, поскольку в литературе приводятся противоречивые данные о фундаментальных параметрах материала КГВ, определяющих характеристики термолинзы. Поэтому актуальным представляется экспериментальное исследование термической линзы и оценка на этой основе термооптических параметров кристалла Nd³⁺:КГВ.

Излучение накачки (ламповой или диодной) создает в активном элементе твердотельного лазера неоднородное распределение температуры. Такое распределение приводит к изменению показателя преломления активной среды. Оно может быть разделено на вариацию Δn_T , зависящую от температуры, и часть, вызванную механическими деформациями в кристалле - Δn_{def} . Кроме этих факторов, на оптическую силу ТЛ может незначительно влиять искривление торцов АЭ лазера [4]. В дальнейшем под термооптическими параметрами мы будем понимать величины $(dn/dT + C_{A,B})$ - сумму температурного коэффициента показателя преломления и коэффициента, определяющего изменение показателя преломления вследствие эффекта фотоупругости (А – направление, параллельное плоскости поляризации излучения лазера, В – ортогональное к нему). В [5] приводится теоретическая формула для фокусного расстояния ТЛ для случая непрерывной диодной накачки и Гауссового профиля излучения накачки. Для случая квазинепрерывной накачки мощность накачки возможно заменить средней P_p^{aver} , что связано со значительным временем тепловой релаксации в АЭ твердотельных лазеров, достигающем несколько секунд. Для учета характерного для полупроводникового диода накачки вытянутого профиля пучка накачки следует ввести его эффективное сечение по уровню $1/e^2 - S_{eff}$. Тогда выражение примет вид (1):

$$f = \frac{K_c \cdot S_{eff}}{\eta \cdot P_p^{aver}} \frac{1}{(dn/dT + C_{A,B})}, \quad (1)$$

где η – часть средней мощности накачки (P_p^{aver}), преобразуемой в АЭ в тепло, K_c – коэффициент теплопроводности вещества. Для определения фокусного расстояния ТЛ был собран измерительный стенд, включающий лазер на Nd^{3+} :КГВ с диодной накачкой и систему измерения пространственных и энергетических характеристик лазерного излучения в дальней зоне. Система квазинепрерывной накачки позволяла изменять частоту и длительность повторения импульсов накачки. Длина волны генерации лазера составила $\lambda=1.35$ мкм (при накачке на длине волны $\lambda=812$ нм), выходное излучение было линейно поляризованным вдоль оси оптической индикатрисы N_m ($E//N_m$), волновой вектор $k//b$.

Для определения оптической силы ТЛ использовались две методики. В первом методе, методе анализа пространственных характеристик выходного излучения лазера, зависимость диаметра моды излучения от расстояния от АЭ $\omega=\omega(L)$ моделировалась теоретически с применением ABCD - метода расчета резонатора. Варьируемым параметром выступало фокусное расстояние ТЛ, которое определялось на основании наилучшего совпадения расчета с экспериментальными данными. Во втором методе, методе срыва генера-

ции, рассчитывалась оптическая сила ТЛ – D_{th} , при которой резонатор переходит в область неустойчивости. Важный параметр, учитывающий зависимость оптической силы ТЛ в активной среде от средней мощности накачки – коэффициент чувствительности активного элемента к термооптическим искажениям ($M_{A,B}$). Он показывает, насколько изменяется величина оптической силы $D_{A,B}$ термолинзы при увеличении средней мощности накачки на 1Вт:

$$M_{A,B} = \frac{dD_{A,B}}{dP_p^{aver}} \quad (2)$$

На рис. 1 показана зависимость диаметра моды выходного излучения лазера от расстояния от АЭ. При малых средних мощностях накачки пучок имеет круговое сечение (влияние термической линзы выражено слабо). Так, при P_p^{aver} , близкой к пороговой (a), экспериментальные точки хорошо согласуются с теоретическим расчетом $\omega=\omega(L)$ для значения фокусного расстояния ТЛ $f \rightarrow \infty$. При увеличении средней мощности накачки ($P_p^{aver}=53$ мВт) диаметр моды в различных направлениях изменяется по-разному. В направлении $/N_g$ пучок вытягивается (b), а в $/N_m$ – сжимается (c), что связано с различными знаками ТЛ в этих направлениях: $D_B < 0$, $D_A > 0$.

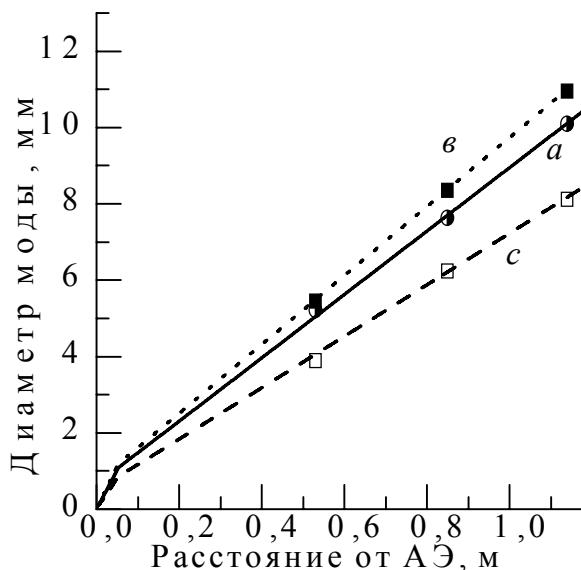


Рис. 1. Зависимость диаметра моды выходного излучения лазера от расстояния от АЭ: $a - P_p^{aver}=7.4$ мВт, $D \rightarrow 0$; $b - P_p^{aver}=53$ мВт, $D_B=-8.13$ дптр ($/N_g$); $c - P_p^{aver}=53$ мВт, $D_A=11.8$ дптр ($/N_m$).

В направлении $/N_m$ ($D_A > 0$) для некоторых средних мощностей измеренные на одном

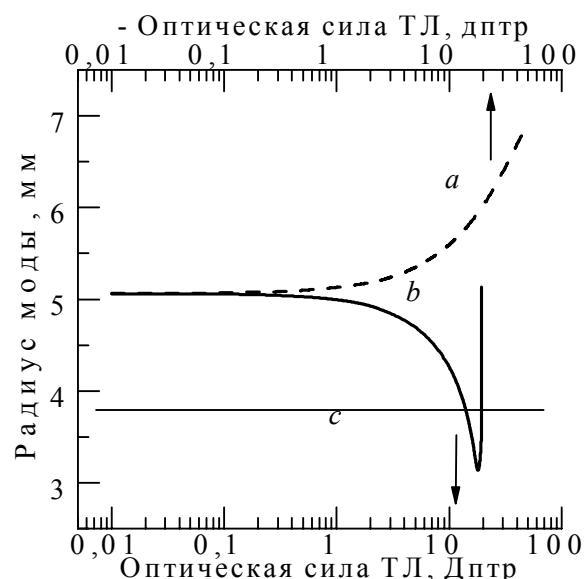


Рис. 2. Рассчитанная зависимость радиуса моды излучения от оптической силы ТЛ в АЭ лазера на Nd³⁺:КГВ: $a - D_{TL} < 0$, $b - D_{TL} > 0$. Расстояние от АЭ $L=114$ см.

расстоянии от АЭ диаметры пучка могут совпадать (рис. 2, *c*) – так, это наблюдалось при $P_p^{aver} = 80$ и 120 мВт. Данный факт связан с тем, что при больших мощностях накачки, соответствующих $D_A > 20$ дптр, резонатор переходит в область неустойчивости, и диаметр моды начинает резко возрастать (*b*). В то же время значение оптической силы термолинзы в этом случае другое, что необходимо учитывать при построении зависимости $D(P_p^{aver})$. Видно, что для второго направления // N_g ($D_B < 0$) такой эффект не наблюдается (*b*). Это связано с очень большим абсолютным значением отрицательной D_{TL} , которое требуется для выведения резонатора из области стабильности: $|D_+| < |D_-|$. В наших экспериментах данное значение не достигалось даже при максимальной мощности накачки. Поэтому ясно, что причина падения мощности в экспериментах по срыву генерации – развитие сильной положительной ТЛ.

Зависимость средней выходной мощности излучения лазера от мощности накачки показана на рис. 3 для различных соотношений длительности τ и периода следования T импульсов накачки (*a* и *b*). Вертикальная линия – момент перехода в область нестабильности (первая точка после максимальной средней мощности генерации лазера) – соответствует $P_p^{aver} = P_p^{th} = 123.2$ мВт. Для метода срыва генерации коэффициент чувствительности может быть определен как P_p^{th}/D_{th} .

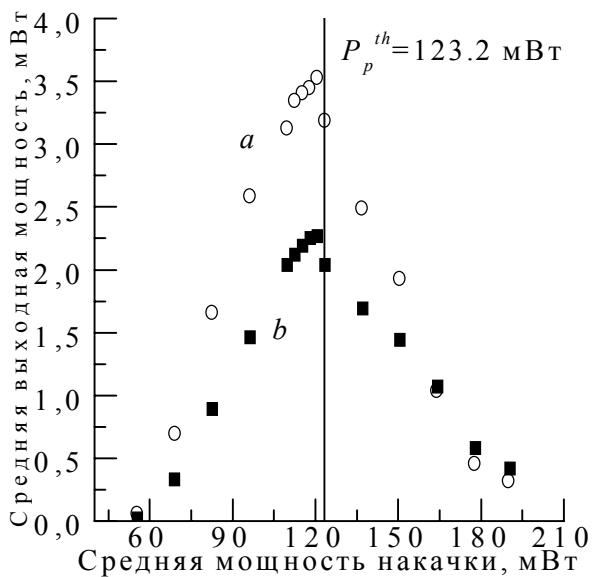


Рис. 3. Зависимость средней мощности генерации от средней мощности накачки: *a* – $\tau/T=680/1910$ (мс); *b* – $\tau/T=470/1324$ (мс).

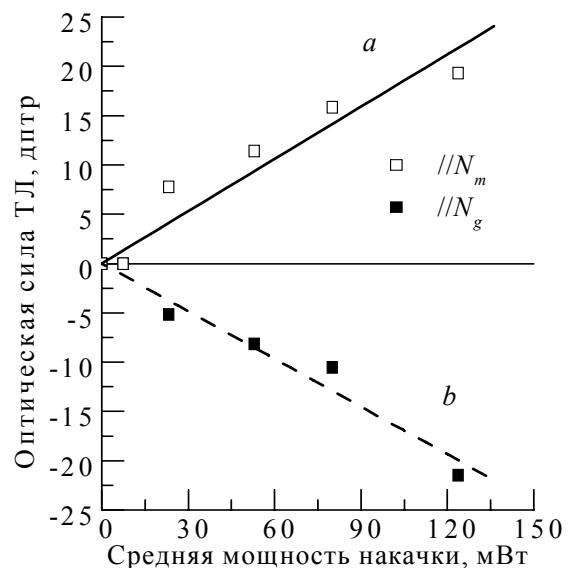


Рис. 4. Зависимость оптической силы ТЛ от средней мощности накачки: *a* – $//N_m$, *b* – $//N_g$.

На рис. 4 приведена зависимость оптической силы наводимой в АЭ лазера на Nd³⁺:КГВ ТЛ от средней мощности накачки в двух направлениях (*a* – направление $//N_m$, *b*

$- //N_g$). Наибольшая оптическая сила составила 19.4 дптр для направления N_m и -23.0 дптр для N_g . Для определения коэффициента чувствительности активного элемента данные аппроксимировались линейной зависимостью. Сумма температурного коэффициента показателя преломления и коэффициента, определяющего изменение n вследствие эффекта фотоупругости, $(dn/dT+C_{A,B})$ определялась из (1). Наведенная в кристалле Nd³⁺:КГВ термическая линза является бифокальной с отрицательной оптической силой в направлении, перпендикулярном плоскости поляризации излучения лазера $//N_g$, и с положительной оптической силой в направлении, параллельном плоскости поляризации излучения лазера $//N_m$). Абсолютные значения оптической силы данной линзы в обоих направлениях растут с увеличением средней мощности накачки. Коэффициент чувствительности $M_{A,B}$ активного элемента из Nd³⁺:КГВ, равен $M_A=1.8*10^2$ дптр/Вт для направления $//N_m$ и $M_B=-1.6*10^2$ дптр/Вт для направления $//N_g$. Величины $(dn/dT+C_A)=2.1*10^{-6}$ К⁻¹, $(dn/dT+C_B)=-2.3*10^{-6}$ К⁻¹ (измеренные методом анализа пространственных характеристик лазера) и $(dn/dT+C_A)=2.0*10^{-6}$ К⁻¹ (по методу срыва генерации).

Полученные в данной работе результаты позволяют повысить эффективность работы лазеров на кристалле Nd³⁺:КГВ при высоких уровнях накачки (увеличить выходную мощность, улучшить качество выходного излучения лазера и устойчивости его работы по отношению к термооптическим возмущениям).

Литература

1. S. Biswal, S. P. O'Connor, S. R. Bowman. Appl. Opt. **44** №15, 3093-3097 (2005).
2. V. V. Filippov, N. V. Kuleshov, I. T. Bodnar. Appl. Phys. B **87**, 611-614(2007).
3. I. V. Mochalov. Opt. Eng. **36**, 1660(1997).
4. N. Hodgson and H. Weber. Optical resonators, Springer. New York, 1997.
5. M. E. Innocenci, H. T. Yura, C. L. Fincher, R. A. Fields. Appl. Phys. Lett. **56**(19),1831-1833(1990).

ОЦЕНКА ТЕРМОЛИНЗЫ В КВАЗИНЕПРЕРЫВНОМ ТВЕРДОТЕЛЬНОМ ЛАЗЕРЕ С ВКР-САМОПРЕОБРАЗОВАНИЕМ И МОЩНОЙ ДИОДНОЙ НАКАЧКОЙ

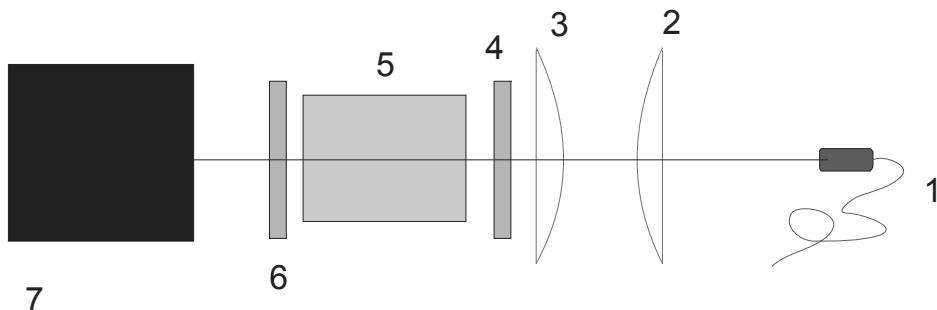
А. А. Кононович

*Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости 68, 220072
Минск, Беларусь, aakopovich@yahoo.com*

Активированный ионами неодима кристалл ванадата иттрия (Nd:YVO_4) обладает высоким коэффициентом усиления в ($2.7 \times 10^{-19} \text{ см}^2$ [1]) и широкой полосой поглощения в окрестности спектральной области 809 нм [2], что делает данный кристалл привлекательным для использования в твердотельных лазерах с диодной накачкой, работающих как в непрерывном, так и в импульсном режиме (см., например, [3, 4]). Высокий коэффициент ВКР-усиления – 4.5 см/ГВт [5] позволяет использовать данный кристалл в лазерах с ВКР-самопреобразованием (лазеры с внутрирезонаторным преобразованием частоты излучения, основанным на эффекте вынужденного комбинационного рассеяния) [6, 7], а также в лазерах, основанных на эффекте вынужденного комбинационного рассеяния (ВКР) (см., например, [3-5]). Однако, вследствие низкой теплопроводности (коэффициент теплопроводности 51 мВт/(см·К) [8]), при непрерывном режиме работы тепловые эффекты могут существенно искажать качество пучка, а при высоких мощностях накачки – приводить к разрушению кристалла [2]. Термовая нагрузка на активное вещество ВКР лазеров при ВКР-самопреобразовании должна возрастать еще больше, поскольку данный эффект основан на неупругом взаимодействии излучения с веществом, которое сопровождается выделением теплоты. В работе исследуются тепловые эффекты квазинепрерывного лазера на Nd:YVO_4 , проводится сравнение тепловой нагрузки при работе лазера режиме генерации на 1064 нм и в режиме ВКР-самопреобразования с генерацией на длине волны 1176 нм, производится оценка формируемой термолинзы.

Исследуемый лазер накачивался диодным лазером с выходом излучения через волокно диаметром 600 мкм, импульсами с длительностью 50 мс и скважностью 10. Длина волны излучения накачки ~808 нм. Активное вещество лазера – кристалл Nd:YVO_4 . Уровень легирования ионами неодима – 0,8 at. %. Передняя и задняя грани кристалла были просветлены на длинах волн 808 и 1064 нм. Кристалл охлаждался медным радиатором, температура которого поддерживалась равной 16°C с помощью элемента Пельтье. Входное зеркало было плоским, имело пропускание 0,07% на длине волны 1064 нм и 0,05% на длине волны 1176 нм. Для обеспечения режима работы лазера с генерацией на длине вол-

ны 1064 нм использовалось плоское выходное зеркало с отражением 90% на длине волны 1064 нм. Для получения ВКР-самопреобразования излучения с длиной волны 1176 нм в кристалле ванадата иттрия в излучение с длиной волны 1176 нм использовалось плоское выходное зеркало с отражением 0,03% на длине волны 1064 нм и 0,16 % на длине волны 1176 нм. Входное и выходное зеркала отстояли от передней и задней граней кристалла Nd:YVO₄ на расстояние 1 мм, длина резонатора составила 10 мм.



На рисунках 2 и 3 представлены зависимости мощности выходного излучения от мощности накачки. В случае генерации на длине волны 1064 нм (рисунок 2), достигнута эффективность, близкая к 50%. Примечательно, что график остается линейным и при больших мощностях. В случае ВКР-самопреобразования, достигнутые максимальная мощность и эффективность невелики (см. рисунок 3). Это объясняется тем, что для генерации на длине волны 1176 нм резонатор не оптимизировался.

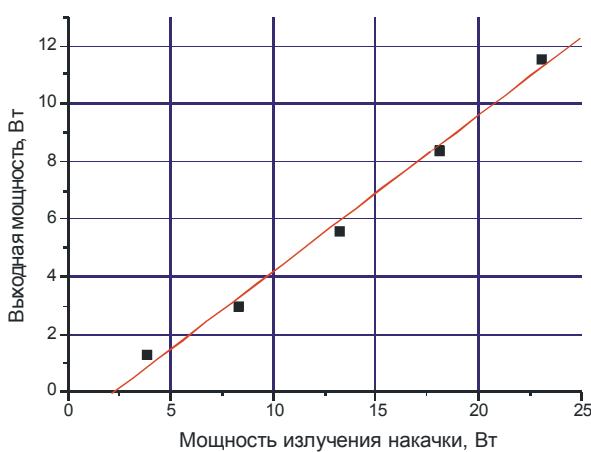


Рис. 2. Средняя по импульсу накачки выходная мощность лазера в случае генерации на длине волны 1064 нм

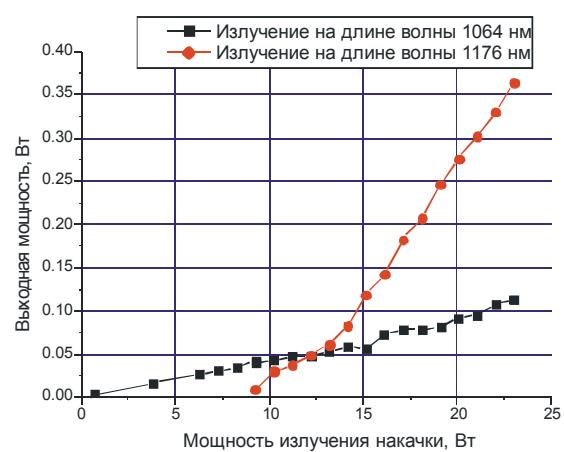


Рис. 3. Средняя по импульсу накачки мощность лазера в случае ВКР-самопреобразования

Для определения термолинзы были сделаны следующие предположения. Основным источником нагревания кристалла можно считать излучение накачки. Поскольку ванадат иттрия обладает большим коэффициентом поглощения на длине волны 808 нм, можно считать, что все излучение накачки поглощается в самом начале кристалла и, таким образом, считать термолинзу эффективно расположенной у передней грани кристалла.

Для оценки термолинзы использовался стандартный метод ABCD-матриц. Резонатор может быть представлен как волновод из повторяющихся оптических элементов. Величина комплексного параметра пучка \tilde{q} должна оставаться постоянной после каждого прохода пучком системы, т.е. [9]:

$$\tilde{q} = \frac{A\tilde{q} - B}{C\tilde{q} + D}, \quad (1)$$

где A, B, C, D – элементы ABCD – матрицы резонатора, f – фокусное расстояние термолинзы. Для данного лазера матрица ABCD принимает вид:

$$\begin{pmatrix} A & C \\ B & D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & d_1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & \frac{d}{n} \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -\frac{1}{f} & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 2d_1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -\frac{1}{f} & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & \frac{d}{n} \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & d_1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2)$$

где n – показатель преломления кристалла, d – длина кристалла, d_1 – расстояние между кристаллом и зеркалом.

Подставляя в уравнение (1) уравнение (2) и решая относительно \tilde{q} , можно получить зависимость $\tilde{q}(f)$:

$$\tilde{q} = \frac{\sqrt{f} \sqrt{\frac{d_1^3}{f^2} - \frac{3d_1^2}{f} + \frac{2dd_1^2}{f^2n} - \frac{4dd_1}{fn} + \frac{d^2d_1}{f^2n^2} + 2d_1 + \frac{d}{n} - \frac{d^2}{fn^2}}}{\sqrt{\frac{d_1}{f} - 1}}, \quad (3)$$

Комплексный параметр пучка \tilde{q}_0 в плоскости перетяжки связан с радиусом перетяжки ω_0 как [9]:

$$\omega_0(f) = \sqrt{\frac{-i\tilde{q}_0(f)\lambda}{\pi}}, \quad (4)$$

Следовательно, при известном радиусе перетяжки ω_0 из уравнений (3) и (4) можно определить фокусное расстояние формируемой термолинзы. В данной работе радиус перетяжки оценивался из расходимости и диаметра пучка в дальнем поле. Отметим, что из-за принятых допущений такие расчеты не могут считаться точными, а служат только для

оценки.

На рисунке 4 приведены результаты подобных вычислений термолинзы для данного лазера. Термолинза положительная.

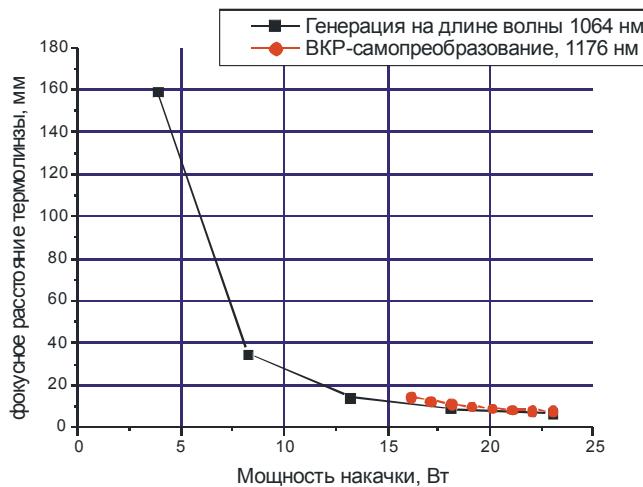


Рис. 4. Зависимость фокусного расстояния термолинзы от мощности накачки в случае генерации на длине волны 1064 нм и ВКР-самопреобразования

Рисунок 4 иллюстрирует, что при одинаковых мощностях фокусное расстояние термолинзы в случае ВКР-самопреобразования и генерации на длине волны 1064 нм приблизительно одинаково. Это можно объяснить тем, что в данном случае ВКР-самопреобразование малоэффективно и, как следствие, вносит малый тепловой вклад (для сравнения, путем оптимизации резонатора можно достичь эффективности ВКР-самопреобразования в ванадате иттрия 7% [7], а в кристалле вольфрамата калия была достигнута эффективность 14% [10]). При мощности накачки 23 Вт фокусное расстояние термолинзы достигает 8 мм. Это чрезвычайно сильная термолинза. Для компенсации предлагается использовать полусферическую конфигурацию резонатора (выходное зеркало – выпуклое).

Таким образом, проведено сравнительное исследование формирования тепловой линзы в квазинепрерывном твердотельном лазере на основе кристалла ванадате иттрия с ВКР-самопреобразованием излучения и мощной диодной накачкой. Для сравнения использовался лазер с такими же параметрами, но без ВКР-самопреобразования. Показано, что из-за малой эффективности для данной системы вклад ВКР-самопреобразования в формирование термолинзы незначителен. Фокусное расстояние термолинзы при мощности накачки в 23 Вт составило около 8 мм в обоих рассмотренных случаях.

Автор выражает благодарность А. А. Демидовичу, М. Данаилову и А. С. Грабчикову за постановку задачи исследований и плодотворные обсуждения.

Литература

1. D.G. Matthews, J. R. Boon, R. S. Boon, R. S. Conroy, B. D. Sinclair, J. Mod. Opt., **43**, 1079 (1996).
2. W. Koechner. Solid-state laser engineering, 6th ed., Berlin , 2006.
3. V. Couderc, F. Louradour, A. Barthelemy, Opt. Commun 103, 166(1999).
4. Z. Xiong, Z.G. Li, N. Moore, W.L. Huang, G.C. Lim, IEEE J. Quantum Electron. 39, 979 (2003)
5. A.A. Kaminskii, K.-I. Ueda, H.J. Eichler, Y. Kuwano, H. Kouta, S.N. Bagaev, T.H. Chyba, J.A. Barnes, G.M.A. Gad, T.Murai, J. Lu, Opt.Commun. 194, 201 (2001).
6. V. N. Burakevich, V. A. Lisinetskii, A. S. Grabtchikov, A. A. Demidovich, V. A. Orlovich, V.N. Matrosov, Appl. Phys. B. 86, 511 (2007).
7. A.J. Lee, H. M. Pask, T. Omatsu, P. Dekker, J.A. Piper, Appl. Phys. B. 88, 539 (2007).
8. H. R. Xia, X. L. Meng, M. Guo, L. Zhu, H. J. Zhang, and J. Y. Wang, J. Appl. Phys. 88, 5134 (2000).
9. О. Звелто. Принципы лазеров, Москва, 1990.
10. V.A. Lisinetskii, A.S. Grabtchikov, A.A. Demidovich, V.N. Burakevich, V.A. Orlovich, A.N. Titov, Appl. Phys. B 88, 449 (2007)

ВКР ЛАЗЕР НА КРИСТАЛЛЕ КГВ С НЕУСТОЙЧИВЫМ ТЕЛЕСКОПИЧЕСКИМ РЕЗОНАТОРОМ

В. А. Лисинецкий

*Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости 68, 220072
Минск, Беларусь, lisinetskii@gmail.com*

Лазерное зондирование озона в тропосфере является актуальной задачей экологии, поскольку озон – это сильный токсичный загрязнитель, относящийся к веществам первого класса опасности и играющий ключевую роль в химических и фотохимических процессах в атмосфере [1]. Для зондирования тропосферного озона необходимы источники лазерного излучения в спектральном диапазоне 270-300 нм. Традиционно в лидарных системах используются эксимерные лазеры с генерацией вынужденного комбинационного рассеяния (ВКР) в газах, перестраиваемые лазеры на сапфире с титаном и параметрические генераторы света с генераторами гармоник [1, 2]. Высокая стоимость и сложность излучателей такого типа препятствует их широкому применению в сетях мониторинга озона.

Ранее [3] был предложен и реализован способ получения излучения в области 280 нм за счет генерации 1-й стоксовой компоненты (длина волны 563 нм) в ВКР лазере на кристалле нитрата бария, накачиваемом второй гармоникой Nd:YAG лазера, и последующего удвоения частоты излучения этой стоксовой компоненты. При этом, поскольку эффективность генерации второй гармоники сильно зависит от расходимости, необходимо, чтобы излучение 1-й стоксовой компоненты имело не только высокую энергию импульсов, но и малую расходимость. Поэтому в работе [3] использовался ВКР лазер с телескопическим неустойчивым резонатором, обеспечивающий генерацию импульсов с достаточно высокой энергией (32 мДж), сравнительно невысоким значением M^2 фактора (17) и эффективностью 19 %. Такие параметры излучения 1-й стоксовой компоненты позволили получить импульсы на длине волны 281.7 нм с энергией до 4 мДж.

Кристалл нитрата бария, на основе которого был выполнен ВКР лазер, исследованный в работе [3], имеет серьезный недостаток: он является гигроскопичным, что существенно сокращает срок его службы. Поэтому с практической точки зрения более целесообразным является применение негигроскопических кристаллов. Одним из наиболее широко используемых и недорогих комбинационно активных кристаллов является кристалл калий гадолиниевого вольфрамата (КГВ) [4]. Хотя коэффициент ВКР усиления в этом кристалле в два раза ниже, чем в кристалле нитрата бария, ширина линии спонтанного комбинационного рассеяния в нем в несколько раз выше, что важно при преобразовании излучения

многомодовых коммерческих лазеров. Кроме того, этот кристалл является негигроскопичным и таким образом более удобным для практического использования, чем кристалл нитрата бария. Настоящая работа посвящена исследованию генерации 1-й стоксовой компоненты в ВКР лазере на кристалле КГВ с неустойчивым телескопическим резонатором.

В качестве излучения накачки в экспериментах использовалась вторая гармоника многомодового коммерческого Nd:YAG лазера (модель LS-2137 производства Лотистии), работающего в режиме активной модуляции добротности. Ширина спектральной линии излучения составляла примерно 0.6 см^{-1} . Длительность импульса накачки составляла 15 нс, частота следования – 10 Гц, M^2 фактор пучка – 4. Диаметр пучка накачки на выходе лазера составлял около 6 мм. При помощи двукратного телескопа диаметр пучка накачки уменьшался до 3 мм, что приводило к снижению порога генерации ВКР. Исследованные в работе ВКР лазеры были выполнены на основе кристаллов КГВ длиной 4 см, вырезанных вдоль оптической оси N_g . На торцы кристаллов были нанесены антиотражающие покрытия. Кристаллы располагались в неустойчивых телескопических резонаторах. Были исследованы резонаторы с различными радиусами кривизны входного и выходного зеркал, что позволяло менять увеличение и длину неустойчивого телескопического резонатора ВКР лазера.

Для всех исследованных резонаторов входное зеркало максимально пропускало излучение накачки и максимально отражало излучение на длинах волн 1-й (559 нм) и 2-й (588 нм) стоксовых компонент. При генерации 1-й стоксовой компоненты необходимо подавлять паразитную генерацию 2-й стоксовой компоненты. Для этого выходные зеркала резонатора должны иметь минимальное отражение на длине волны 2-й стоксовой компоненты и оптимальное отражение на длине волны 1-й стоксовой компоненты. В экспериментах были исследованы три ВКР лазера с резонаторами, имеющими одинаковое увеличение (1.36) и длину (151 мм), но с разными коэффициентами отражения выходных зеркал на длинах волны 1-й (28%, 44% и 52 %) и 2-й стоксовых компонент (23%, 42%, 42%). Отражение зеркал на длине волны накачки было максимальным. Полученные зависимости энергий импульсов 1-й и 2-й стоксовых компонент представлены на рисунке 1. Видно, что наибольшая энергия импульсов 1-й стоксовой компоненты получена при использовании зеркала с отражением 28% на длине волны 559 нм и 23% на длине волны 588 нм. Это объясняется тем, что при таком зеркале достигается наименьшая мощность 1-й стоксовой компоненты внутри резонатора и наибольшая пороговая энергия генерации 2-й стоксовой компоненты. Оба этих фактора приводят к более успешному подавлению генерации 2-й стоксовой компоненты.

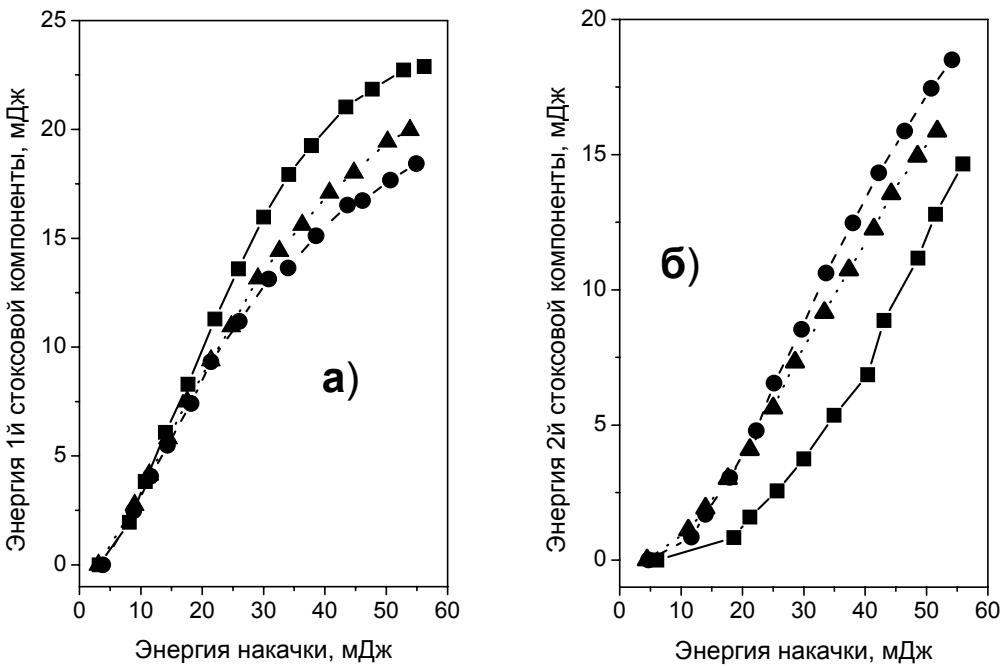


Рис. 1. Зависимость выходной энергии импульсов 1-й (а) и 2-й (б) стоксовых компонент от энергии импульсов накачки для разных коэффициентов отражения выходного зеркала: квадраты соответствуют отражению 28% на длине волны 559 нм и 23% на длине волны 588 нм, круги – 51% на длине волны 559 нм и 42% на длине волны 588 нм, треугольники – 44% на длине волны 559 нм и 42% на длине волны 588 нм.

Кроме коэффициентов отражения выходного зеркала на энергию импульсов первой стоксовой компоненты оказывают влияние длина и увеличение резонатора. Для исследования этого влияния использовались различные наборы входных и выходных зеркал, обеспечивающие разные увеличения резонатора для двух длин резонатора: примерно 150 мм и 200 мм (см. рисунок 2а). Видно, что зависимости являются довольно пологими, т.е. можно заключить, что энергия импульсов первой стоксовой компоненты от увеличения резонатора зависит слабо. При этом для резонаторов длиной 200 мм энергия импульсов первой стоксовой компоненты заметно выше. Еще большее увеличение длины резонатора до 330 мм привело к заметному повышению порога генерации и соответствующему снижению энергии импульсов первой стоксовой компоненты. Таким образом наиболее высокие энергии импульсов первой стоксовой компоненты (26 мДж) были достигнуты при использовании резонатора длиной 200 мм.

На рисунке 2б представлены зависимости M^2 факторов излучения первой стоксовой компоненты при максимальной энергии накачки от увеличения резонатора. Видно, что зависимости M^2 как от увеличения, так и от длины резонатора являются слабо выраженным. Тем не менее, целесообразно использовать резонаторы с не очень высоким увели-

чением резонатора. Наименьшее значение M^2 фактора было достигнуто при использовании резонатора длиной 200 мм и увеличением 1.25.

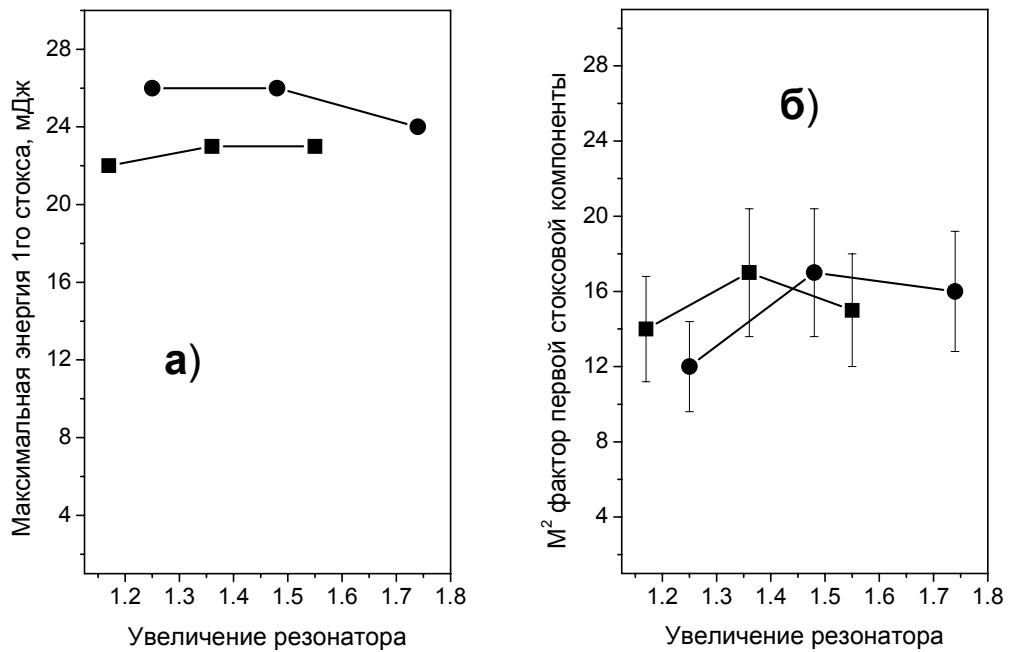


Рис. 2. Зависимость максимальной выходной энергии импульсов (а) и M^2 фактора (б) 1-й стоксовой компоненты от увеличения резонатора для разных значений геометрической длины резонатора (квадраты – 150 мм, круги – 200 мм).

Таким образом, с точки зрения повышения энергии импульсов и уменьшения M^2 фактора излучения 1-й стоксовой компоненты наиболее оптимальным является неустойчивый телескопический резонатор с длиной 200 мм, увеличением 1.25 и коэффициентом отражения выходного зеркала на длине волны 1-й стоксовой компоненты 28 %. Зависимости энергий импульсов и эффективностей 1-й и 2-й стоксовой компоненты от энергии импульсов накачки для этого резонатора приведены на рисунке 3. При максимальной энергии накачки энергия импульсов 1-й стоксовой компоненты составляла 26 мДж, а эффективность генерации – 42 %. При этом M^2 фактор излучения 1-й стоксовой компоненты был равен 12.

Длительности импульсов 1-й стоксовой компоненты сильно зависели от превышения над порогом генерации ВКР и при максимальной энергии импульсов накачки практически не зависели от длины и увеличения резонатора. При существенном превышении порога длительность импульса излучения 1-й стоксовой компоненты достигала 20 нс, превышая длительность импульса излучения накачки (15 нс), измеренную на полувысоте, что объясняется существенным влиянием генерации 2-й стоксовой компоненты.

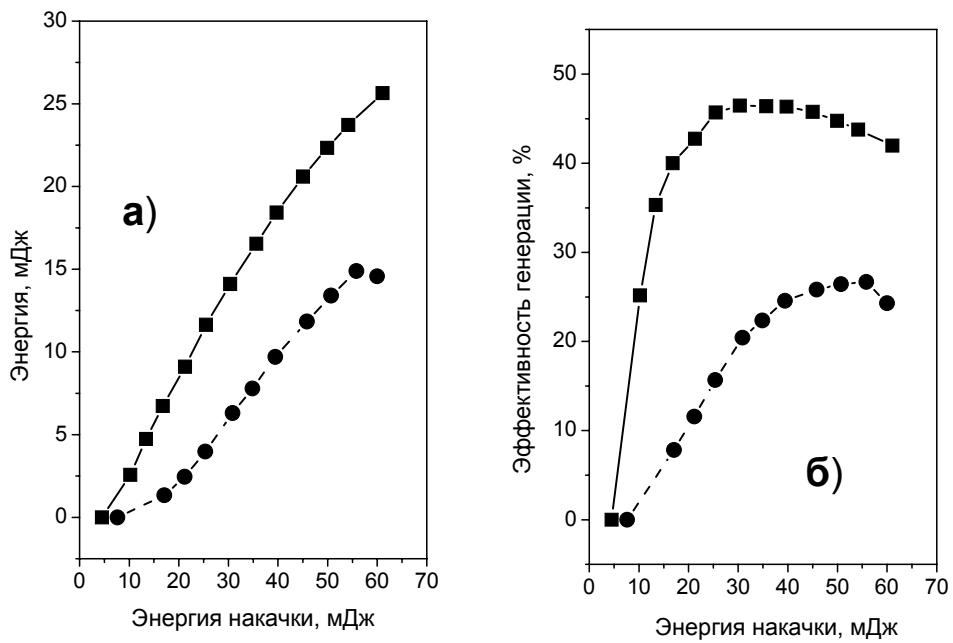


Рис. 3. Зависимость выходной энергии импульсов (а) и эффективности генерации (б) 1-й (квадраты) и 2-й (круги) стоксовых компонент от энергии импульсов накачки для резонатора длиной 200 мм и увеличением 1.25.

Таким образом, исследованный ВКР лазер с неустойчивым телескопическим резонатором на кристалле КГВ позволил получить импульсы 1-й стоксовой компоненты с практически такой же энергией как и ВКР лазер на нитрате бария [3], но с вдвое большей эффективностью и меньшим значением M^2 фактора. Такое увеличение эффективности объясняется тем, что для преобразования многомодового излучения с большой шириной спектра кристалл КГВ является, по-видимому, более предпочтительным, чем нитрат бария. Возможно дальнейшее увеличение импульсов 1-й стоксовой компоненты за счет использования более селективного резонатора.

Литература

1. A. Fix, M. Wirth, A. Meister, G. Ehret, M. Pesch, and D. Weidauer. *Applied Physics B* **75**, 153 (2002).
2. J. T. Zenker, T. H. Chyba, C. L. McCray, H. R. Lee, R. Elivert, B. Thomas, C. Toppin, D. Larson, N. S. Higdon, and D. A. Richter. *Proceedings of SPIE* **3707**, 541 (2003).
3. V. V. Ermolenkov, V. A. Lisinetskii, Y. I. Mishkel, A. S. Grabchikov, A. P. Chaikovskii, and V. A. Orlovich. *Journal of Optical Technology* **72**, 32 (2005).
4. I. V. Mochalov. *Optical Engineering* 36, 1660 (1997).

ГЕНЕРАЦИЯ МОЩНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В БЛИЖНЕМ ИК-ДИАПАЗОНЕ В ТВЕРДОТЕЛЬНЫХ ВКР ЛАЗЕРАХ

В. А. Лисинецкий, Д. Н. Бусько

*Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости 68, 220072
Минск, Беларусь, lisinetskii@gmail.com*

Вынужденное комбинационное рассеяние (ВКР) является одним из распространенных методов преобразования частоты лазерного излучения, позволяющим эффективно генерировать излучение на длинах волн, на которых затруднена обычная лазерная генерация. При этом особый интерес представляют источники, основанные на твердотельных комбинационно активных средах, из-за их компактности, низкого порога генерации и эффективности. Однако существует ряд проблем, связанных с преобразованием мощного излучения в твердотельных комбинационно активных средах. Это, в первую очередь, паразитная генерация более высоких стоксовых компонент [1-3] и нагрев среды из-за ВКР с формированием тепловой линзы в комбинационно активной среде [4]. Из-за этих проблем до недавнего времени энергии импульсов и мощности выходного излучения твердотельных ВКР преобразователей были невелики (несколько десятков миллиджоулей и несколько ватт) [1-3]. В тоже время для многих приложений необходимы источники излучения с высокой средней мощностью или с высокой энергией импульсов. Настоящая работа посвящена разработке источников такого излучения, основанных на ВКР преобразовании в кристалле нитрата бария излучения основной гармоники Nd:YAG лазеров.

Одной из основных проблем при преобразовании импульсов с высокой энергией в отдельно взятую стоксовую компоненту является паразитная генерация стоксовой компоненты более высокого порядка [1-3]. Как только энергия импульсов стоксовой компоненты требуемого порядка превышает величину, соответствующую порогу генерации более высокой стоксовой компоненты, начинается эта паразитная генерация и энергия импульсов требуемой стоксовой компоненты перестает расти. Таким образом, для эффективной генерации импульсов требуемой стоксовой компоненты с высокой энергией необходимо подавлять генерацию стоксовой компоненты более высокого порядка. В некоторой степени такое подавление можно осуществить, используя генерацию ВКР в оптическом резонаторе (ВКР лазер). Используя зеркала резонатора с оптимальным отражением на длине волны требуемой стоксовой компоненты (а также с максимальным отражением на длинах волн всех стоксовых компонент более низкого порядка) и с минимальным отражением на длине волны стоксовой компоненты более высокого порядка можно повысить порог и

предотвратить паразитную генерации стоксовой компоненты более высокого порядка. Однако, на практике такое осуществить в обычном двухзеркальном резонаторе не удается, поскольку зеркала имеют конечное (несколько процентов) отражение на длине волны стоксовой компоненты более высокого порядка. Такого отражения оказывается вполне достаточно [1] для паразитной генерации стоксовой компоненты более высокого порядка.

Для решения этой проблемы нами был предложен и реализован способ подавления паразитной генерации стоксовой компоненты более высокого порядка, заключающийся в использовании многозеркальных резонаторов с селективными поворотными зеркалами, имеющими малое отражение на длине волны стоксовой компоненты более высокого порядка. Используя такие трех- и четырехзеркальные резонаторы с селективными зеркалами оказалось возможным практически полностью подавить паразитные генерации стоксовых компоненты более высокого порядка и получить в ВКР лазерах на нитрате бария, возбуждаемых импульсами длительностью 30 нс на длине волны 1.064 мкм, импульсы первой стоксовой компоненты (длина волны 1.197 мкм) с энергией 156 мДж (рисунок 1а, квантовая эффективность 66 %) и второй стоксовой компоненты (длина волны 1.369 мкм) с энергией 104 мДж (рисунок 1б, квантовая эффективность 44 %). Также нами был реализован ВКР лазер, генерирующий импульсы третьей стоксовой компоненты. Для подавления паразитной генерации четвертой стоксовой компоненты в этом лазере не использовался многозеркальный резонатор. Комбинационно активный кристалл нитрата бария имеет значительное поглощение на длине волны четвертой стоксовой компоненты, поэтому для ее подавления достаточно использовать двухзеркальный резонатор с селективными зеркалами. На длине волны третьей стоксовой компоненты (1.599 мкм) были получены импульсы с энергией 116 мДж (рисунок 2а, квантовая эффективность – 63 %). M^2 фактор излучения всех стоксовых компонент составлял примерно 20.

Генерация третьей стоксовой компоненты в нитрате бария представляет большой практический интерес, т.к. это излучение находится в безопасном для глаз спектральном интервале и может найти разнообразные применения (например, использование в лидаре для диагностики CO₂ газа в атмосфере). При этом, для генерации этой стоксовой компоненты при возбуждении импульсами длительностью 30 нс оказывается достаточным использования обычного двухзеркального устойчивого резонатора. Однако как показали наши исследования, при преобразовании более коротких импульсов (10 нс) несмотря на поглощение в кристалле из-за высокой пиковой мощности импульсов происходит генерация четвертой стоксовой компоненты, которая несколько уменьшает энергию импульсов третьей стоксовой компоненты. Тем не менее, была достигнута энергия импульсов треть-

ей стоксовой компоненты, равная 93 мДж (рисунок 2б, квантовая эффективность 47 %). Пиковая мощность импульсов третьей стоксовой компоненты достигала 10 МВт. Частота следования импульсов составляла 20 Гц, таким образом, средняя выходная мощность была равна 1.8 Вт. При генерации такого излучения с высокой средней и пиковой мощностями наблюдался нагрев среды с образование тепловой линзы, однако ее влияние было не очень сильным. M^2 фактор излучения третьей стоксовой компоненты составлял 15.

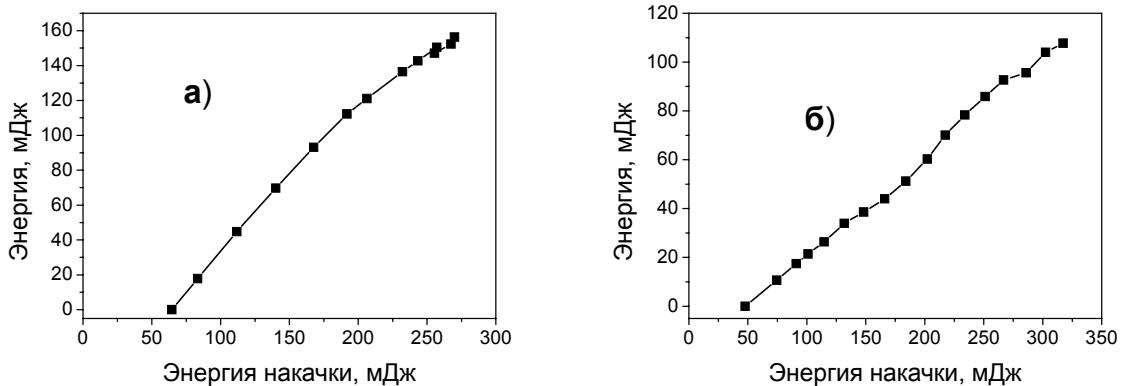


Рис. 1. Зависимости энергий импульсов первой (а) и второй (б) стоксовых компонент от энергии импульсов накачки.

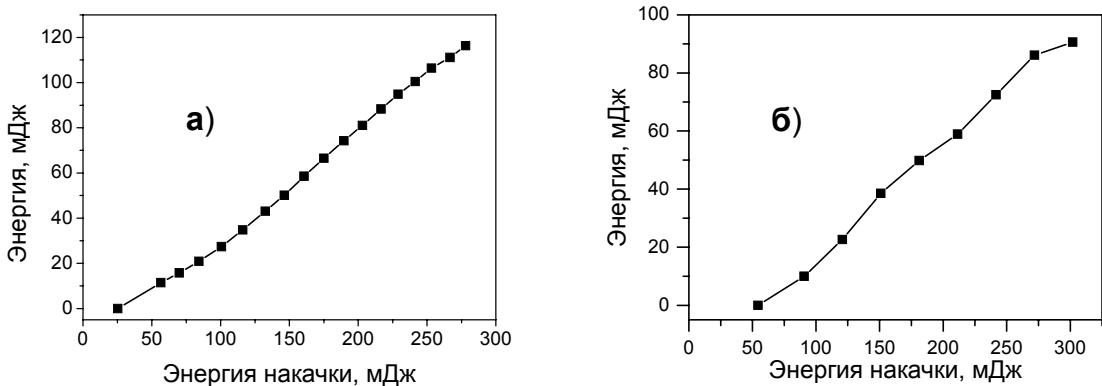


Рис. 2. Зависимости энергий импульсов третьей стоксовой компоненты от энергии импульсов накачки при возбуждении импульсами длительностью 30 нс (а) и 10 нс (б).

Нагрев среды и образование тепловой линзы является другой проблемой, возникающей при преобразовании мощного излучения на ВКР. Если паразитная генерация более высокой стоксовой компоненты связана с высокими пиковыми мощностями и энергиями излучения накачки и генерируемого излучения, то нагрев среды особенно сильно проявляется при преобразовании излучения с высокой средней мощностью. Нагрев комбинационно активной среды из-за ВКР приводит к образованию в среде тепловой линзы, которая в нитрате бария является отрицательной. Если оптическая сила такой линзы становится

слишком большой, то резонатор ВКР лазера может из устойчивого превратиться в неустойчивый, в результате чего возрастут потери на длинах волн различных стоксовых компонент. Отрицательное влияние тепловой линзы на ВКР генерацию в нитрате бария было обнаружено при генерации третьей стоксовой компоненты в ВКР лазере с плоскопараллельным резонатором при выходной мощности всего 0.22 Вт [4] и приводило к снижению выходной мощности на 76 %. Использование для генерации ВКР устойчивого резонатора, как в описанном выше примере, позволило получить третью стоксовую компоненту со средней мощностью, равной 1.8 Вт, при этом влияние тепловой линзы было слабым. Однако при преобразовании излучения со средней мощностью несколько десятков ватт влияние тепловой линзы существенно сильнее.

В настоящей работе нами были созданы ВКР лазеры на кристаллах нитрата бария для генерации первой и третьей стоксовых компонент, возбуждаемых излучением мощностью до 60 Вт. Возбуждающее излучение представляло собой последовательность вспышек, идущую с частотой следования 100 Гц. Каждая вспышка состояла из 11 импульсов длительностью 50 нс и периодом следования 40 мкс. Излучение было пространственно одномодовым и узкополосным (ширина спектра - $0.02\text{-}0.03\text{ см}^{-1}$). Для преобразования такого излучения использовались ВКР лазеры с устойчивыми резонаторами, образованными сферическими входными зеркалами с радиусом кривизны 1500 мм и плоскими выходными зеркалами. Длины резонаторов составляли 18 см.

Эксперименты показали, что при ВКР преобразовании излучения с такой мощностью влияние тепловой линзы очень сильное. Как при генерации третьей стоксовой компоненты, так и при генерации первой стоксовой компоненты тепловая линза практически сразу же делала резонатор ВКР лазера неустойчивыми. При генерации третьей стоксовой компоненты, когда устойчивость резонатора является очень важным требованием из-за необходимости накопления в резонаторе излучений первой и второй стоксовых компонент, это привело к генерации излучения с выходной мощностью всего 0.35 Вт при мощности излучения накачки 33 Вт (рисунок 3а). При этом дальнейшее увеличение мощности накачки приводило к падению мощности третьей стоксовой компоненты. Расходимость этой компоненты составляла 4 мрад. При генерации первой стоксовой компоненты влияние тепловой линзы на среднюю мощность было менее значительным, что связано с втрое меньшим квантовым дефектом по сравнению с генерацией третьей стоксовой компоненты, а значит и меньшей оптической силой тепловой линзы. Кроме того, выходная мощность первой стоксовой компоненты менее чувствительна к устойчивости резонатора. В результате была достигнута выходная мощность 7 Вт при мощности накачки 60 Вт (рису-

нок 3б). Однако при этом тепловая линза и вызванная ей неустойчивость резонатора приводили к высокой расходимости генерируемого излучения – 200 мрад.

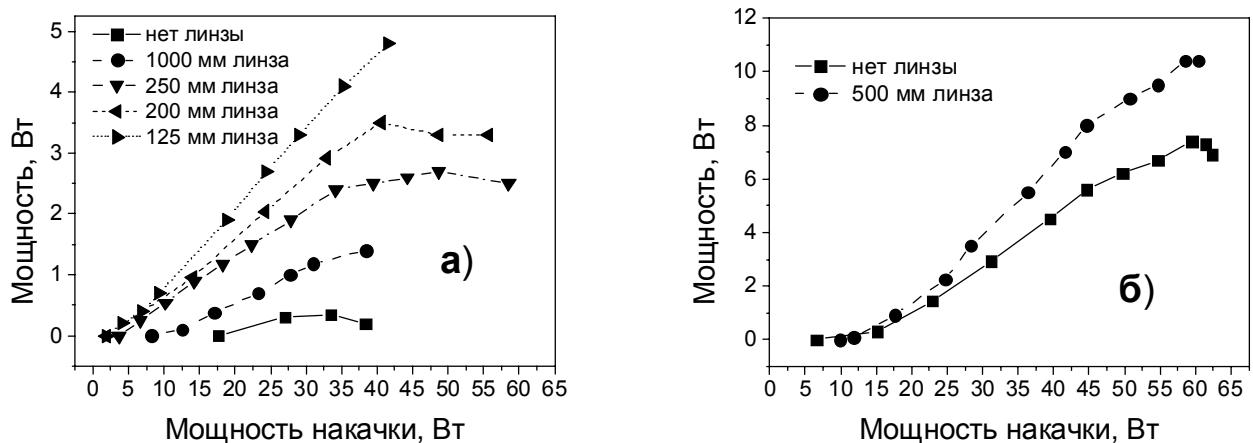


Рис. 3. Зависимости средней мощности излучения третьей стоксовой компоненты (а) и первой стоксовой компоненты (б) от средней мощности излучения накачки для разных фокусных расстояний компенсирующих линз.

Для того чтобы компенсировать отрицательную тепловую линзу в резонатор вносились положительные линзы. При генерации первой стоксовой компоненты была использована линза с фокусным расстоянием 500 мм. Это позволило повысить среднюю выходную мощность до 10 Вт (рисунок 3б, квантовая эффективность составила 20 %) и снизить расходимость до 0.2 мрад. При генерации третьей стоксовой компоненты тепловую линзу удалось компенсировать только при использовании линзы с фокусным расстоянием 125 мм. В результате выходная мощность третьей стоксовой компоненты достигла 5 Вт при мощности накачки 40 Вт (рисунок 3а, квантовая эффективность – 17 %). Расходимость этой стоксовой компоненты также составила 0.2 мрад.

Таким образом, в ходе работы были в основном решены проблемы, связанные с паразитной генерацией более высокой стоксовой компоненты и нагревом среды. Созданные в результате работы источники излучения могут найти различные применения, в частности для зондирования CO₂ газа и аэрозолей в атмосфере, для лазерной хирургии, для очистки произведений искусства.

Литература

1. С. Н. Карпухин, А. И. Степанов. Квантовая электроника **13**, 1572 (1986).
2. P. G. Zverev, T. T. Basiev, and A. M. Prokhorov. Optical Materials **11**, 335 (1999).
3. C. He and T. H. Chyba. Optics Communications **135**, 273 (1997).
4. N. Takei, S. Suzuki, and F. Kannari. Applied Physics B **74**, 521 (2002).

УСИЛЕНИЕ ВКР ИЗЛУЧЕНИЯ ПЕРВОЙ СТОКСОВОЙ КОМПОНЕНТЫ С МАЛОЙ РАСХОДИМОСТЬЮ В КРИСТАЛЛЕ НИТРАТА БАРИЯ

В. А. Лисинецкий

Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости 68, 220072 Минск, Беларусь, lisinetskii@gmail.com

Вынужденное комбинационное рассеяние (ВКР) – хорошо известный нелинейно-оптический эффект, используемый, как правило, для преобразования частоты лазерного излучения. В последнее время особенное внимание привлекает ВКР преобразование в кристаллических средах [1], поскольку такие среды обладают высокими коэффициентами ВКР усиления, хорошими термическими и механическими свойствами, что позволяет создавать компактные и эффективные преобразователи лазерного излучения на основе ВКР в кристаллах.

Для многих приложений (создание лидаров, дальномеров и т.п.) необходимо, чтобы преобразованное на ВКР излучение обладало как высокой энергией импульсов, так и низкой расходимостью. Ранее была показана возможность эффективной ВКР генерации импульсов с высокой энергией в ВКР лазере на кристалле нитрата бария [2]. Были получены импульсы первой стоксовой компоненты с энергией до 156 мДж при квантовой эффективности 66 %. Однако расходимость преобразованного излучения при этом была высокой (M^2 фактор превышения дифракционного предела составлял 15-20).

Альтернативным к ВКР генерации подходом, позволяющим получать преобразованные импульсы с высокой энергией, является ВКР усиление. В отличие от ВКР генерации, когда на комбинационно активную среду падает только возбуждающее излучение, а излучение первой стоксовой компоненты развивается от уровня спонтанных шумов, при ВКР усилении в среду направляется также и независимо сформированный поток излучения на длине волны первой стоксовой компоненты (излучение затравки). Это излучение может быть получено или в специально созданном ВКР генераторе или в обычном лазере с соответствующей длиной волны.

ВКР усиление было достаточно хорошо исследовано в газообразных комбинационно активных средах. Было показано, что если излучение затравки первой стоксовой компоненты является слаборасходящимся, то и усиленное излучение также имеет малую расходимость. Так, например, в газообразном водороде [3] было получено двухкаксадное ВКР усиление импульсов первой стоксовой компоненты с усилением, равным 20000 (энергия

усиленных импульсов достигала 0.6 Дж). M^2 фактор усиленного излучения составлял всего 1.1. Однако габариты такого ВКР усилителя были велики: размеры кювет с газообразным водородом составляли несколько метров. В настоящей работе мы показываем, что ВКР усиление в кристаллических средах длиной несколько сантиметров также позволяет получать импульсы с высокой энергией и низким значением M^2 фактора. В качестве комбинационно активной среды в данной работе был выбран кристалл нитрата бария, поскольку этот кристалл имеет очень высокий коэффициент ВКР усиления и поэтому является подходящей средой для создания эффективных компактных ВКР усилителей.

Экспериментальная схема представлена на рисунке 1. В качестве источника излучения накачки (1) использовался многомодовый коммерческий Nd:YAG лазер (модель Spes-traphysics DCR 3), работающий в режиме активной модуляции добротности на длине волны 1.064 мкм. M^2 фактор излучения накачки был равен 3. Длительность лазерных импульсов составляла 10 нс, частота следования – 20 Гц. Ширина спектральной линии была менее 0.8 см⁻¹. При помощи светоделителя (2) возбуждающее излучение разделялось на две части. Первая часть с энергией импульсов примерно 2 мДж направлялась в ВКР генератор, образованный фокусирующей линзой (3) (фокусная длина – 200 мм) и кристаллом нитрата бария (4) длиной 7 см. На торцы кристалла были нанесены антиотражающие покрытия. Линза фокусировала излучение накачки в центр кристалла. Довольно сильная фокусировка этого излучения обеспечивала малое число Френеля для ВКР генерации, благодаря чему излучение первой стоксовой компоненты было практически дифракционно-ограниченным (M^2 фактор был около 1.5). Пространственный профиль излучения затравки первой стоксовой компоненты представлен на рисунке 2. В экспериментах использовались два режима работы ВКР генератора. В первом энергия импульсов затравки первой стоксовой компоненты составляла 8 мкДж, а во втором – 190 мкДж.

Выходящее из генератора излучение первой стоксовой компоненты коллимировалось при помощи телескопа, состоящего из рассеивающей (6) и фокусирующей (7) линз. Затем это излучение при помощи селективных зеркал (8)-(11) отделялось от излучений истощенной накачки и второй стоксовой компоненты, совмещалось со второй частью возбуждающего излучения и направлялось в ВКР усилитель.

ВКР усилитель был выполнен на кристалле нитрата бария (17) длиной 7 см. Торцы кристалла были срезаны под углом Брюстера, что позволяло избежать обратной связи и вызванного этим снижения порога ВКР генерации в этом кристалле. Оптические пути для излучений затравки первой стоксовой компоненты и накачки в эксперименте были подобраны так, чтобы их импульсы хорошо перекрывались во времени. Пучки этих излучений в

ВКР усилителе были также пространственно совмещены.

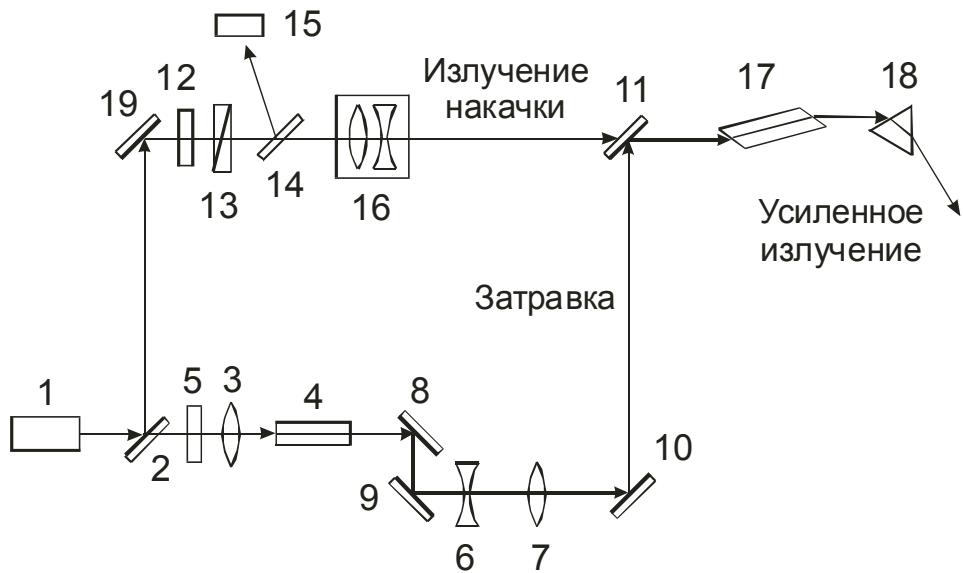


Рис. 1. Экспериментальная схема. 1 – Nd:YAG лазер, 2, 14 – светоделители, 3 – фокусирующая линза, 4, 17 – кристаллы нитрата бария, 5 – нейтральные фильтры, 6 – рассеивающая линза, 7 – собирающая линза, 8, 9, 10, 11 – селективные зеркала, 12 – полуволновая пластина, 13 – поляризатор, 15 – измеритель энергии, 16 – 2.5x телескоп, 18 – призма, 19 – зеркало.

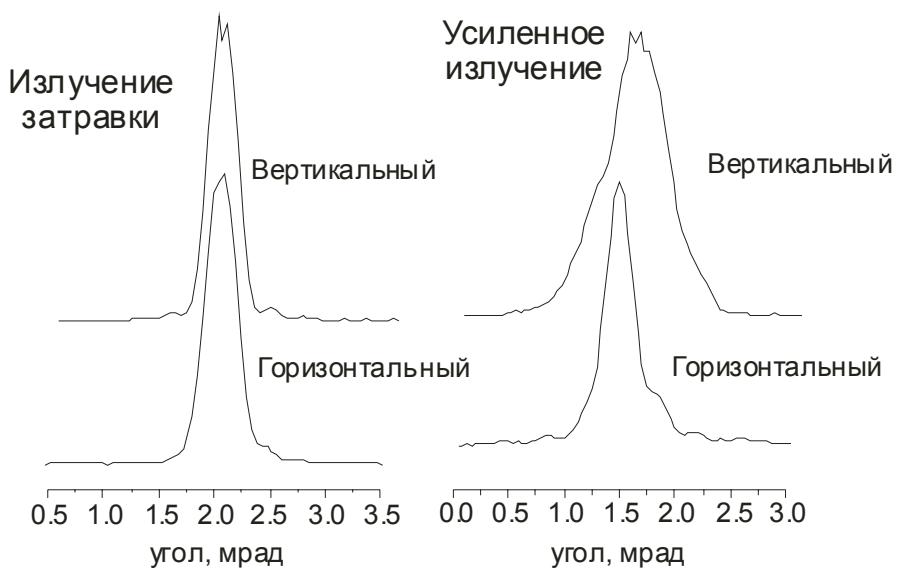


Рис. 2. Пространственные распределения излучения затравки и усиленного излучения.

Энергия импульсов накачки не превышала 215 мДж. Измерения показали, что переход ВКР усилителя в режим генерации наступал при энергии импульсов накачки в примерно 250 мДж. Поэтому в экспериментах происходило только ВКР усиление.

На рисунке 3а представлены зависимости усиления первой стоксовой компоненты (отношение энергии усиленных импульсов к энергии импульсов затравки) от энергии им-

пульсов накачки усилителя для импульсов затравки с энергиями 8 мкДж и 190 мкДж. Усиление импульсов с энергией 8 мкДж достигало 1600 при энергии накачки 215 мДж, а усиление импульсов с энергией 190 мкДж составляло 330 при энергии импульсов накачки 208 мДж. Меньшее усиление импульсов первой стоксовой компоненты с энергией 190 мкДж по сравнению с импульсами с энергией 8 мкДж связано с насыщением процесса ВКР усиления, вызванным истощением накачки. Действительно энергия усиленных импульсов при использовании затравки с энергией 190 мкДж в пять раз выше, чем при использовании импульсов затравки с энергией 8 мкДж. Зависимости энергий усиленных импульсов от энергии накачки представлены на рисунке 3б. Видно, что при использовании импульсов затравки с энергией 190 мкДж энергия усиленных импульсов составляет 63 мДж при энергии накачки 210 мДж, что соответствует эффективности преобразования 30 % (квантовая эффективность – 34 %). Для импульсов затравки с энергией 8 мкДж энергия усиленных импульсов составляла всего 14 мДж, а эффективность - 6 % (квантовая эффективность – 7 %).

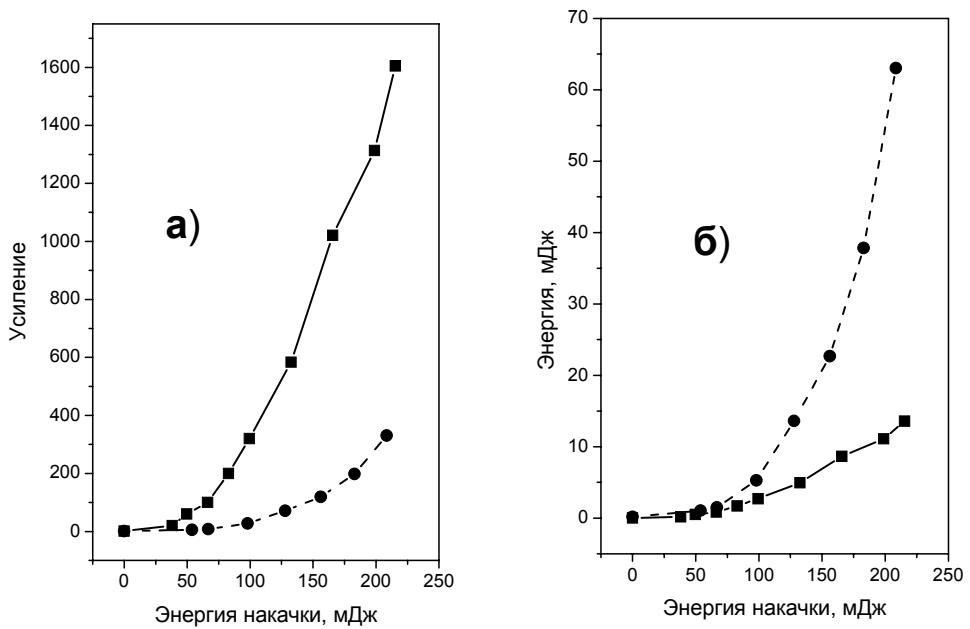


Рис. 3. Зависимости усиления первой стоксовой компоненты (а) и энергии усиленных импульсов (б) от энергии импульсов накачки. Квадраты соответствуют импульсам затравки с энергией 8 мкДж, круги импульсам с энергией 190 мкДж.

Истощение импульсов накачки из-за ВКР усиления, обуславливающее насыщения процесса усиления, было обнаружено экспериментально. Осциллограммы входного и выходного возбуждающих импульсов показали, что при энергии импульсов затравки 8 мкДж истощение накачки незначительно (рисунок 4), а при энергии импульсов затравки

190 мкДж это истощение довольно существенно.

Пучок усиленного излучения первой стоксовой компоненты был пространственно однородным (см. рисунок 2) как при использовании импульсов затравки с энергией 8 мкДж, так и с энергией 190 мкДж. M^2 фактор усиленного пучка составлял около 2.2, что существенно ниже, чем M^2 фактор излучений стоксовых компонент, получаемых за счет генерации в ВКР лазерах [2], и даже ниже чем M^2 фактор излучения накачки. Следовательно, при ВКР усилении в кристалле нитрата бария происходило улучшение качества пучка.

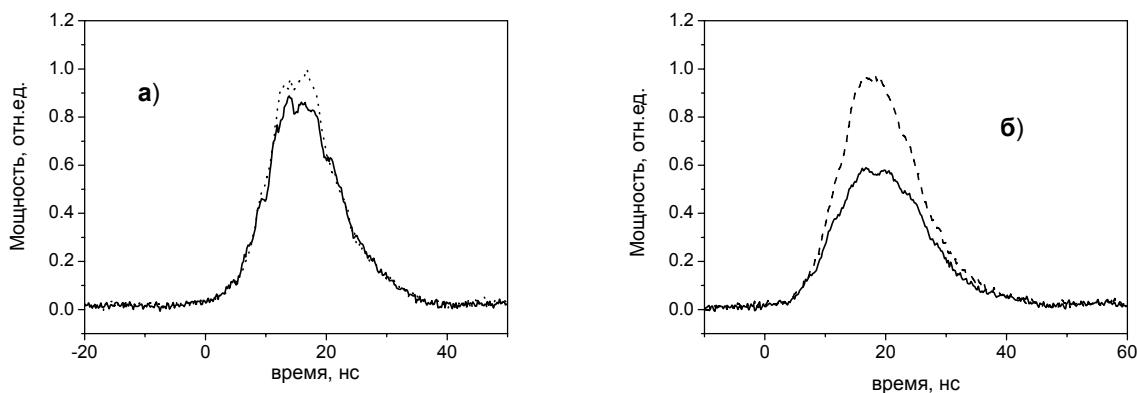


Рис. 4. Осциллограммы входящего в ВКР усилитель импульса накачки (штриховая линия) и импульса истощенной накачки (сплошная линия) для энергий импульсов затравки 8 мкДж (а) и 190 мкДж (б).

Таким образом, усиление ВКР в кристалле нитрата бария длинной 7 см позволило получить импульсы с энергией до 63 мДж, квантовой эффективностью до 34 % и малым значением M^2 фактора (2.2). Максимально достигнутое усиление составляло 1600. Наши оценки показывают, что использование второго каскада усиления ВКР позволит получить импульсы с энергией до 350 мДж при энергии импульсов накачки 500 мДж.

Литература

1. T. T. Basiev and R. C. Powell. Opt. Mat. **11**, 301 (1999).
2. V. A. Lisinetskii, A. S. Grabtchikov, I. A. Khodasevich, H. J. Eichler, and V. A. Orlovich. Opt. Commun. **272**, 509 (2007).
3. A. Mandl, R. Holmes, A. Flusberg, S. Fulghum, and D. Angeley. Journal of Applied Physics. **66**, 4625 (1989).

ЛАЗЕРНЫЙ СПЕКТРАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ СТРОИТЕЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ЦЕМЕНТА

В. Ю. Гуринович¹, В. В. Кирич²

¹*Белорусский национальный технический университет
просп. Независимости 65, 220013 Минск, Беларусь, тел. 265-96-88, lldp@imaph.bas-net.by*

²*Институт физики им. Б.И.Степанова, НАН Беларуси,
просп. Независимости 68, 220072 Минск, Беларусь*

Практически все строительные конструкции, подвержены «старению», то есть происходит изменение их прочностных характеристик, которое отражается на работе конструкций. Скорость «старения» во многом зависит от воздействия агрессивных факторов, наиболее значимыми из которых являются, хлоридная и сульфатная коррозия арматуры, а также карбонизация цементного камня [1]. Определение данных компонент в строительных материалах до последнего десятилетия осуществлялось сравнительно трудоемкими химическими методами с механическим отбором пробы и длительной пробоподготовкой, связанной с необходимостью полного растворения анализируемого материала. Поэтому, разработка и внедрение в аналитическую практику новых экспрессных инструментальных методов материаловедческой экспертизы является весьма перспективной задачей. Данному критерию наиболее полно удовлетворяют методы лазерного спектрального анализа (ЛСА), они практически не требуют пробоподготовки и позволяют проводить анализ в режиме реального времени.

К настоящему времени имеется ряд работ по определению хлора и серы в строительных материалах методом ЛСА [2,3]. Однако при воздействии лазерного импульса на исследуемый объект в нормальных атмосферных условиях, предел определения данных элементов лежит выше предельно допустимых концентраций, регламентируемых нормативными актами. Поэтому, в работах [2,3] использовалась обдувка точки поражения образца потоком гелия, что приводило к увеличению интенсивности спектральных линий хлора и серы. Однако такой подход связан с постоянным расходом гелия, что усложняет технику эксперимента, повышает стоимость измерений и снижает практическую привлекательность данного метода.

В связи с вышесказанным был предложен и апробирован комбинированный лазерно-электроискровой спектральный метод экспрессного определения хлора, серы и углерода в материалах на основе цемента. Возбуждение спектров и повышение их интенсивности проведено при наложении на лазерный абляционный факел импульсного электрического разряда.

Схема экспериментальной установки приведена на рисунке 1. Основные параметры следующие: длина волны генерации лазера – 1064 нм, энергия в импульсе – 0,19 Дж, стабильность энергии – $\pm 3\%$, длительность импульсов – 7-8 нс, расходимость пучка $< 0,8$ мрад. Излучение лазера фокусировалось короткофокусной ($f=50$ мм) линзой на поверхность образца, помещаемого на подвижный столик, обеспечивающий возможность смещения образца по всем трем направлениям.

Над мишенью на расстоянии 1 мм располагались остия электродов из вольфрамовой проволоки диаметром сечения 0,8 мм. Абляционный факел замыкал электродный промежуток, что приводило к разряду низкоиндуктивного конденсатора К75-30 емкостью 1 мкф, заряженного до 2,5 кВ.

В схеме использовался светосильный, относительное отверстие – 1:4,9, фокусное расстояние – 380 мм, спектрограф, с дифракционной решеткой – 600 штр/мм, что обеспечивает обратную линейную дисперсию – 4,3 нм/мм и одновременную регистрацию спектрального интервала – 120 нм. Спектрограф оснащен ПЗС линейкой Toshiba1205D, имеющей 2048 светочувствительных пикселей и 12-ти разрядным аналого-цифровым преобразователем, область спектральной чувствительности линейки (по уровню 0,1) – 200-1060 нм.

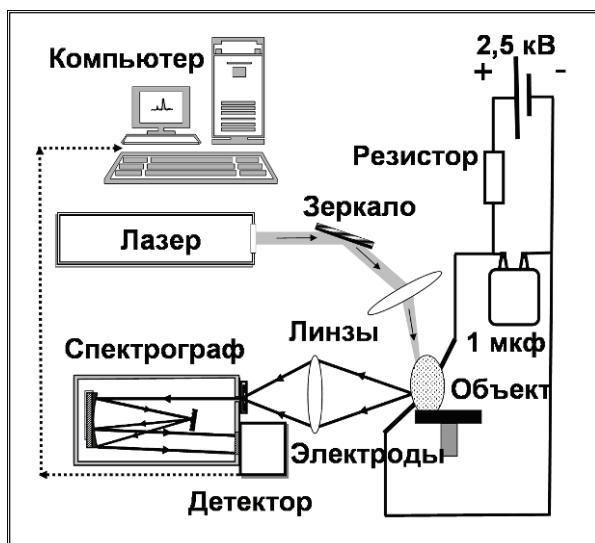


Рис. 1. Схема установки.

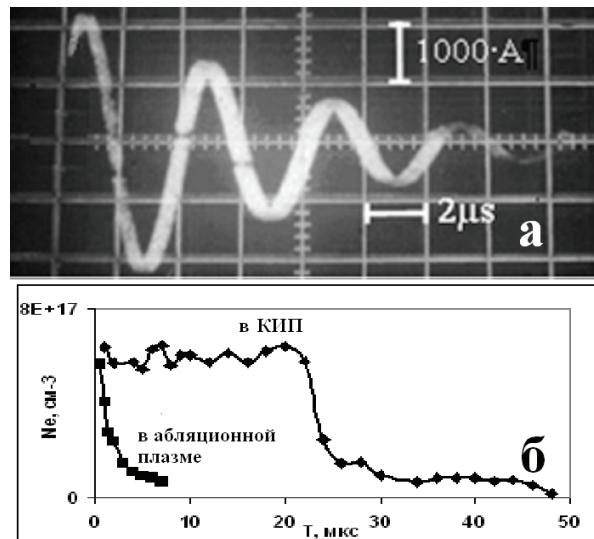


Рис. 2. Оциллограмма тока (а) и изменение концентрации электронов во времени (б).

Несмотря на низкую $\sim 0,4$ мкГн индуктивность разрядного контура, наблюдается колебательный характер разряда рисунок 2а, вследствие низкого $\sim 0,15$ Ом сопротивления разрядного промежутка. Поскольку энергия электрического разряда более чем в 10 раз превышает энергетику лазерного импульса, наблюдается значительно увеличение времени

распада комбинированной импульсной плазмы (КИП) по сравнению с аблационной плазмой рисунок 2б. Это обеспечивает приблизительно постоянное (в пределах допустимой погрешности эксперимента) в среднем 11-кратное усиление аналитического сигнала. Увеличение времени свечения плазмы при наложении электрического разряда приходится признать, по-видимому, основной причиной усиления регистрируемых спектров, т.к. существенного увеличения температуры КИП по сравнению с аблационной плазмой не наблюдается.

Анализ возможности качественного и количественного контроля выполнен с помощью искусственно приготовленных в лаборатории эталонных образцов. Исходными компонентами были: портландцемент марки 500, песок мелкозернистый и дистиллированная вода, для анализа хлора вводилась поваренная соль, а для анализа серы – гипс. Углекислый газ, содержащийся в атмосфере, в присутствии влаги, вступает в реакцию, с продуктами гидратации портландцемента, поэтому содержание его в образцах измерялось после их застывания методом сухого сжигания.

В диапазоне концентраций, характерном для возможного на практике накопления вышеупомянутых компонент в бетонах, практически правомерно построение линейных зависимостей при возбуждении вещества в комбинированном разряде. На рисунке 3 приведен калибровочный график для хлора.

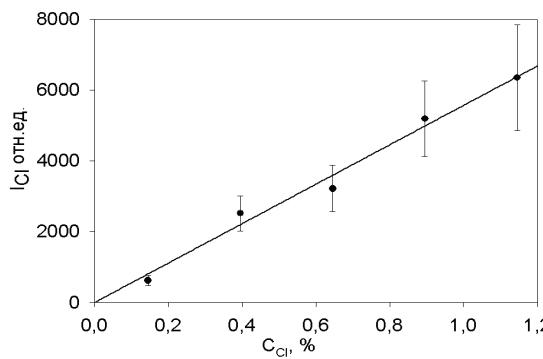


Рис. 3. Калибровочная зависимость для хлора в комбинированном разряде.

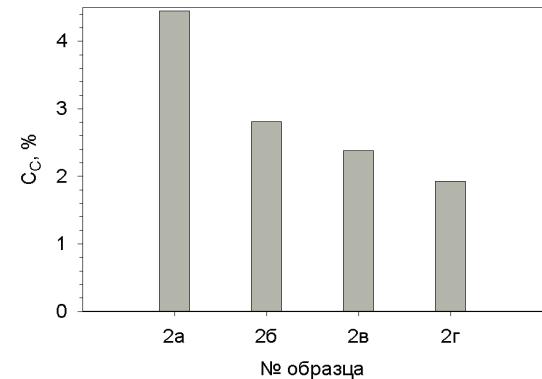


Рис. 4. Гистограмма распределения углерода в образцах из Новоселья

Установленные согласно критерию $2\sigma/k$ пределы определения трудновозбудимых химических элементов в изделиях на основе цемента, вызывающих интенсивную коррозию металлической арматуры и разрушение цементного камня, составляют для хлора 0,05%, для серы 0,15% и 0,07% для углерода, что позволяет регистрировать данные компоненты на уровне ниже, чем ПДК.

При помощи данного метода была проведена экспертиза цементного камня разрушившихся опор водонапорных башен. На местах обрушения были отобраны следующие образцы:

башня в Новоселье – 1а (наружная боковая поверхность разрушенной опоры), 1б (подповерхностный слой на глубине 1-2 см), 1в (слой на расстоянии 1-2 см от арматурного стержня), 1г (слой, непосредственно примыкающий к арматурному стержню);

башня в Лошанах – 2а (наружная боковая поверхность разрушенной опоры), 2б (подповерхностный слой на глубине 1-2 см), 2в (слой на расстоянии 1-2 см от арматурного стержня), 2г (слой, непосредственно примыкающий к арматурному стержню).

По результатам анализа гипотеза локальной хлоридной и/или сульфатной коррозии металлической арматуры оказалась несостоятельной. Экспериментальные данные свидетельствуют, что во всех отобранных образцах концентрации хлора и серы невелики. Наибольшая регистрируемая концентрация элементов наблюдается в образце 2б на уровне 0,14 % (хлор) и в образце 2г – 0,43 % (серы). Такие концентрации свидетельствуют о том, что хлоридной и/или сульфатной коррозией можно пренебречь.

Другая возможная причина разрушения опор, которая проверялась нами, была так называемая карбонизация – т.е. процесс поглощения углекислого газа из внешней среды продуктами гидратации портландцемента. Данный процесс сопровождается, в частности, усадкой бетона, т.к. новообразования в цементном камне стремятся кристаллизоваться в ненапряженные состояния. Измеренные концентрации углерода во всех образцах оказались аномально высокими [4], достигающими почти 4,5 % по массе бетона рисунок 4, причем четко прослеживается нарастание концентрации от наружной поверхности к центру опоры для обеих обрушившихся башен. Таким образом, наиболее вероятным процессом, приведшим к разрушению опор является карбонизация бетона.

Литература

1. С.Н.Алексеев, Ф.М.Иванов, С.Модры, П.Шиссль. Долговечность железобетона в агрессивных средах, Москва, 1990.
2. H. Wiggenhauser, G. Wilsch, D. Schaurich, J. Wustmann. INSIGNT, 42, 436 (2000).
3. G. Wilsch, D. Schaurich, F. Weritz. Spectrochimica Acta Part B 62, 1504 (2007).
4. Christian J. Engelsen, Jacob Mehus, Claus Pade and Dag Henning Sæther. Carbon dioxide uptake in demolished and crushed concrete, Oslo, 2005.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОБЩЕГО СОДЕРЖАНИЯ УГЛЕРОДА В ПОЧВАХ СОВРЕМЕННЫМИ МЕТОДАМИ ЛАЗЕРНОГО СПЕКТРАЛЬНОГО АНАЛИЗА

В. В. Кирис

*Институт физики им. Б. И. Степанова, НАН Беларуси, пр. Независимости 68, 220072
Минск, Беларусь, тел. 284-10-19, lldp@imapr.bas-net.by*

Данные о содержании органического вещества в почве (гумуса) являются одним из главных показателей плодородия. Поскольку анализ структуры и содержания той или иной составной органической части образца практически невозможен из-за сложности процедуры, то объективное представление об органическом веществе могут составить данные о валовом содержании углерода [1].

Самым распространенным методом определения органического углерода в почве является метод определения бихроматной окисляемости (ГОСТ 26213-91). Нужно отметить, что данная процедура весьма длительная, трудоемкая и определению углерода мешают хлориды, которые надо учитывать или маскировать сульфатом серебра. На результаты анализа может, при определенных обстоятельствах, влиять наличие в пробах окиси марганца и солей двухзарядного железа [1].

Поэтому, в данной работе стояла задача экспериментальной проверки возможностей двух современных методов лазерного спектрального анализа (ЛСА), лишенных данных недостатков, [2,3] для определения содержания углерода в почвах. Первый метод – пробой лазерной плазмой импульсного электрического разряда у поверхности анализируемого материала. Второй метод – более традиционный вариант – двухимпульсная абляция материала.

При реализации двухимпульсного метода использовался лазерный спектральный анализатор с дифракционным спектрографом (фокусное расстояние – 1000 мм, относительное отверстие – 1:20). С дифракционной решеткой 1800 штр./мм, при входной щели 60 мкм (определялась диаметром световода) спектральное разрешение составляло 0,025 нм. Рабочая спектральная область – 239-340 нм, в качестве аналитической – линия СI 247,85 нм, данная линия наиболее интенсивная в доступном спектральном диапазоне согласно [4].

Блок возбуждения – частотный двухимпульсный АИГ:Nd³⁺ лазер со следующими параметрами: длина волны излучения – 1064 нм, энергия в обоих импульсах была одинаковой (50 мДж), частота импульсов – 10 Гц, их длительность – 10 нс, интервал между им-

пульсами составлял 8 мкс. Объект анализа располагался на столике с перемещением по координатам XYZ и микроскопическим контролем точки поражения лазерным излучением. Характерный спектр двухимпульсной лазерной плазмы представлен на рисунке 1.

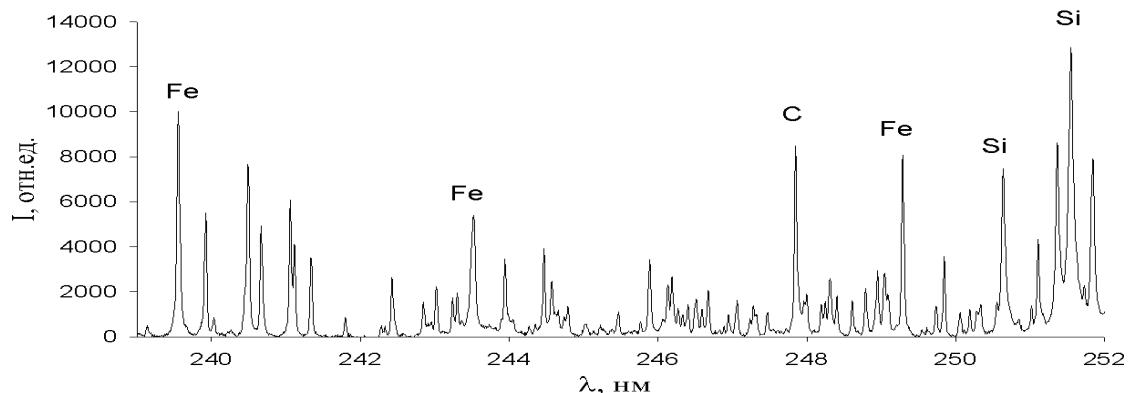


Рис. 1. Участок спектра излучения двухимпульсной лазерной плазмы в диапазоне 239-252 нм, содержащий аналитическую линию углерода СI 247,86 нм.

В варианте комбинированной импульсной плазмы (КИП) использовался лазер фирмы Lotis TII (модель LS 2134U) при следующих основных параметрах: λ – 1064 нм, Е – 0,18 Дж и t – 8 нс. Излучение лазера фокусировалось линзой ($F=50$ мм) на поверхность мишени с обеспечением плотности мощности в пятне поражения $(2\text{-}3)\cdot10^{11}$ Вт/см².

Над мишенью на расстоянии 1,5 мм располагались острия электродов из меди. Абляционный факел замыкал электрическую цепь, содержащую малоиндуктивный конденсатор емкостью 1 мкф, заряженный до напряжения 4 кВ; наблюдался затухающий характер разряда с условным периодом 4 мкс. Размеры образующегося плазменного облака при наложении электрического разряда существенно превышают размеры абляционной плазмы по сравнению с воздействием на мишень только лазерного импульса (рис. 2).

Облако КИП с помощью линзы ($F=61$ мм) отображалось в масштабе 1:1 на входной щели полихроматора с дифракционной решеткой 600 штр/мм, относительным отверстием 1:4,9 и фокусным расстоянием 380 мм. Рабочая ширина входной щели полихроматора составляла 20 мкм. Ширина аппаратной функции на половине высоты, измеренная по линии 632,8 нм, составляла 0,06 нм. Спектр регистрировался оптическим многоканальным анализатором («Орминс», Беларусь). В качестве аналитической была выбрана линия СI 833,51 нм.

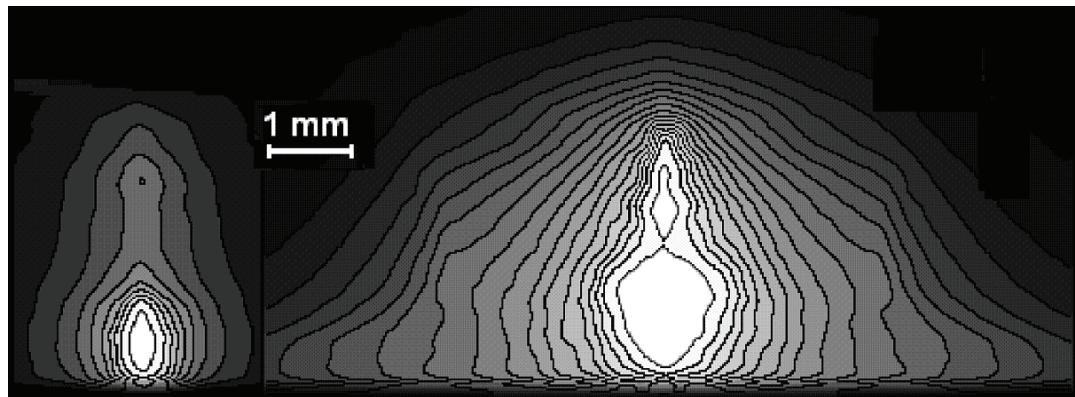


Рис. 2. Изображения эрозионной плазмы (левое) и плазмы комбинированного импульсно-разряда (правое, ослаблено втрое).

Образцы почвы для построения калибровочной зависимости подбирались, с различных земельных участков с целью получения широкого диапазона концентраций углерода в образцах с различной основой (песок, глина). Отобранные почвы гомогенизировались и анализировались на С-Н-Н-О-С анализаторе Vario EL методом сухого сжигания. Оставшиеся части проб прессовались под давлением 200-250 атмосфер в форме таблеток диаметром – 17 мм, толщиной – 4-5 мм.

С целью уменьшения влияния неоднородности изготовленных проб, измеряемые интенсивности аналитической линии усреднялись по 30 лазерным импульсам, произведенным в различных точках таблетки. В методе КИП измерялась интегральная интенсивность эмиссионной линии над уровнем фона; при двухимпульсной аблации измерялась площадь контура Гаусса, которым аппроксимировался контур аналитической линии. Для учета наложения на аналитическую линию углерода СI 247,85 нм линии железа FeI 247,85 нм, измерялась площадь соседней линии железа FeI 247,07 нм с того же верхнего энергетического уровня, и производился пересчет интегральной интенсивности аналитической линии углерода с учетом вероятностей переходов обоих линий железа, взятых из базы данных [4].

Калибровочные зависимости для определения общего содержания углерода представлены на рисунках 3 и 4, соответственно, для случая эрозии вещества и возбуждения спектров с двойными лазерными импульсами и комбинированной импульсной плазмой. Нижний предел измерения концентрации углерода, оцененный по уровню $3\sigma/k$, равен 0,07 % для обоих методов, где σ – дисперсия шумов детектора, k – коэффициент наклона калибровочного графика.

Причину наличия отсечки на оси интенсивностей при продолжении прямолинейного калибровочного графика нужно отнести, очевидно, к фактору наличия самопоглощения на

определенных стадиях развития плазмы [5], т.к. при использовании системы регистрации типа CCD отсутствует временное разрешение.

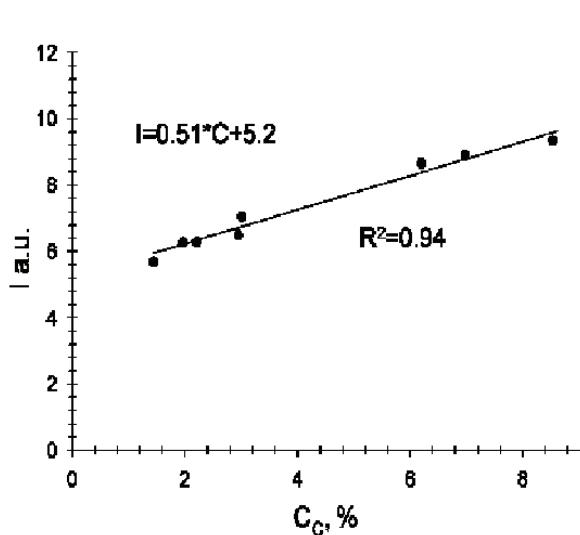


Рис. 3. Калибровочная зависимость, по-
строенная по линии CI 247.86 нм.

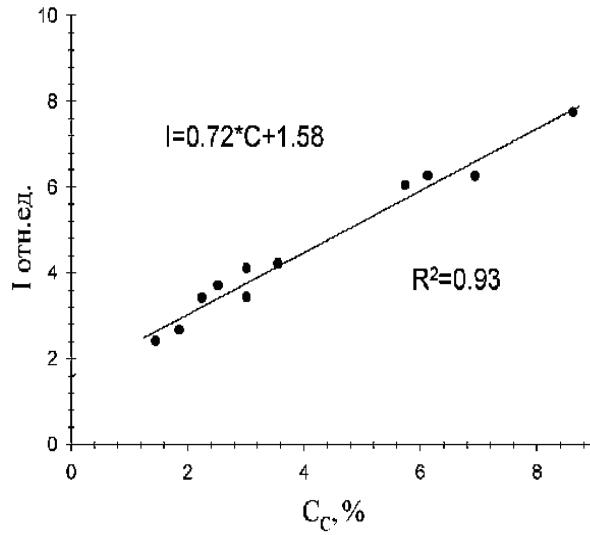


Рис. 4. Калибровочная зависимость, по-
строенная по линии CI 833.51 нм.

При отмеченной особенности хода калибровочных графиков их нужно признать вполне удовлетворительными для аналитических целей в исследованном диапазоне концентраций важном для практического применения.

Одновременно с определением углерода на спектрометре с двойными лазерными импульсами велась регистрация спектральных линий ряда питательных микроэлементов, а также свинца в почве (табл.).

Табл. Относительные интенсивности спектральных линий микроэлементов в исследуемых образцах почвы.

Концентрация C _С (%)	1,45	1,97	2,21	2,95	3,01	6,14	6,97	8,62
Fe 273,96 нм	1,00	0,54	0,81	0,90	0,44	0,53	0,52	0,53
Al 308,22 нм	1,00	0,49	0,54	0,72	0,42	0,34	0,53	0,52
Mg 285,21 нм	1,00	0,43	0,60	0,70	0,380	0,37	0,60	0,52
Mn 260,57 нм	0,95	0,84	1,000	0,82	0,48	0,62	0,58	0,52
Ca 315,89 нм	0,62	0,38	0,39	0,49	0,37	1,00	0,83	0,43
Si 298,76 нм	1,00	0,60	0,60	0,77	0,42	0,40	0,34	0,60
Pb 283,31 нм	0,60	0,00	0,00	0,00	0,00	1,00	0,00	0,00
Cu 324,75 нм	0,28	0,41	0,48	0,83	0,44	1,00	0,43	0,94
Zn 328,23 нм	0,00	0,00	1,00	0,00	0,48	0,44	0,34	0,00
Ti 335,62 нм	1,00	0,65	0,84	0,78	0,56	0,36	0,42	0,41
K 769,9 нм	0,37	0,92	0,49	0,92	1,0	0,52	0,64	0,57

В работе была установлена возможность определения полного содержания углерода

в почвах методами КИП и двухимпульсного ЛСА, что важно для возможного практического применения ЛСА, имеющего ряд преимуществ по сравнению с традиционными методиками. Обе методики демонстрируют примерно одинаковый предел определения содержания углерода и точность. Метод двухимпульсного ЛСА обладает достаточной чувствительностью для регистрации линий большинства микроэлементов на уровне концентраций характерных для почв.

Литература

1. G. Kerven, N. Menzies, M. Geyer. Communications In Soil Science And Plant Analysis 31, 1935 (2000).
2. D. Cremers, M. Ferrism, M. Davies. SPIE, 2835, 190 (1996).
3. M.H. Ebinger, M. Lee Norfleet, D.D. Breshears, D.A. Cremers, M.J. Ferris, M.S. Lamb, K.L. Goddard, C.W. Meyer. Soil Sci. Soc. Am. J. 67, 1616 (2003).
4. <http://cfa-www.harvard.edu/amp/ampdata/kurucz23/sekur.html>
5. V. Lazic, R. Barbini, F. Colao, R. Fantoni, A. Palucci. Spectrochim. Acta Part B, 56, 807 (2001).

ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ РАСТВОРОВ ОРГАНИЧЕСКИХ КРАСИТЕЛЕЙ ПРИ ОРИЕНТАЦИОННОЙ РЕЛАКСАЦИИ РАСТВОРИТЕЛЯ

А. Н. Козловский¹, И. А. Дремук²

¹Белорусский Государственный Университет, просп. Независимости 4, 220050, Минск,
Беларусь, Kozlovski.bsu@gmail.com

²Барановичский государственный университет, инженерный факультет, кафедра
информационных технологий и безопасности жизнедеятельности, ул. Королика 8,
225409, Барановичи, Беларусь

Процессы межмолекулярной релаксации играют важную роль в фотофизических явлениях, происходящих в растворах сложных органических молекул, и оказывают существенное влияние на формирование их спектрально-люминесцентных характеристик. Характер релаксационных процессов и скорость их протекания в случае большой интенсивности возбуждения определяются соотношением между средним временем пребывания молекулы в основном τ_g и возбужденном τ_e состояниях, постоянной времени релаксации τ_r , а также длительностью воздействия на систему мощным оптическим излучением t_{ex} [1]. При этом, варьируя интенсивность, длительность и спектральный состав возбуждающего излучения, можно менять параметры релаксации в широких пределах, а, следовательно, и оптические свойства растворов [2].

Согласно [1 – 4] могут быть реализованы четыре основных случая соотношения между величинами τ_g , τ_e , τ_r и t_{ex} :

- 1) полная релаксация в основном и возбужденном состояниях – $\tau_r \ll \tau_g, \tau_e$;
- 2) полная релаксация в основном и частичная в возбужденном состоянии – $\tau_e < \tau_r < \tau_g$;
- 3) полная релаксация в возбужденном и частичная в основном состояниях – $\tau_g < \tau_r < \tau_e$;
- 4) частичная релаксация в основном и возбужденном состояниях – $\tau_e \sim \tau_r \sim \tau_g$.

В первых двух случаях влияние релаксации на спектрально-кинетические параметры флуоресценции практически не зависит от интенсивности возбуждающего излучения, если не принимать во внимание другие нелинейные процессы, протекающие в ансамблях сложных органических молекул. В третьем случае (полная релаксация в возбужденном и частичная в основном) увеличение плотности мощности возбуждающего излучения приводит к уменьшению τ_g , т. е. препятствует релаксации в основном состоянии, что должно приводить к длинноволновому смещению спектра поглощения [4], такого рода эффекты описаны в работах [3, 4]. В четвертом случае происходит частичная релаксация в основ-

ном и возбужденном состояниях. Поэтому большинство переходов в поглощении и испускании совершаются с неравновесных уровней, что создает предпосылки для наблюдения вынужденной (ступенчатой) межмолекулярной релаксации, впервые описанной в [2]. Принципиальным отличием этой работы от тех, которые были сделаны ранее, является учет изменения оптической плотности раствора на частоте возбуждающего излучения. Остановимся на этом случае более подробно.

Расчеты будем проводить согласно следующей модели. Зададим спектры поглощения и флуоресценции. Будем считать, что величина реактивного поля в основном и возбужденном состояниях, когда релаксация полностью завершилась, пропорциональна величине дипольного момента молекулы активатора в соответствующем электронном состоянии:

$$E_{\infty}^{g(e)} = \alpha \mu_{g(e)}. \quad (1)$$

Здесь, $E_{\infty}^{g(e)}$ – реактивное поле, когда молекула активатора находится в S_0 (S_1) состояниях; $\mu_{g(e)}$ – дипольный момент молекулы активатора в S_0 (S_1) состояниях; α – коэффициент пропорциональности.

В расчетах будем полагать, что величина дипольного момента молекулы активатора в основном и возбужденном состоянии соответствует значениям, которые характерны для 3-амино-*N*-метилфталимида (классический объект в спектроскопии межмолекулярных взаимодействий): $\mu_g = 2.6$ D и $\mu_e = 5.2$ D. Расчеты будем проводить в приближении отсутствия флуктуаций энергии межмолекулярных взаимодействий, а также в предположении дебаевской модели ориентационной релаксации. Согласно [1], зависимость частоты 0-0-перехода в поглощения (испускания) при релаксационном смещении спектра от времени может быть записана в следующем виде:

$$\nu^{a(f)}(t) = \nu_{\infty}^{a(f)} + (\nu_0^{a(f)} - \nu_{\infty}^{a(f)}) \cdot \exp\left(-t/\tau_r^{g(e)}\right), \quad (2)$$

где $\nu_0^{a(f)}$ – частоты 0-0-переходов для спектров в поглощении (испускании) в момент времени $t = 0$; $\tau_r^{g(e)}$ – время ориентационной релаксации растворителя, когда активатор находится в основном (возбужденном) состоянии; ν_{∞}^a и ν_{∞}^f – частоты 0-0-перехода, соответствующие полностью отрелаксированным спектрам в поглощении и испускании.

В предположении (1) можно записать выражение для эволюции величины реактивного поля во времени:

$$\frac{E^{g(e)}(t) - E_\infty^{g(e)}}{E_0^{g(e)} - E_\infty^{g(e)}} = \exp\left\{-\frac{t}{\tau_r^{g(e)}}\right\}. \quad (3)$$

Зададим величину релаксационного сдвига $2\ 000\ \text{см}^{-1}$:

$$v_0^f - v_\infty^f = \Delta v_\infty^a - \Delta v_\infty^f = \alpha(\mu_e - \mu_g)^2. \quad (4)$$

Здесь $\Delta v_\infty^{a(f)}$ – величина сдвига спектра в поглощении и испускании, соответственно.

Таким образом, процедура расчета заключается в следующем. Сразу отметим, что аналитического решения данной задачи не существует, т.к. в процессе релаксационного смещения спектра изменяется сечение поглощения активатора, которое влияет на процесс ступенчатой релаксации. Расчет будем проводить на основании методов статистического моделирования. Временной интервал разобьем на отрезки δt таким образом, чтобы величина δt была много меньше времени жизни молекул активатора в возбужденном S_1 -состоянии, а также временем ориентационной релаксации $\tau_r^{g(e)}$ и величины $1/b$.

$$\delta t \ll \tau_f, \delta t \ll \tau_r^{g(e)}, \delta t \ll 1/b. \quad (5)$$

Здесь b – константа скорости поглощения, которая определяется следующим образом:

$$b = \sigma(v_{ex}) \cdot I_{ex}, \quad (6)$$

где $\sigma(v_{ex})$ – сечение поглощения на частоте возбуждающего излучения, I_{ex} – плотность мощности возбуждающего излучения.

В этом случае приближенно можно записать, что вероятности соответствующих электронных переходов за интервал времени δt определяются следующим образом:

$$P_{01} = b \cdot \delta t, \quad P_{10} = \delta t / t_f. \quad (7)$$

Здесь P_{01} и P_{10} – вероятности переходов молекул $S_0 \rightarrow S_1$ и $S_1 \rightarrow S_0$, соответственно.

Расчеты начнем со случая, когда возбуждение осуществляется импульсом света прямоугольной формы (по времени) длительность которого много больше, чем $\tau_r^{g(e)}$. Положим, что в момент времени $t = 0$ (включение возбуждающего излучения) молекула находится в основном S_0 -состоянии, а величина реактивного поля соответствует полностью отрелаксированному состоянию сольвата – молекула активатора и ближайшие молекулы растворителя $E(t = 0) = E_\infty^g$. Далее определяем константу скорости поглощения, которая зависит от интенсивности возбуждения и положения спектра поглощения (в процессе ступенчатой релаксации спектр поглощения смещается в низкочастотную область). Вычисля-

ем вероятность P_{01} перехода молекулы в возбужденное состояние за временной интервал δt и на основании величины P_{01} проверяем произошло ли событие (переход молекулы на электронный уровень S_1). Если переход произошел, считается, что молекула находится в S_1 состоянии и в течение каждого момента времени δt с вероятностью P_{10} может вернуться в основное электронное состояние. Во время нахождения молекулы в S_1 состоянии происходит релаксационное изменение реактивного поля, которое описывается выражением (3). Причем в выражении (3) E_0^e соответствует значению реактивного поля в момент поглощения молекулой фотона $E^g(t = t_{abs})$. После возвращения молекулы в основное состояние начинается ориентационная релаксация растворителя в S_0 , которая описывается выражением (3), однако в этом случае $E_0^g = E^e(t = t_{em})$, где t_{em} – момент времени испускания фотона. Повторяя указанную процедуру многократно: поглощение $\xrightarrow{\text{релаксация}}$ испускание $\xrightarrow{\text{релаксация}}$ поглощение рассчитывается эволюция изменения реактивного поля, а, следовательно, и сдвигов спектров поглощения и испускания во времени для одной из молекул. Результаты таких расчетов усреднялись по множеству молекул в растворе.

На рисунке 1 приведены спектры поглощения (кривая 1) и флуоресценции (кривая 2) в момент ступенчатого включения возбуждающего излучения ($\nu_{ex} = 19\ 800\ \text{см}^{-1}$), а также спектры поглощения и флуоресценции по прошествии времени $30\tau_f$ (кривые 3, 4). Видно, что как спектр флуоресценции, так и спектр поглощения претерпевают низкочастотный сдвиг с течением времени.

Динамика изменения положения максимума спектра поглощения во времени приведена на рисунке 2. При малой интенсивности возбуждающего излучения спектр поглощения практически не смещается во времени (кривая 1). При увеличении интенсивности возбуждения наблюдается низкочастотное смещение спектра (кривые 2, 3), причем при больших интенсивностях возбуждения возрастает как амплитуда смещения спектра, так и скорость этого смещения (кривые 2 и 3). Следует отметить, что с течением времени возрастает константа скорости поглощения, причем возрастание более заметно при больших интенсивностях возбуждающего излучения. Возрастание константы скорости поглощения обусловлено тем, что частота возбуждения приходится на красный край спектра поглощения. В результате при низкочастотном смещении спектра поглощения наблюдается возрастание константы скорости поглощения.

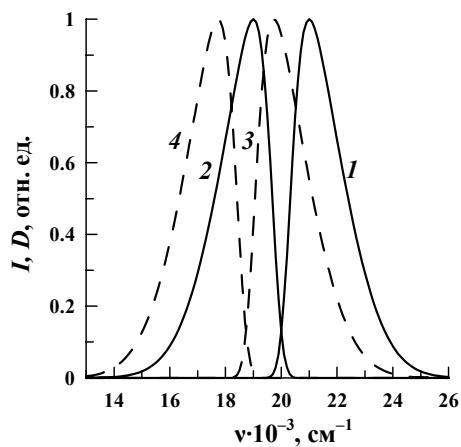


Рис. 1. Спектры поглощения (1, 3) и флуоресценции (2, 4); (1, 2) – $t = 0$, (3, 4) – $t/\tau_f = 30$.

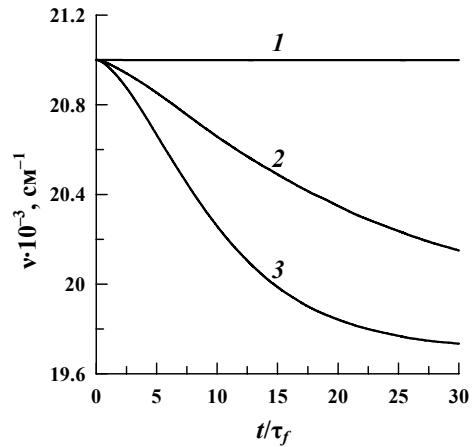


Рис. 2. Зависимости положения максимума спектра поглощения от времени: (1) – $b_0 \cdot \tau_f = 0.033$, (2) – 3.33, (3) – 6.66. $v_{ex} = 19800 \text{ см}^{-1}$

При возбуждении импульсом света, зависимость интенсивности от времени которого представлена на рисунке 3, наблюдается немонотонное смещение спектра поглощения во времени (рисунок 4). Причем смещение спектра имеет большую амплитуду при возбуждении на низкочастотном крае спектра.

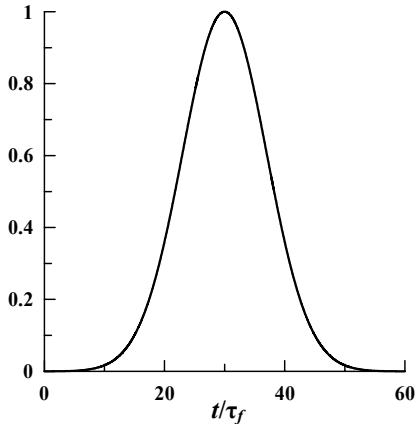


Рис. 3. Зависимость интенсивности возбуждающего импульса от времени.

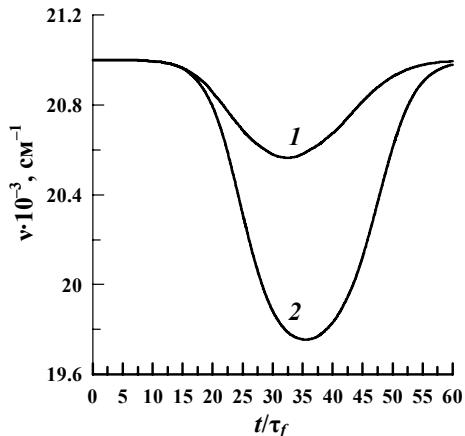


Рис. 4. Зависимости положения максимума спектра поглощения от времени при $b_0 \cdot \tau_f = 6.67$, $\tau_r^g = \tau_r^e = 3 \tau_f$: (1) – $v_{ex} = 23900 \text{ см}^{-1}$, (2) – 19350 см^{-1}

Литература

1. Н. Г. Бахшиев. Спектроскопия межмолекулярных взаимодействий, Ленинград, 1972.
2. О. П. Гирин. Изв. АН СССР. Сер. физ. **42**, 550 (1978)
3. О. П. Гирин, Н. Г. Бахшиев. Опт. и спектр. **60**, 418 (1986)
4. Н. Г. Бахшиев, Е. С. Воропай, В. А. Гайсенок. Опт. и спектр. **50**, 1117 (1981)

СИГНАЛЫ ОДНОИМПУЛЬСНОГО ЯДЕРНОГО ЭХА В МАГНИТОУПОРЯДОЧЕННЫХ СРЕДАХ В НЕРЕЗОНАНСНЫХ УСЛОВИЯХ ВОЗБУЖДЕНИЯ

В. С. Кузьмин¹, В. М. Колесенко², Е. П. Борботко¹

¹*Международный государственный экологический университет им. А.Д. Сахарова, ул. Долгобродская 23, 220009 Минск, Беларусь, vskuzm@iseu.by*

²*ГНПО «Научно-практический центр НАН Беларусь по материаловедению», ул. П. Бровки 19, 220072 Минск, Беларусь, koles@iftp.bas-net.by*

В нестационарной спектроскопии традиционно считается, что нерезонансный режим возбуждения сигнала спинового эха ведет лишь к уменьшению амплитуды сигнала. Однако в работе [1] было экспериментально установлено, что нерезонансность возбуждения приводит к интересному следствию, которое заключается в расщеплении сигнала спинового эха на ряд компонент, обладающих определенной временной симметрией. Другой особенностью нерезонансного способа возбуждения явилось формирование после одного РЧ импульса одиночного сигнала, который назвали одноимпульсным эхом (ОЭ) [2]. В 1974 г. сигнал ядерного ОЭ был обнаружен в антиферромагнетиках $MnCo_3$, $CsMnF_3$, затем в ферритах $MnFe_2O_4$, $Eu_3Fe_5O_{12}$ и позднее в ферромагнетиках: монокристаллических пленках кобальта и сплавах $FeNiCo$, Co_2MnSi , $FeLi$. Данные объекты являются магнитоупорядоченными квантовыми системами, обладающими не только значительным неоднородным уширением спектроскопической линии, но и неоднородностью коэффициента усиления радиочастотного (РЧ) поля на ядрах [3]. Природа усиления РЧ поля на ядрах в магнитоупорядоченных материалах заключается в следующем. Вследствие экранировки ядра электронной оболочкой атома внешнее переменное магнитное поле действует на ядра через электронную подсистему посредством сверхтонкого взаимодействия [3]. Поэтому амплитуда сигнала ЯМР будет определяться в большей степени амплитудой колебаний электронных моментов. Такую ситуацию описывают с помощью введения коэффициента усиления, имея ввиду то, что амплитуда внешнего переменного магнитного поля на ядре в ферромагнетике усилена по сравнению со случаем, когда переменное поле непосредственно воздействует на ядра. В общем случае существует разброс коэффициента усиления по объему образца, поэтому при расчете ядерной намагниченности в магнитоупорядоченных материалах необходимо производить усреднение намагниченности по контуру неоднородного распределения коэффициента усиления. В настоящее время класс объектов, в которых наблюдалось ОЭ, очень широк, что позволяет говорить о нем, как о всеобщем явлении. Однако удовлетворительной теоретической интерпретации ОЭ до сих пор не су-

ществует. Решению этой задачи и посвящена настоящая работа.

В магнитоупорядоченных средах выражение для сигнала свободной прецессии (ССП), генерирующегося после воздействия на двухуровневую ядерную систему нерезонансного РЧ импульса, учитывающее неоднородное уширение спектроскопического перехода и неоднородное распределение коэффициента усиления, имеет вид:

$$\langle\langle v(t) \rangle\rangle = \int_1^{\eta_m} \eta F(\eta) d\eta \int_{-\infty}^{+\infty} v(\Delta + \delta, \eta, t) g(\Delta) d\Delta, \quad (1)$$

где $\delta = \omega_0 - \omega$ и $\Delta = \omega_n - \omega_0$ – соответственно, отстройки несущей частоты ω РЧ импульса и частоты прецессии ω_n отдельного спинового пакета от центральной частоты ω_0 линии ЯМР, соответственно; $\eta = A\chi$ – коэффициент усиления; A – константа сверхтонкого взаимодействия; χ – восприимчивость образца; $g(\Delta)$ и $F(\eta)$ – функции распределения отстроек отдельных спиновых пакетов Δ по частотам ЯМР и коэффициента усиления η РЧ поля на ядрах; η_m – максимальное значение коэффициента усиления; v – компонента магнитного момента отдельного спинового пакета без учета релаксационных процессов [4]:

$$v(\Delta + \delta, \eta, t) = v_0 \eta \omega_1 \left[\frac{\beta + (\Delta + \delta)}{2\beta^2} \sin(\beta t_1 + (\Delta + \delta)t) + \frac{\beta - (\Delta + \delta)}{2\beta^2} \sin(\beta t_1 - (\Delta + \delta)t) \right]_1 - \\ - v_0 \eta \omega_1 \left[\frac{(\Delta + \delta) \sin((\Delta + \delta)t)}{\beta^2} \right]_2 = v_1(\Delta + \delta, \eta, t) + v_2(\Delta + \delta, \eta, t), \quad (2)$$

где v_0 – равновесное значение намагниченности, $\omega_1 = \gamma H_1$; ω_1 – частота Раби; γ – гиромагнитное отношение; H_1 – амплитуда РЧ импульса; $\beta = (\eta^2 \omega_1^2 + (\Delta + \delta)^2)^{1/2}$ – выраженное в единицах частоты эффективное поле, действующее на спиновый пакет с отстройкой $(\Delta + \delta)$; t – время, отсчитываемое от конца РЧ импульса длительностью t_1 .

Допустим, что неоднородное уширение и неоднородное распределение коэффициента усиления в магнитоупорядоченной среде описываются нормальными законами $g(\Delta)$ и $F(\eta)$:

$$g(\Delta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{\Delta^2}{2\sigma^2}\right), \quad F(\eta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\eta_0} \exp\left(-\frac{(\eta - \bar{\eta})^2}{2\eta_0^2}\right),$$

где σ и η_0 – величины, характеризующие полуширины соответствующих распределений, $\bar{\eta}$ – среднее значение коэффициента усиления.

Теперь для усреднения v -компоненты, описывающей ССП, по контуру неоднородно уширенной линии и функции неоднородного распределения коэффициента усиления вос-

пользуемся соответственно методом стационарной фазы и методом перевала. В качестве большого параметра возьмем площадь РЧ импульса $\omega_1 t_1 > 1$. Применив стандартную процедуру расчета в рамках этих методов, найдем для первого слагаемого выражения (2) соответственно стационарные точки $\Delta_{0(1,2)} = \pm(\eta\omega_1 t) / \sqrt{t_1^2 - t^2}$ и точки перевала:

$$\eta_{1,2}(t) = \frac{\bar{\eta}}{2\eta_0^2 q(t)} + \frac{\delta\Delta_0(t)}{2\sigma^2 q(t)} \pm i \frac{\omega_1 \sqrt{t_1^2 - t^2}}{2q(t)},$$

где $q(t) = \Delta_0(t)^2 / (2\sigma^2) + 1 / (2\eta_0^2)$; $\Delta_0(t) = (\omega_1 t) / \sqrt{t_1^2 - t^2}$ – стационарная точка в случае, когда коэффициент усиления равен единице.

В результате, с помощью последовательного применения методов стационарной фазы и перевала получим:

$$\begin{aligned} \langle\langle v(t) \rangle\rangle &= v_0 \frac{\sqrt{\omega_1}}{8\sigma\eta_0} \frac{(t_1 - t)^{3/4}}{t_1(t_1 + t)^{1/4}} \exp\left(-\frac{\omega_1^2(t_1^2 - t^2)}{4q(t)}\right) \times \\ &\times \left[D^{(+)}(t) \exp\left(-\frac{(\bar{\eta}\Delta_0(t) - \delta)^2}{4\sigma^2\eta_0^2 q(t)}\right) \sin(\Phi^{(+)}(t)) + D^{(-)}(t) \exp\left(-\frac{(\bar{\eta}\Delta_0(t) + \delta)^2}{4\sigma^2\eta_0^2 q(t)}\right) \sin(\Phi^{(-)}(t)) \right]_1 + \\ &+ \left[\int_1^{\eta_{\text{in}}} \eta F(\eta) d\eta \int_{-\infty}^{+\infty} v_2(\Delta + \delta, \eta, t) g(\Delta) d\Delta \right]_2 = \langle\langle v_1(t) \rangle\rangle + \langle\langle v_2(t) \rangle\rangle, \end{aligned} \quad (3)$$

$$\text{где } D^{(\pm)}(t) = \frac{(\omega_1^2 \sigma^4 \eta_0^4 (t_1^2 - t^2) + (\bar{\eta}\sigma^2 \pm \delta\eta_0^2 \Delta_0(t))^2)^{3/4}}{\sigma^3 \eta_0^3 q(t)^2},$$

$$\Phi^{(\pm)}(t) = \frac{\omega_1 \bar{\eta} \sqrt{t_1^2 - t^2}}{2\eta_0^2 q(t)} \pm \frac{\delta t}{2(\sigma^2 / \omega_1^2) q(t)} + \frac{3}{2} \arctg \left(\frac{\omega_1 \sigma^2 \eta_0^2 \sqrt{t_1^2 - t^2}}{\bar{\eta} \sigma^2 \pm \delta \eta_0^2 \Delta_0(t)} \right) + \frac{\pi}{4}.$$

Оставшийся в формуле (3) интеграл $\langle\langle v_2(t) \rangle\rangle$ в аналитической форме имеет громоздкий вид и здесь не приводится. Численный и аналитический расчет этого интеграла показал, что второе слагаемое $\langle\langle v_2(t) \rangle\rangle$ описывает начальный участок ССП, представляющий собой максимум намагниченности, за которым идет ее монотонный спад. Что касается первого слагаемого ССП, то оно вычислено аналитически. Из анализа этого слагаемого видно, что оно содержит сумму двух гауссианов, зависящих от времени. Когда выполняется равенство $\bar{\eta}\Delta_0(t) = \pm\delta$, одна из функций Гаусса принимает максимальное значение, и это обуславливает возникновение в ССП сигнала ОЭ. Физически возникновение ОЭ в ССП можно объяснить следующим образом. После прекращения действия РЧ поля нерезонансные и резонансные спиновые пакеты неоднородно уширенной линии ис-

пытывают колебания соответственно на переменной частоте $\eta\Delta_0(t)$ и частоте отстройки от резонанса δ . В результате интерференции колебаний нерезонансных спиновых пакетов при усреднении по коэффициенту усиления их частота становится равной $\bar{\eta}\Delta_0(t)$. Именно эта интерференция обуславливает формирование сигнала ОЭ в случае когда отстройка от резонанса равна нулю. Однако, в ситуации когда отстройка не равна нулю, кроме этой интерференции, возникают нулевые биения при совпадении переменной частоты колебаний магнитных моментов с частотой отстройки, на которой совершают осцилляции резонансные магнитные моменты. В результате амплитуда сигнала ОЭ существенно увеличивается, что соответствует экспериментальным данным. Сказанное иллюстрируется на рисунке 1, на котором представлен сигнал ОЭ, имеющий биполярную форму.

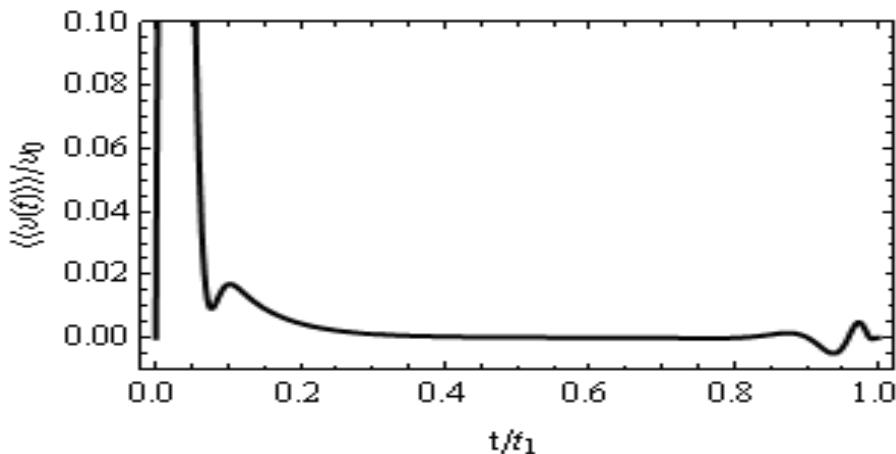


Рис. 1. Сигнал свободной прецессии и одноимпульсное эхо при значениях параметров $\omega_1 t_1 = 2\pi$, $\frac{\sigma}{\omega_1} = 5$, $\frac{\delta}{\omega_1} = 10$, $\eta_0 = 0.8$, $\bar{\eta} = 2, 7$.

Для выяснения характера зависимости амплитуды сигнала ОЭ от отстройки относительно центральной частоты ЯМР, построим эти зависимости при различных величинах частоты Раби (рис. 2). В условиях слабого РЧ поля зависимость амплитуды сигнала ОЭ от отстройки имеет симметричный колоколообразный вид (кривая 1). При увеличении амплитуды РЧ импульса форма рассматриваемой зависимости постепенно трансформируется в двугорбовую кривую 2, которая при дальнейшем изменении напряженности РЧ поля превращается в два отдельных равных друг другу пика (кривая 3). Такая полевая зависимость указанных на рис. 2 кривых позволяет трактовать это явление как выжигание провала в контуре неоднородно уширенной спектроскопической линии. Аналогичная ситуация наблюдалась экспериментально в [2] при изучении ОЭ в феримагнетике $\text{Eu}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$.

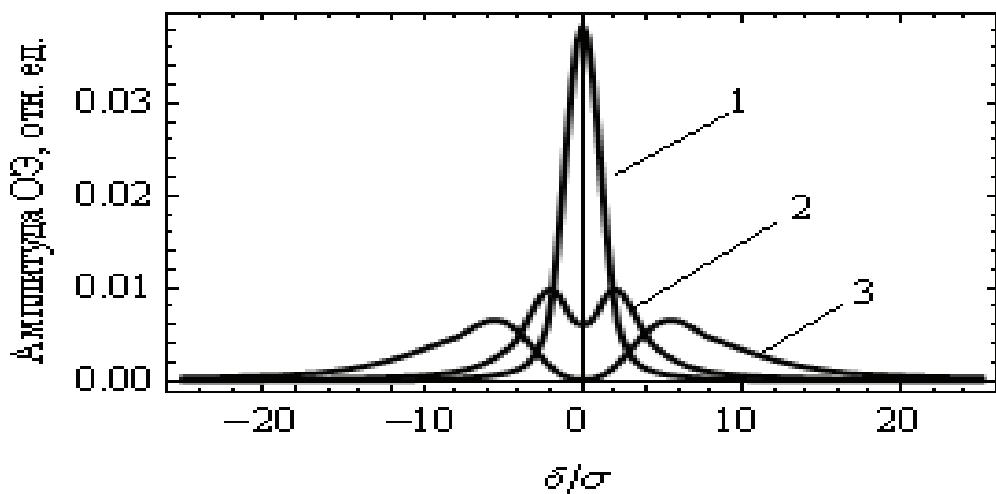


Рис. 2. Семейство кривых зависимостей амплитуды сигнала ОЭ от отстройки относительно центральной частоты ЯМР, соответствующих различным значениям частоты Раби $\omega_1\sigma = 0,1$ (1); $\omega_1\sigma = 0,2$ (2); $\omega_1\sigma = 0,4$ (3); при этом значения общих параметров для всех кривых равны: $\sigma t = 10\pi$; $\eta_0 = 0,8$; $\bar{\eta} = 2,7$.

Литература.

1. D.K. Fowler, D.C. Creagh, R.W.N. Kinnear, G.V.H. Wilson. Phys. stat. sol. A92, 545 (1985).
2. В.П. Чекмарев, М.И. Куркин, С.И. Голощапов. ЖЭТФ 76, 1675 (1979).
3. М.И. Куркин, Е.А. Туров. ЯМР в магнитоупорядоченных веществах и его применение, Москва, 1990.
4. В.С. Кузьмин, В.М. Колесенко. ФТТ 47, 1994 (2005).

ИЗУЧЕНИЕ СВЯЗИ ОПТИЧЕСКИХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ ВИННЫХ ДИСТИЛЛЯТОВ С ВОЗРАСТОМ ИХ ВЫДЕРЖКИ

Е. И. Незальзова¹, Е. А. Скорбанова¹, Б. С. Гаина²

¹ Национальный Институт Виноградарства и Виноделия Республики Молдова (НИВВ),
ул. Виерул 59, Кишинев, Республика Молдова, тел./факс: +373 22 28 54 37

e-mail: nezalzova@rambler.ru

² Академия Наук Республики Молдова,
бл. Штефан чел Маре 1, Кишинев, MD-2001, Республика Молдова

Коньки на сегодняшний день занимают значительную долю алкогольного рынка и пользуются большим спросом. Коньяки готовят из выдержаных винных дистиллятов. Одним из основных критериев качества винных дистиллятов является их возраст или срок выдержки. Основными контролируемыми показателями возраста дистиллятов в настоящее время являются содержание в них дубильных веществ, ванилина, лигнина. Эти показатели в значительной степени зависят от срока и условий выдержки и хранения [1-4]. Наиболее распространенными способами определения химического состава веществ в винных дистиллятах являются рутинные методы анализа. В последнее время широкое распространение получили инструментальные методы анализа – оптические, ионные, хроматографические и др. [1,2,3]. Оптические и спектральные методы анализа позволяют выявить суммарные группы веществ, в наибольшей степени изменяющихся при выдержке винных дистиллятов в дубовой таре [5,7]. Хроматографические методы анализа (жидкостная и газовая хроматография) дают возможность детально охарактеризовать и количественно определить индивидуальные вещества из каждой, выделенной оптическими методами, группы веществ. В данной работе представлены результаты исследования оптических и спектральных характеристик винных дистиллятов.

Индикатором скорости созревания винных дистиллятов, выдерживаемых в дубовой таре, может быть их окраска, которая изменяется со временем выдержки и зависит от количества и состава экстрагированных веществ [8]. Естественно предположить, что изменение состава этих веществ может проявляться в спектрах поглощения винных дистиллятов и в их оптической плотности.

На рис. 1 представлены спектры поглощения винных дистиллятов разных лет выдержки, измеренные на спектрометре Cary-500 в диапазоне от 200 до 1500 нм. Как видно из рисунка, спектры поглощения дистиллятов в диапазоне от 600 – 1500 нм не зависят от сроков выдержки. С информативной точки зрения представляет интерес диапазон 200 – 600 нм, на котором заметно формирование локальных максимумов при 280 и 350 нм, а также

различия в коэффициенте пропускания от 400 до 600 нм, зависящие от сроков выдержки. В работе [6] отмечается, что вещества танины, придающие коньякам цвет, были обнаружены при 420 нм. Зависимость оптической плотности D винных дистиллятов в указанном спектральном диапазоне от сроков выдержки представлена на рис. 2. Из рисунка видно, что с увеличением срока выдержки проявляется характерный максимум при 280 нм, который соответствует накапливающимся в дистилляте при выдержке некоторым ароматическим альдегидам [9].

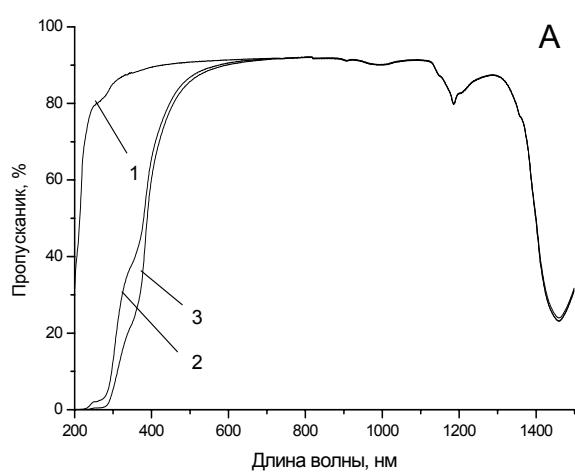


Рис. 1. Спектры поглощения винных дистиллятов различных сроков выдержки: 1 – 1 год, 2 – 3 года, 3 – 7 лет.

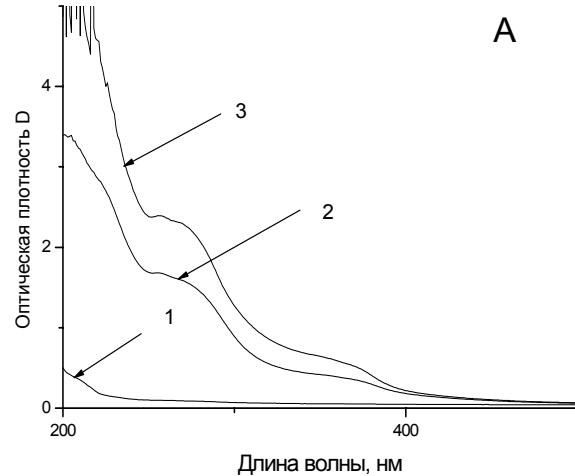


Рис. 2. Оптическая плотность винных дистиллятов различных сроков выдержки: 1 – 1 год, 2 – 3 года, 3 – 7 лет.

Хроматическая (цветовая) характеристика винных дистиллятов является важным показателем качества продукции. Под ней понимают яркость, чистоту, интенсивность и оттенок цвета [8]. Учитывая изменения в спектрах поглощения и литературные данные, для определения зависимости хроматических характеристик дистиллятов были выполнены измерения оптической плотности на длинах волн 280, 420 и 520 нм. Кроме того, на длине волны 280 нм был определен показатель поглощения E_{280} . Оптические показатели винных дистиллятов в зависимости от их возраста приведены в таблице.

Сопоставляя данные оптических показателей молодых и выдержаных винных дистиллятов, можно отметить следующее: молодые винные дистилляты бесцветные или слабо окрашены (1- летние), поэтому интенсивность их окраски имеет наименьшую величину - < 1 . С увеличением продолжительности выдержки дистилляты обогащаются продуктами распада лигнина (фенольными соединениями), что приводит к появлению сначала желтых, затем янтарных и коричневых оттенков в цвете, за счет чего интенсивность окраски увеличивается, становится > 1 и достигает величины 1,7. Как уже отмечалось ранее, коли-

чество экстрагированных веществ зависит от породы дуба и сроков использования древесины. Этим объясняются более низкие значения показателя D_{420} для дистиллятов 6- и 8-летней выдержки по сравнению с 5-летней. Поскольку основными окрашивающими веществами являются лигнин и продукты его распада, то снижение этого показателя для дистиллятов 15- и 20-летней выдержки связано с тем, что относительное содержание лигнина среди экстрактивных веществ в первые годы (до 6 лет) несколько увеличивается, но после 10 лет выдержки уменьшается. И это обусловлено участием продуктов распада лигнина во взаимодействии с различными веществами винного дистиллята с образованием плохо растворимых соединений, выпадающих в осадок [10]. Оптическая плотность при 520 нм, характеризующая содержание некоторых продуктов распада лигнина, возрастает, по сравнению с молодым винным дистиллятом, сразу же к 2 годам выдержки, затем изменяется незначительно и составляет 0,2 – 0,3, поэтому она не может быть использована в качестве показателя хорошо характеризующего возраст дистиллята. Поскольку интенсивность окраски и ее оттенок напрямую связаны с показателями D_{420} и D_{520} , то и они оказались маловыразительны.

Таблица. Оптические показатели винных дистиллятов

№ п/п	Срок выдерж- ки образца (МД-молодой дистиллят, Д- дистиллят), лет	Показатели					
		E_{280}	D_{280}	D_{420}	D_{520}	Интенсивность окраски $I = D_{420} + D_{520}$	Оттенок ок- раски $T = \frac{D_{420}}{D_{520}}$
1	МД	0,02	0,4	0,03	0,01	0,04	3
2	Д1	0,02	0,4	0,03	0,01	0,04	3
3	Д2	25	3,7	0,9	0,2	1,1	4,5
4	Д3	50	3,6	0,9	0,2	1,1	4,5
5	Д4	50	4,3	1,1	0,2	1,3	5,5
6	Д5	33	4,6	1,0	0,2	1,2	5,0
7	Д6	50	4,3	0,7	0,2	0,9	3,5
8	Д7	100	4,2	1,7	0,3	2,0	5,7
9	Д8	50	3,9	0,8	0,2	1,0	4,0
10	Д9	33	3,1	1,4	0,2	1,6	7,0
11	Д10	100	3,8	1,6	0,3	1,9	5,3
12	Д12	100	3,9	1,2	0,2	1,4	6,0
13	Д20	33	4,1	1,0	0,2	1,2	5,0
14	Д27	100	4,0	1,5	0,3	1,8	5,0

Наиболее информативным, оказался показатель E_{280} . Его абсолютное значение возрастало в зависимости от срока выдержки и достигло максимальной величины 100 в 10-летнем дистилляте. Как отмечается в работе [9], величина поглощения света (E) дистиллятов в ультрафиолетовой части спектра при длине волны 280 нм зависит от его качества. В отдельных случаях он вырастал до значения 100 уже в 7-летнем возрасте, но в тоже время его уровень у некоторых 9-ти и 20-летних дистиллятов соответствовал 5-летним. Очевидно, это обусловлено условиями выдержки винных дистиллятов, в частности, возрастом дубовой тары. Как указывалось ранее, зависимость спектральных характеристик на длине волны 280 нм связана с ароматическими альдегидами, которые химически активны и количество их, в зависимости от изменяющихся условий, может колебаться в широких пределах.

Полученные результаты свидетельствуют о том, что для достоверной оценки возраста дистиллятов возможно использование комплекса оптических методов как дополнение к газовой и жидкостной хроматографии. С этой целью было начато их исследование методом спонтанного комбинационного рассеяния.

Литература

1. Э.Я. Мартыненко Технология коньяка. – Симферополь: Таврида, 2003.–313с.
2. А.Г. Паносян, Г.В. Мамиконян, М. Торосян, Э.С. Габриэлян, С.А. Мхитарян, М.Р. Тиракян, А. Ованесян // Журн. Аналит. Химии. 2001. Т. 56. № 10. С. 1078.
3. И.М. Скурихин. Химия коньяка и бренди. – М.: ДeЛи Принт, 2005.
4. M. Marche, E. Joseph Etude theorique sur les Cognac, sa composition et don vieillissement naturel an futs de chemea // Rev. Franc. Oenol. – 1975.–№ 57.–P.1-96.
5. A. Nordon, A. Mills, R.T. Burn, F.M. Cusick, D. Littlejohn. Comparison of non-invasive NIR and Raman spectrometries for determination of alcohol content of spirits. *Analytica Chimica Acta* 548 (2005) 148–158.
6. S. A. Savchuk, V. N. Vlasov, S. A. Appolonova, V. N. Arbuzov, A. N. Vedenin, A. B. Mezinov, and B. R. Grigor'yan. Application of Chromatography and Spectrometry to the Authentication of Alcoholic Beverages. *Journal of Analytical Chemistry*, Vol. 56, No. 3, 2001, pp. 214–231. Translated from *Zhurnal Analiticheskoi Khimii*, Vol. 56, No. 3, 2001, pp. 246–264.
7. V.A. Watts, C.E. Butzke, R.B. Boulton. Study of Aged Cognac Using Solid-Phase Microextraction and Partial Least-Squares Regression. *J. Agric. Food Chem.* 2003, 51, 7738-7742.
8. А.С. Сибиряков, Н.М. Агеева. Роль цветовых характеристик в оценке подлинности коньяков. Ж. Виноделие и виноградарство. 1/2008. – с. 20-21.
9. Э.М. Соболев, И.В. Оседецева. Описание изобретения к патенту Российской Федерации. RU 2147372 C1 7 G01N33/14, C12G3/07.
10. И.М. Скурихин Химия коньячного производства. – М.: Пищевая промышленность, 1968. – 232 с.

**СЕКЦИЯ:
ЛАЗЕРЫ В БИОЛОГИИ И МЕДИЦИНЕ**

СЕЛЕКТИВНОСТЬ ФОТОСЕНСИЛИЗИРОВАННОГО ПОВРЕЖДЕНИЯ КЛЕТОК КОСТНОГО МОЗГА ПРИ ОНКОГЕМАТОЛОГИЧЕСКИХ ЗАБОЛЕВАНИЯХ

Д. А. Афанасенко¹, В. П. Савицкий², В. П. Зорин¹

¹ Белорусский государственный университет, физический факультет, кафедра биофизики, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь, black_catd@mail.ru

²Республиканский научно-практический центр детской онкологии и гематологии, Минск, Беларусь

В настоящее время метод фотодинамической терапии (ФДТ), в основе которого лежит комбинированное действие пигмента-фотосенсилизатора (ФС) и видимого света, используется преимущественно для избирательного повреждения солидных опухолей. Однако в последние годы предпринимаются попытки применения техники ФДТ для лечения онкогематологических и иммунных заболеваний [1,2]. Результативность применения данного терапевтического подхода определяется избирательностью накопления ФС в патологических клетках, поэтому стратегия развития техники ФДТ в онкогематологии связана с поиском ФС, обладающих повышенным сродством к лейкемическим клеткам. В этой связи значительный интерес представляет изучение механизмов взаимодействия ФС с нормальными и опухолевыми клетками крови.

Целью нашей работы было исследование процессов распределения хлорина еб (Хл еб) и его диметилового эфира (ДМЭ) в смешанной суспензии клеток костного мозга пациентов с острым лейкозом. Методом проточной цитометрии были определены уровни накопления хлоринов нормальными и лейкозными клетками, исследованы параметры фотосенсилизированного повреждения клеток, а также проведена сравнительная оценка возможности избирательного повреждения опухолевых клеток в препаратах костного мозга пациентов с различными видами лейкоза. В работе использовали суспензии клеток, полученные из костного мозга пациентов с острым лимфолейкозом (ОЛЛ) и острым миелолейкозом (ОМЛ).

Для дифференцирования отдельных клеточных фракций использовали стандартные методы проточной цитометрии. Характеристики процессов накопления ФС клетками определяли на основании измерений интенсивности флуоресценции единичных клеток в полосе испускания хлоринов на проточном цитофлуориметре FACScan (Becton Dickinson, USA). Фенотипирование клеток костного мозга осуществляли путем обработки клеток моноклональными антителами (МКА) CD45, конъюгированными с флуоресцеинизотиоцинатом. Контроль за изменением числа жизнеспособных клеток в исследуемых образцах

проводили на основании анализа характеристик светорассеяния и определения степени окраски исследуемых клеток пропидиум йодидом (PI). Фотооблучение образцов клеток проводили диодным лазером ($\lambda=660\text{нм}$, 100мВт/см^2) при комнатной температуре и при постоянном перемешивании.

Было установлено, что интенсивность флуоресценции лейкозных клеток в смешанной суспензии клеток костного мозга пациентов с острым лейкозом значительно выше в сравнении с нормальными клетками как для Хл е6, так и для ДМЭ. Однако уровень внутриклеточного накопления ДМЭ значительно превышает уровень накопления Хл е6. Численные значения уровней накопления ФС клетками представлены в таблице.

Табл. Накопление хлоринов в нормальных и лейкозных клетках крови

Измеряемый параметр	Хл е6 (ОЛЛ)		ДМЭ (ОЛЛ)		Хл е6 (ОМЛ)		ДМЭ (ОМЛ)	
	норма	лейкоз	норма	лейкоз	норма	лейкоз	норма	лейкоз
Интенсивность флуоресценции, отн.ед.	576±25	1380±42	682±30	1662±45	570±23	2650±78	456±20	2860±83

Различия в уровнях накопления ФС клетками, как было показано ранее [3,4], связаны с особенностями физико-химических свойств ФС, обуславливающих их способность проникать в клетки и накапливаться в составе внутриклеточных органелл. Следует отметить, что относительный уровень накопления в составе трансформированных клеток зависит не только от свойств ФС, но и от типа лейкоза. Полученные нами результаты показывают, что контрастность окрашивания миелолейкозных клеток в 2-3 раза выше в сравнении с лимфолейкозными клетками.

Воздействие излучения диодного лазера на образцы окрашенных хлоринами клеток костного мозга пациентов приводит к их повреждению, что было зафиксировано в тесте с PI (рис. 1). Поврежденные клетки характеризуются высоким значением интенсивности флуоресценции PI – увеличивается относительный вес фракции клеток, сильно окрашивающихся зондом. Необходимо отметить, что данный эффект обусловлен именно фотосенсибилизированным воздействием на клетки. Инкубирование клеток с хлоринами без воздействия видимого света, а также фотооблучение клеток без предварительной окраски ФС не приводит к гибели клеток.

Повреждение лейкемических клеток происходит при меньших концентрациях и меньших дозах светового воздействия в сравнении с нормальными клетками. Опухолевые клетки различной природы отличаются по своей чувствительности к фотосенсибилизиро-

ванному воздействию (рис. 2). Для трансформированных клеток при лимфолейкозе реакция на фотовоздействие развивается значительно медленнее в сравнении с лейкемическими клетками при миелолейкозе. Можно полагать, что данные отличия связаны с различным уровнем накопления фотосенсибилизаторов клетками при ОМЛ и ОЛЛ. Использование Хл-е6 и его производного в качестве фотосенсибилизаторов при облучении видимым светом образцов костного мозга обеспечивает избирательное повреждение опухолевых клеток. Согласно полученным результатам, при интенсивностях фотодинамического воздействия, приводящих к повреждению 25-30% нормальных клеток, число жизнеспособных лейкемических клеток в образцах снижается в 2,5-3,0 раза.

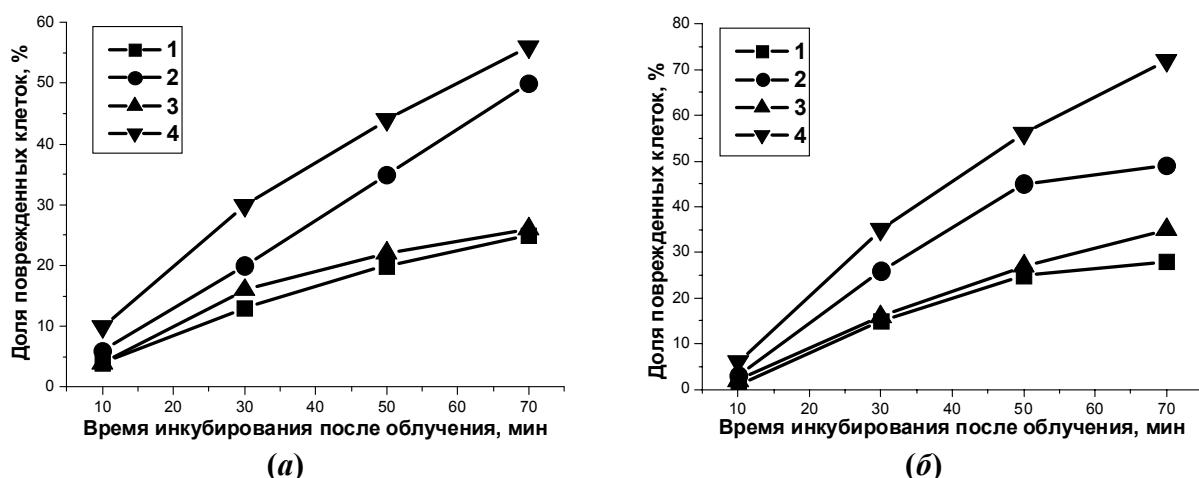


Рис. 1. Фотосенсибилизированное хлоринами повреждение клеток крови: *а* – ОЛЛ, *б* – ОМЛ; 1 – Хл е6 норма, 2 – Хл е6 лейкоз, 3 – ДМЭ норма, 4 – ДМЭ лейкоз.

Таким образом, использование Хл е6 и ДМЭ в качестве фотосенсибилизаторов при облучении видимым светом смешанной суспензии клеток костного мозга может обеспечивать избирательное повреждение опухолевых клеток. Полученные результаты подтверждают возможность применения техники ФДТ с Хл е6 и ДМЭ для элиминации малигнизованных клеток в образцах костного мозга пациентов с острыми лейкозами.

Литература

1. Hunt D.W., Chan A.H. Influence of photodynamic therapy on immunological aspects of disease – an update//Expert Opin. Investig. Drugs.-2000.-V.9.-P.807-817.
2. Plaetzer K., Kiesslich T., Verwanger T., Kramer B. The modes of cell death induced by PDT// Med. Lazer Appl.–2003. –V.18.–P.7-19.
3. Zorin V.P., Khludeyev I.I., Zorina T.E., et al. Kinetic characteristics of porphyrin distribution in the blood. In Proceedings SPIE//Laser Use in Oncnlogy II.- 2000.-Vol.-4059.-P.139 - 147.
4. Savitskiy VP, Zorin VP, Potapnev MP. Selective phototoxicity of chlorin-e6 derivatives toward leukemic cells. Experimental oncology 2002.

МОРФОЛОГИЯ МОНОНУКЛЕАРОВ ДЛЯ ЗАДАЧИ ИДЕНТИФИКАЦИИ КЛЕТОК ПО ДАННЫМ СВЕТОРАССЕЯНИЯ

О. А. Грицай¹, Г. И. Рубан¹, В. А. Лойко¹, Н. В. Гончарова²

¹Институт физики им. Б. И. Степанова, пр. Независимости 68, 220072, Минск, Беларусь,
o.gritsai@dragon.bas-net.by

²Центр трансфузиологии и гематологии, Долгиновский пр. 160, 223059, Минск, Беларусь

В настоящее время активно проводятся исследования биологических частиц, направленные на решение задач диагностики заболеваний, раннего выявления патологий и злокачественных новообразований. Задача идентификации мононуклеаров периферической крови (лимфоцитов и моноцитов) по интенсивности рассеянного излучения представляет интерес для решения ряда проблем биомедицинской диагностики. С помощью индикаторы рассеянного излучения можно восстановить морфометрические и оптические характеристики клетки для ее идентификации, а так же выявлять патологии [1]. Анализ интенсивности рассеянного излучения лежит в основе метода проточной цитометрии, который широко применяется для идентификации клеток.

В обычном проточном цитометре клетки идентифицируют по интенсивности рассеянного лазерного излучения и флуоресценции. Поверхностные клеточные антигены специфически маркируются антителами, конъюгированными с флуорохромом. Клеточная суспензия вводится в оптическую систему прибора. Клетки проходят через лазерный луч, сфокусированный на потоке. Излучение лазера рассеивается клетками и вызывает эмиссию флуорохрома. Рассеянное в направлениях вперед ($1^\circ < \theta < 3^\circ$) и вбок ($65^\circ < \theta < 115^\circ$) излучение и свечение флуоресценции регистрируются фотодетекторами. По интенсивности излучения, рассеянного вперед, определяют размер клетки, по интенсивности излучения, рассеянного вбок, - внутреннюю структуру. Одновременное измерение интенсивностей излучения, рассеянного вперед и вбок, позволяет идентифицировать лимфоциты, моноциты и гранулоциты периферической крови. Субпопуляции клеток фракционируют по эмиссии флуорохрома.

В сканирующем проточном цитометре – новом классе цитометров, разработанном в Новосибирске, частицы идентифицируют по интенсивности излучения, рассеянного в диапазоне углов от 5 до 120 градусов.

Задача идентификации биологических частиц по угловой структуре рассеянного излучения относится к обратным задачам оптики рассеивающих сред. Для ее решения нужна оптическая модель клетки. Для построения оптической модели необходимо знать гео-

метро-оптические характеристики клетки. Представленные ниже результаты наших исследований могут быть использованы при разработке оптических моделей клеток для решения задачи оптимизации идентификации клеток по данным светорассеяния.

Белые клетки крови – гранулоциты, лимфоциты и моноциты играют важную роль в иммунной системе человека. Мононуклеары периферической крови – лимфоциты и моноциты – это клетки с агранулярной цитоплазмой и одним ядром. Основные функции лимфоцитов – распознавание антигенов (чужеродных объектов) и выработка антител. В функции моноцитов входит уничтожение проникших в организм инородных частиц, бактерий, вирусов, разрушенных клеток и пр. В периферической крови человека в норме содержится примерно 20-40 % лимфоцитов и 1-6 % моноцитов.



Рис. 1. Мононуклеары периферической крови.

Лимфоциты и моноциты периферической крови в норме исследовались с помощью микроскопа Leica DMLB2 в режимах дифференциального интерференционного контраста и флуоресценции. Клеточная суспензия помещалась между предметным и покровным стеклами, как в микрочувствительном. Мы использовали объектив с увеличением 100x и числовая апертура 1.25. Изображения клеток фотографировались цифровой камерой Leica DC 150 и обрабатывались при помощи специализированного программного обеспечения Leica IM 1000 [1, 2]. На рисунке 1 приведено изображение мононуклеаров периферической крови. Снимок сделан в режиме дифференциального интерференционного контраста.

В общем случае, биологическая клетка состоит из цитоплазмы и органелл. Крупнейшая органелла – ядро. Клетка и ядро окружены тонкими мембранами.

Исследования показывают, что форма лимфоцитов и их ядер округлая или слегка вытянутая [2, 3]. Размеры лимфоцитов (максимальные линейные размеры) составляют 4.8-11.8 микрона, а размеры их ядер – 4.1-8.3 микрона. Средний размер клетки и ядра 7.5 и 6.2 микрона соответственно. Как правило, ядро лимфоцита занимает большую часть цито-

плазмы и смещено относительно центра клетки. Смещение ядра составляет примерно от 0 до 1.5 микрона [4].

Форма моноцитов обычно круглая, а их ядер – вытянутая. Размер клеток изменяется в диапазоне 7.8 -14.6 микрон. Размеры ядер составляют 5.6 - 10.8 микрон. Средние размеры для клетки и ядра 11 и 8 микрон. Ядро моноцита занимает около 70% клетки. Ядра моноцитов, так же, как и ядра лимфоцитов, смещены относительно центра клетки.

В проточном цитометре мононуклеары периферической крови идентифицируют по угловой структуре излучения, рассеянного в направлении вперед. Разделение лимфоцитов и моноцитов происходит по интенсивности излучения, рассеянного в направлении вбок. Результаты исследований показывают, что интервалы размеров лимфоцитов, моноцитов и их ядер перекрываются (см. Рис. 2), что может затруднить их идентификацию.

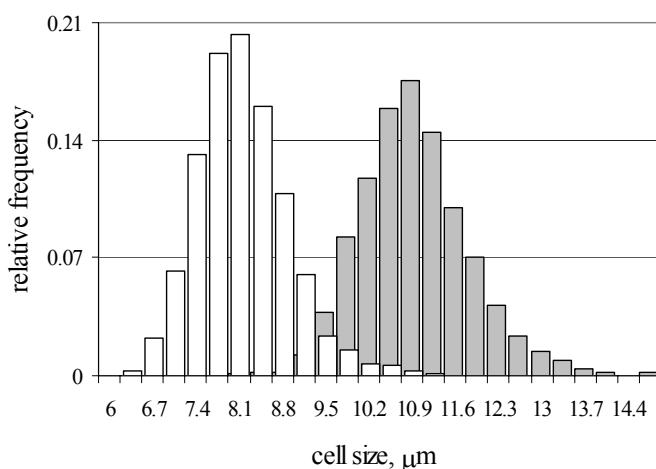


Рис. 2. Гистограммы распределений по размерам лимфоцитов (белый цвет) и моноцитов (серый цвет).

Из анализа полученных экспериментальных данных следует, что основное отличие морфологии лимфоцитов и моноцитов заключается в отношении клетка- ядро (отношение максимальных линейных размеров клетки и ядра). Для лимфоцитов среднее значение этого отношения составляет примерно 1.2, а для моноцитов 1.4. Гистограммы распределения отношения клетка-ядро для лимфоцитов и моноцитов приведены на рисунке 3.

Для решения обратной задачи, при моделировании рассеяния излучения лимфоцитами и моноцитами периферической крови, необходимо нативную форму клетки и ядра привести к более простому виду, удобному для проведения расчетов в реальном режиме времени. На рисунке 4 представлены морфометрические схемы лимфоцита и моноцита, учитывающие основные особенности морфологии клеток.

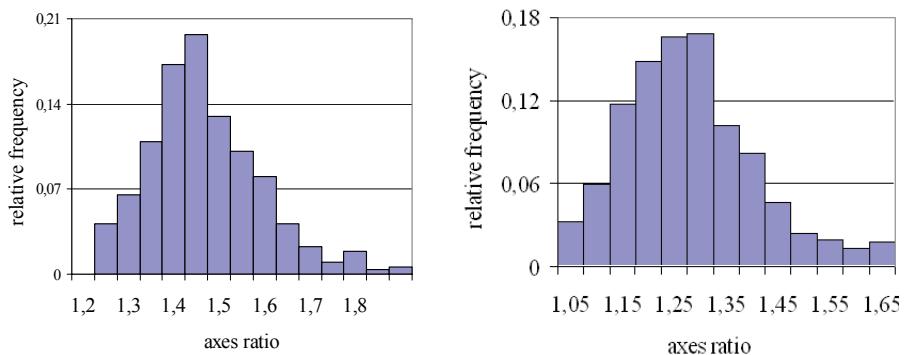


Рис. 3. Гистограммы распределения отношения клетка-ядро для лимфоцитов (слева) и моноцитов (справа)

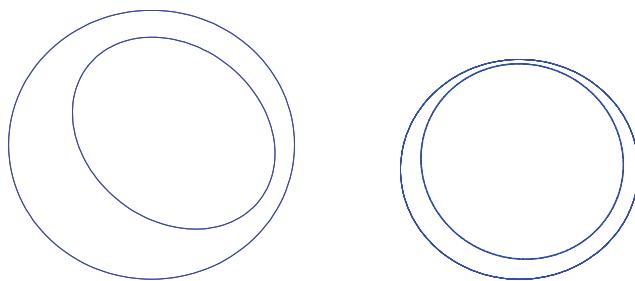


Рис. 4. Морфометрические схемы лимфоцита и моноцита

Методами специализированной оптической микроскопии исследованы мононуклеары периферической крови человека в норме. Проведен анализ морфологии лимфоцитов и моноцитов применительно к решению задач сканирующей проточной цитометрии. Разработанные морфометрические модели клеток позволяют оценить влияние морфологии клетки на угловую структуру рассеянного излучения. Полученные результаты могут быть использованы для оптимизации идентификации клеток по данным светорассеяния.

Литература

1. V.P. Maltsev, K.A. Semyanov. Characterization of bio-particles from light scattering, Utrecht, 2004.
2. G.I. Ruban, V.A. Loiko, O.A. Gritsai, A.A. Miskevich, A.D. Gruzdev, S.V. Kosmacheva, and N.V. Goncharova. Proceedings SPIE. **6284**, 6284OH-1-5 (2006).
3. V.A. Loiko, G.I. Ruban, O.A. Gritsai, S.M. Kosmacheva, and N.V. Goncharova. Book of Abstracts of the 9th Inter. conference on electromagnetic and light scattering by non-spherical particles: theory, measurements, and applications, 169, St.-Petersburg, 2006.
4. V.A. Loiko, G.I. Ruban, O.A. Gritsai, et al. J. Quant. Spectr. Radiat. Transfer. **102**, 73 (2006).

**СЕКЦИЯ:
ФИЗИКА НАНОСТРУКТУР**

РАСПРОСТРАНЕНИЕ РАБИ-ВОЛН В НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ НАНОСТРУКТУРАХ

Г. Я. Слепян, Е. Д. Ерчак, С. А. Максименко

Институт ядерных проблем БГУ, ул. Бобруйская, 11, 220050, Минск, Беларусь

Введение. Осцилляции Раби (ОР) – периодические переходы двухуровневой системы между ее стационарными состояниями под воздействием внешнего поля [1]. Впервые наблюдавшиеся на ядерных спинах в радиочастотном магнитном поле [2], ОР затем были обнаружены во многих других двухуровневых системах, таких как атомы в электромагнитном поле [3], квантовые точки (КТ) [4], Джозефсоновские кубиты [5] и др. Помимо фундаментального интереса, ОР важны как средство реализации бинарной логики и оптического контроля в квантовой информатике и квантовых вычислениях.

Усложнение физических систем, где наблюдаются ОР, приводит к наложению дополнительных особенностей на идеальную картину этого эффекта [1]. Это, к примеру, фононно-индуцированная дефазировка [6] и эффекты локального поля в КТ [7]. Новые возможности открываются в системах двух связанных Раби-осцилляторов [8-11]. В пространственно протяженных образцах, содержащих большое число осцилляторов, механизм, вызывающий ОР, также приводит к ряду нестационарных когерентных оптических явлений, таких как оптическая нутация, фотонное эхо, самоиндуцированная прозрачность и др. [12]. Это обусловлено тем, что в образцах, чьи размеры значительно превышают длину волны, существенными оказываются эффекты распространения. В низкоразмерных системах эти эффекты также проявляются, однако их характер качественно изменяется.

Классическое внешнее поле. Рассмотрим взаимодействие одночастичного возбуждения в бесконечной периодической цепочке связанных КТ с электромагнитным полем. Каждую отдельную р-тую КТ будем моделировать как двухуровневую систему с основным и возбужденным состояниями $|b_p\rangle$ и $|a_p\rangle$, соответственно, и частотой перехода между ними ω_0 . Процессами дефазировки и диссипации внутри КТ пренебрежем. Соседние КТ в цепочке взаимодействуют между собой. Физическая природа взаимодействия может быть различной – туннелирование электронов между КТ, диполь-дипольное взаимодействие и др. Пусть рассматриваемая структура взаимодействует с бегущей вдоль цепочки плоской волной классического света: $E(x, t) \sim \exp[i(kx - \omega t)]$. Волновое число k предполагается удовлетворяющим условию $ka \ll 1$, где a – период цепочки. Гамильтониан, описывающий динамику рассматриваемой системы в приближении вращающейся

волны можно представить в виде $\hat{H} = \hat{H}_0 + \Delta\hat{H}$, где слагаемое

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0 \sum_n \hat{\sigma}_{zn} - \frac{\hbar\Omega_R}{2} \sum_n [\hat{\sigma}_n^+ e^{i(nka-\omega t)} + \hat{\sigma}_n^- e^{-i(nka-\omega t)}] \quad (1)$$

описывает ОР в несвязанных КТ. Здесь $\hat{\sigma}_n^\pm$, $\hat{\sigma}_{zn}$ – матрицы Паули для n -ной КТ, Ω_R – частота Раби. Слагаемое

$$\Delta\hat{H} = -\frac{\hbar\xi}{2} \sum_n \sum_{p=\pm 1} (|a_n\rangle\langle a_{n+p}| + |b_n\rangle\langle b_{n+p}|) + H.c. \quad (2)$$

учитывает взаимодействие между КТ, ξ здесь константа связи. Уравнения движения имеют вид одночастичного уравнения Шрёдингера $i\hbar\partial_t |\Psi\rangle = \hat{H} |\Psi\rangle$; вектор состояния можно записать в виде $|\Psi(t)\rangle = \sum_p (A_p |a_p\rangle + B_p |b_p\rangle)$. Учитывая (1) и (2), получаем из уравнения Шрёдингера систему дифференциальных уравнений, непосредственно связывающую A_p с B_p , $A_{p\pm 1}$ и B_p с A_p , $B_{p\pm 1}$. Переходя от дискретной цепочки к непрерывному пределу по формулам $A_p(t) \rightarrow A(x, t)$, $A_{p+1}(t) + A_{p-1}(t) - 2A_p(t) \rightarrow a^2 \partial_x^2 A_p(x, t)$ и то же самое для $B_p(t)$, приходим к следующей системе уравнений:

$$\partial_t A = -\frac{i}{2}(\omega_0 - 4\xi)A + \frac{i\Omega_R}{2} B e^{i(kx-\omega t)} + i\xi a^2 \partial_x^2 A, \quad \partial_t B = \frac{i}{2}(\omega_0 + 4\xi)B + \frac{i\Omega_R}{2} A e^{-i(kx-\omega t)} + i\xi a^2 \partial_x^2 B. \quad (3)$$

Уравнения (3) описывают взаимодействие света с цепочкой КТ в рамках сформулированной модели. Чтобы найти их общее решение, введем новые переменные $u(x, t) = A(x, t) \exp[i(\omega t - kx - 2\Phi t)/2]$ и $v(x, t) = B(x, t) \exp[-i(\omega t - kx + 2\Phi t)/2]$. В этих переменных уравнения (3) перепишутся в виде

$$\partial_t u + \frac{i\Delta}{2} u + V \partial_x u - i\xi a^2 \partial_x^2 u - \frac{i\Omega_R}{2} v = 0, \quad \partial_t v - \frac{i\Delta}{2} v - V \partial_x v - i\xi a^2 \partial_x^2 v - \frac{i\Omega_R}{2} u = 0. \quad (4)$$

Эта система может быть точно решена с помощью преобразования Фурье по переменной x . Решение имеет вид

$$u(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} [\tilde{u}(h) \varphi_h^-(t) + \tilde{v}(h) \psi_h(t)] e^{ih(x - \xi a^2 h t)} dh, \quad v(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} [\tilde{u}(h) \psi_h(t) + \tilde{v}(h) \varphi_h^+(t)] e^{ih(x - \xi a^2 h t)} dh, \quad (5)$$

где $\varphi_h^\pm(t) = \cos \tau \pm i(\Delta_h / \Omega_h) \sin \tau$, $\tau = \Omega_h t / 2$, $\psi_h(t) = i(\Omega_R / \Omega_h) \sin \tau$, $\Omega_h = \sqrt{\Omega_R^2 + \Delta_h^2}$,

$\Delta_h = \Delta + 2Vh$. Функция $\tilde{u}(h)$ определяется из начальных условий: $\tilde{u}(h) = \int_{-\infty}^{\infty} u(x, 0) e^{-ihx} dx$ и

аналогично для $\tilde{v}(h)$. На рис. 1

представлен типичный вид зависимости плотности инверсности, определяемой как $w(x, t) = a \left(|A(x, t)|^2 - |B(x, t)|^2 \right)$, от координаты и времени. Как видно из рисунка, исходное гауссово распределение инверсности, осциллируя во времени, движется вдоль цепочки, при этом уширяясь, т.е. представляет собой пакет Рабиволн. Хотя диапазон изменения изображенной на Рис. 1 плотности инверсности в произвольной точке пространства не очень велик, интегральная характеристика $\int_{-\infty}^{\infty} w(x, t) dx$ (мы будем называть ее интегральной инверсностью), представленная на Рис. 2, осциллирует в диапазоне $[-1, 1]$, что говорит о режиме сильной связи цепочки с

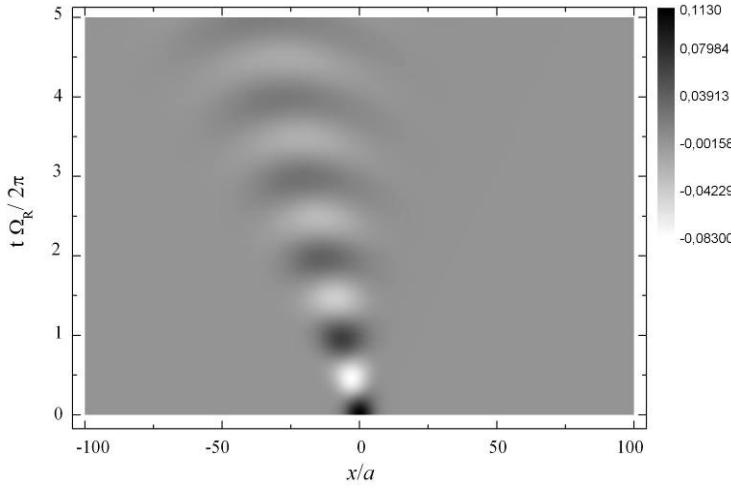


Рис. 1. Пространственно-временное распределение инверсности в цепочке. $A(x, 0) = \exp(-x^2 / 2\sigma^2) / \sqrt[4]{\pi\sigma^2}$, $B(x, 0) = 0$, $\xi = 3\Omega_R$, $\Delta = Vh$, $ka = 0.33$, $\sigma = 5a$.

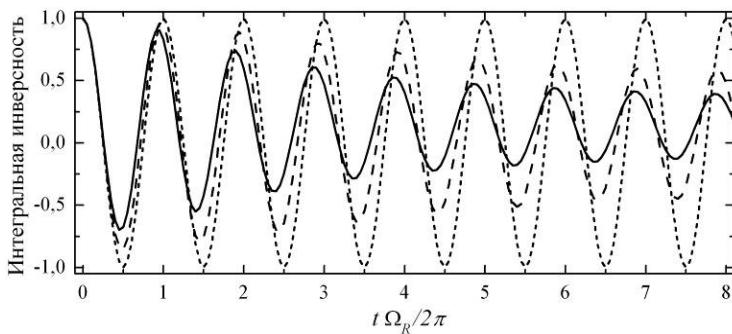


Рис. 2. Зависимость интегральной инверсности от времени. $\Delta = 0$, $k = 0$ (пунктирная линия), $\Delta = 0$, $ka = 0.33$ (сплошная линия), $\Delta = Vh$, $ka = 0.33$ (штриховая линия); Везде $\xi = 3\Omega_R$, $\sigma = 5a$.

полем. Следует отметить, что осцилляции интегральной инверсности при $V \neq 0$ со временем затухают, в то время как при $V = 0$ интегральная инверсность осциллирует гармонически в диапазоне от -1 до 1 (пунктирная линия на Рис. 2). Такое поведение говорит о наличии специфического механизма коллективной дефазировки, обусловленного тем, что Δ_h и, следовательно, частоты образующих волновой пакет отдельных гармоник Ω_h зависят от h . Это означает, что значение $\Delta = 0$ не является

оптимальным для наблюдении за эффектом. Оптимизация Δ позволяет увеличить интенсивность Раби-волн и время дефазировки (штриховая линия на Рис. 2).

Квантовое поле. В случае квантового внешнего поля слагаемое \hat{H}_0 принимает вид

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega_0 \sum_n \hat{\sigma}_{zn} + \hbar \omega \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hbar g \sum_n [\hat{\sigma}_n^+ \hat{a} e^{inka} + \hat{\sigma}_n^- \hat{a}^\dagger e^{-inka}], \quad (6)$$

где g – константа связи КТ с полем, \hat{a}^\dagger , \hat{a} – операторы рождения и уничтожения фотонов.

Слагаемое $\Delta \hat{H}$ остается без изменений. Вектор состояния перепишется в виде

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_p \sum_n (A_{p,n}(t) |a_p, n\rangle + B_{p,n}(t) |b_p, n\rangle), \text{ где } n \text{ – число фотонов.}$$

Уравнения движения оказываются математически эк-

вивалентны случаю классическо-

го поля, с той разницей, что вме-

сто Ω_R надо подставить

$$-2g\sqrt{n+1},$$

а начальные условия зависят от числа фотонов n .

На рис. 3 представлена простран-

ственно-временная динамика

плотности инверсности для кван-

тowego поля, находящегося в ко-

герентном состоянии со средним

$$\langle n \rangle = 5.$$

Как видно из графика, у нас по-

прежнему есть волновой пакет,

движущийся вдоль цепочки, но при этом имеют место явления коллапса и возрождения

пакета, причем *возрождение происходит в другой области пространства*.

Экспериментальная наблюдаемость Раби-волн. Сформулированная теория может

быть применена к различным физическим ситуациям, таким, например, как квантовая

динамика электрона в цепочке КТ. Раби-волны в этом случае реализуются при помощи

оптически индуцированных переходов между размерно-квантованными электронными

уровнями. Переход электрона из одной КТ в другую осуществляется с помощью

туннелирования через потенциальный барьер [11]. Другой пример – ОР

двухэлектронного запутанного состояния $(|01\rangle + |10\rangle)/\sqrt{2}$, происходящие в двух соседних

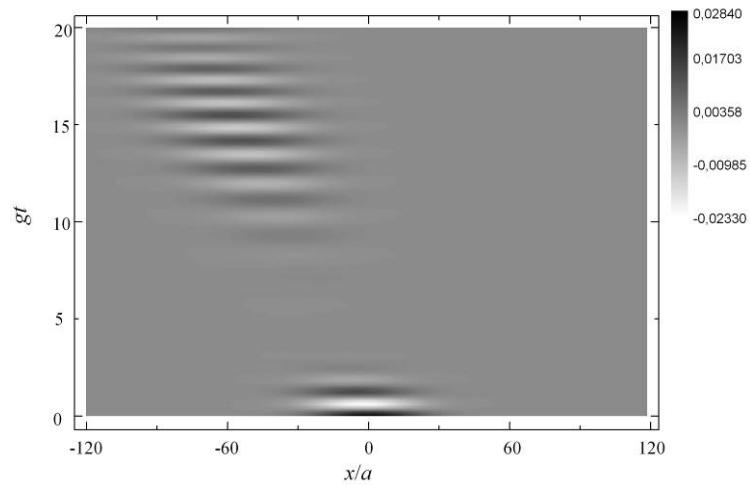


Рис. 3. Пространственно-временное распределение инверсности в цепочке для случая квантового поля. $A(x, 0) = \exp(-x^2 / 2\sigma^2) / \sqrt[4]{\pi\sigma^2}$, $B(x, 0) = 0$, $\xi = 10g$, $\Delta = Vk$, $ka = 0.33$, $\sigma = 20a$.

КТ благодаря диполь-дипольному взаимодействию [8-10]. Построенная модель описывает движение этого состояния как одного целого.

Проведенный теоретический анализ показал, что оптимальное возбуждение Раби-волн достигается, когда константы взаимодействия КТ друг с другом и с внешним полем сравнимы по величине: $\xi \sim \Omega_R$. Другое необходимое условие, налагаемое на Ω_R – чтобы она была много больше всех характерных для системы скоростей релаксации. Для типичных структур из КТ [4] это условие выполняется для широкого диапазона частот: $\hbar\Omega_R \sim 0.001\text{-}1$ мэВ, что соответствует вполне реалистичным значениям напряженности электрического поля $E \sim 10^2\text{-}10^5$ В/см. Как следствие, константа ξ также изменяется в диапазоне от 1 мэВ до 1 мэВ, что достижимо на практике [8, 10, 11] для типичных расстояний между КТ в 4-20 нм.

Раби-волны могут быть обнаружены на эксперименте в спектрах резонансной флуоресценции пространственно-распределенных образцов по доплеровским сдвигу и уширению линий триплета Моллоу, а также по наличию новых, дополнительных к триплету линий. Это, безусловно, потребует высокоупорядоченных цепочек идентичных КТ, чтобы исключить неоднородное уширение, которое может скрыть эффект. Быстрый прогресс в выращивании подобных структур позволяет надеяться, что это будет достижимо уже в ближайшее время. Раби-волны также могут наблюдаться в системах иной физической природы, таких, например, как взаимодействующие Джозефсоновские кубиты [5].

Литература

1. M. O. Scully and M. S. Zubairy, *Quantum Optics* (University Press, Cambridge, 2001).
2. H. C. Torrey, *Phys. Rev.* **76**, 1059 (1949).
3. G. B. Hocker, C. L. Tang, *Phys. Rev. Lett.* **21**, 591 (1968).
4. H. Kamada et al, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 246401 (2001).
5. A. Blais et al, *Phys. Rev. A* **75**, 032329 (2007).
6. J. Förstner et al, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 127401 (2003).
7. G. Ya. Slepyan et al, *Phys. Rev. B* **70**, 045320 (2004); *Phys. Rev. B* **76**, 195328 (2007).
8. Th. Unold et al, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 137404 (2005).
9. J. Gea-Banacloche, M. Mumba, and M. Xiao, *Phys. Rev. B* **74**, 165330 (2006).
10. J. Dankwerts et al, *Phys. Rev. B* **73**, 165318 (2006).
11. V. Tsukanov, *Phys. Rev. B* **73**, 085308 (2006).
12. Y.R. Shen, *The Principles of Nonlinear Optics* (John Wiley & Sons, New York, 1984).

МОРФОЛОГИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОСТРУКТУР ОКСИДА ЦИНКА, СИНТЕЗИРОВАННЫХ МЕТОДОМ ПОГРУЖЕННОГО РАЗРЯДА В ЖИДКОСТИ

Д. А. Лопатик¹, Е. А. Невар¹, Е. А. Быкова²

¹Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларусь, пр. Независимости 68, 220072 Минск, Беларусь, nevar@imapr.bas-net.by

²Институт тепло-и массообмена им. А. В. Лыкова НАН Беларусь, ул. П.Бровки 15, 220072, Минск, Беларусь

Открытие наноструктур можно отнести к одному из наиболее значительных достижений современной науки. В последние десятилетия все большее внимание привлекают наноразмерные материалы, которые обладают особыми свойствами, отличающимися от свойств объемных материалов. К соединениям, интенсивно исследуемым в последнее время, безусловно, относятся наночастицы оксида цинка [1-4]. Такой интерес обусловлен возникновением серии сообщений о получении на наноразмерных структурах ZnO эффективной люминесценции в УФ области при комнатной температуре. Оксид цинка является широкозонным полупроводниковым материалом ($E = 3.37$ эВ) [2]. Обладание большой энергией связи экситона (60 МэВ), а также его стойкость к высоким температурам и агрессивным средам, позволяет рассматривать оксид цинка как перспективный материал для создания ультрафиолетовых низкобарьерных лазеров [1], полевых эмиттеров и других приборов наноэлектроники [2].

В настоящей работе наноструктуры оксида цинка были получены при электрическом разряде в жидкости. Стоит отметить, что данный метод синтеза наночастиц в последнее время получил большое развитие вследствие своей простоты, высокой производительности и низкой стоимости.

Для проведения экспериментов по получению наноструктур оксида цинка методом электрической эрозии в жидкости использовался модифицированный источник питания на базе генератора переменного тока типа ДГ-1. Детально техника эксперимента по формированию наночастиц методом электрической эрозии описана ранее [3]. В настоящей работе использовались искровой и дуговой разряды переменного тока. Электрические разряды инициировались между двумя цинковыми электродами, погруженными в дистиллированную воду. Используемые цинковые электроды имели форму цилиндра диаметром 6 мм и длиной 2 см. Длина зазора между электродами составляла около 0.3 мм. Синтезированные образцы получали в виде коллоидных растворов наночастиц. Полученный рас-

твр отстаивали в течение 3 мин до выпадения видимого осадка на дне. Затем коллоид переливали в чашку Петри за исключением последних 5-8 мл с крупным осадком на дне. Коллоидные растворы наночастиц исследовались спектроскопией оптического поглощения и сканирующей электронной микроскопией (СЭМ). Спектры записывались на спектрофотометре Cary – 500 Scan в диапазоне длин волн от 200 нм до 800 нм с использованием 0.5 см кюветы. СЭМ исследования выполнялись на микроскопе SUPRA 55WDS (Carl Zeiss, Германия) с ускоряющим напряжением электронов до 30 кВ.

В ходе проведения синтеза были получены коллоидные растворы наночастиц для различных режимов включения источника питания разряда, которые впоследствии были отделены от осадков. По окончании протекания разряда на поверхности наблюдалась плавающая пленка, состоящая, вероятно, из наиболее мелких частиц. Генерация разряда приводила к образованию коллоидного раствора темно-серого, почти черного, цвета. Оставаясь в открытом сосуде, коллоид постепенно приобретал молочно-белый цвет. Со временем (через сутки) все коллоидные растворы становились более прозрачными, а осадок на дне сосуда увеличивался. Это можно объяснить тем, что наноразмерные частицы, обладая высокой поверхностной активностью, при столкновениях агглюмировали, образуя более крупные частицы, которые оседали на дно сосуда. При этом было хорошо заметно как происходило постепенное изменение цвета суспензий, и образование хлопьеобразных соединений на поверхности. Через двое суток цвет растворов менялся окончательно и приобретал молочно-белый цвет.

С целью анализа изменения спектров поглощения полученных растворов со временем они были прописаны сразу же после проведения экспериментов (свежие растворы), а также через сутки и трое суток после синтеза. Из полученных спектров (рисунок 1) видно, что коллоидные растворы наночастиц имеют четко выраженные по-

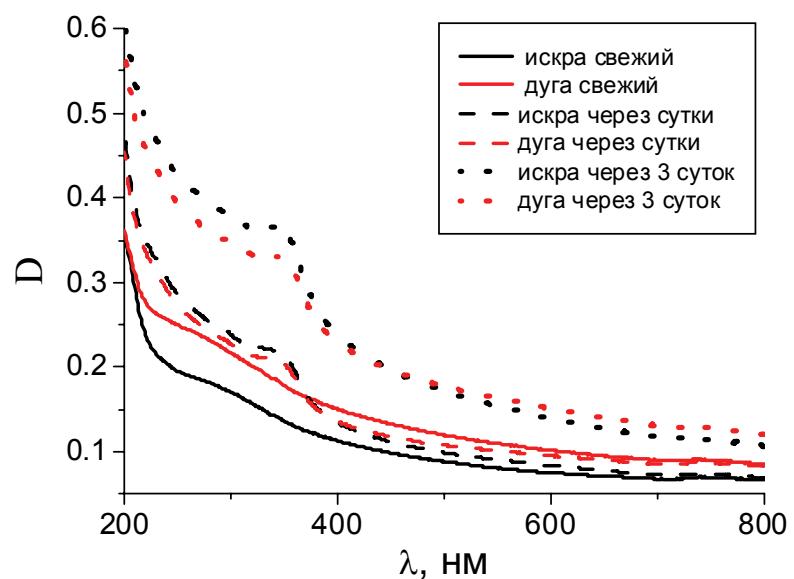


Рис. 1. Спектры поглощения наночастиц цинка, синтезированных в искровом и дуговом разрядах

лосы поглощения и поглощают свет в широкой спектральной области. Оптическая плотность увеличивается при уменьшении длины волны. Оптически более плотный раствор синтезирован в дуговом разряде. Различия в оптической плотности могут быть связаны, прежде всего, с различной концентрацией наночастиц в образцах. Также фактором, оказывающим влияние на разную оптическую плотность растворов, можно назвать различный компонентный состав наночастиц.

Поскольку для создания мощных полупроводниковых светодиодов необходимо получение наноструктур на основе ZnO с преобладающим свечением в ультрафиолетовой области спектра, весьма интересным представляется изучение люминесценции синтезированных нами образцов.

Для исследования люминесценции образцов на кремниевую подложку наносился предварительно высушенный порошок оксида цинка, разведенный дистиллированной водой. Возбуждение образцов осуществлялось на длине волны 365 нм. Характерные спектры люминесценции наночастиц оксида цинка, полученных при искровом и дуговом электрических разрядах в жидкости, приведены на рисунке 2. Видно, что полосы люминесценции, наблюдаемые в исследуемых образцах, расположены в красной области спектра с максимумом вблизи 620 нм.

Объяснить такое явление можно следующим образом. Наличие дефектов в оксиде цинка приводит к увеличению поглощения со стороны длинноволновой области полосы поглощения, где и располагаются линии фотолюминесценции [4]. В то же время в спектрах соответствующих испаренных осадков (рисунок 2) присутствуют лишь пики около 430 нм. Разница между положениями максимумов пиков образцов и их осадков, синтезированных в искре и дуге, подтверждает предположение об отсутствии влияния разряда на морфологию наноструктур. Таким образом, образование наночастиц оксида цинка происходит при разрушении цинковых электродов и последующем окислении полученных час-

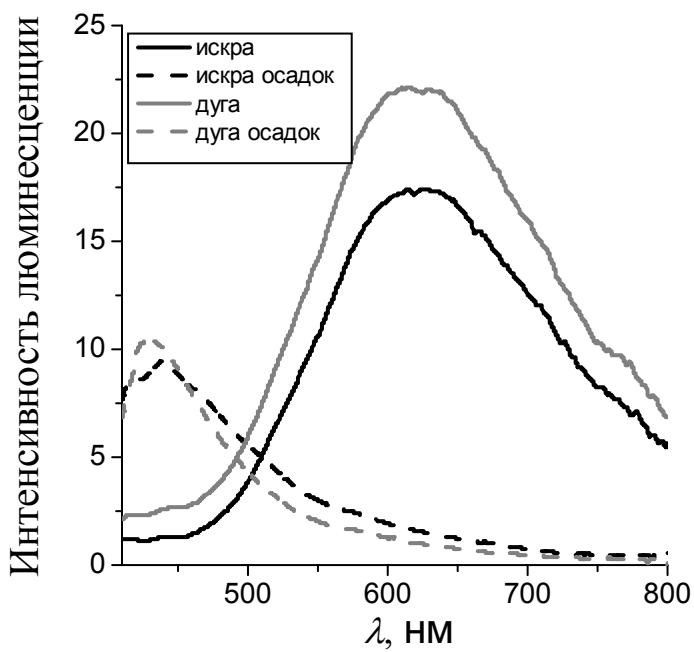
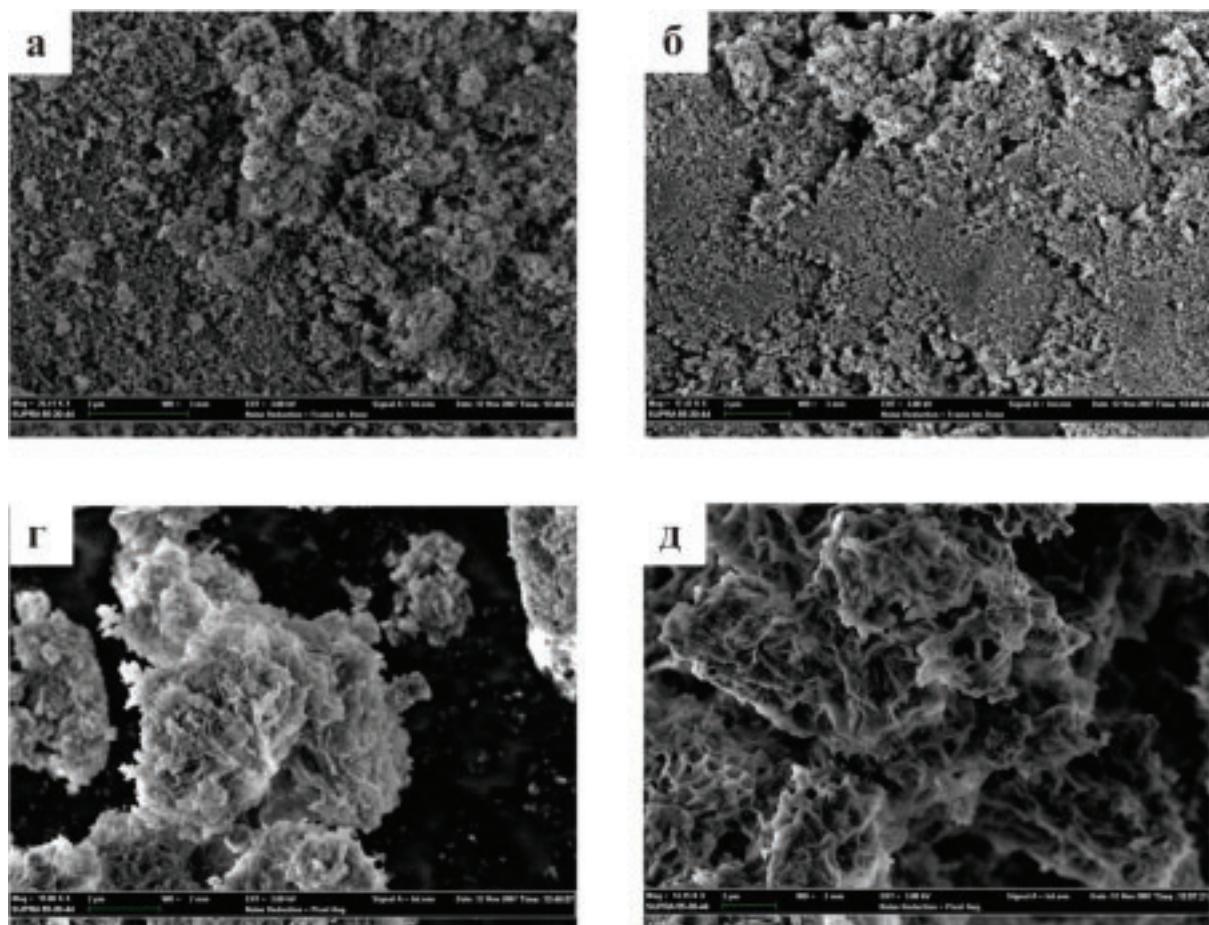


Рис. 2. Спектры люминесценции порошка ZnO при возбуждении излучением с длиной волны 365 нм

тиц кислородом растворенным в воде и окружающей атмосферы.

Сканирующая электронная микроскопия порошков полученных при испарении коллоидных растворов оксида цинка показала, что поверхность образцов выглядит как рыхлая порошкообразная масса (рисунок 3). Стоит отметить, что с помощью этих фотографий оценить морфологические различия образцов достаточно затруднительно. Из изображений (рисунок 3 *а* и *б*) видно, что синтезированные в искровом и дуговом разрядах порошки состоят из близкорасположенных эллипсоидальных частиц. Причем размеры палочковидных зерен, полученных в искре, составляют 25 нм и 75 нм диаметр и длина соответственно (рисунок 3 *а*), и 40 нм и 130 нм для частиц, приготовленных в дуге (рисунок 3 *б*). Большие размеры гранул, наблюдаемые на снимках, полученных с помощью СЭМ, скорее



а – частицы ZnO получены в искровом разряде;

б – частицы ZnO получены в дуговом разряде;

г – осадок из крупных частиц ZnO полученных в искровом разряде;

д – осадок из крупных частиц ZnO полученных в дуговом разряде

Рис. 3. СЭМ-изображения частиц ZnO, полученные методом сканирующей электронной микроскопии.

всего, указывают на агломерацию частиц по мере испарения жидкости из раствора. Оса-

док из крупных частиц, который оставался на дне кюветы, после отделения верхнего слоя, также исследовался методом СЭМ. На фотографиях (рисунок 3 *г* и *д*) видно что порошки осадка состоят из собранных в довольно крупные агломераты нанопластинооксида цинка. При более детальном рассмотрении в образцах наблюдаются еще и гранулированные элипсообразные структуры, аналогичные тем, которые наблюдаются на рисунке 3 *а* и *б*.

На основании проведенных экспериментов можно сделать некоторые предположения о механизме образования наноструктур ZnO в разряде, погруженном в жидкость. В процессе разряда электроды нагреваются, плавятся и испаряются. Вблизи электродов жидкость также испаряется в результате воздействия высокой температуры. Температура в зоне разряда изменяется приблизительно от температуры кипения материала электродов вблизи электродов до температуры кипения жидкости на границе газовая смесь-жидкость. Известно, что цинк не реагирует с водой, следовательно, можно предположить, что в разряде образовывались наночастицы цинка, которые, вступив в реакцию с растворенным в жидкости кислородом, образовали оксид цинка. Данная реакция может также происходить после испарения рабочей жидкости между неокисленными наночастицами цинка и кислородом, содержащимся в воздухе.

В данной работе продемонстрирована возможность получения наноструктурированного порошка ZnO методом погруженного разряда. Результаты проведенных экспериментов позволяют сделать следующие выводы. Параметры разряда (длительность импульса и сила тока в разряде) практически не оказывают влияния на морфологию синтезированных образцов. Определяющее влияние на морфологию и оптические свойства синтезированного материала оказывают, процессы, происходящие в коллоидном растворе после прекращения разряда. Механизм образования наноструктур ZnO: наночастицы цинка, синтезированные в результате разряда, вступая в реакцию с растворенным в жидкости кислородом, образуют оксид цинка.

Литература

1. Wang Zh.L. Materials Today. **6**, 26 (2004).
2. Yu W.D., Li X.M., Gao X.D. et al. Appl. Phys. A. **79**, 453 (2004).
3. B.C. Бураков, Н.А. Савастенко, Н.В. Тарасенко, Е.А. Невар. Журн. прикл. спектр. **75** 111 (2008).
4. А.Н. Жерихин, А.И. Худобенко, Р.Т. Вильямс и др. Квантовая электроника **11**, 975 (2003).

ИЗУЧЕНИЕ НАНОСТРУКТУРНЫХ СОСТОЯНИЙ В ПЛАТИНЕ, ИНИЦИИРОВАННЫХ ИОННЫМ ОБЛУЧЕНИЕМ

Е. В. Медведева, В. А. Ивченко

*Институт электрофизики Уральского отделения РАН, ул. Амундсена, д. 106, 620016
Екатеринбург, Россия, lena@iep.uran.ru*

Исследование изменений структуры металлов и сплавов после взаимодействия ускоренных заряженных пучков частиц с поверхностью показывают, что ионная обработка приводит к формированию особых конденсированных состояний, а также уникальных прочностных и физических свойств в материалах, которые не достигаются традиционными способами [1-3]. В результате развития этого направления радиационной физики твердого тела, возникают новейшие технологии, создаются новые материалы и покрытия.

Цель настоящей работы – изучить эффект образования наносостояний в чистых металлах (Pt) в атомно-пространственном масштабе методом полевой ионной микроскопии (ПИМ) после воздействия заряженных пучков ионов Ar^+ , и проанализировать распределение наноблоков в приповерхностном объеме по размерам в зависимости от расстояния от облученной поверхности и дозы облучения. Использование ПИМ позволяет непосредственно визуализировать и регистрировать атомно-чистую поверхность, и анализировать объект исследования в приповерхностном объеме с пространственным разрешением отдельных поверхностных атомов и таким образом однозначно определять полученные на поверхности и в приповерхностном объеме структурные изменения и новые, возникшие под влиянием определенного внешнего воздействия, кристаллические структуры.

Объектом облучения являлась платина (чистота 99,99 %). В работе облучение игольчатых платиновых образцов, предварительно аттестованных в полевом ионном микроскопе, проводилось ионами Ar^+ с энергией 30 кэВ, дозами (D) 10^{16} и 10^{17} ион/ cm^2 при плотностях ионного тока $j = 150$ ($T=70^0\text{C}$), и 200 $\text{мкA}/\text{cm}^2$ ($T=200^0\text{C}$), соответственно. Имплантированные образцы-острия вновь помещали в ПИМ и, регистрируя фото- или видеокамерой полевые ионные микрокартины поверхности при контролируемом удалении атомных слоев, получали экспериментальный материал для последующего анализа дефектной структуры.

Аттестованные для проведения исследований методом ПИМ платиновые эмиттеры перед облучением имели атомно-гладкую поверхность вершины, близкую к полусферической форме, приготовленную *in situ* полевым испарением поверхностных атомов. Ионные изображения аттестуемых полевых эмиттеров фиксировали совершенную кольцевую кар-

тину монокристаллов, практически свидетельствующую об отсутствии структурных дефектов (рис. 1а). На рис. 1б представлено неоновое изображение атомно-чистой поверхности чистой платины, облученной ионами Ar^+ до $D = 10^{16}$ ион/см². На ионных изображениях выявлялись разрывы кольцевой картины. Именно разрыв в кольцевой картине ионного контраста показывает нарушения совершенной структуры кристалла и определяет контраст от тех или иных дефектов, возникающих в материале после внешних воздействий. В данном случае изменение ионного контраста облученной платины по сравнению с аттестованной свидетельствует о формировании блочной нанокристаллической структуры в приповерхностном объеме материала.

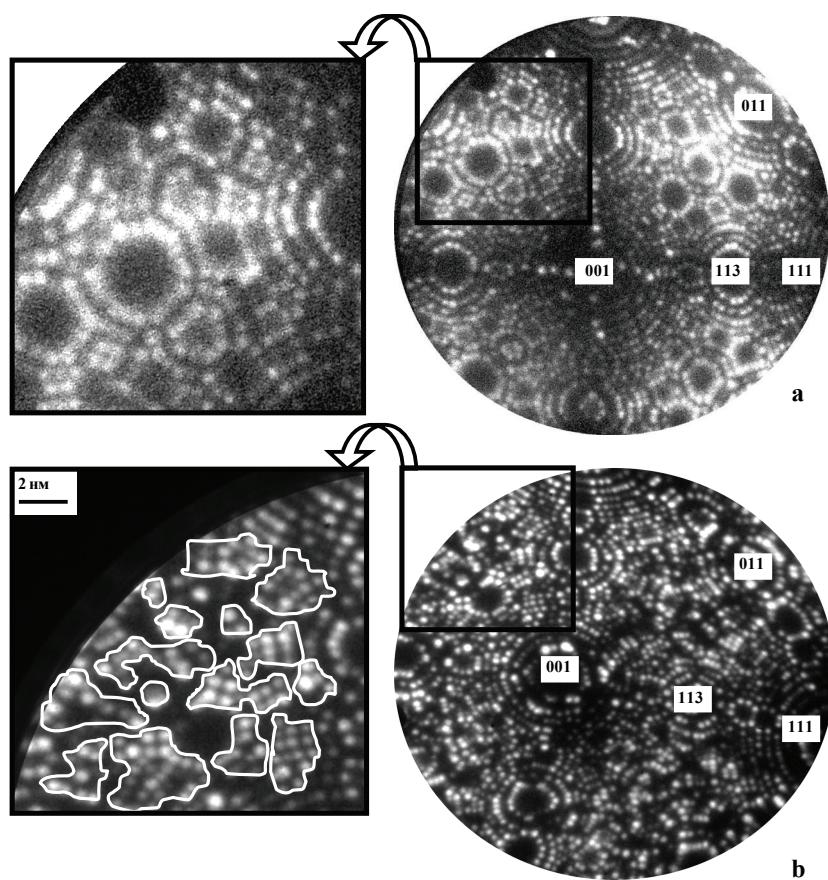


Рис. 1. Неоновые изображения платинового кристалла: (а) – аттестованный; (б) – поверхность после облучения Ar^+ с $D = 10^{16}$ см⁻².

В процессе последовательного удаления поверхностных атомов электрическим полем был исследован объем облученной платины и определена толщина модифицированного слоя. Установлено, что после испарения полем поверхностного слоя толщиной 1,5 нм, наблюдается кольцевая картина, соответствующая необлученному кристаллу. В модифицированном приповерхностном объеме был проведен расчет размеров нанокристаллических блоков и, в итоге, построена гистограмма их распределения по размерам (рис. 2).

Для определения объемных долей наноблоков различных размеров использовался линейный метод А. Розиваля, основанный на принципе Кавальери-Акера.

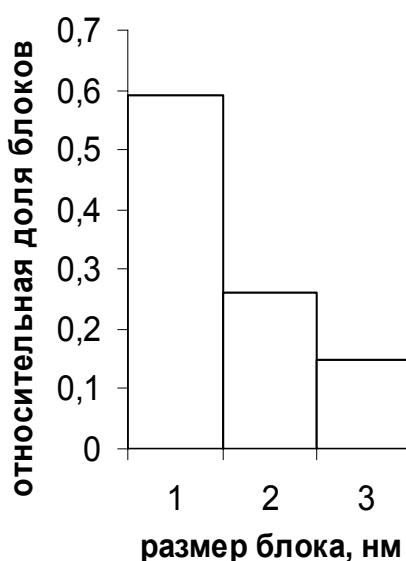


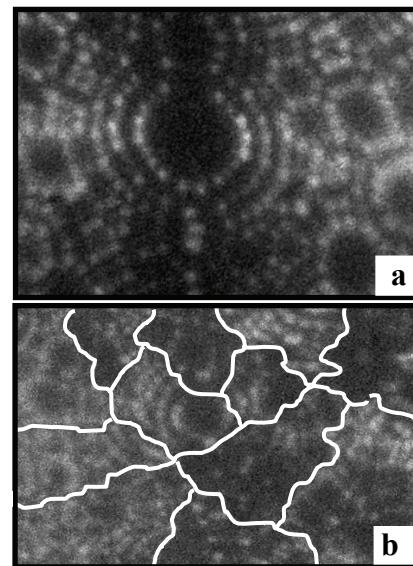
Рис. 2. Распределение блоков по размерам в приповерхностном объеме платины, облученной ионами Ar^+ ($D = 10^{16}$ ион/ см^2).

Рис. 3. Участки поверхности платины, аттестованной (а) и имплантированной (б) Ar^+ ($D = 10^{17}$ см^{-2}); (б) – после удаления 100 атомных слоев (19,6 нм).

В случае облучения до более высокой дозы ($D=10^{17}$ см^{-2}) эффект формирования блочной нанокристаллической структуры (с размером блоков 1-5 нм) наблюдается в приповерхностном объеме толщиной не менее 20 нм от облученной поверхности (рис. 3). Изучение ~300 микроснимков позволило измерить поперечные и продольные размеры нанокристаллических блоков и ширину граничной области. На рис. 4 приведено распределение блоков по размерам, а на рис. 5 показано изменение среднего размера блоков в зависимости от глубины от облученной поверхности. Ширина граничной области варьировалась от 0,4 до 0,8 нм на различных участках поверхности облученной ионами платины.

В [4] было показано, что подобные нанокристаллические блочные структуры реализовывались в процессе интенсивных пластических деформаций. На основании этого можно предположить, что исследуемая в настоящей работе наноблочная структура является результатом деформационных процессов, протекающих в материале в ходе ионного облучения и в последующий за облучением промежуток времени.

Данные экспериментальных исследований и теоретических расчетов [5] показывают, что в металле в процессе облучения величина инициируемых напряжений значительно выше предела текучести материала. Поэтому можно предположить, что воздействие облучения фактически является своеобразным нагружением подобно механическому нагруже-



нию. При этом происходит «закачка» энергии в облучаемый кристалл. Необходимым условием формирования наносостояний в платине при проведенном энергетическом воздействии является то, что количество поглощаемой материалом энергии было достаточным для подобных изменений структуры. Получение таких наноструктур может оказаться перспективным для создания высоких поверхностных свойств материалов.

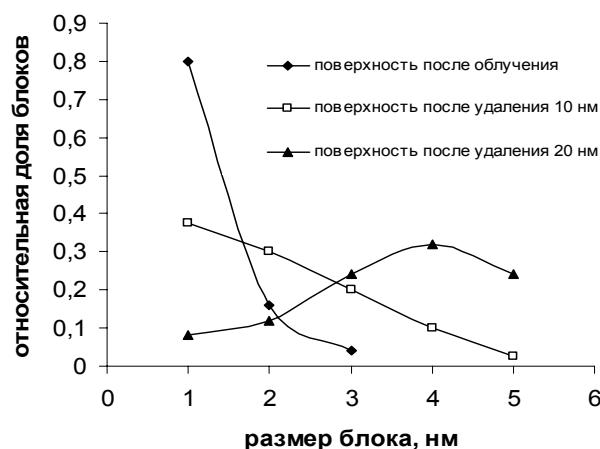


Рис. 4. Распределение блоков по размерам на поверхности платины, облученной Ar^+ ($D=10^{17}$ ион/см 2), в зависимости от глубины приповерхностного объема.

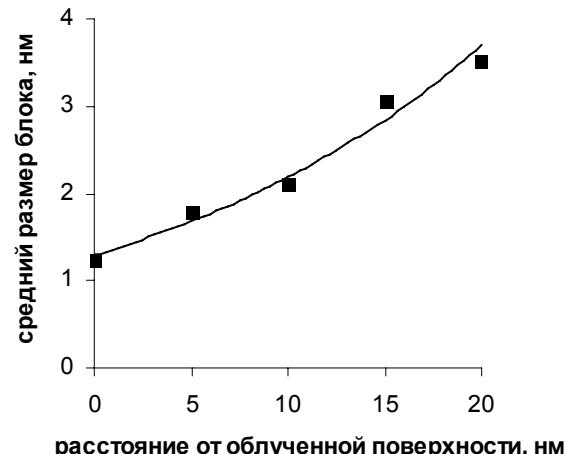


Рис. 5. Изменение размеров блоков по глубине сечения от облученной поверхности платины, облученной Ar^+ ($D=10^{17}$ ион/см 2).

Работа выполнена при поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований (грант № 07-02-00722-а), Программы ОФН-5 «Новые материалы и структуры», а также Уральского отделения РАН (грант молодых ученых и аспирантов).

Литература

1. Дранова Ж.И., Михайловский И.М., Суворов А.Л. // Приборы и техника эксперимента. – 1980. – № 3. – с. 225-228.
2. Зайцев С.В., Суворов А.Л. // Поверхность. – 1985. – № 9. – с. 104-109.
3. А.Ю. Бункин, В.А. Ивченко, Л.Ю. Кузнецова и др. // ФММ. – 1990. – вып. 7. – с. 111-118.
4. Б.М. Эфрос, С.Г. Сынков, Е.В. Попова, Т.П. Заика, Л.В. Лоладзе, В.Г. Сынков, В.А. Ивченко, В.Н. Варюхин // ФТВД. – 2002. – т. 12. – № 2 . – 27-37.
5. Титов В.В. Роль механических напряжений при легировании материалов с помощью ионных пучков. – М.: ИАЭ. – 1983. – 47 с. / Препринт ИЭА – 3774/11.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ВОДОРАСТВОРИМЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК CdSe/ZnS С БЕЛКАМИ ПЛАЗМЫ

В. А. Решетов, В. П. Зорин

*Белорусский государственный университет, физический факультет, кафедра биофизики,
ул. Бобруйская 5, 220050 Минск, Беларусь, vadim.reshetov@gmail.com*

Исследования люминесцентных полупроводниковых нанокристаллов, или квантовых точек (КТ), получили широкое распространение за последние два десятилетия. Стремительный рост активности в разработке новых наноматериалов обусловлен потенциально широкими областями применения наноструктур. Благодаря отличительным оптическим свойствам нанокристаллов, таким как узкий симметричный спектр испускания, высокий квантовый выход, большие времена жизни флуоресценции, высокая фотостабильность, зависимость оптических спектров от размера структур [1], перспективно использование КТ в биологических приложениях в качестве биосенсоров, меток для визуализации клеточных и тканевых структур [2-4], средств направленной доставки лекарственных соединений [3]. Для успешного применения КТ в биоприложениях необходимо детальное изучение взаимодействия КТ с биологическими структурами, в том числе белками крови.

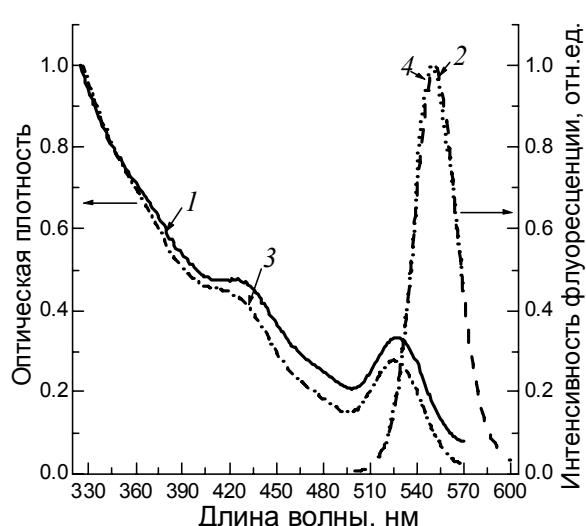
Целью данной работы явилось исследование поведения водорастворимых КТ в водных средах и изучение процессов взаимодействия КТ с белками сыворотки крови. Эти вопросы имеют значение для понимания механизмов транспорта и распределения КТ в биосистемах, для разработки методов визуализации различных тканевых структур и функциональных процессов в организме.

В работе использовались КТ CdSe/ZnS типа ядро/оболочка, поверхность которых была модифицирована для придания гидрофильных свойств полиэтиленгликолем, глутатионом или меркаптопропионовой кислотой и тиоглицерином. Исследовались КТ с диаметром ядра CdSe ~2.6 нм (КТП, КТГ, КТМТ) и ~6.2 нм (КТГ6, КТМТ6).

Нормированные спектры поглощения и флуоресценции КТ с диаметром ядра 2.6 нм, модифицированных глутатионом (КТГ), показаны на рис. 1. Данные КТ характеризуются широким спектром поглощения (рис. 1, 1) с максимумами на длине волны 437 нм и 527 нм и наличием интенсивной флуоресценции. КТГ обладают узким (полуширина 28 нм) симметричным спектром флуоресценции с максимумом на длине волны 551 нм (рис. 1, 2).

Аналогичные исследования спектральных характеристик были проведены и для КТ с модификацией поверхности другими системами (КТП, КТМТ), а также с диаметром ядра 6.2 нм (КТГ6, КТМТ6). Согласно полученным результатам, спектры КТ с различной мо-

дификацией поверхности очень близки между собой. Спектральные характеристики КТ с диаметром ядра 6.2 нм значительно отличаются от таковых для КТ с ядром 2.6 нм. Первый экситонный максимум в спектре поглощения смещен до 630 нм, максимум флуоресценции приходится на длину волны 661 нм.



1 – спектр поглощения в буфере Трис-НCl, 2 – спектр флуоресценции в буфере Трис-НCl, 3 – спектр поглощения в растворе БСА, 4 – спектр флуоресценции в растворе БСА

Рис. 1. Спектры флуоресценции и поглощения КТГ

относительного квантового выхода флуоресценции в процессе инкубирования в водных растворах сильно уменьшается (в 2-4 раза за 1 час инкубирования).

Значительный интерес представляет исследование стабильности флуоресцентных свойств КТ в растворах с различным содержанием белка. На рис. 2 приведена кинетика изменения интенсивности флуоресценции КТГ при инкубировании в растворах бычьего сывороточного альбумина (БСА).

В отсутствие белка интенсивность флуоресценции КТГ значительно падает через 2 часа инкубирования в буферном растворе. Длительное время нахождения КТ в буферном растворе приводит к тому, что нанокристаллы агрегируют и выпадают в осадок. Добавление БСА приводит к существенному увеличению устойчивости флуоресцентных свойств КТ. Это выражается не только в снижении амплитуды, но и в замедлении скорости изменения интенсивности флуоресценции КТ. При больших концентрациях белка нанокристаллы сохраняют интенсивную флуоресценцию при временах инкубирования более 30 суток.

Введение белка в водные растворы КТ практически не влияет на спектры поглощения (рис. 1, 3) и флуоресценции (рис. 1, 4) по сравнению с аналогичными характеристиками КТ в буферном растворе. Для спектров флуоресценции характерен гипсохромный сдвиг на 1 нм, что, по-видимому, связано с изменением характеристик микроокружения КТ вследствие связывания с белком.

Для использования КТ в практических целях в биологических системах важным аспектом является стабильность их флуоресцентных свойств. Результаты наших исследований флуоресценции водорастворимых КТ показывают, что величина их отно-

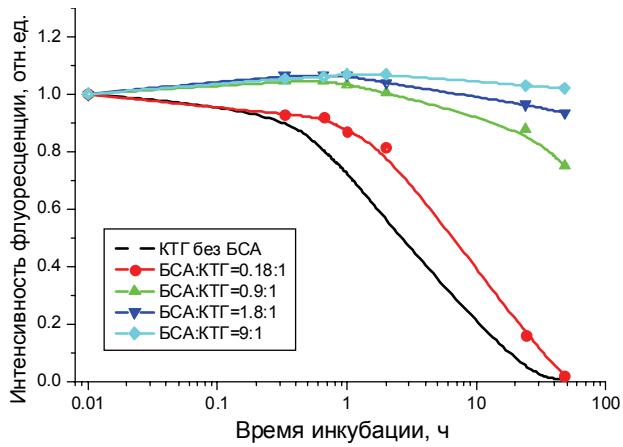


Рис. 2. Устойчивость флуоресцентных свойств КТГ в растворах БСА

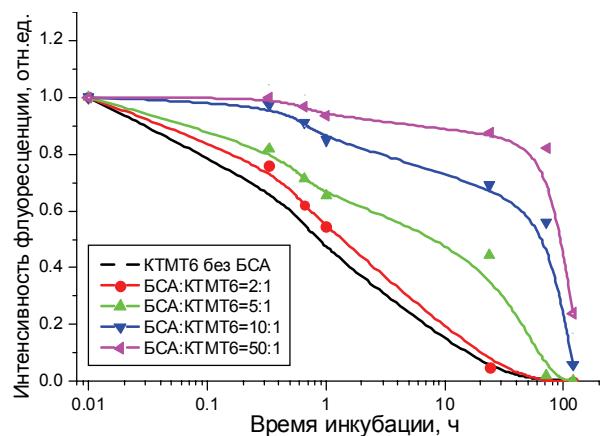


Рис. 3. Устойчивость флуоресцентных свойств КТМТ6 в растворах БСА

Аналогичные результаты были получены и для КТМТ6 (рис. 3). При низких соотношениях БСА:КТМТ6 стабилизирующий эффект белка выражен значительно меньше, чем для КТГ. Так, при соотношениях БСА:КТМТ6 менее 2:1 не наблюдается изменения устойчивости по сравнению с КТМТ6 в водных растворах без белка.

Из общих соображений можно предположить, что при взаимодействии молекулы БСА обволакивают КТ, приводя к образованию дополнительного слоя, защищающего нанокристаллы от взаимодействия с компонентами и примесями буферных растворов. Это значительно снижает скорость падения интенсивности флуоресценции, а также препятствует агрегации КТ в течение длительного времени. Для КТ с диаметром ядра 2.6 нм устойчивость флуоресцентных свойств значительно возрастает по сравнению с КТ в водных растворах уже при соотношениях БСА:КТ больше 1:1. В случае КТ с диаметром ядра 6.2 нм подобный эффект наблюдается при соотношениях БСА:КТ, больших 10:1. Эти различия, очевидно, обусловлены отличиями площадей поверхности нанокристаллов — для покрытия КТ большего диаметра белковой оболочкой требуется значительно большее число молекул белка.

При исследовании процессов связывания КТ с белками сыворотки нанокристаллы помещали в раствор сыворотки и инкубировали в течение 1 часа, затем полученный образец пропускали через хроматографическую колонку 1.2x45 см, заполненную гелем Sephadex 400-HR. Пропускание водорастворимых КТ через колонку показывает, что в свободном виде нанокристаллы не выходят из колонки, что, по всей видимости, связано с образованием устойчивых связей КТ с полимерным гелем. Существенно иное поведение демонстрируют нанокристаллы, проинкубированные с белками сыворотки крови: КТ вы-

ходят из колонки в виде одного широкого пика. Измерения содержания КТ в полученных хроматографических фракциях по поглощению и флуоресценции КТ позволяет сделать вывод, что большая часть КТ (более 70%) выходит из колонки. Наши данные свидетельствуют, что КТ взаимодействуют в основном с сывороточным альбумином. Поэтому основное внимание было сосредоточено на взаимодействии КТ с сывороточным альбумином.

При исследовании процессов связывания КТ с БСА нанокристаллы предварительно инкубировали с белком при различных соотношениях БСА:КТ, а затем пропускали через колонку. Чистый БСА без КТ выходит из колонки в виде полосы с объемом исключения 15-17 мл. Количество вышедших из колонки КТ зависит от концентрации БСА в образце. Анализ профилей элюции КТ и БСА показывает, что нанокристаллы выходят из колонки с объемом элюции 10-13 мл, причем БСА распределен между двумя фракциями: 10-13 мл и 15-18 мл, что, очевидно, соответствует фракциям белка, связавшегося с КТ, и мономерному белку, не связанному с КТ (рис. 4). При уменьшении соотношения БСА:КТ наблюдается увеличение веса фракции альбумина, выходящего с КТ, одновременно с уменьшением относительного количества белка, проходящего через колонку независимо от КТ.

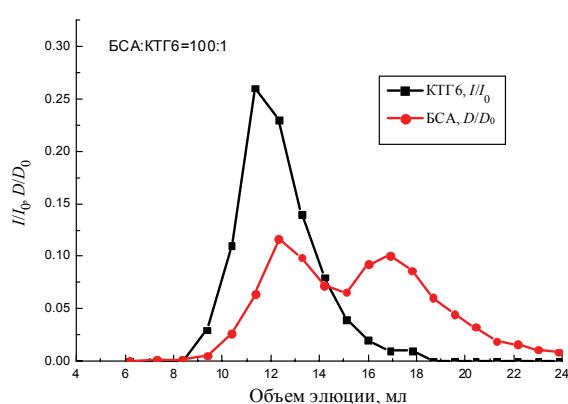


Рис. 4. Профили элюции КТГ6 и БСА

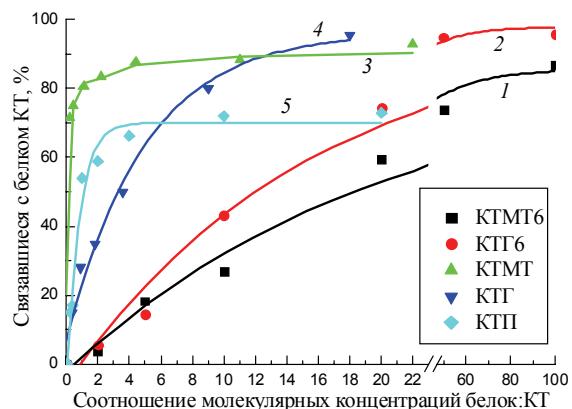


Рис. 5. Стехиометрия связывания КТ с БСА: 1 – КТМТ6, 2 – КТГ6, 3 – КТМТ, 4 – КТГ, 5 – КТП

Исходя из полученных результатов, можно сделать вывод, что КТ образуют комплексы с БСА, проходящие через колонку. Экранировка поверхности нанокристаллов сорбированными молекулами белка предотвращает связывание с полимерным гелем и обеспечивает возможность элюции КТ через колонку. Комплексообразование сопряжено с появлением более крупных структур по сравнению с нативными белками, о чем свидетельствует смещение полос БСА в гель-хроматограммах в сторону меньших объемов исключения. Размер комплексов зависит от соотношения БСА:КТ в исследуемом образце, так как при изменении соотношения наблюдается небольшое смещение пика выхода на-

нокристаллов и белка из колонки.

Процесс комплексообразования белка и КТ характеризуется насыщением при высоких концентрациях белка. На основании анализа зависимости выхода КТ из колонки от концентрации белка можно охарактеризовать стехиометрию комплексообразования КТ и БСА. Так, для КТ с размером ядра 2.6 нм (рис. 5, 3-5) насыщение комплексообразования происходит при соотношении молекул белка и КТ около 5:1. Для КТ с диаметром ядра 6.2 нм (рис. 5, 1-2) насыщение связывания наблюдается при значительно больших концентрациях белка (24:1 для КТГ6 и 40:1 в случае КТМТ6), что, очевидно, является следствием большей площади поверхности данных наноструктур. При достижении насыщения значительно возрастает фракция белка, несвязанного с КТ и выходящего в мономерной форме. Образованные БСА и КТ комплексы достаточно устойчивы и характеризуются временем диссоциации БСА с поверхности КТ большим, чем время проведения разделения.

Наблюдаются отличия в связывании белка и КТ с различной модификацией поверхности. Отличия могут быть связаны с изменением сродства КТ к белку и заполнением поверхности нанокристаллов. Для КТМТ характерно быстрое насыщение даже при невысоких концентрациях белка (соотношение БСА:КТ ~1:1). Более объемная оболочка из полимерных молекул у КТП, вероятно, обуславливает необходимость присутствия в образце большего количества молекул белка для достижения насыщения (рис. 5).

Полученные результаты показывают, что КТ могут связывать большое число молекул белка, причем стехиометрия комплексообразования зависит от размеров нанокристалла и от свойств поверхности КТ. Образование на поверхности КТ белковой оболочки существенно изменяет их поведение в водных растворах и в составе биологических систем, что должно учитываться при характеристике процессов распределения КТ в биосистемах.

Литература

1. Sahoo S.K., Panda J.J. The present and future of nanotechnology in human health care. Clinical Nanomedicine 20-31 (2007).
2. Baker J. R. et al. Pharm. Res. **19**, 1310–1316 (2002).
3. Wickline S. A. et al. Magn. Reson. Med. **51**, 480–486 (2004).
4. Medintz I.L., Uyeda H.T., Goldman E.R., Matoussi H. Nat. Mater. **4**, 435–446 (2005).

РЕЗОНАНСНЫЕ МЕТОДЫ ДЛЯ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ

В. А. Карпович, Г. Я. Слепян, О. В. Филипенок

НИУ «Институт ядерных проблем БГУ», 11, ул. Бобруйская, 220050, г. Минск, Беларусь,
тел. 2264220, факс 2265124, ann@inp.minsk.by

При измерении параметров наноматериалов применяются различные методы: волноводный, антенный, резонансный. Применение волноводных методов связано со значительными техническими трудностями: большие погрешности таких измерений приводят к неоднозначным и не воспроизводимым результатам. Антенные измерения требуют сложной и громоздкой аппаратуры (безэховая камера, остронаправленная антенна с большим коэффициентом усиления, мощный и высокостабильный источник сигнала). Сказанное позволяет заключить, что наиболее перспективным для данной задачи является резонансный метод измерений.

Центральной проблемой при реализации резонансного метода является оптимальный выбор типа используемого резонатора.

Среди широкодиапазонных высокодобротных резонаторов наилучшими характеристиками в сантиметровом диапазоне длин волн обладают разработанные нами цилиндрические многомодовые широкодиапазонные резонаторы [1-3], а в миллиметровом и субмиллиметровом диапазонах - открытые квазиоптические резонаторы с разреженным спектром собственных мод, а также новый тип резонатора – гребенчатый [4, 5]. Комплект высокодобротных широкодиапазонных резонаторов в диапазоне частот от 06 до 260 ГГц представлен на рисунке 1.



Рис. 1. Фотография комплекта высокодобротных резонаторов

Разработанные резонаторы характеризуются значениями собственной добротности

$Q > 106$ и перестраиваются в диапазоне частот стандартного волновода с КСВ < 1,7 без дополнительного согласования. Основные технические характеристики резонаторов приведены в таблице 1.

Таблица 1. Основные технические параметры комплекта резонаторов

Модель	Диапазон, ГГц	Тип резонатора	Канал	Добротность	КСВН
PBO101	32,0-53,57	Открытый квазиоптический	Волновод	60000	1,65
PBO111	53,57-78,33			66000	1,70
PBO121	78,33-118,1			75000	1,70
PBO131	118,1-178,4			75000	1,90
PBC501	17,44-21,6	Цилиндрический		42000	1,80
PBC511	21,6-25,95			48000	1,90
PBC521	25,95-32,0			45000	2,0
PBC531	32,0-37,5			45000	2,0
PBG531	32,0-37,5	Гофрированный		60000	1,65
PBG541	37,5-47,0			60000	1,65
PBG551	47,0-53,57			60000	1,6
PBC311	2,0-3,0	Цилиндрический	Коаксиал	18000	1,6
PBC321	3,0-4,0			24000	1,6
PBC331	4,0-5,2			51000	1,6
PBC371	4,9-5,64			57000	1,6
PBC401	5,64-7,2			42000	1,6
PBC411	6,93-8,15			42000	1,6
PBC421	7,6-9,8			45000	1,5
PBC451	9,4-12,05			45000	1,8
PBC061	8,15-12,05			42000	1,6
PBC461	12,5-15,4			42000	1,95
PBC481	15,4-17,44			42000	1,95
PBC071	12,05-17,44			42000	1,8
PBC241	0,60-1,20			10000	1,2
PBC251	1,07-2,14			10000	1,6

Методика эксперимента

Широкодиапазонность резонатора является важнейшим фактором при проведении данных исследований и позволяет измерить частотные зависимости материальных параметров наносред, а не только их значения на фиксированной частоте. Такие резонаторы использовались в данной работе для измерения относительной диэлектрической проницаемости и тангенса угла диэлектрических потерь наноматериалов [6-8] в требуемом частотном диапазоне.

Экспериментальные исследования композитных наноматериалов резонансными методами проводились на специально разработанных стендовых установках (Рис. 2).

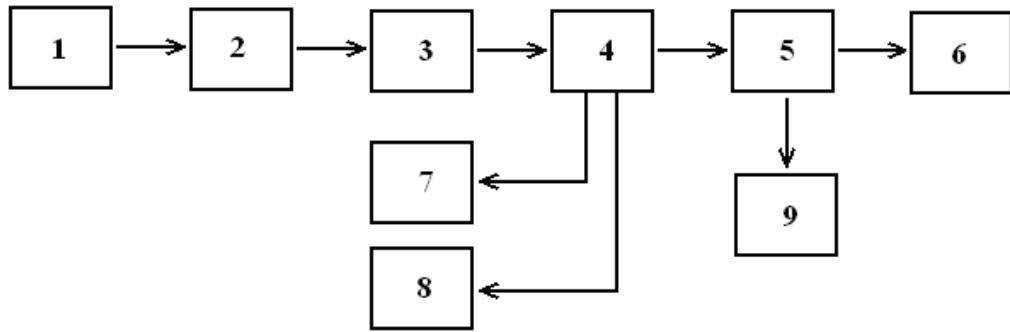


Рис. 2. Блок-схема измерений параметров наноматериалов в СВЧ диапазоне с помощью высокодобротных резонаторов, где 1 – генератор, 2 – вентиль, 3 – поляризационный аттенюатор, 4 – направленный ответвитель, 5 – измерительная линия, 6 – резонатор, 7 – электронно-счетный частотомер, 8 – измеритель мощности, 9 -детекторная секция

Сигнал от высокостабильного источника сигнала 1 (частотная нестабильность $<10^{-6}$) через ферритовый вентиль 2, который служит для развязки (при этом обеспечен уровень переотражений $< 0,2$ Дб), поступает на направленный ответвитель 4 с повышенной направленностью (>25 дБ), в одном из каналов которого будут проводится измерения резонансной частоты 7, а в другом канале будет измеряться мощность 8. Далее, прямой сигнал, проходящий через ответвитель, поступает на измерительную линию 5, с помощью которой измерялся КСВ. Аттенюаторы 3 включены для обеспечения стабильного уровня мощности (при этом обеспечено $7,0$ мВт ± 10 мкВт). В качестве задающего генератора использован генератор на диоде Ганна (частотная стабильность 10^{-6} , достигнута использование внешнего стабилизирующего гофрированного резонатора [4,5] с $Q \approx 10^5$). Нагруженная добротность резонатора и нагруженная добротность резонатора со вставками из нанокомпозитных образцов измерялась по методике «половинной мощности» на резонансных частотах во всем частотном диапазоне резонатора ($Q = \frac{f_0}{2\Delta f}$, где f_0 – резонансная частота, $2\Delta f$ – ширина линии на уровне 3 дБ).

Впервые на основе высокодобротных широкодиапазонных резонаторов разработаны методики и стендовая аппаратура для прецизионного измерения характеристик искусственных композитных (в том числе и нанокомпозитных) материалов в диапазоне частот 53 – 78 ГГц.

Результаты и их обсуждение

Результаты измерений частотной зависимости величины диэлектрической проницаемости различных образцов УНТ и УНВ волн приведены на Рис. 3 и Рис. 4.

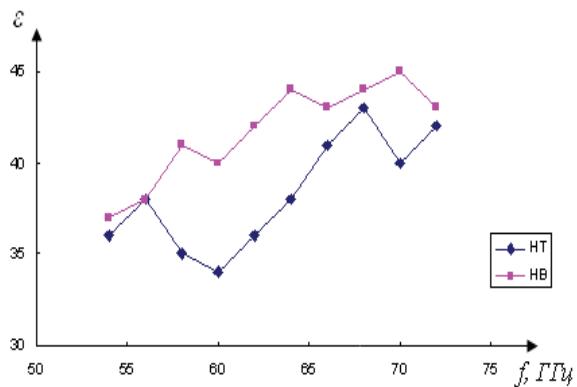


Рис. 3. Частотные зависимости диэлектрической проницаемости: 1 график – треугольники – углеродные нанотрубки с 10% содержанием примесей Fe_2O_3 ; 2 график – прямоугольники – углеродные нановолокна с 10% содержанием примесей Fe_2O_3 .

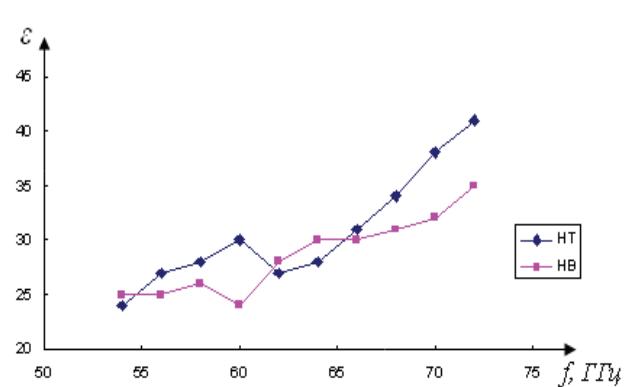


Рис. 4. Частотные зависимости диэлектрической проницаемости: 1 график – треугольники – углеродные нанотрубки без примесей; 2 график – прямоугольники – углеродные нановолокна без примесей.

Результаты электродинамического моделирования высокодобротных цилиндрических резонаторов «на проход» с частичным нанозаполнением с развитием численных методов расчета добротности объемных резонаторов со вставками из углеродных наноматериалов, а также результаты измерения диэлектрической проницаемости и диэлектрических потерь в углеродных наноматериалах, показали хорошее совпадение численных расчетов и экспериментальных результатов.

Работа выполнена при финансовой поддержке ГКПНИ «Нанотех» (задание 1.09) и ГКПНИ «Электроника» (задание 4.21).

Литература

1. Родионова В.Н., Карпович В.А., Слепян Г.Я. Исследования в СВЧ-диапазоне: электродиаанамика резонансных систем, приборы и оборудование для решения научных и прикладных задач // Фундаментальные и прикладные физические исследования. 1986-2001гг.: Сб.тр.; Под ред. В.Г.Барышевского. - Минск: БГУ, 2001. - С.295-311.
2. V.Karpovich, E.Novikov, V.Rodionova, G.Slepyan. Past, present and future millimeter wave's resonator systems.// V Inter. Symposium on physics and engineering of microwave, millimeter and submillimeter waves. Kharkov, Ukraine, June 21-26, 2004. -P. 601-602.
3. V.Karpovich, G.Slepyan, V.Skresanov, V.Rodionova, O.Filipenok. Grating coupling elements for high-Q resonators and rectangular waveguides of the millimeter wave band//Journal of Communications Technology and electronics, 2006.- Vol.12.- P.1227-1231.
4. В.Карпович, В.Родионова, Г.Слепян. Высокодобротные гребенчатые резонаторы// Радиотехника и электроника. Т.47, №5. 2002. - С.570-574.
5. V. Karpovich, V.Rodionova, G.Slepyan. High-quality corrugated resonators for measurements at millimeter and submillimeter-wave bands// Electromagnetics, No11, 2004. - P.515-521.

6. V.Karpovich, V.Rodionova, A.Rakov, I.Anoshkin, O.Filipenok. Electromagnetic wave absorption and reflection by carbon nanotube composites//The VI Intern. Symposium on Physics and Engineering of microwaves, millimeter and submillimeter waves, Kharkov, Ukraine, June 26-30, 2007. – P.
7. Филипенок О.В. Стенд для измерения электрофизических характеристик наноматериалов в сверхвысокочастотном диапазоне//11 Международный молодежный форум «Радиоэлектроника и молодежь в XXI веке», Харьков, 10-12 апреля 2007. – С.189.
8. Карпович В.А., Родионова В.Н., Скресанов В.Н. Исследования электрофизических свойств наноматериалов в миллиметровом диапазоне спектральными методами. // ФФТ-2007. Актуальные проблемы физики твердого тела” 23-26 октября 2007 г., Минск, 2007.- С.182-185.

СЕКЦИЯ:
ФИЗИКА ПОЛИМЕРОВ И ОРГАНИЧЕСКИХ
СОЕДИНЕНИЙ

ВЛИЯНИЕ СОСТАВА ЖИДКИХ СЦИНТИЛЛЯТОРОВ НА ОТНОШЕНИЕ «ПИК/ДОЛИНА» ПРИ РЕГИСТРАЦИИ ИОНИЗИРУЮЩИХ ИЗЛУЧЕНИЙ

Т. Е. Горбачева, Ю. Т. Выдай, В. М. Шершуков, В. А. Тарасов, А. И. Бедрик,
Е. Я. Кожурова, Д. А. Елисеев

*Институт сцинтилляционных материалов, НТК "Институт монокристаллов" НАН
Украины, пр. Ленина, 60, 61001, Харьков, Украина; e-mail: gorbacheva@isc.kharkov.com*

Для регистрации ионизирующих излучений широкое применение находят жидкие сцинтилляторы (ЖС) [1]. ЖС – это многокомпонентная система, содержащая основу, состоящую из одного или нескольких растворителей и люминесцентные добавки. Эта система должна быть устойчива достаточно длительное время к атмосферным и радиоактивным воздействиям, между составляющими не должно быть химического взаимодействия. Растворители, применяемые в качестве сцинтилляционных матриц, должны обладать прозрачностью к излучению растворенных в них люминофоров, способными эффективно передавать энергию. Люминофоры наряду с высокой сцинтилляционной эффективностью, должны иметь хорошую растворимость в основах и не быть склонными к агрегации, иметь высокий квантовый выход фотolumинесценции в используемой жидкой матрице. Необходимо также, чтобы максимум люминесценции соответствовал спектральным параметрам ФЭУ. Обычно для достижения этих целей используется 2 люминофора (так называемые первичные и вторичные добавки). Использование вторичных добавок позволяет сместить спектр люминесценции сцинтиллятора в длинноволновую область, увеличивая при этом такой спектрометрический параметр как световой выход [2]. Уменьшая или повышая концентрацию добавок, можно менять свойства жидких сцинтилляторов. Однако, результаты ранее проведенных исследований [3,4], свидетельствуют о том, что увеличения светового выхода жидких сцинтилляторов можно достичь также за счет применения новых основ, используя уже известные люминесцентные добавки.

При разработке жидких сцинтилляторов, кроме требований, связанных с высоким световым выходом, необходимо уделять внимание такому спектрометрическому параметру как пик/долина. Он характеризует форму амплитудного спектра импульсов, который получается при регистрации излучения с помощью сцинтилляторов и с применением специальной аппаратуры. Этот параметр равен отношению числа импульсов в фотопике амплитудного спектра импульсов N_p к числу импульсов в долине N_d , т.е. $p/d = N_p/N_d$. Параметр пик/долина влияет как на спектрометрические, так и на радиометрические характеристики жидкого сцинтиллятора. Нами проведены экспериментальные исследования

влияния состава разработанных жидких сцинтилляторов на указанный выше параметр. Растворители, применяемые в качестве сцинтиляционных основ, должны быть по возможности менее токсичными, пожаробезопасными и недорогими.

Мы исследовали в качестве основ для жидких сцинтилляторов вазелиновое масло (ВМ) и третбутилтолуол (ТБТ). В качестве первичной люминесцентной добавки применялся 2-(4-бифенил)-5-фенилоксазол (ВРО), а вторичной – замещенное 1,4-бис 2,5-фенилоксазолил-бензола (POPOPa).

Использование в качестве вторичного растворителя третбутилтолуола обеспечивает достаточную растворимость люминесцирующих добавок, высокую прозрачность основы и эффективный перенос энергии электронного возбуждения.

В литературе имеется информация о получении жидких сцинтилляторов на основе вазелинового масла в смеси с п-терфенилом и POPOP [3]. Однако, световой выход такого сцинтиллятора оказался невысоким. Нами показано, что использование в качестве вторичной основы третбутилтолуола в определенном процентном соотношении позволяет существенно увеличить световой выход жидкого сцинтиллятора. Как это влияет на параметр пик/долина, было предметом дальнейших исследований.

Образцы жидких сцинтилляторов размещались в одинаковых кюветах в оптическом контакте с фотоэлектронным умножителем (ФЭУ) типа R 1307 фирмы «Hamamatsu». Геометрия измерений для всех образцов была одинаковой. Использовался радиоактивный источник Cs-137. Регистрировались конверсионные электроны с энергией 624 кэВ. В качестве эталона использовался жидкий сцинтиллятор (ЖС-1) на основе толуола с добавками п-терфенила (4г/л) и POPOPa (0,1г/л) (ЖС-1).

Табл. Экспериментальные и расчетные данные сцинтиляционных параметров для ряда разработанных образцов жидких сцинтилляторов при регистрации конверсионных электронов.

№ об- разца	Люминофоры		Растворители		Пик/доли на	Световой выход, %
	основ- ной	Сместитель спектра	основной	дополни- тельный		
ЖС-1 (эталон)	п-тер- фенил	POPOP	толуол	-	2,5	100
1	BPO	*л-POPOP	ВМ	ТБТ	2,88	100
2	BPO	POPOP	ВМ	ТБТ	3,7	128
3	BPO	*л-POPOP	ВМ	ТБТ	2,9	88

*л-POPOP – 1,4-бис(2-(5-фенил-4-изобутилоксазолил) бензол

Из таблицы видно, что оптимальным является содержание компонентов у образца

№2. Увеличение концентрации вазелинового масла почти в 2 раза по сравнению с ТБТ при сохранении концентрации добавок (образец №3) приводит к уменьшению параметра пик/долина на 22%. При этом наблюдается ухудшение светового выхода. Сохранение в образце №1 соотношений растворителей таким же, как и в образце №2, но уменьшение концентрации первичной добавки в 1,6 раза, приводит к ухудшению параметра пик/долина.

На рисунке 1 представлены спектры амплитуд импульсов для образца №1 и образца №2. Из рисунка видно, что уменьшение параметра пик/долина у образца №1 происходит за счет увеличения числа импульсов в долине Nd.

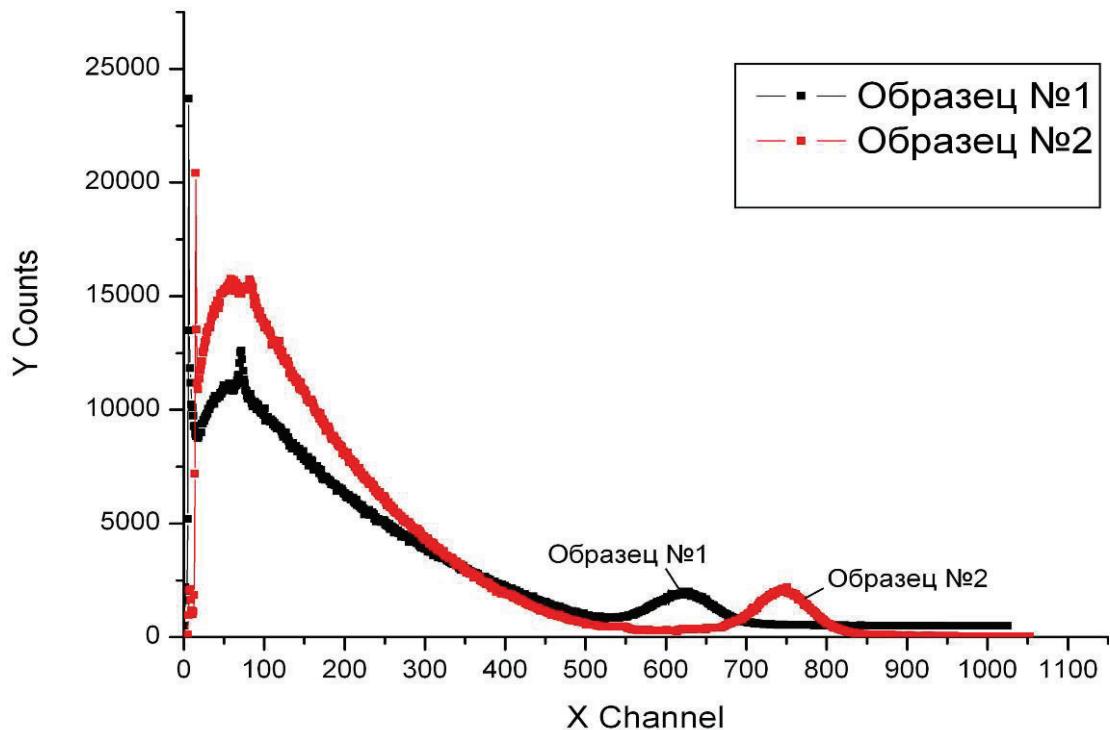


Рис. 1. Амплитудные спектры импульсов исследуемых образцов №1 и №2 при регистрации конверсионных электронов от радионуклида Cs-137 с энергией 624 кэВ.

Следовательно, указанные изменения в составе жидких сцинтилляторов №1 и №3 концентрации основ (растворителей) и первичной люминесцентной добавки приводят к ухудшению параметра пик/долины. Это связано с изменением суммарного числа импульсов в фотопике, что влечет за собой ухудшения эффективности регистрации ионизирующих излучений. Такой экспериментальный факт возможно связан с увеличением миграционных потерь при передаче энергии возбужденного состояния в жидких сцинтилляторах. Это приводит к неравномерности светового выхода по объему жидкого сцинтиллятора. Поэтому важно использовать для оценки качества жидких сцинтилляторов параметр

пик/долина как дополнительный к основным спектрометрическим параметрам: световому выходу и энергетическому разрешению, в случаях, когда предъявляются повышенные требования к однородности жидкого сцинтиллятора.

Литература

1. Галунов Н.З., Семиноженко В.П. Теория и применение радиолюминесценции органических конденсированных сред. – Киев, Наукова думка, 1997. – 280с.
2. Красовицкий Б.М., Болотин Б.М. Органические люминофоры. – М.: Химия, 1984. – 336с
3. Подужайло В.Ф., Красовицкий Б.М. Исследования в области получения жидкых сцинтилляторов. Монокристаллы, сцинтилляторы и органические люминофоры, вып..5, Харьков, 1969. с. 9-19.
4. Васильченко Ю.Г., Головкин С.В., Медведков А.М., Соловьев А.С.// Дешевые эффективные органические сцинтилляторы/ ПТЭ. 2000. №5. с.34

ОБРАЗОВАНИЕ ПЕРВОГО СУПЕРВИТКА В КОЛЬЦЕВОЙ ЗАМКНУТОЙ МОЛЕКУЛЕ ДНК

А. В. Ширко, А. Н. Камлюк, В. Б. Немцов

Белорусский государственный технологический университет, факультет химической технологии и техники, кафедра теоретической механики, ул. Свердлова 13а, 220006 Минск, Беларусь; e-mail: kamluk@mail.ru

В 1963 году было обнаружено, что в некоторых вирусах ДНК существует в кольцевой замкнутой форме [1]. В этом состоянии две одиночные цепи, из которых состоит ДНК, замкнуты каждая на себя. Схематически кольцевая замкнутая ДНК изображена на рисунке 1. Видно, что две комплементарные нити оказываются в кольцевой ДНК зацепленными, причем они образуют зацепление высокого порядка.

Открытие кольцевых ДНК привело к постановке принципиально новых проблем, поскольку оказалось, что многие физические свойства кольцевой замкнутой формы радикально отличаются от свойств линейной формы. Отличие в свойствах этих двух форм ДНК обусловлено не только тем, что в одном случае есть концевые эффекты, а в другом их нет. Они затрагивают все участки молекулы и целиком обусловлены топологическими ограничениями, возникающими в кольцевой замкнутой форме ДНК. Топологические ограничения состоят в том, что порядок зацепления двух комплементарных цепей Lk должен быть строго неизменным. Очевидно, эти топологические ограничения немедленно снимаются после разрыва хотя бы одной из цепей.

Выделенная из клеток ДНК оказывается не только кольцевой замкнутой, но и сверхспирализованной. В суперспиральном состоянии двойная спираль в целом является напряженной, что может приводить как к изменению фактического числа оснований, приходящегося на один виток двойной спирали в кольцевых замкнутых ДНК, так и к регулярному изгибуанию оси спирали в пространстве (рисунок 2). Последняя возможность и обусловила термин «сверхскручивание».

Для описания образования первого супервитка используем модель молекулы ДНК в виде упругого стержня единичной длины. Каждому значению естественной координаты s ($0 \leq s \leq 1$), отсчитываемой вдоль оси стержня, соответствует определенное значение радиус-вектора $r(s)$. Ориентация поперечного сечения стержня задается ортогональной системой единичных векторов (d_1, d_2, d_3) . Вектор d_3 , нормальный к плоскости сечения стержня, является первой производной от радиус-вектора $d_3 = r'$ и представляет собой вектор касательной, проведенной к оси стержня. Штрих означает дифференцирование по s . Век-

торы d_1 и d_2 лежат в плоскости сечения стержня и совпадают с его главными осями.

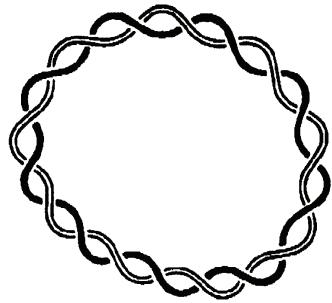


Рис. 2. Схематическое изображение коль-
цевой замкнутой ДНК

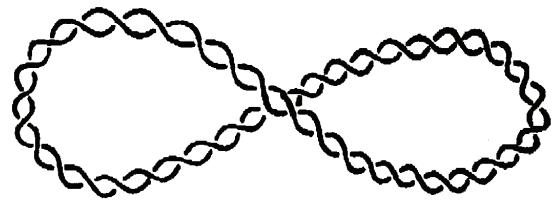


Рис. 3. Сверхскрученная кольцевая замкну-
тая ДНК с одним супервитком

Как известно [2], равновесие стержня соответствует минимуму свободной энергии деформации при определенных ограничениях, наложенных на пространственные конфигурации стержня [3]. В нашем случае будем использовать условие замкнутости кольца, которое является интегральной связью, условие равенства векторов касательных в начальной и конечной точках кольца (условие гладкости замыкания) и условие связи нормали и бинормали в начальной и конечной точках кольца.

Энергию деформации выразим с помощью ее линейной плотности $W(u_1, u_2, u_3, s)$

$$U = \int_0^1 W(u_1(s), u_2(s), u_3(s), s) ds, \quad (1)$$

где $W(u_1, u_2, u_3, s) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 K_i (u_i - u_i^0)^2$ ($K_1 = K_2 = g_b$ – жесткость на изгиб, $K_3 = 0,8K_1 = g_t$ – жесткость на кручение).

Будем считать, что в отсутствии внешних сил стержень имеет определенную начальную конфигурацию с минимальной энергией, отвечающей деформациям $u_i^0(s) = (\mathbf{d}_1^0, \mathbf{d}_2^0, \mathbf{d}_3^0)$. Ориентацию поперечных сечений стержня (d_1 , d_2 , d_3) зададим с помощью компонент кватерниона $\mathbf{q} = \mathbf{q}(s) = (q_1, q_2, q_3, q_4) \in \mathbb{R}^4$

$$[\mathbf{d}_1(\mathbf{q}) \ \mathbf{d}_2(\mathbf{q}) \ \mathbf{d}_3(\mathbf{q})] = \begin{bmatrix} q_1^2 - q_2^2 - q_3^2 + q_4^2 & 2q_1q_2 - 2q_3q_4 & 2q_1q_3 + 2q_2q_4 \\ 2q_1q_2 + 2q_3q_4 & -q_1^2 + q_2^2 - q_3^2 + q_4^2 & 2q_2q_3 - 2q_1q_4 \\ 2q_1q_3 - 2q_2q_4 & 2q_2q_3 + 2q_1q_4 & -q_1^2 - q_2^2 + q_3^2 + q_4^2 \end{bmatrix}. \quad (2)$$

Учтем, что в ортогональной системе координат (d_1 , d_2 , d_3) кватернион имеет норму $|\mathbf{q}| = 1$. Деформации u_i , выраженные в компонентах кватерниона с учетом нормы кватер-

ниона, примут вид [4]

$$\begin{aligned} u_1(s) &= -2q_1q_4' + 2q_2q_3' - 2q_3q_2' + 2q_4q_1', \\ u_2(s) &= -2q_1q_3' - 2q_2q_4' + 2q_3q_1' + 2q_4q_2', \\ u_3(s) &= 2q_1q_2' - 2q_2q_1' - 2q_3q_4' + 2q_4q_3'. \end{aligned} \quad (3)$$

Равновесные формы соответствуют минимуму энергии деформации, поэтому для минимизации функционала (1), учитывая условие замкнутости кольца и норму кватерниона, составим функцию Лагранжа вида

$$L(\mathbf{q}, \mathbf{q}', s) = W(\mathbf{q}, \mathbf{q}', s) - \mathbf{m} \cdot \mathbf{d}_3(\mathbf{q}) - \mu(s) |\mathbf{q}|, \quad (4)$$

где $\mathbf{m} = (m_1, m_2, m_3)$, $\mu(s)$ – множители Лагранжа. Последнее слагаемое в (4) представляет собой конечную связь.

Уравнения равновесия стержня получим с помощью системы уравнений Эйлера-Лагранжа в следующей форме:

$$\frac{d}{ds} \frac{\partial L}{\partial q_k'} - \frac{\partial L}{\partial q_k} = 0, \quad k = 1..4. \quad (5)$$

Для решения нелинейной системы (5) используем численный метод с конечно-разностной аппроксимацией производных. Полученная система уравнений содержит $5n+3$ неизвестных. Дополнительные $n+3$ уравнения (основных уравнений – $4n$) получены из условия замкнутости кольца, представленного в дискретной форме

$$\sum_{i=0}^n \mathbf{d}_3(\mathbf{q})_i = 0 \quad (6)$$

и условия выполнения нормы кватерниона на каждом дискретном шаге

$$|\mathbf{q}_k| = 1. \quad (7)$$

Для проведения численного анализа системы (5), представленной в дискретно-разностной форме, и дополнительных уравнений (6) и (7) стержень был разбит на 36 частей. При этом полагалось, что он имеет такую начальную конфигурацию, при которой кривизны $u_1^0 = u_2^0 = u_3^0 = 0$, что отвечает прямолинейному стержню. В качестве начального приближения были взяты координаты кольца единичной длины, выраженные через углы Эйлера ($\theta_i = 0.2\pi$, $\phi_i = 0$, $\psi_i = 0$), а затем преобразованы в компоненты кватерниона с помощью формул [5]. Расчеты проводились в безразмерной форме, для чего каждое урав-

нение системы (6) было умножено на $1/g_b$. При этом соотношение жесткостей на кручение и изгиб принимали $C = g_t / g_b = 0.8$, что характерно для молекулы ДНК. Поиск решений системы уравнений (5)–(7) был осуществлен по методу Ньютона – Рафсона при соответствующих граничных условиях: $\mathbf{r}(0) = \mathbf{r}(1) = \langle 0, 0, 0 \rangle$, $\mathbf{q}(0) = \langle 0, 0, \sin(\alpha_{tw} / 4), -\cos(\alpha_{tw} / 4) \rangle$, $\mathbf{q}(1) = \langle 0, 0, \sin(\alpha_{tw} / 4), \cos(\alpha_{tw} / 4) \rangle$.

Равновесные конфигурации определялись при различных значениях твиста α_{tw} – угла поворота сечения одного конца стержня относительно фиксированного второго. После нахождения первой равновесной конфигурации, соответствующей значению $\alpha_{tw} = 0$, эта форма принималась за начальное приближение на следующем шаге ($\alpha_{tw} + \Delta\alpha_{tw}$). Координаты точек стержня, отвечающие положению его равновесия, можно записать следующим образом:

$$\begin{aligned} X_j &= \sum_{i=0}^j (\mathbf{d}_3(\mathbf{q})_i)_x \Delta s = \sum_{i=0}^j (2q_1^i q_3^i + 2q_2^i q_4^i) \Delta s, \\ Y_j &= \sum_{i=0}^j (\mathbf{d}_3(\mathbf{q})_i)_y \Delta s = \sum_{i=0}^j (2q_2^i q_3^i - 2q_1^i q_4^i) \Delta s, \\ Z_j &= \sum_{i=0}^j (\mathbf{d}_3(\mathbf{q})_i)_z \Delta s = \sum_{i=0}^j \left(-(q_1^i)^2 - (q_2^i)^2 + (q_3^i)^2 + (q_4^i)^2 \right) \Delta s. \end{aligned} \quad (8)$$

Зная значения пространственных координат (5), деформаций (3), а также выражения, определяющие изменения осевой линии стержня ΔTw , порядка зацепления ΔLk и райзинг Wr [4], можно исследовать влияние α_{tw} на топологические и дифференциально-геометрические свойства ДНК (рисунок 3). Кроме того, для равновесных конфигураций, соответствующих различным значениям α_{tw} можно рассчитать энергию кручения u_t , изгиба u_b и полную энергию u как функцию ΔLk (рисунок 4).

В данной работе энергия (u_t , u_b , u) отнесена к жесткости молекулы ДНК на изгиб g_b . Следует также отметить, что при расчете первого супервитка учитывался контакт между двумя соприкасающимися ветвями. В этом случае большую роль играет соотношение диаметра стержня к его длине (в нашей работе для расчетов было принято $d / L = 0.03$). В зависимости от внешних условий (например, ионное окружение, температура, давление), в которых находится ДНК, меняется ее жесткость. Поэтому, варьируя параметром $C = g_t / g_b$, теоретически можно исследовать поведение ДНК в разных условиях (явная связь между параметром C и внешними условиями пока не установлена). На рисунке 5 по-

казаны зависимости u_t , u_b , u от параметра C и критического твиста α_{tw}^{kp} .

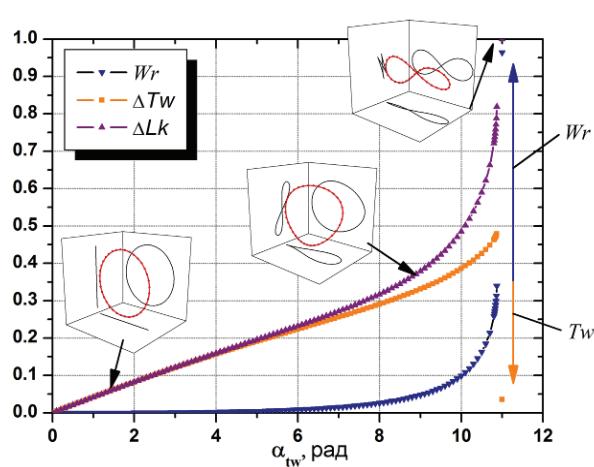


Рис. 4. Влияние твиста на топологические характеристики

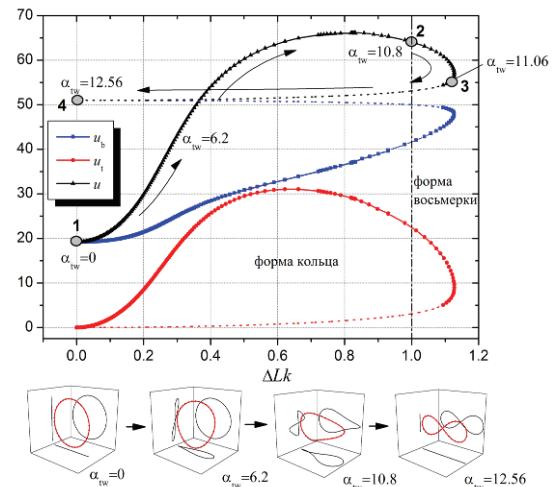


Рис. 5. Влияние ΔLk на энергию кручения, изгиба и полную энергию

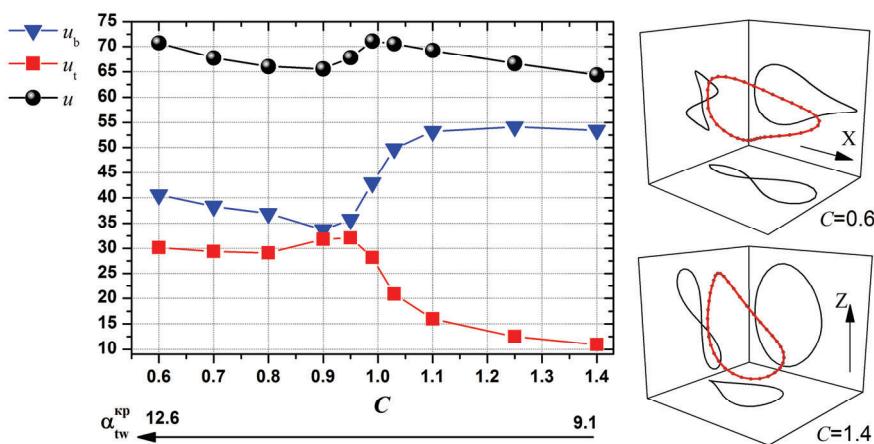


Рис. 6. Зависимость энергий u_t , u_b , u от параметров C и α_{tw}^{kp}

Видно, что при $C < 1$ деформированное кольцо стремится вытянуться вдоль оси X , а при $C > 1$ – вдоль оси Z . Полученные результаты позволяют исследовать равновесные пространственные конфигурации кольцевых замкнутых ДНК.

Литература

1. М. Д. Франк-Каменецкий, А. В. Вологодский. УФН **134**, 641 (1986).
2. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Теоретическая физика. Т. 7. Теория упругости, М., 1987.
3. P. B. Furrer, R. S. Manning, J. H. Maddocks. Biophys. J. **79**, 116 (2000).
4. А. В. Ширко, А. Н. Камлюк, В. Б. Немцов. ДНАНБ **51**, 34 (2007).
5. D. J. Evans, S. Murad. Molecular Physics **34**, 327 (1977).

УПАКОВКА ДНК НА БЕЛКОВЫЙ КОМПЛЕКС ПОД ДЕЙСТВИЕМ СЛЕДЯЩЕЙ СИЛЫ

А. Н. Камлюк, С. А. Борисевич, А. В. Ширко

Белорусский государственный технологический университет,
факультет химической технологии и техники, кафедра теоретической механики,
ул. Свердлова 13а, 220006 Минск, Беларусь; e-mail: a_shirko@tut.by

Выяснение молекулярных механизмов функционирования сложных клеточных структур является одним из наиболее актуальных аспектов активно развивающегося направления в современной биологии – клеточной инженерии. Среди исследуемых проблем одно из главных мест занимает проблема строения, организации и работы хромосомного аппарата. Решение данного вопроса позволило бы понять, каким образом происходит дифференцировка клеток, являющихся элементарными единицами организма, и привело бы к созданию общей теории регуляции работы генов высших организмов.

Для модели молекулы в виде стержня Кирхгофа можно получить сравнительную оценку величины упаковывающей нагрузки, необходимой для обеспечения начала процесса компактизации, при различных вариантах ее приложения. На рисунках 1–3 представлены схемы приложения внешнего силового воздействия на ДНК, которая в результате этого нагружения должна быть прижата к цилиндрической оболочке (гистонам) [1].

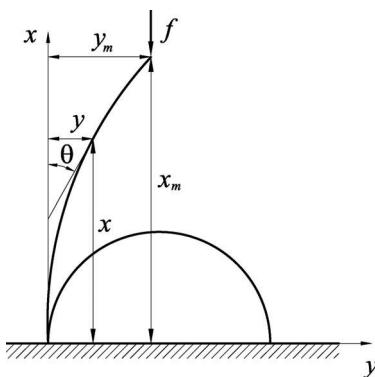


Рис. 1. Схема нагружения вертикальной силой

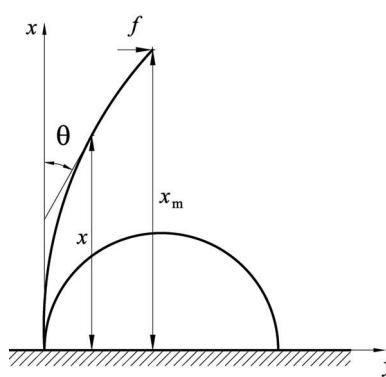


Рис. 2. Схема нагружения горизонтальной силой

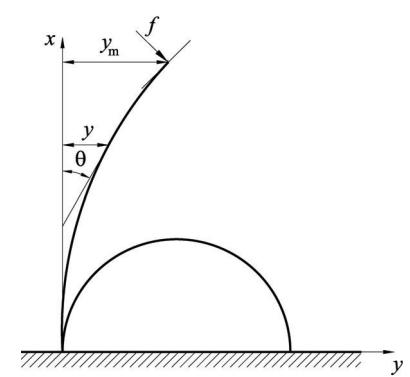


Рис. 3. Схема нагружения следящей силой

Запишем в общем виде уравнение чистого изгиба для стержня круглого поперечного сечения [2]

$$EJ \left(\frac{d\vec{r}}{ds} \times \frac{d^3\vec{r}}{ds^3} \right) = \vec{F} \times \frac{d\vec{r}}{ds}, \quad (11)$$

где EJ – жесткость стержня на изгиб, \vec{r} – радиус-вектор, описывающий положение конца стержня, s – дуговая координата, \vec{F} – сила, приложенная к свободному концу стержня.

Выберем плоскость изгиба в качестве плоскости xy . Вводим угол θ между касательной к линии стержня и осью x (рисунок 1). Тогда

$$\sin \theta = \frac{dy}{ds}, \cos \theta = \frac{dx}{ds},$$

где x и y координаты точек стержня. Раскрывая векторные произведения в (1) получаем уравнения для θ как функции длины дуги s

$$EJ \frac{d^2\theta}{ds^2} - F_x \sin \theta + F_y \cos \theta = 0, \quad (12)$$

где F_x - проекция силы на ось x , F_y - проекция силы на ось y .

Для первой схемы $F_y = 0$, $F_x = -f$. Тогда на основании (2) получаем следующее уравнение

$$EJ \frac{d^2\theta}{ds^2} + f \sin \theta = 0. \quad (13)$$

Для второй схемы $F_y = f$, $F_x = 0$. Тогда получаем

$$EJ \frac{d^2\theta}{ds^2} + f \cos \theta = 0. \quad (14)$$

Для третьей схемы $F_x = -f \sin \theta_m$, $F_y = f \cos \theta_m$ (θ_m – угол наклона касательной на конце стержня). В итоге уравнение (2) принимает вид

$$EJ \frac{d^2\theta}{ds^2} + f \cos(\theta - \theta_m) = 0. \quad (15)$$

Введем новые переменные: $S = s / L$, $F = fL^2 / (EJ)$ (L – длина молекулы), т. е. перейдем для универсальности к безразмерной форме записи уравнений (3)–(5). Теперь решаем нелинейные уравнения численно с помощью пакета *Maple 12*. Длина L молекулы выбрана такой, чтобы она смогла сделать полуоборот по поверхности гистонов радиусом R , т. е. $L = \pi R$.

Уравнение (3) решаем при следующих начальных условиях: $\theta(0) = 0$, $(d\theta/ds)_{s=0} = M_{s=0} / EJ = f y_m / EJ$ (y_m – горизонтальное смещение конца стержня). Вводя безразмерную координату $Y_m = y_m / L$, можем записать последнее граничное условие в безразмерном виде $(d\theta/dS)_{s=0} = F Y_m$. Результаты, полученные для первой схемы, пред-

ставлены на рисунках 4–5. Зависимость максимального горизонтального смещения от величины продольной силы, показанная на рисунке 4, получена итерационным методом. Расчеты показали (см. рисунок 5), что прилегание молекулы к гистонам обеспечивается при наименьшей величине безразмерной силы $F = 4$. Действительное значение силы можно получить по выражению $f = F \frac{EJ}{L^2} = F \frac{EJ}{(\pi R)^2}$. Подставляя значения $EJ = 2,7 \cdot 10^{-28}$ Нм² (жесткость ДНК на изгиб) и $R = 3,5$ нм (радиус гистонов), получаем $f = 8,94 \cdot 10^{-12}$ Н.

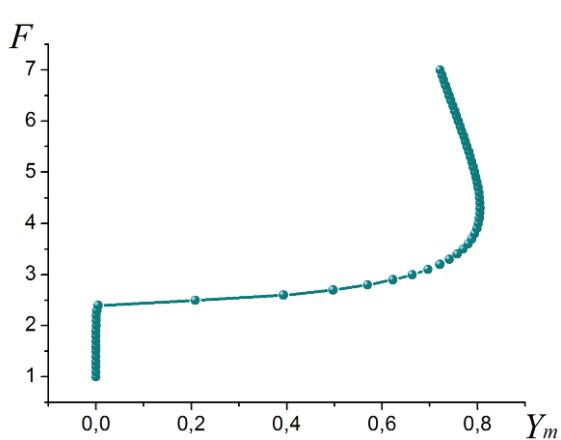


Рис. 4. Зависимость максимального горизонтального смещения от величины продольной силы

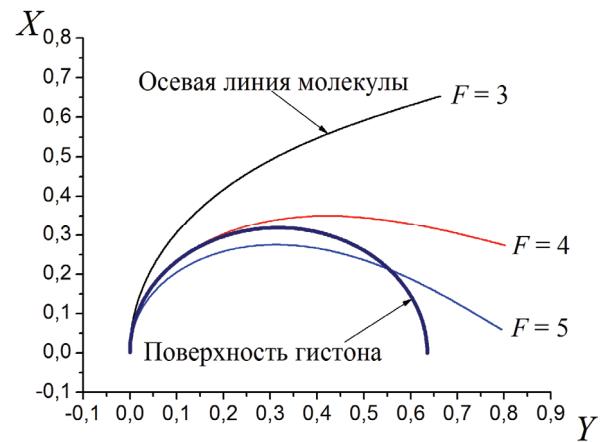


Рис. 5. Упругая линия оси молекулы при различных величинах продольной силы

Решаем уравнение (4) для второй системы при следующих начальных условиях:

$\theta(0) = 0$, $\left(\frac{d\theta}{ds}\right)_{s=0} = \frac{M_{s=0}}{EJ} = \frac{fx_m}{EJ}$ (x_m - вертикальное смещение конца стержня). Вводя без-

размерную координату $X_m = x_m / L$, можем записать последнее граничное условие в без-

размерном виде $\left(\frac{d\theta}{dS}\right)_{s=0} = FX_m$. Результаты, полученные для второй схемы, представлены

на рисунках 6–7. Расчеты показали (см. рисунок 7), что прилегание молекулы к гистону обеспечивается при наименьшей величине безразмерной силы $F = 8$, что соответствует действительному значению силы $f = 17,9 \cdot 10^{-12}$ Н.

Решаем уравнение (5) для третьей схемы при следующих начальных условиях: $\theta(0) = 0$, $(d\theta/ds)_{s=0} = M_{s=0}/EJ = f(y_m \sin \theta_m + x_m \cos \theta_m)/EJ$. В безразмерном виде последнее граничное условие примет вид $(d\theta/dS)_{s=0} = F(Y_m \sin \theta_m + X_m \cos \theta_m)$.

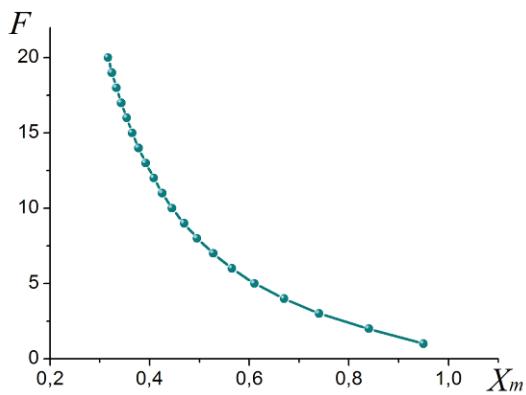


Рис. 6. Зависимость максимального вертикального смещения от величины горизонтальной силы

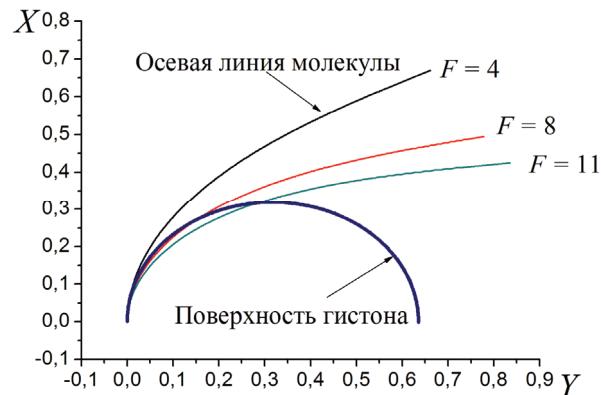


Рис. 7. Упругая линия оси молекулы при различных величинах горизонтальной силы

Результаты, полученные для третьей схемы, представлены на рисунках 8–9. Расчеты показали (см. рисунок 9), что прилегание молекулы к гистону обеспечивается при наименьшей величине безразмерной силы $F = 5$, что соответствует действительному значению силы $f = 11,175 \cdot 10^{-12}$ Н.

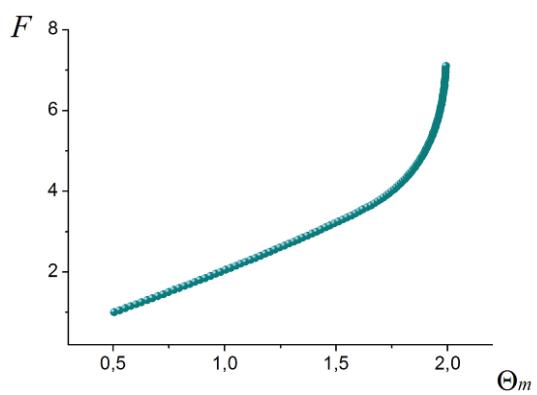


Рис. 8. Зависимость угла наклона касательной на конце стержня от величины следящей силы

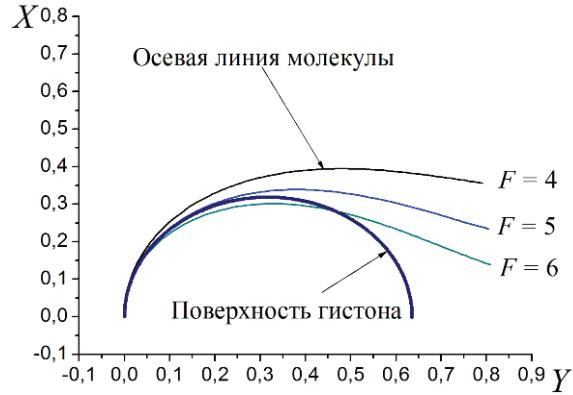


Рис. 9. Упругая линия оси молекулы при различных величинах следящей силы

Таким образом, расчеты, проведенные в работе, дают возможность сравнить результат воздействия внешней силы, сосредоточенной на свободном конце молекулы, для различных схем ее приложения. Отметим, что контакт между ДНК и гистонами в этой работе не учитывался. Работа выполнена при поддержке БРФФИ Ф07М-024.

Литература

1. А. Н. Камлюк, В. Б. Немцов // Труды БГТУ. Сер. физ.-мат. н. и информ. 9, 52 (2001).
2. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Теория упругости, Том VII, Москва, 2001.

МЕХАНИЗМЫ ВОССТАНОВЛЕНИЯ МЕНАДИОНА И АКТИВАЦИЯ КИСЛОРОДА В КЛЕТКАХ ГЛИОМЫ

Н. Г. Крылова, Т. А. Кулагова, Г. Н. Семенкова

Белорусский государственный университет, физический факультет, кафедра биофизики, ул. Бобруйская 5, 220050 Минск, Беларусь, pina-kr@tut.by

Глиома – наиболее распространенная злокачественная опухоль мозга. Лечение глиомы затруднено ее диффузно-инфилтратирующим ростом, что делает практически невозможным хирургическое вмешательство [1]. Поэтому развитие новых химиотерапевтических препаратов, направленных на остановку опухолевого роста, является одной из важнейших проблем онкологии. В ряде исследований было показано противоопухолевое действие витамина К₃ (менадиона) [2].

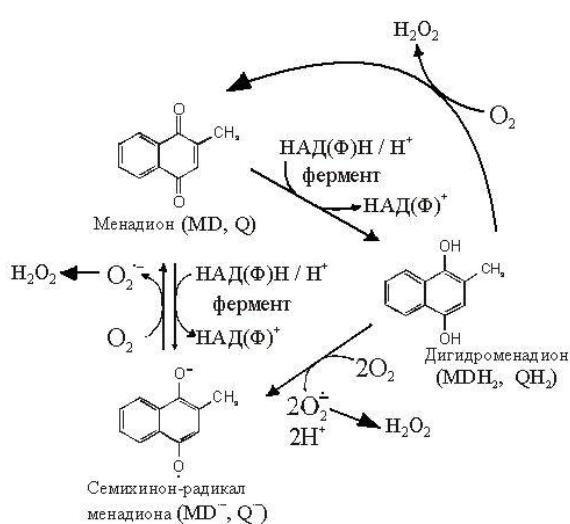


Рис. 1. Схема образования АФК при действии витамина К₃ [3]

Влияние менадиона на клетки опухоли было изучено на клетках глиомы человека линии U251.

Рассмотрим теоретическую модель кинетики химических реакций, протекающих в клетках при действии менадиона (система дифференциальных уравнений (1-5)).

$$\begin{aligned}
\frac{d[MD]}{dt} &= K_d([MD_0] - [MD]) - \frac{v_{E_1}[MD]}{k_{E_1} + [MD] + k \cdot [MD]^2} - \frac{v_{E_2}[MD]}{k_{E_2} + [MD]} + \\
&\quad + k_1[MDH_2] \cdot [O_2] + k_4[MD^{\cdot-}] \cdot [O_2] \\
\frac{d[MD^{\cdot-}]}{dt} &= \frac{v_{E_1}[MD]}{k_{E_1} + [MD] + k \cdot [MD]^2} - k_4[MD^{\cdot-}] \cdot [O_2] + k_9[MDH_2] \cdot [O_2] \\
\frac{d[MDH_2]}{dt} &= \frac{v_{E_2}[MD]}{k_{E_2} + [MD]} - k_1[MDH_2] \cdot [O_2] - k_9[MDH_2] \cdot [O_2] \\
\frac{d[O_2^{\cdot-}]}{dt} &= k_4[MD^{\cdot-}] \cdot [O_2] + k_9[MDH_2] \cdot [O_2] - k_7[O_2^{\cdot-}]^2 \\
\frac{d[H_2O_2]}{dt} &= k_1[MDH_2] \cdot [O_2] + k_7[O_2^{\cdot-}]^2 - k_{sc} \cdot [H_2O_2]
\end{aligned} \tag{1-5}$$

где $[MD]$, $[MD^{\cdot-}]$, $[MDH_2]$, $[O_2^{\cdot-}]$, $[H_2O_2]$, $[O_2]$ – концентрация менадиона, семименадиона, дигидроменадиона, супероксидных анион-радикалов, пероксида водорода и молекулярного кислорода в клетке, соответственно; $[MD_0]$ – внеклеточная концентрация менадиона, k_{E1} , k_{E2} , v_{E1} , v_{E2} – константы Михаэлиса-Ментен и максимальные скорости ферментативных реакций для ферментов одно- и двухэлектронного восстановления хинона, соответственно; k_1 , k_4 , k_9 – константа скорости самопроизвольного окисления дигидроменадиона до менадиона, семименадиона до менадиона и дигидроменадиона до семименадиона, соответственно; k_7 – константа скорости дисмутации супероксидных анион-радикалов в присутствии супероксиддисмутазы (СОД), k_{sc} – константа скорости утилизации пероксида водорода внутриклеточными антиоксидантными системами, K_d – константа скорости диффузии менадиона через мембрану.

Наиболее простая картина наблюдается при ингибиции двухэлектронного восстановления хинонов, применяя дикумарол. В этом случае $v_{E2}=0$ и дигидроменадион в клетке не образуется. Система существенно упрощается (система (6-9)).

$$\begin{aligned}
\frac{d[MD]}{dt} &= K_d([MD_0] - [MD]) - \frac{v_{E_1}[MD]}{k_{E_1} + [MD] + k \cdot [MD]^2} + k_4[MD^{\cdot-}] \cdot [O_2] \\
\frac{d[MD^{\cdot-}]}{dt} &= \frac{v_{E_1}[MD]}{k_{E_1} + [MD] + k \cdot [MD]^2} - k_4[MD^{\cdot-}] \cdot [O_2]
\end{aligned} \tag{6-7}$$

$$\begin{aligned}
\frac{d[O_2^{\cdot-}]}{dt} &= k_4[MD^{\cdot-}] \cdot [O_2] - k_7[O_2^{\cdot-}]^2 \\
\frac{d[H_2O_2]}{dt} &= k_7[O_2^{\cdot-}]^2 - k_{sc} \cdot [H_2O_2]
\end{aligned} \tag{8-9}$$

С учетом начальных условий $[MD^{\cdot-}]_{t=0} = 0$, $[H_2O_2]_{t=0} = 0$, $[O_2^{\cdot-}]_{t=0} = 0$ и $[MD]_{t=0} = 0$ систему (6-9) можно решить численно. Решение системы для переменных $[MD]$, $[MD^{\cdot-}]$, $[H_2O_2]$ и $[O_2^{\cdot-}]$ – функции, зависящие от времени и имеющие вид возрастающих кривых с выходом на постоянный уровень.

При действии менадиона на клетки в диапазоне концентраций от $1 \cdot 10^{-6}$ до $1 \cdot 10^{-3}$ моль/л регистрируется практически мгновенное увеличение внутриклеточной концентрации пероксида водорода до некоторого уровня, и этот параметр остается постоянным во времени [4]. Таким образом, экспериментально мы измеряем стационарное значение концентрации пероксида водорода в клетке в зависимости от концентрации добавленного менадиона.

Приравняв правые части уравнений (6-9) к нулю найдем стационарное решение системы. Стационарное значение $[H_2O_2]$ равно:

$$[H_2O_2]_0 = \frac{1}{k_{sc}} \frac{v_{E_1} [MD_0]}{k_{E_1} + [MD_0] + k \cdot [MD_0]^2}. \quad (10)$$

Аппроксимируя экспериментальные данные полученной теоретической зависимостью, были найдены численные значения констант, характеризующих процесс одноэлектронного восстановления менадиона: $\frac{v_{E_1}}{k_{sc}} = (7,7 \pm 0,1) \cdot 10^{-4}$ моль/л, $k_{E1} = (5,30 \pm 0,05) \cdot 10^{-5}$ моль/л, $k = (2,0 \pm 0,3) \cdot 10^3$ (моль/л) $^{-1}$.

На рис. 2 представлены экспериментальная и теоретическая зависимости концентрации пероксида водорода в клетках от концентрации добавленного менадиона при ингибиции двухэлектронного восстановления хинона. Видно, что значения, полученные из эксперимента (представлены на графике в виде точек) хорошо согласуются с полученной теоретической зависимостью (10) (сплошная линия).

Двухэлектронное восстановление хинонов чаще всего рассматривается как механизм антиоксидантной защиты, т.к. дигидрохинон может расходоваться в метаболических реакциях, не внося вклад в генерацию АФК. Из рис. 3 видно, что для клеток глиомы линии U251 ингибирование двухэлектронного восстановления приводит к повышению уровня генерации АФК. Это свидетельствует о вкладе дигидроменадиона в свободнорадикальные процессы в клетках глиомы. Однако численный расчет системы уравнений (1-5) с использованием значений констант для фермента двухэлектронного восстановления, полученных из литературных данных, не объясняет величину и характер экспериментальной зависи-

мости концентрации пероксида водорода в клетке от концентрации менадиона при участии ферментов как одно- так и двухэлектронного восстановления.

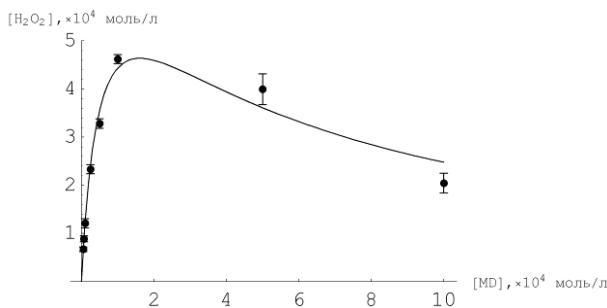


Рис. 2. Экспериментальная и теоретическая зависимости концентрации пероксида водорода в клетках от концентрации добавленного менадиона при ингибиравании двухэлектронного восстановления хинона

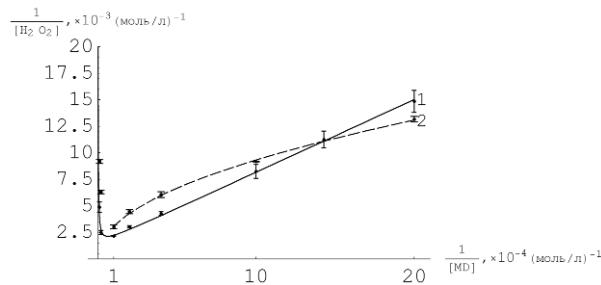


Рис. 3. Экспериментальные зависимости концентрации пероксида водорода в клетке от концентрации менадиона в координатах Лайневера-Берка: 1 – только одноэлектронное восстановление, 2 – одно- и двухэлектронное восстановление

Было замечено, что данные в диапазоне концентраций менадиона $[5 \cdot 10^{-6}$ моль/л, $1 \cdot 10^{-4}$ моль/л] хорошо аппроксимируются зависимостью

$$\frac{1}{[H_2O_2]} = 257 + 28.7 \sqrt{\frac{1}{[MD]}}. \quad (11)$$

Можно предположить, что на форму зависимости концентрации пероксида водорода от концентрации менадиона при участии ферментов одно- и двухэлектронного восстановления менадиона значительное влияние оказывают неучтенные реакции образования АФК при окислении дигидроменадиона [5]. Кроме того, использование обоими ферментами одних и тех же восстановительных эквивалентов может приводить к истощению последних и, таким образом, усилению влияния двухэлектронного восстановления в области высоких концентраций менадиона.

Таким образом:

1. Экспериментально доказано участие двух ферментных систем, одно- и двухэлектронного восстановления менадиона, в генерации АФК в клетках глиомы.
2. Предложена теоретическая модель образования пероксида водорода в клетках глиомы, учитывающая два конкурирующих процесса одно- и двухэлектронного восстановления менадиона.
3. Получены теоретические зависимости для процесса одноэлектронного восстановления менадиона, которые хорошо согласуются с экспериментальными данными.
4. Найдены численные значения констант, характеризующих процесс одноэлектрон-

ного восстановления менадиона: $\frac{v_{E_1}}{k_{sc}} = (7,7 \pm 0,1) \cdot 10^{-4}$ моль/л, $k_{E1} = (5,30 \pm 0,05) \cdot 10^{-5}$ моль/л, $k = (2,0 \pm 0,3) \cdot 10^3$ (моль/л)⁻¹.

Литература

1. D. N. Louis. Annu. Rev. Pathol. Mech. Dis. 1, 97 (2006).
2. D. W. Lamson, S. M. Plaza. Alt. Med. Rew. 3, 303 (2003).
3. Диссертация Кулаговой Т.А. на соискание ученой степени кандидата биологических наук, Минск, 2006.
4. Н. Г. Крылова, Т. А. Кулагова, З. Б. Квачева, С. В. Корень. Сборник БООФиБ, 2008.
5. S. W. Ham et al. Bull. Korean Chem. Soc. 21, 1173 (2000).

**СЕКЦИЯ:
ОПТИЧЕСКИЕ ПРИБОРЫ,
МАТЕРИАЛЫ И ТЕХНОЛОГИИ**

ОЦЕНКА ПРЕДЕЛЬНОЙ ЭФФЕКТИВНОСТИ МНОГОПЕРЕХОДНЫХ СОЛНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Г. Л. Зыков¹, А. Л. Зыков²

¹*Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларусь, пр. Независимости 68, 220072
Минск, Беларусь, zykov@inel.bas-net.by*

²*ОООА “Finfomatech”, ул. Федюнинского 17, 246000 Гомель, Беларусь*

Среди глобальных проблем энергетика занимает одно из ведущих мест. Этому способствуют две основные причины: исчерпаемость энергетических ресурсов, используемых в традиционных методах производства энергии, и ухудшающаяся экологическая обстановка, вызванная нарастающими темпами производства энергии. Решение этой проблемы связывается с освоением экологически чистых, возобновляемых источников энергии. Наиболее полно требованиям к таким источникам энергии отвечают гелиоэлектрические методы прямого преобразования световой энергии солнца в электрическую.

В фотовольтаической энергетике в течение многих лет устойчивые позиции занимали монокристаллический кремний и арсенид галлия. Постоянное совершенствование технологии изготовления и конструкции солнечных фотопреобразователей энергии позволило достичь КПД преобразования для кристаллического *Si* 15-18 %, а для *GaAs* – 20-25 %. Однако, широкое использование этих материалов в фотопреобразователях содержалось их высокой стоимостью.

В последние годы проводится активный поиск альтернативных материалов, которые смогли бы быть достаточно дешёвыми, технологичными и давали бы возможность получить КПД преобразования более 20 %. Одним из возможных кандидатов на этот материал, как считают специалисты, может быть *CuInGaSe₂/CdS* [1, 2]. Эти поликристаллические соединения являются одними из ведущих кандидатов в области солнечных элементов с гетеропереходом из-за высокого коэффициента поглощения *CuInGaSe₂*, долговременной стабильности работы и более низкой их стоимости. Другими потенциальными кандидатами являются шестипереходные солнечные элементы *GaInN/GaN* / *GaInP* / *GaAs* / *Si* / *In-GaAsP*, возможность применения которых показана в недавних работах [3, 4]. Оценка предельной эффективности последних будет выполнена в данной работе.

Теоретические исследования оптимальных запрещенных зон и максимальной эффективности проводили за последние годы многие исследователи [1-11]. Простой подход к вычислению оптимальных запрещенных зон многопереходных солнечных элементов состоит в использовании гипотезы предельной эффективности [6]: каждый фотон с эн-

гией, больше чем энергия запрещенной зоны, производит один электронный заряд.

Авторы [6] исследовали параметры солнечного элемента с одним *p-n* переходом для излучения черного тела при температуре 6000 К. Они вычислили предельную эффективность для ширины запрещенной зоны 1,1 эВ ($\sim 44\%$). В работе [3] термодинамический подход к расчету эффективности показывал, что использование многопереходных (шестипереходных) солнечных элементов позволяет повышать эффективность преобразования солнечного спектра. Однако, использование большего количества элементов приносит небольшую пользу и в большинстве случаев оказывается неэкономным [3]. В данной работе выполнена оценка предельной эффективности многопереходных солнечных элементов вплоть до шести запрещенных зон с помощью термодинамического подхода к расчету эффективности.

Мы считаем, что солнечные элементы в многозонной структуре объединены поверхностями друг с другом. Предположим, что излучение, поступающее в *i*-ый элемент данной структуры, передается в *i+1*-элемент без потерь. Число фотонов с энергиями, равными или выше ширины запрещенной зоны для верхнего элемента может быть записано в виде:

$$Q_N = \frac{2\pi}{c^2} \int_{\nu_N}^{\infty} \frac{\nu^2}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} d\nu, \quad (1)$$

где ν – частота фотона, ν_N – частота запрещенной зоны верхнего элемента, h – постоянная Планка, k – постоянная Больцмана, c – скорость света в вакууме и T – температура черного тела, испускающего излучение. Для *i*-го элемента, находящегося под верхним элементом число полезных фотонов с энергиями, равными или выше ширины запрещенной зоны определяется таким образом:

$$Q_i = \frac{2\pi}{c^2} \int_{\nu_i}^{\nu_{i+1}} \frac{\nu^2}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} d\nu; \quad i = 1, \dots, N-1 \quad (2)$$

где ν_i и ν_{i+1} – частоты *i*-го и (*i+1*)-го элемента соответственно.

Если поверхность рассматриваемой структуры, на которую воздействует излучение, имеет площадь A , то согласно гипотезе предельной эффективности [6] выходная мощность, создаваемая Q_i , будет равна:

$$P_i = h \cdot \nu_i \cdot A \cdot Q_i. \quad (3)$$

Полная выходная мощность представляет собой сумму вкладов P_i от каждого элемента:

$$P = h \cdot A \cdot \sum_{i=1}^N (\nu_i \cdot Q_i). \quad (4)$$

В соответствии с хорошо известной формулой распределения Планка мощность излучения, падающего на единицу площади за единицу времени, равна:

$$P_s = \frac{2\pi^5 A (kT)^4}{15h^3 c^2}. \quad (5)$$

Введем стандартное упрощение:

$$x = \frac{h\nu}{kT}. \quad (6)$$

Предельная эффективность определяется как отношение полной выходной мощности P к мощности излучения, падающего на единицу площади за единицу времени, P_s :

$$u = \frac{P}{P_s} = \frac{15h^4 c^2}{2\pi^5 (kT)^4} \sum_{i=1}^N (\nu_i Q_i) \quad (7)$$

Используя выражения (1), (2) и (6) в уравнении (7) можно записать выражение для предельной эффективности в виде:

$$u = \frac{15}{\pi^4} \left[\sum_{i=1}^{N-1} \left(x_i \cdot \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{x^2}{e^x - 1} dx \right) + x_N \cdot \int_{x_N}^{\infty} \frac{x^2}{e^x - 1} dx \right]. \quad (8)$$

Интегралы в уравнении (8) известны из статей [12-13], посвященных излучению черного тела. Предельная эффективность многозонного элемента может быть численно определена:

$$u = \frac{15}{\pi^4} \left\{ \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{i=1}^{N-1} [\alpha_{i,j} x_i e^{-jx_i} - \alpha_{i+1,j} x_i e^{-jx_{i+1}}] + \alpha_{N,j} x_N e^{-jx_N} \right\} \quad (9)$$

$$\text{где } \alpha_{i,j} = \frac{x_i^2}{j} + \frac{2x_i}{j^2} + \frac{2}{j^3}, \quad \alpha_{i+1,j} = \frac{x_{i+1}^2}{j} + \frac{2x_{i+1}}{j^2} + \frac{2}{j^3} \quad \text{и} \quad \alpha_{N,j} = \frac{x_N^2}{j} + \frac{2x_N}{j^2} + \frac{2}{j^3}.$$

Теоретические расчеты предела эффективности преобразования солнечной энергии показывают, что согласно идеальным предположениям множество подходов может использоваться для приближения к термодинамическим пределам эффективности преобразования солнечной энергии [14]. В работе [3, 4] показано, что наиболее оптимальны по эффективности солнечные элементы с шестью $p-n$ переходами. Для расчета эффективности такой структуры мы использовали следующие материалы: $GaInN/GaN$ (2,4 эВ); $GaInP$ (1,84 эВ); $GaAs$ (1,43 эВ); Si (1,12 эВ) и $InGaAsP$ (0,95 и 0,7 эВ). В используемой структуре

солнечный спектр делится на три области: область высоких энергий (от 2,4 до 1,84 эВ), средних энергий (от 1,84 до 0,95 эВ) и низких энергий (от 0,95 до 0,7 эВ) (рис. 1). В случае использования однопереходных солнечных элементов термодинамическая эффективность указанных выше материалов приведена на рис. 2. Расчетные значения получены нами на основе термодинамического подхода к расчету эффективности. Поскольку на практике термодинамическая эффективность не может быть достигнута из-за неизбежных потерь, таких как паразитное сопротивление и отражение, то в расчетах обычно используют так называемый “derating factor” или понижающий коэффициент, равный 0,8, для перехода от термодинамической эффективности к достижимой эффективности [3]. Позднее в работе [4] было показано, что понижающие коэффициенты могут быть различны в зависимости от используемого материала солнечных элементов. Так, например, понижающий коэффициент, согласно [4], может изменяться от 0,7 (для $E_g = 0,7$ эВ) до 0,89 (для $E_g = 2,4$ эВ).

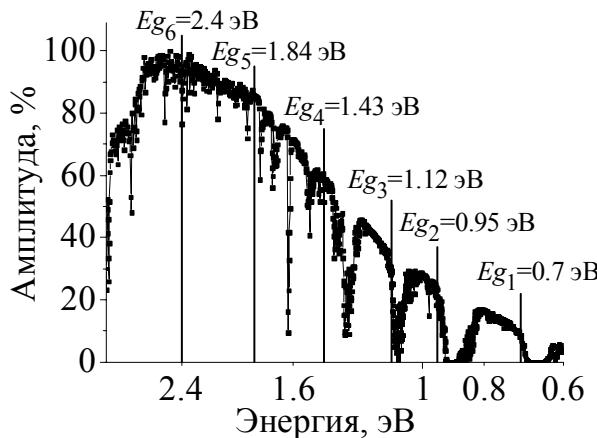


Рис. 1. Солнечный спектр стандарта AM 1.5G

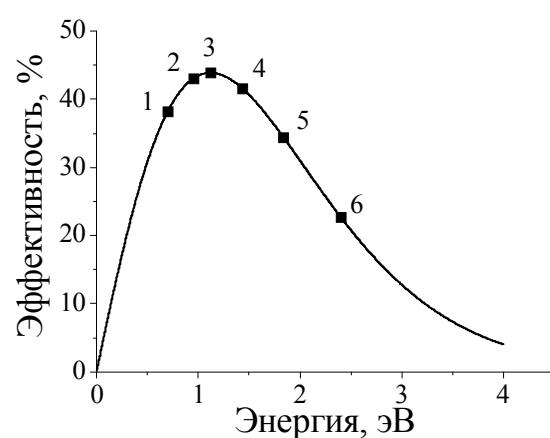


Рис. 2. Эффективность однопереходных солнечных элементов: *InGaAsP* (1,2), *Si* (3), *GaAs* (4), *GaInP* (5), *GaInN/GaN* (6)

Согласно нашим расчетам предельной эффективности шестислойной структуры солнечных элементов (рис. 3), с учетом понижающих коэффициентов из работы [3], рассчитанная эффективность составила 62,5 %, что превышает практический предел эффективности (54,3 %) из работы [3] и незначительно ниже расчетных значений, полученных в [3] (64,2 %) (рис. 4). При использовании в наших расчетах понижающих коэффициентов из работы [4] предельная эффективность (кривая 2, рис. 4) составила $\sim 55,5$ %. Обозначения на рисунке 4 (\square ■ ○ ●) соответствуют *p-n* переходам рассматриваемого солнечного элемента.

Проведенные исследования показывают, что эффективность однопереходных солнечных элементов для исследуемых материалов не превышает 50 %. Увеличение числа *p*-

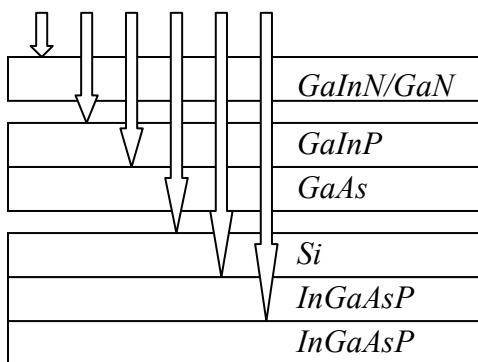


Рис. 3. Схема исследуемого солнечного элемента с 6 *p-n* переходами

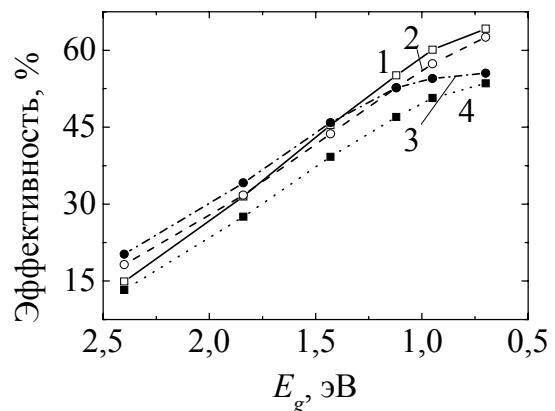


Рис. 4. Эффективность многопереходных солнечных элементов при использовании материалов, представленных на рисунке 2: 1 – расчетные значения из [4], 2 и 3 – наши расчетные значения, 4 – практический предел эффективности из [4]

n переходов приводит к повышению эффективности преобразования солнечного излучения, и для 6 *p-n* переходов эффективность составила $\sim 62,5\%$ (понижающий коэффициент равен 0,8) и 55,5 % (повышающий коэффициент в диапазоне от 0,7 до 0,89). Дальнейшее увеличение числа переходов приводит к незначительному повышению эффективности.

Литература

1. В. Б. Залесский, В. А. Пилипович, Т. Р. Леонова и др. Оптоэлектронные и информационные технологии: сборник научных трудов, 212, Минск, 2003.
2. А. М. Поликанин, О. В. Гончарова, С. А. Сергиеня и др. ЖПС **71**, 683 (2004).
3. A. Barnett, D. Kirkpatrick, C. Honsberg. Proceedings of the 21st European Photovoltaic Solar Energy Conference, 15, Dresden, Germany, 2006.
4. A. Barnett, D. Kirkpatrick, C. Honsberg et al. Proceedings of the 22nd European Photovoltaic Solar Energy Conference, 95, Milan, Italy, 2007.
5. D. Trivich, P. A. Flinn. In: T. Daniels and J. Duffie (Eds.), Solar Energy Research, Madison, WI, 1955.
6. W. Shockley, H. J. Queisser. J. Appl. Phys. **32**, 510 (1961).
7. J. E. Parrott. J. Phys. D: Appl. Phys. **12**, 441 (1979).
8. H. Pauwels, A. de Vos. Solid State Electronics **24**, 835 (1981).
9. P. T. Landsberg, A. de Vos and P. Baruch. J. Phys.: Condens. Matter **3**, 6415 (1991).
10. M. A. Green. Prog. Photovolt: Res. Appl. **9**, 257 (2001).
11. A. S. Brown, M. A. Green. J. Appl. Phys. **92** (3), 1329 (2002).
12. M. Planck. The Theory of Heat Radiation, Dover Publications, Inc., New York, 1991.
13. I. N. Bronshtein and K. A. Semendyayev. Handbook of Mathematics, Van Nostrand Reinhold Company, New York, 1985.
14. M. A. Green. Progress in Photovoltaics **9**, 123 (2001).

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК ИНТЕГРАЛЬНО-ОПТИЧЕСКОГО ФИЛЬТРА НА ОСНОВЕ ОДНО- И ДВУХКОЛЬЦЕВЫХ МИКРОРЕЗОНАТОРОВ

Г. Л. Зыков¹, А. Л. Зыков²

¹*Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларусь, пр. Независимости 68, 220072*

Минск, Беларусь, zykov@inel.bas-net.by

²*ОООА “Finfomatech”, ул. Федюнинского 17, 246000 Гомель, Беларусь*

Для практически важных задач экспериментальной физики и при создании высоко-селективных устройств контрольно-измерительной аппаратуры волоконно-оптических сетей, в современной оптоэлектронике для передачи и обработки сигналов с различными несущими в оптических магистралях нового поколения необходимы простые, небольших размеров управляемые оптические фильтры, обладающие высокими: разрешением, надёжностью, быстродействием; низкой стоимостью и возможностью интегрирования в современную телекоммуникационную индустрию [1-3]. В ряде областей науки и техники такую аппаратуру можно создать, используя в качестве базового элемента микрорезонатор в виде замкнутого в кольцо оптического волновода на диэлектрической подложке, резонансная длина волны которого зависит от концентрации свободных носителей в нём [4].

Целью работы является численное моделирование оптических свойств однокольцевого и двухкольцевых волноводных микрорезонаторов для создания простых и высокоэффективных интегрально-оптических управляемых фильтров высокого разрешения.

Узкополосный управляемый интегрально-оптический фильтр (в рассматриваемом случае) представляет собой один микрокольцевой резонатор (рис. 1а) или два оптически последовательно связанных кольцевых волноводных резонатора (рис. 1б) диаметром единицы микрон, которые расположены на расстояниях 200 нанометров друг от друга и от двух прямых входного и выходного оптических волноводов. Коэффициент оптической связи входного и выходного волноводов с волноводами обоих микрорезонаторов определяется величиной зазора между ними и длиной области взаимодействия. Из набора оптических частот, распространяющихся по входному волноводу, в микрорезонатор будут ответвляться только те, которые совпадают с его резонансными частотами [5, 6]. Меняя резонансные условия (например, оптическую длину резонатора, т.е. либо его геометрическую длину, либо эффективный показатель преломления волновода), можно менять оптические частоты, ответвляемые в микрорезонатор. В волноводах из полупроводниковых материалов изменение показателя преломления можно осуществлять с помощью оптической или электрической инжекции свободных носителей заряда [4, 7]. Для осуществления

электрической инжекции снаружи кольцевых микрорезонаторов необходимо расположить области с n -легированием, а внутри – с p -легированием. При подаче электрического напряжения на такую диодную структуру электроны и дырки проникают внутрь материала волноводных микроколец и меняют их эффективный показатель преломления и, тем самым, резонансную частоту.

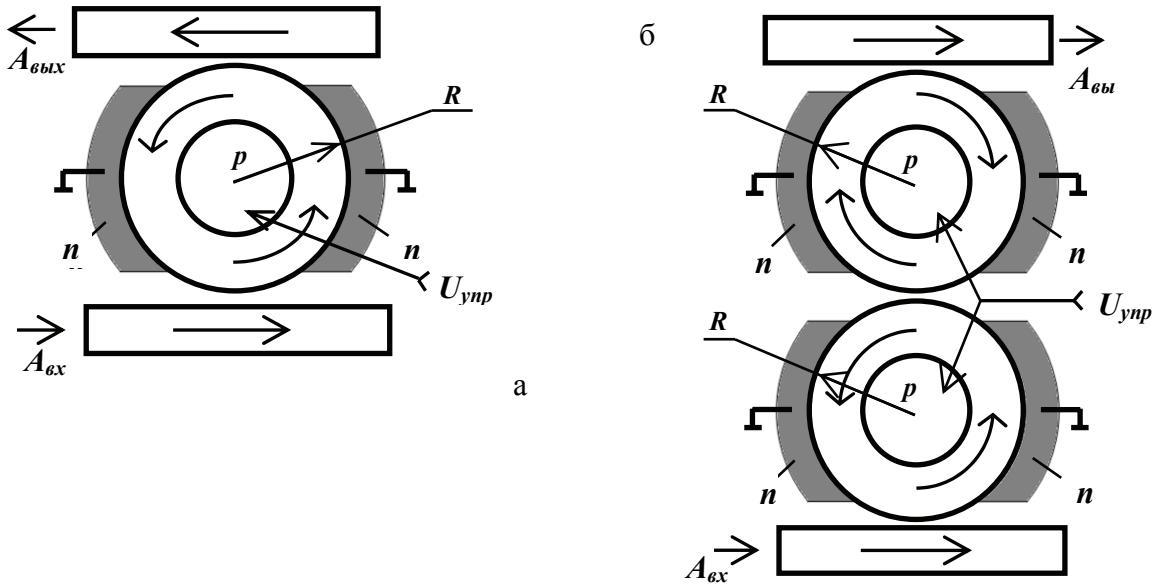


Рис. 1. Структурная схема управляемого интегрально-оптического фильтра на основе одного (а) и двух (б) кольцевых оптически связанных волноводных микрорезонаторов

Анализ характеристик управляемого интегрально-оптического фильтра на основе кольцевых микрорезонаторов проводился методом численного моделирования. Для получения картин распределения электромагнитных полей на входе и выходе фильтра, соответствующих различным моментам времени, резонансных и переходных характеристик установления интенсивности выполнено решение волнового уравнения, записанного для электрической функции Боргниса [8]. Это позволило для структуры, состоящей из двух линейных волноводов и оптически последовательно связанных кольцевых микрорезонаторов, ограничиться рассмотрением одной компоненты ТМ-волны E_z и тем самым воспользоваться уравнениями Даламбера в декартовых координатах – для прямых волноводов:

$$\frac{\partial^2 E_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E_z}{\partial y^2} - \frac{n_1^2}{c^2} \frac{\partial^2 E_z}{\partial t^2} = 0 \quad (1)$$

и в цилиндрических координатах – для кольцевых микрорезонаторов:

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial E_z}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 E_z}{\partial \varphi^2} - \frac{n_2^2}{c^2} \frac{\partial^2 E_z}{\partial t^2} = 0, \quad (2)$$

где n_1 – коэффициент преломления во входном и выходном волноводах, n_2 – коэффициент преломления в кольцевых микрорезонаторах.

Уравнения (1,2) дополнены начальными и граничными условиями. Т.к. расчеты проводились в определенной области, то на ее границах волновая функция равнялась нулю.

Сигнал на входе волновода задавался в виде:

$$E_z(x_0 = 0, y, t) = E_0 \exp(-(y - y_0)^2 a^{-2}) \sin(2\pi f t), \quad (3)$$

а распределение компоненты электромагнитного поля E_z в кольцевых микрорезонаторах вычислялось следующим образом:

$$E_z(\rho, \varphi, t) = E_1 \exp(-((\rho - \rho_0) \cos(\varphi))^2 a^{-2}) \sin(2\pi f t), \quad (4)$$

где E_0 — амплитуда входного сигнала в первый волновод, E_1 — амплитуда входного сигнала в кольцевой микрорезонатор, f — несущая частота, значения $x_0, y_0, \rho_0, \varphi_0$ и a задают форму и пространственное положение функции Гаусса.

При моделировании предполагали, что коэффициент связи входного и выходного волноводов с оптически связанными кольцевыми микрорезонаторами равен $k_{\text{св 1}}$, а коэффициент связи кольцевых микрорезонаторов между собой равен $k_{\text{св 2}}$.

Резонансную характеристику рассмотренной структуры определим как:

$$T(\lambda) = I_{\text{вых}} / I_{\text{вх}} = E_{z \text{ вых}}^2 / E_{z \text{ вх}}^2, \quad (5)$$

где $E_{z \text{ вх}}$ и $E_{z \text{ вых}}$ – амплитуды входного и выходного сигнала фильтра, $I_{\text{вх}}$ и $I_{\text{вых}}$ – интенсивности входного и выходного сигнала фильтра.

На рис. 2 приведены рассчитанные зависимости ширины $\Delta\lambda$ отдельной резонансной линии по уровню 0,5 для фильтра с одним (а) и двумя (б) кольцевыми микрорезонаторами от радиуса колец для волноводов из фосфидов галлия (кривая 1) и индия (кривая 2).

Ширина полосы пропускания фильтра, выполненного на InP , состоящего из однокольцевого микрорезонатора ($R = 2,5$ мкм), по уровню 0,5 равна 1,025 нм (кривая 2, рис. 2а). Ширина полосы пропускания такого фильтра по уровню 0,1 составляет 2,82 нм. Для эффективного переключения его резонансной полосы пропускания необходимо смещать положение λ_m на величину спектрального интервала $\sim 2,8$ нм. Расчет показал, что для такого смещения резонансной полосы пропускания фильтра с радиусом его кольца $R = 2,5$ мкм необходимо изменить показатель преломления материала его волновода n во втором знаке после запятой, что практически нереализуемо [4, 7]. А для фильтра с $R = 10$ мкм и $n = 3,02$ ширина резонансной линии полосы пропускания по уровню 0,1 составляет

0,77 нм. На практике, при использовании *InP* для изготовления интегрально-оптического фильтра можно достичь реального изменения концентрации свободных носителей на величину $3 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$ [9]. Это приводит к вариациям коэффициента преломления материала волновода $\Delta n = 0,003$. Аналогичный вывод справедлив для фильтра на *GaP* с концентрацией свободных носителей $\sim 10^{18}$ [10], что приводит к $\Delta n \sim 0,004 - 0,003$.

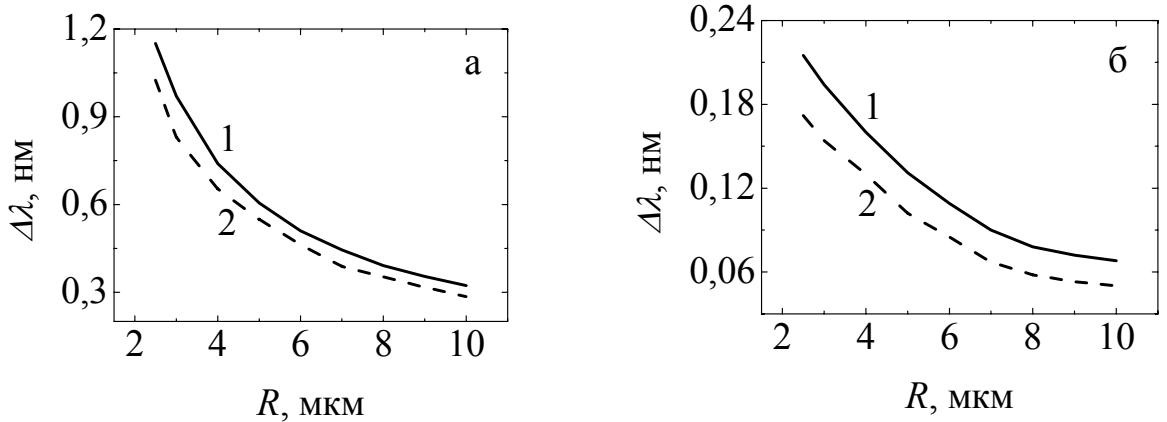


Рис. 2. Зависимость ширины резонансной линии $\Delta\lambda$ по уровню 0,5 для фильтра с одним микрорезонатором (а) и двумя последовательно расположенными и оптически связанными микрорезонаторами (б), выполненных из *GaP* (1) и *InP* (2), от радиуса кольца R

Эффективность управления резонансной полосой пропускания одно- и двухкольцевого фильтра оценивалась по величине отношения η максимальных интенсивностей сигналов на его выходе в двух положениях: $\eta = I_{\text{вкл}}/I_{\text{выкл}}$, где $I_{\text{вкл}}$ и $I_{\text{выкл}}$ – максимальные интенсивности, соответствующие открытому и закрытому состоянию фильтра. Проведенные расчеты показывают что, фильтр с одним кольцевым микрорезонатором, радиус которого равен $R = 2,5 \dots 10$ мкм, из-за малого значения η не может быть использован для большинства практических приложений. Рассчитанные резонансные полосы пропускания двухкольцевого фильтра приведены на рис. 3, где также представлены зависимости η от изменения коэффициентов преломления *GaP* (а) и *InP* (б), из которых они изготовлены.

Для данных фильтров высокое значение η (кривая 3, рис. 3) достигается при $\Delta n \sim 4 \times 10^4$ для $R = 10$ мкм. Быстродействие исследуемого фильтра определяется суммой временных интервалов: установления выходного сигнала и времени релаксации (рекомбинации) носителей зарядов. Для $k_{\text{св}1} = 0,224$ установление выходного сигнала происходит за ~ 15 проходов светового излучения по кольцу микрорезонатора с $R = 10$ мкм [6], что составляет для *InP* – 10 пс и *GaP* – 9 пс. Для фильтра, состоящего из двух оптически последовательно связанных микрорезонаторов, установление выходного сигнала происходит за 20 проходов, что для $R = 10$ мкм составляет: для *InP* – 26,6 пс и *GaP* – 25,3 пс. С учетом вре-

мени релаксации носителей заряда в InP – 0,2 пс [11], получаем для фильтра на одном микрорезонаторном кольце из фосфида индия, максимальная частота следования сигналов ~48 ГГц. Для фильтра, состоящего из двух оптически связанных колец с $R = 10$ мкм, максимальные частоты следования сигналов уменьшаются: до порядка 18,6 (InP).

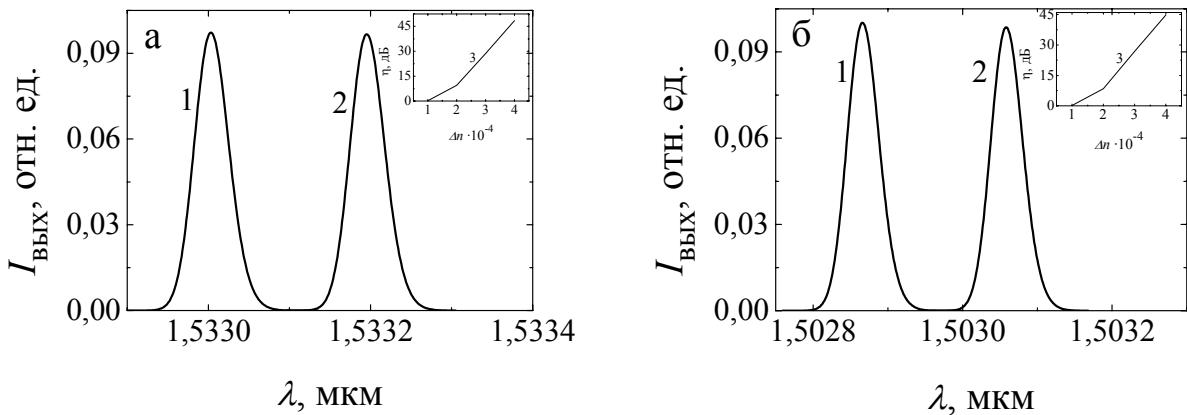


Рис. 3. Резонансные полосы пропускания фильтра, состоящего из двух одинаковых оптически связанных микрорезонаторов при $R = 10$ мкм: а– выполненных из GaP для $n = 3,02$ (1) и $3,0204$ (2), б– из InP для $n = 3,172$ (1) и $3,1724$ (2); зависимости η для двух положений резонансной полосы пропускания от Δn (3) при $R = 10$ мкм для $n = 3,02$ – а, $n = 3,172$ – б

Использование рассмотренных управляемых фильтров с полосой пропускания 32 нм в волоконных системах связи позволит по одному волокну осуществить параллельную передачу данных по 160 каналам, т.е. с производительностью ~1,6 Тбит/с при быстродействии канала 10 Гбит/с. Предложенная разработка может позволить освоить технологию производства высокоэффективных оптических элементов для приборов высокого спектрального разрешения; а также разработать приборы для контроля в технологии элементов микроэлектроники и создать узкополосные перестраиваемые фильтры для оптических магистралей нового поколения.

Литература

1. И. А. Мамзелев, В. М. Малафеев, А. Д. Снегов, Л. В. Юрасова. Технологии и оборудование, Москва, 2005.
2. В. Г. Таценко, А. К. Шишов. Теле-Спутник **2**, 24 (2004).
3. А. В. Шмалько. Вестник связи **4**, 162 (2002).
4. T. A. Ibrahim, W. Cao, Y. Kim et al. J. of Lightwave Technol. **21**(12), 2997 (2003).
5. B. E. Little, J. S. Foresi, G. Steinmeyer et al. IEEE Phot. Technol. Lett. **10**(4), 549 (1998).
6. I. A. Goncharenko, A. K. Esman, V. K. Kuleshov, V. A. Pilipovich. Opt. Commun. **257**(1), 54 (2006).
7. S. Abdalla, S. Ng, P. Barrios et al. IEEE Phot. Technol. Lett. **16**(4), 1038 (2004).
8. S. T. Chu, S. K. Chaudhuri. J. of Lightwave Technol. **7**, 2033 (1989).

9. M. V. Kotlyar, L. O'Faolain, A. B. Krysa, T. F. Krauss. J. of Lightwave Technol. **23**(6) 2169 (2005).
10. М. М. Соболев, В. Г. Никитин В.Г. Письма в ЖТФ. **24**(9) 1 (1998).
11. А. С. Тагер. Перспективы применения фосфида индия в полупроводниковой электронике СВЧ. – В сб. Фосфид индия в полупроводниковой электронике, Кишинев, 1988.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ТРИАНГУЛЯЦИОННОГО ЛАЗЕРНОГО СКАНЕРА ДЛЯ СОЗДАНИЯ ТРЁХМЕРНЫХ МОДЕЛЕЙ

Е. О. Котяшёв, И. А. Корнеева

*Могилевский государственный университет им. А. А. Кулешова,
Беларусь, 212012 Могилёв, Космонавтов 1; e-mail: korneeva.ira@gmail.com*

Создание компьютерных моделей различных объектов реального окружающего нас мира при современном уровне развития компьютерной техники является весьма актуальной задачей. Трехмерная модель объекта в самом простом случае представляется в виде полигональной (чаще всего используются треугольники) сетки, координаты узлов которой совпадают или пропорциональны декартовым координатам точек поверхности объекта. Дополнительно кроме пространственных координат для каждой вершины может быть задан вектор нормали и координаты текстуры.

Для создания трехмерной модели необходимо произвести измерение пространственных координат числа точек объекта, достаточного для корректного отображения всех деталей его геометрии на экране компьютера или для других целей. Измерение координат может быть произведено с помощью контактных методов, когда устройство-зонд перемещается от одной точки объекта к другой, при контакте зонда с поверхностью координаты записываются в компьютер. При использовании лазерного излучение становится возможным подсвечивать отдельные точки, а затем делать снимки предмета с подсвеченными точками цифровой камерой.

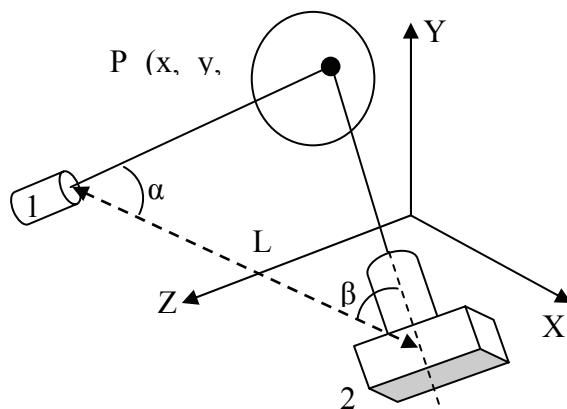


Рис. 1. Типичная схема триангуляционного лазерного сканера. Лазер 1 подсвечивает точку поверхности объекта Р, которая затем фотографируется цифровой камерой 2.

В данной работе описана методика использования триангуляционного лазерного сканера. Типичная схема измерений показана на рисунке 1. В процессе регистрации коор-

динаты точки P объекта, подсвеченной лазером преобразуются в координаты пикселя на матрице цифровой камеры. Зная расстояние L от камеры до источника лазерного излучения, а также триангуляционные углы α и β можно вычислить декартовы координаты точки объекта. В качестве альтернативы можно использовать процесс калибровки камеры, в результате которого мы получаем коэффициенты линейного преобразования координат точек объекта в координаты пикселей плоскости изображения цифровой камеры. Процесс сканирования предполагает последовательное измерение координат точек всего объекта с необходимым интервалом.

Измерения включал в себя 3 последовательных этапа: калибровку камеры, сканирование объекта светящейся полосой лазерного пучка и получение координат точек модели, визуализация и постобработка полученной цифровой модели.

Калибровка камеры выполнялась на базе метода прямого линейного преобразования (ПЛП). Данный метод [1] предполагает вычисление коэффициентов линейного преобразования точки $O(x, y, z)$ объекта в мировой трехмерной системе координат XYZ в двухмерные координаты пикселя $P(u, v)$ плоскости изображения камеры, как показано на рисунке 2.

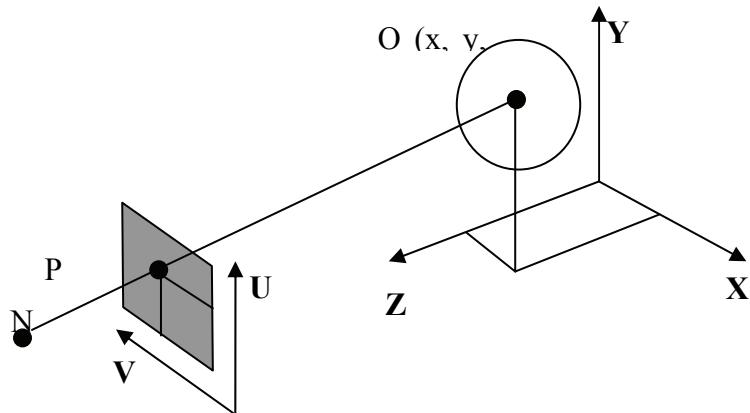


Рис. 2. Связь координат точки $O(x, y, z)$ объекта и координаты пикселя $P(u, v)$ в плоскости ПЗС - матрицы камеры осуществляется через перспективное преобразование с центром в точке N . Точки O , P и N лежат на одной прямой

Для калибровки использовался калибровочный объем в виде угла из двух взаимно-перпендикулярных плоскостей с нанесенными на них круглыми метками. Размеры фрейма должны быть такими, чтобы объект сканирования мог в него мог поместился целиком. Мы использовали фрейм с почти квадратными сторонами с длиной 50 см. Число меток было равно 25, что позволяет использовать метод наименьших квадратов для уточнения значений 10 независимых параметров ПЛП. Декартовы координаты меток считаются из-

вестными. Камера жестко фиксируется на штативе и снимает неподвижный равномерно освещенный калибровочный фрейм в течение нескольких секунд.

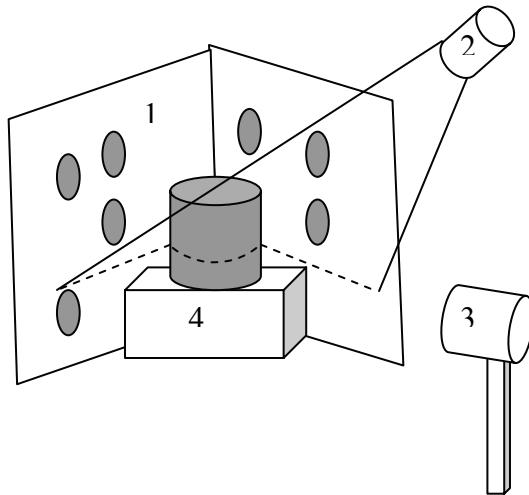


Рис. 3. Схема установки для сканирования. 1 – калибровочный объем в виде прямого угла с калибровочными метками на обеих гранях, 2 – лазер, 3 – цифровая камера, подключенная к компьютеру через интерфейс IEEE 1394, 4 – объект сканирования, штрихами показан след лазерного пучка на измеряемом объекте и на гранях калибровочного фрейма.

После вычисления параметров ПЛП можно по полученным данным внутрь координатного фрейма помещается объект, и осуществляется его сканирование на установке, схема которой показана на рисунке 3. Для подсветки объекта используется полупроводниковый лазер с длиной волны 656 нм, пучок которого был преобразован с помощью цилиндрической линзы в линию. Пучок лазера в виде линии «заметал» объект несколько раз, при этом сам источник излучения находился в фиксированной точке пространства. При этом необходимо чтобы угол между плоскостью пучка лазера и оптической осью камеры был не менее 10 градусов. Положение камеры при сканировании то же что и при калибровке. Частота кадров при сканировании составляет 30 кадров в секунду, угловая скорость поворота луча лазера была порядка градуса в секунду. Величина экспозиции камеры подбиралась такой, чтобы на видео хорошо был виден только след линии лазерного излучения. Необходимо также чтобы в поле зрения попадали следы пучка лазера на обеих гранях калибровочного фрейма.

Для восстановления координат объекта использовалась свободно распространяемая программа David Laser Scanner [2]. Эта программа позволяет идентифицировать на каждом из кадров изображения линию точек объекта, подсвеченных лазером и определить их координаты. В результате на выходе программы мы получаем сырую модель в формате ОВЈ. Эта модель обычно содержит шум и требует дальнейшей обработки. Для удаления

шума, а также ненужных частей модели мы использовали программу MeshLab [3], свободно распространяемой на основе лицензии GPL. Данная программа позволяет «склеивать» несколько моделей одного объекта с различных ракурсов для получения обзора с большего диапазона углов вплоть до 360 градусов.

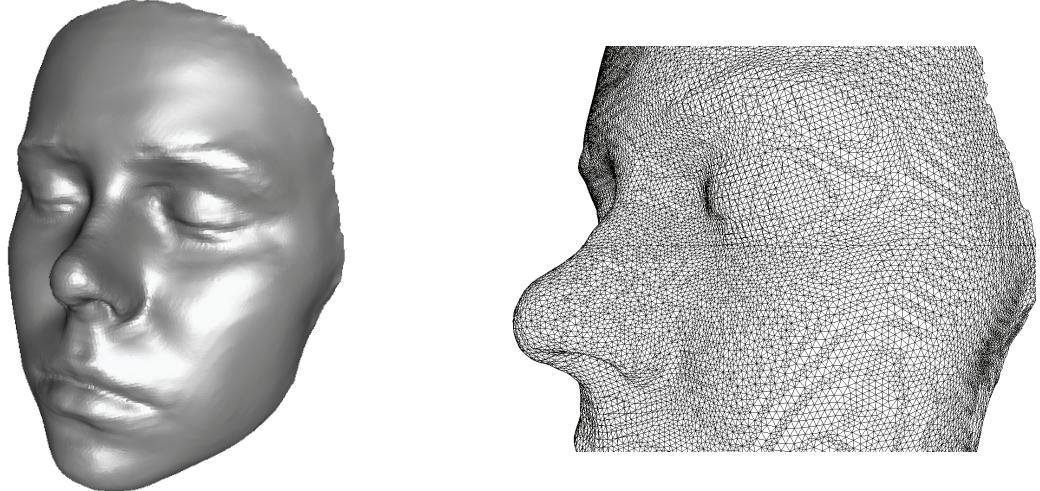


Рис. 4. Трехмерная модель лица при отрисовке с учетом освещения.

Рис. 5. Та же модель в каркасном режиме отображения. Хорошо заметна треугольная сетка, натянутая на точки изображения.

На рисунках 4 и 5 представлена модель лица одного из авторов работы, полученная обработкой 6 сканов с различных ракурсов. Погрешность в определении расстояния меньше 1 мм.

Данная методика позволяет получать трехмерные модели не слишком крупных (размером порядка нескольких метров) и достаточно мелких (единицы сантиметров) объектов. При этом необходим соответствующий выбор размеров калибровочного фрейма и расстояния от камеры до измеряемых предметов. В качестве недостатка следует отметить большое время сканирования, которое зависит от частоты кадров используемой камеры и невозможность сканирования больших объектов, например памятников архитектуры, что ограничивается максимально возможным размером калибровочного объема.

Литература

1. <http://www.kwon3d.com/theory/dlt/dlt.html>.
2. <http://www.david-laserscanner.com>.
3. <http://meshlab.sourceforge.net/>.

СВЕТОСОБИРАНИЕ В ДЕТЕКТОРЕ МАММОГРАФА

В. П. Гаврилюк, В. Ю. Педаш, А. С. Раевский

*Институт сцинтилляционных материалов НТК «Институт монокристаллов»
НАН Украины, пр-т Ленина 60, 61001 Харьков, Украина, raevskiy@isma.kharkov.ua*

Введение

В настоящее время злокачественные образования в молочных железах являются самыми распространенными онкологическими заболеваниями у женщин, и распространение этой формы рака постоянно возрастает. Рак молочной железы лидирует среди причин смертности женщин в возрасте от 35 до 54 лет, что составляет по величине от 1,5 до 4 %. В таком случае важным фактором является ранняя и точная диагностика рака молочной железы и своевременно начатое лечение. В качестве диагностической аппаратуры во многих странах Европы применяются ОФЭКТ (однофотонный электронный компьютерный томограф) системы со сцинтилляционными детекторами.

Основной целью работы являлось создание практических рекомендаций по дизайну детектора с улучшенными технико-эксплуатационными характеристиками, которые позволили бы улучшить пространственное разрешение прибора.

Объект исследований

В данной работе процессы светособирания в сцинтилляционном детекторе маммографа исследуются с помощью численного моделирования.

Объектом моделирования является цилиндрический детектор маммографа, состоящий из соосных кристалла NaI(Tl) и световода. Световод набран из плоских пластин, со-прикасающихся с внешней цилиндрической поверхностью кристалла. Проводится моделирование процесса светособирания в таком детекторе. Моделируется только оптика детектора и формирование сигнала.

Табл. Размеры детектора

Размер	Значение, см	Размер	Значение, см
Внутренний диаметр кристалла	22,3	Внешний диаметр световода	22,6
Толщина кристалла	0,85	Высота детектора	16,6
Внешний диаметр	24	Толщина детектора	1,3
Число образующих пластин световода	16	Ширина образующей пластины	5,22

Форма и размеры детектора считались недоступными для изменения, так как они

были определены спецификой детектора. Световод набран из плоских пластин, соприкасающихся с внешней цилиндрической поверхностью кристалла. Только следующие элементы конструкции и факторы подбирались при исследовании:

- число, размер и расположение фотоэлектронных умножителей (ФЭУ);
- коэффициент отражения света среды, заполняющей пространство между элементами световода (перемычками);
- наличие светоотражающих масок под ФЭУ;
- обработка (коэффициент отражения света) торцевой поверхности кристалла и световода.

При этом исходили из соображений возможности изменения данных элементов дизайна детектора на самом последнем этапе его сборки (при уже изготовленных и сопряженных между собой кристалле и световоде).

Пространственное разрешение и параметризация функции распределения света

Процесс светособирания описывается функцией распределения интенсивности света: двумерной функцией плотности вероятности распределения точек регистрации лучей при данном положении сцинтиляционной вспышки. Реализация именно этой функции получается алгоритмом при расчете траекторий лучей, возникших в результате сцинтиляции.

Рассмотрим, каким образом формируется пространственный сигнал детектора. В гамма-камерах для этого применяется алгоритм Ангера, при котором положением точки вспышки считается центр тяжести системы ФЭУ с весами, пропорциональными их сигналам. Разновидности алгоритма Ангера различаются по методам подбора веса каждого ФЭУ, и методам деления ФЭУ на «близкие», сигналы которых учитываются в алгоритме, и «далекие», сигналы которых несут сильную статистическую составляющую, и участвуют с нулевым весом.

Для нужд данного исследования можно ограничиться одномерным упрощением алгоритма: пусть точка вспышки находится на прямой, соединяющей ФЭУ №0 и ФЭУ №1. Получим сигналы с каждого ФЭУ E_0 и E_1 при различных положениях точки вспышки на этой прямой (см. рис. 1).

Пусть вспышка находится в точке с координатой X . Энергетическое разрешение (ширина фотопика), и сигналы (положение фотопика) таковы, что система может с уверенностью распознать изменение относительного сигнала dE . Тогда пространственное разрешение в точке X :

$$dx = dE / \tan \alpha .$$

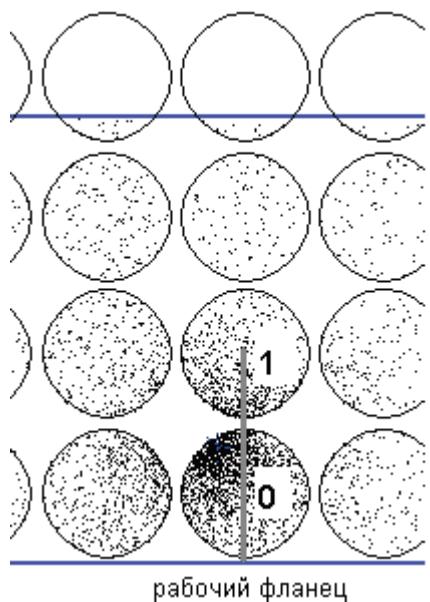


Рис. 1. Получение относительного сигнала ФЭУ в одномерном алгоритме Ангера.

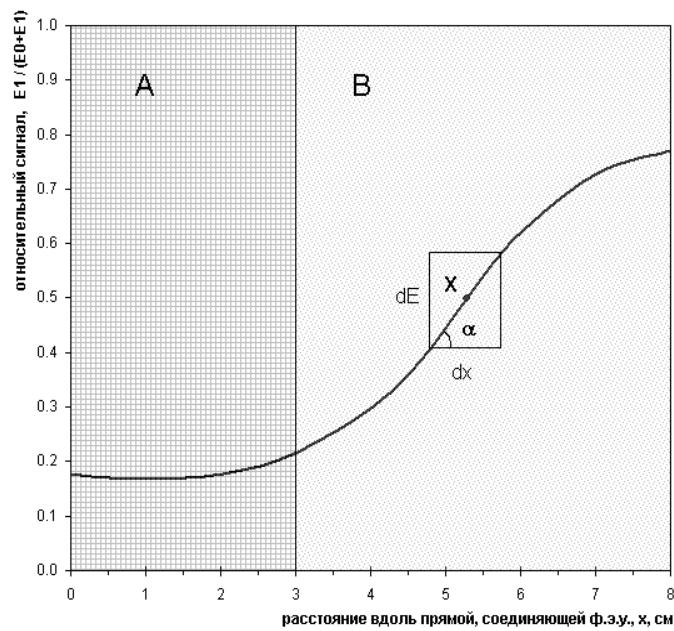


Рис. 2. К получению пространственного разрешения по алгоритму Ангера.

Следовательно, для получения лучшего пространственного разрешения зависимость относительного сигнала от координаты вспышки должна иметь наибольший наклон. Полезное поле зрения детектора начинается в области В на расстояниях не менее 3 см от края детектора. В понимании этой работы, краевой эффект распространяется на всю область В. Таким образом, уменьшение краевого эффекта, или его полное уничтожение означает, что относительный сигнал изменяется наиболее равномерно (линейно) при удалении точки вспышки от края детектора.

Самым удобным методом параметризации функции распределения интенсивности света для данной работы является извлечение относительного сигнала краевых ФЭУ. Именно этот, и только этот метод параметризации применялся в данном исследовании.

Описание полученных результатов

Перемычки в кристалле и световоде. Прослежены закономерности распространения света в детекторе с перемычками, исследовано влияние перемычек на пространственное разрешение. Показано, что лучший ход кривой относительного сигнала достигается в детекторе без перемычек. Краевой эффект распространяется до центра 1-го ФЭУ. Размещение ФЭУ малого диаметра в 1-м поясе должно привести к уменьшению зоны краевого эффекта.

Уменьшение диаметра ФЭУ 1-го ряда.

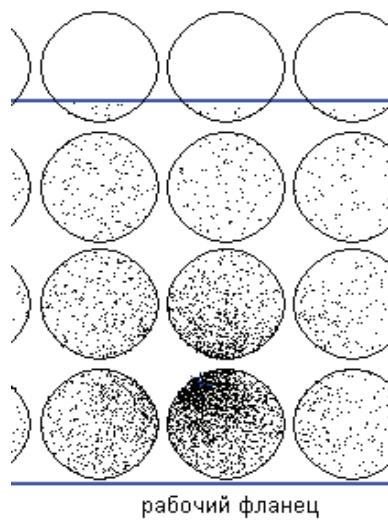


Рис. 3. Дизайн детектора с четырьмя поясами ФЭУ одинакового диаметра (общее число ФЭУ 64).

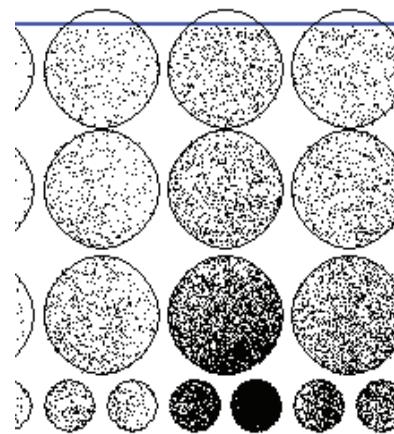


Рис. 4. Дизайн детектора с малыми ФЭУ 1-го пояса (общее число ФЭУ: 32 в 1 поясе, и 48 в 2-4 поясах).

Расчет дизайна детектора с меньшими по сравнению с исходным дизайном (рис. 3) размерами ФЭУ 1-го ряда (рис. 4) показал, что область краевого эффекта уменьшается до 1-1.5 см – по-прежнему до центра 1-го ФЭУ. Дизайн детектора с малыми ФЭУ принят в качестве основного для дальнейшего исследования. Проникающая способность излучения не оказывает заметного влияния на относительный сигнал, дальнейшие исследования ограничиваются проникающей способностью $\mu = 0.3$ см. Путем сравнения сигналов с отдельных ФЭУ показано, что краевой эффект есть следствие слишком медленно уменьшающегося, или постоянного сигнала на ФЭУ 1-го ряда при удалении точки вспышки от фланца кристалла.

Отражение на поверхностях световода. Исследуется взаимосвязь краевого эффекта с факторами, которые влияют на распространение света по всей длине образующей цилиндра детектора – светоотражательные характеристики клея, заполняющего перемычки световода. Область действия краевого эффекта не зависит от этого фактора.

Отражение на поверхностях фланца. Рассмотрены факторы, влияние которых ослабевает по мере удаления от фланца детектора. Серое светоотражающее покрытие на фланце кристалла приводит к более сильному краевому эффекту. Серое же покрытие фланца световода, наоборот, значительно уменьшает краевой эффект. Введение белых масок под ФЭУ 1-го ряда также признано благоприятным для уменьшения краевого эффекта.

Возможные дефекты конструкции. Рассмотрены факторы, которые трудно поддаются контролю при сборке детектора – «отлипание» светоотражающего покрытия от поверхности кристалла. Показано, что нарушение оптического контакта вредно, и приводит к появлению краевого эффекта.

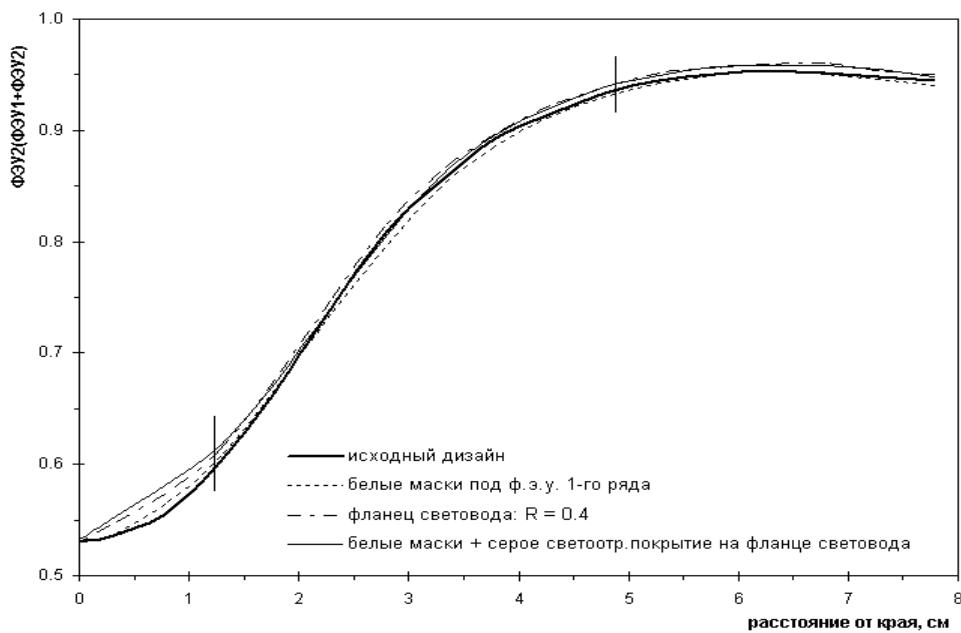


Рис. 5. Относительный сигнал для дизайна, комбинирующего наиболее выгодные черты.

На рис. 5 приведены результаты расчета конструкции, совмещающей наивыгоднейшие черты дизайна. К таковым относятся:

малые ФЭУ 1-го пояса;

серое светоотражающее покрытие на фланце световода;

белые маски под ФЭУ 1-го ряда.

Очевидно, что применение всех этих черт конструкции позволяет в значительной мере ослабить краевой эффект и обеспечить хорошее пространственное разрешение вблизи рабочего фланца детектора.

Литература

1. V. P. Gavrilyuk, E. L. Vinograd, B. V. Grinyov, V. I. Goriletsky, Effect of surface conditions on the light collection in scintillation detectors//Functional materials. 1997. Vol. 4. №4. P. 572 – 577.
2. J. Buscombe et al. Scintimammography. A guide to good practice. Birmingham: Gibbs Associated Limited, 1998. 101 p.
3. Khalkhali at al. Scintimammography: the new role of technetium-99 sestamibi imaging for the diagnosis of breast carcinoma // Q. J. Nucl. Med. 1997. Vol. 41. P.231-238.

ЭЛЕКТРОДИНАМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ НАБЛЮДЕНИЯ ПОЛЯРИЗАЦИОННОЙ СЕЛЕКТИВНОСТИ ДНК

А. П. Балмаков, И. В. Семченко

*Гомельский государственный университет им. Ф. Скорины,
ул. Советская 104, 246019, Гомель, Беларусь*

Изучение киральных (зеркально-асимметричных) сред уже много лет вызывает оживленный интерес в научном сообществе. Молекула ДНК (двойная спираль) является представительницей киральных структур и играет очень важную роль в жизни всего живого на Земле. Сейчас, когда столь распространены всевозможные технические излучающие устройства, беспроводные средства связи, человек окружен разнообразием электромагнитных волн, многие из которых на Земле в естественном виде не встречаются (дальний ультрафиолет, рентген). Поэтому остро встает вопрос о влиянии искусственных высокочастотных электромагнитных полей на человека. Особенно важным нам представляется взаимодействие таких волн с содержащимися в хромосомах молекулами ДНК [1]. Большинство исследователей считают ДНК чувствительным детектором внешних электромагнитных полей, некоторые полагают, что нарушения в цепочке ДНК могут происходить, начиная уже с низкоинтенсивных волн СВЧ диапазона.

Характеристики электромагнитной волны, излучаемой спиральным элементом, зависят от отношения геометрических размеров спирали и длины волны. Если линейные геометрические размеры спирали значительно меньше, чем длина волны, то можно применить дипольное приближение теории излучения [2-4].

В данном случае были рассмотрены электрический дипольный момент и магнитный момент спирали. Главное условие для проявления поляризационной селективности – это одновременное образование в двойной спирали ДНК электрического дипольного и магнитного моментов, которые на пару друг с другом образуют внешнее поле.

Нами были рассчитаны все компоненты электрического дипольного момента и магнитного момента в двойной и одинарной спирали. Поляризация излучаемой волны зависит от соотношения между этими моментами.

Рассмотрим двойную спираль ДНК [5,6], имеющую радиус $r = 1.0 \cdot 10^{-9} \text{ м}$ и шаг $h = 3.4 \cdot 10^{-9} \text{ м}$. Геометрические параметры двойной спирали ДНК, измеренные в процессе многих экспериментов, близки к указанным значениям r и h .

Введем понятие относительного кручения спирали q , которое связано с шагом спирали h соотношением

$$h = \frac{2\pi}{|q|},$$

где знак величины q зависит от направления вращения спирали в пространстве. Если $q > 0$, то спираль образует правый винт.

Следующее выражение было получено ранее для x компоненты электрического дипольного момента спирали:

$$p_x = \frac{i}{\omega} \int_{x_1}^{x_2} I(x) dx \quad (1)$$

здесь ось x направлена вдоль оси спирали, x_1 и x_2 – координаты начала и конца полувитка спирали.

Мы предполагаем гармоническую зависимость электрического тока I от времени, выраженную формулой $e^{-i\omega t}$, где ω – циклическая частота. В дополнение, принимая в расчет геометрические параметры спирали, мы рассчитали x -компоненту магнитного момента [2]:

$$m_x = \frac{1}{2} r^2 q \int_{x_1}^{x_2} I(x) dx$$

Связь между проекциями моментов на ось спирали выражается формулой

$$p_x = \frac{2i}{\omega r^2 q} m_x \quad (2)$$

Это соотношение универсальное, т.к. не зависит от распределения электрического тока вдоль спирали $I(x)$ и остается справедливым при любой последовательности азотистых оснований в ДНК. Компоненты моментов вдоль оси спирали играют главную роль при излучении циркулярно поляризованной волны в направлении, перпендикулярном оси спирали.

Для того чтобы определить геометрические параметры спирали, обеспечивающие излучение циркулярно поляризованной волны, мы использовали универсальное соотношение (2), которое было получено для компонент электрического дипольного момента и магнитного момента спирали в случае произвольного распределения электрического тока в спирали и при условии главного частотного резонанса:

$$\lambda = L \quad (3)$$

где L – длина одного витка спирали, измеренная вдоль спиральной цепочки атомов.

Принимая в расчет соотношение между геометрическими параметрами спирали

$$L \cos \alpha = 2\pi r$$

мы получаем следующее тригонометрическое уравнение для спирали с углом подъема α :

$$\sin^2 \alpha + 2 \sin \alpha - 1 = 0 \quad (4)$$

Выбирая положительный корень квадратного уравнения (4), мы можем найти оптимальный угол подъема спирали для произвольного количества ее витков $\alpha_{\text{опт}} = 24.5^\circ$.

Полученное теоретическое значение оптимального угла подъема приблизительно на 15% отличается от угла подъема $\alpha_{\text{эксп}} = 28.4^\circ$, соответствующего приведенным выше экспериментальным данным для радиуса r и шага спирали h .

Экспериментальным путем нами исследуется электромагнитная волна СВЧ-диапазона (сверхвысокие частоты), отраженная двумерными решетками, состоящими из спиральных проводников. Каждый спиральный элемент имеет геометрические параметры, подобные молекуле ДНК. Исследуется эллиптичность отраженной электромагнитной волны в зависимости от частоты вблизи главного резонанса. На основании принципа электродинамического подобия экспериментально подтверждается результат, полученный ранее теоретически.

В данной статье представлены экспериментальные результаты исследований поляризационной селективности волн, отраженных решетками, состоящими из правых и левых ДНК-подобных спиралей в СВЧ диапазоне. Параметры спиралей были выбраны в соответствии с предсказаниями теории с целью получения отраженных волн высокой эллиптичности.

Для усиления сигнала были изготовлены решетки из медных спиралей, закрепленных на радиопрозрачном материале (рис. 1). Каждый образец состоял из идентичных спиралей одного вида.

Первая решетка возбуждалась линейно-поляризованной волной, падающей на образец под углом 45° (рис. 2). Отраженная от первой решетки волна была почти циркулярно поляризована в исследуемом нами диапазоне длин волн и далее падала на вторую решетку. Волна, отраженная от второй решетки, была циркулярно поляризованной влево (вектор напряженности поля описывает в пространстве левый винт), если спирали обеих решеток были правыми и линейно-поляризованной, если спирали первой решетки были правыми, а второй левыми. Во втором случае интенсивность волны, испытавшей двойное отражение от решеток, была значительно меньшей.

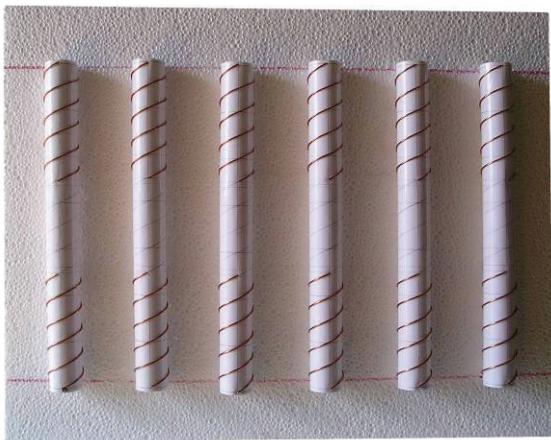


Рис. 1. Фото опытного образца двойных правых днк-подобных спиралей.

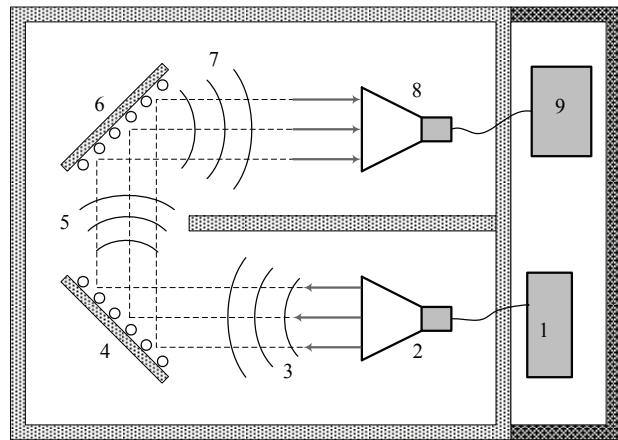


Рис. 2. Схема эксперимента в безэховой камере.

Графики зависимости эллиптичности отраженных волн от частоты можно увидеть на рисунке 3а для случая правых спиралей на образцах (эффект поляризационной селективности излучения на частоте 2.8 GHz) и на рис. 3б для случая левых спиралей на первом образце и правых на втором (отсутствие эффекта поляризационной селективности излучения). Вектор падающей волны направлен поперек осей спиралей для указанных графиков. Рассматривались также случаи, когда вектор был направлен вдоль осей спиралей. Графики зависимостей эллиптичности от частоты для этих случаев оказались сходными с указанными на рис. 3а и 3б.

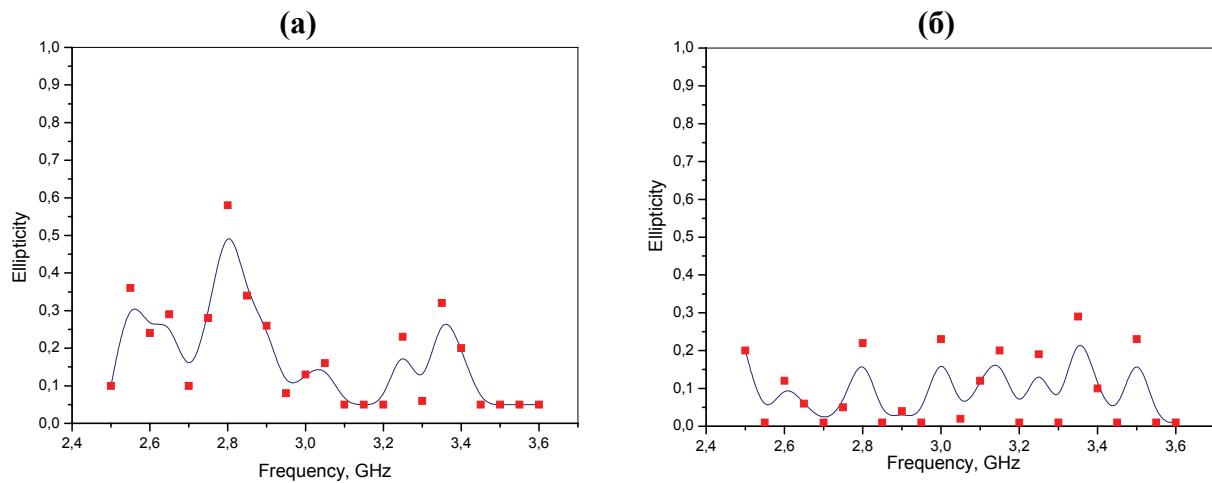


Рис. 3. Графики зависимости эллиптичности отраженной волны от частоты, когда образцы состоят из правых спиралей (а) и когда первый образец состоит из левых спиралей, а второй из правых (б).

Эффект поляризационной селективности воздействия электромагнитного поля является одним из определяющих для спиральных объектов и напрямую связан с нарушением

зеркальной симметрии в природных структурах и явлениях. Это может быть важно при генетическом сохранении различий между правовинтовыми и левовинтовыми формами объектов живой природы.

Теоретически рассчитанный нами угол подъема спирали, необходимый для излучения волн циркулярной поляризации, приблизительно совпадает с углом подъема спирали ДНК, известным из экспериментальных данных. Обладая оптимальной геометрической формой, молекула ДНК не подвержена воздействию правой циркулярно поляризованной электромагнитной волны в мягком рентгеновском диапазоне $\lambda \approx 7 - 8$ нм. Такая волна, для которой правосторонняя молекула ДНК является “прозрачной”, должна распространяться перпендикулярно оси спирали и образовывать в пространстве правый винт. Соответственно волна, излучаемая правосторонней молекулой ДНК перпендикулярно оси спирали в диапазоне $\lambda \approx 7 - 8$ нм, имеет левую циркулярную поляризацию. Эти особенности могут быть использованы при создании ДНК-подобных метаматериалов с селективными поляризационными свойствами.

Литература

1. И.В. Семченко, С.А. Хахомов, А.П. Балмаков. Радиотехника и электроника **52** (9), 1078 (2007).
2. И.В. Семченко, С.А. Хахомов, А. Л. Самофалов. Радиотехника и электроника **52** (8), 917 (2007)
3. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, Теория поля, Наука, М., 1973.
4. I.V. Semchenko, S.A. Khakhomov, A.L. Samofalov. Electromagnetics **26** (3-4), 219 (2006).
5. J.D. Watson and F.H.C. Crick, Nature 171, 737 (1953).
6. from <http://en.wikipedia.org/w/index.php?title=DNA&oldid=56282939>
7. W. Kauzmann, Quantum chemistry. An introduction, New York, Academic Press, 1957.
8. I.V. Semchenko, S.A. Khakhomov, A.P. Balmakov, Proc. 11th Int. Conf. on Complex Media and Metamaterials (Bianisotropics' 2006). 25-28 Sep. 2006, Samarkand (Helsinki: Helsinki Univ. of Technology, Electromagnetics Laboratory), Report 478, P. 45.
9. И.В. Семченко, А.П. Балмаков. Изв. ГГУ **6** (39), Ч. 1, 136 (2006).
10. I.V. Semchenko, S.A. Khakhomov, A.P. Balmakov, 6th Inter-Academia 2007/2nd Inter-Academia for Young Researchers Workshop. 26 – 30 Sep. 2007 (Hamamatsu, Japan), P. 136.
11. I.V. Semchenko, S.A. Khakhomov, A.P. Balmakov, Proc. First International Congress on Advanced Electromagnetic Materials in Microwaves and Optics. 22-24 Oct. 2007 (Rome), P. 711.

ДИФФУЗИОННЫЙ ВОЛНОВОД Cr:ZnSe НА ZnSe

Е. Л. Барсукова, Л. И. Постнова, В. И. Левченко

ГО «НПЦ НАН Беларусь по материаловедению», ул. П.Бровки 19,
220072 Минск, Беларусь, barsukova@iftp.bas-net.by

Интеграция отдельных компонент оптических систем в единое устройство в настоящее время является одной из важнейших тенденций лазерной техники и оптического приборостроения. Переход к интегральным решениям и технологиям, однако, предъявляет новые требования к лазерным материалам, что во многих случаях требует разработки новых материалов. Легированный хромом ZnSe является в настоящее время перспективным материалом для перестраиваемых в диапазоне 2-3 мкм твердотельных лазеров, в объемном виде активно исследуется [1-3] и уже используется в новых разработках лазеров медицинского назначения. Вместе с тем, по совокупности параметров данный материал перспективен для применения в интегральной оптике. В связи с этим актуальна задача получения его в виде тонких слоев.

В технологии изготовления оптических волноводов широко используется диффузионный метод [4]. В этом случае толщина волновода определяется толщиной диффузационного слоя. Для определения технологического режима изготовления волновода необходимо знать зависимость толщины диффузационного слоя от температуры и времени диффузии. Экспериментальное определение толщины диффузационного слоя трудоемко. Гораздо легче провести эксперименты по определению температурной зависимости коэффициента диффузии при высоких температурах, а затем математически рассчитать толщину диффузационного слоя.

Целью настоящей работы является исследование зависимости толщины диффузационного слоя Cr:ZnSe на ZnSe от основных технологических параметров процесса диффузии.

В качестве исходных данных для расчета толщины диффузационного слоя использовались экспериментально определенные температурные зависимости коэффициента диффузии и поверхностной концентрации, полученные по методике, описанной в [5].

Расчет толщины диффузационного слоя проводился в предположении диффузии из неограниченного источника, которая реализуется при легировании ZnSe из тонкой металлической пленки хрома. Как известно, в этом случае распределение диффундирующей примеси по толщине пластины в зависимости от времени описывается уравнением

$$C(x, t) = C_0 \cdot \operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{Dt}}, \quad (1)$$

где C_0 – объемная концентрация примеси на поверхности пластины, см^{-3} ; x – координата в направлении диффузии образца, см; D – коэффициент диффузии, $\text{см}^2/\text{сек}$, t – продолжительность диффузии, сек.

При расчетах толщиной диффузионного слоя считалась глубина, на которой концентрация хрома составляет половину от поверхностной концентрации.

Диффузия хрома в ZnSe осуществлялась в интервале температур 1079–1359 К. Для образцов Cr:ZnSe, полученных при разной температуре диффузии, регистрировался спектр оптической плотности в области поглощения ионов двухвалентного хрома на спектрофотометре Carry-500. Затем из него рассчитывались коэффициент диффузии и поверхностная концентрация хрома [5, 6]. Далее используя известную зависимость коэффициента диффузии от температуры:

$$D(T) = D_0 \exp\left(-\frac{E_{akt}}{k_B T}\right), \quad (2)$$

где D_0 – коэффициент диффузии при $1/T \approx 0$, $\text{см}^2/\text{сек}$, E_{akt} – энергия активации процесса диффузии, Дж, k_B – константа Больцмана, Дж/К, построенную в координатах $-\ln D = f(1/T)$, определялись значения E_{akt} и D_0 . Вычислив постоянные величины $E_{akt} = 20,925 \cdot 10^{-20}$ Дж и $D_0 = 0,00178 \text{ см}^2/\text{сек}$, экспериментальная зависимость коэффициента диффузии от температуры экстраполировалась в область низких температур, где экспериментальное определение коэффициента диффузии затруднительно.

Далее подставляя $D(T)$ в формулу, описывающую диффузионный профиль, несложно получить выражение для расчета толщины диффузионного слоя:

$$f(x) = \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{t(0,00178 \exp(-15163/T))}}\right) - 0,5. \quad (3)$$

Решая это уравнение методом последовательных приближений при различных значениях температуры и времени можно определить зависимость толщины диффузионного слоя от указанных параметров.

На рисунках 1 и 2 представлен внешний вид полученных образцов.



Рис. 1. Волновод Cr:ZnSe на ZnSe полу-
ченный методом селективной диффузии

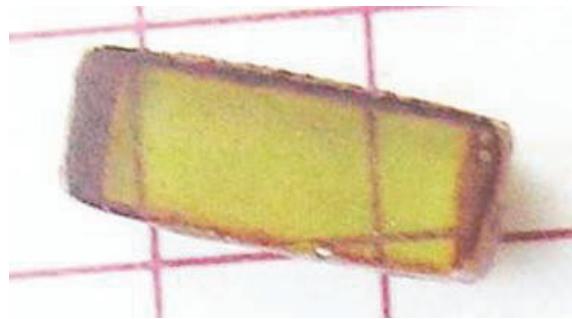


Рис. 2. Заготовка для получения волно-
вода Cr:ZnSe на ZnSe методом травления

На рисунках 3-5 представлены экспериментальные зависимости коэффициента диффузии и толщины диффузионного слоя от параметров процесса диффузии.

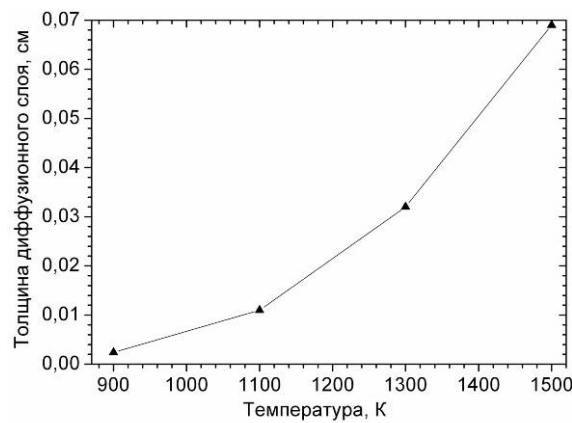


Рис. 3. Зависимость толщины волновода Cr:ZnSe на ZnSe от температуры процесса диффузии

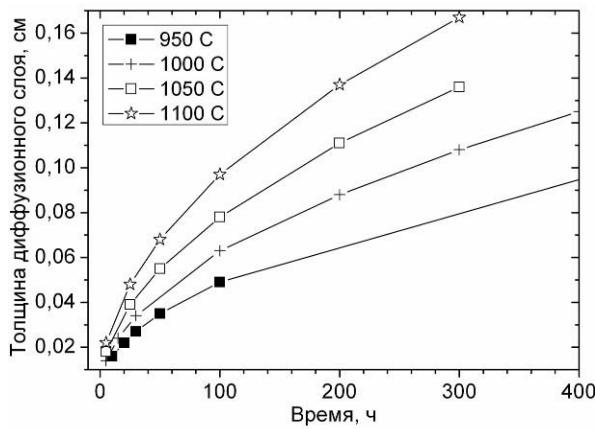


Рис. 4. Зависимость толщины диффузионного слоя от времени процесса диффузии при разных температурах

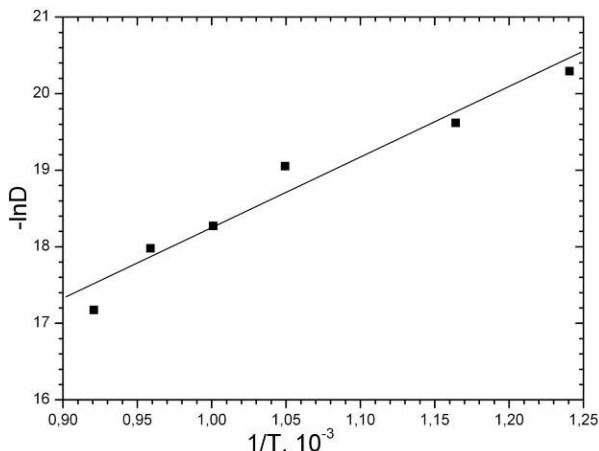


Рис. 5. Зависимость коэффициента диффузии от температуры процесса

Исследована зависимость толщины диффузионного волновода Cr:ZnSe на ZnSe от основных технологических параметров процесса диффузии таких, как температура и время. Определены условия получения слоев Cr:ZnSe в различном диапазоне толщин диффузионного слоя. Расчет толщины диффузионного слоя проводился в предположении диффузии из неограниченного источника.

Литература

1. Levchenko V.I., Yakimovich V.N., Postnova L.I. // Journal of Crystal Growth, Vol. 198-199, 1999, pp. 980-983.
2. Podlipensky A.V., Shcherbitsky V.G., Kuleshov N.V. // Optics Letters, Vol.24 (1999), No 14, pp. 960-962.
3. Mond M., Albrecht D., Heumann E., Huber G., Kück S. // Optics Letters Vol. 27 (2002), N12, pp. 1034-1036.
4. Р. Хансперждер. Интегральная оптика: теория и технология. Пер. с англ. – М.: Мир, 1985.
5. Ndap J.-O., Chattopadhyay K. // Journal of Crystal Growth. 240 (2002) 176-184.
6. Горелик С.С., Дащевский М.Я. Материаловедение полупроводников и металловедение. – М.: Металлургия, 1973.

АДАПТИВНЫЙ СЕНСОР ВОЛНОВОГО ФРОНТА С МАТРИЦЕЙ ГОЛОГРАФИЧЕСКИХ МИКРОЛИНЗ

А. А. Голобородько, В. П. Данько, В. Н. Курасов, Д. В. Поданчук, Н. С. Сутягина

*Радиофизический факультет Киевского национального университета им. Т. Шевченко,
01033 Киев, ул. Владимирская 64, Украина*

Задача определения формы оптического волнового фронта возникает в разных отраслях современной прикладной оптики – метрологии, офтальмологии, а особенно в адаптивной оптике. Для определения формы волнового фронта одним из наиболее распространенных сенсоров является сенсор Шека-Хартманна [1], который измеряет локальные наклоны волнового фронта. К сожалению, его применение ограничивается достаточно малым угловым динамическим диапазоном. Существует ряд методов преодоления этого недостатка [2], некоторые из них основаны на использовании в сенсоре голограммической оптики [3]. В этом случае достаточно использовать в сенсоре матрицу микролинз, в голограммической памяти которой записан заданный набор aberrаций. Тогда при последующей диагностике волнового фронта легко измерять небольшие изменения aberrаций во времени относительно эталонного волнового фронта. Целью работы было рассмотреть возможность записи волнового фронта со сложными aberrациями в память сенсора волнового фронта Шека-Хартманна.

На рис. 1 показан процесс записи в память голограммической матрицы микролинз сенсора Шека-Хартманна объектной волны с некоторым набором aberrаций. Становится понятно, что при восстановлении изображения волны с таким же набором aberrаций в первом порядке дифракции будет восстановлена волна, создающая на фотодетекторе эквидистантный набор точек [4].

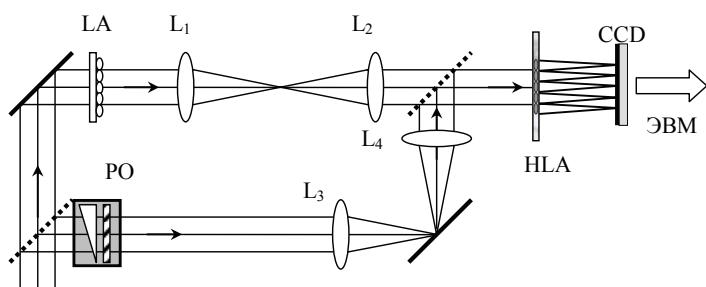


Рис. 1. Схема оптической установки для записи голограммического сенсора волнового фронта Шека-Хартманна.

Плоскость эталонной рефракционной матрицы LA переносится в плоскость записи с помощью 4F системы L₁-L₂. С помощью системы переноса L₃-L₄ эталон aberrации PO пе-

реносится в плоскость голограммы. Следует заметить, что опорный и объектный пучки должны падать на голограмму под разными углами (это не отображено на схеме) с целью разности 1-й и 0-й порядок дифракции, при восстановлении. Соответственно, при восстановлении изображения, после прохождения волна голографического сенсора HLA (рис. 1), результатом будет разность записанной и измеренной аберрации. Результат моделирования измерения формы волнового фронта голографическим сенсором Шека-Хартманна с предкомпенсацией аберраций показан на рис. 2.

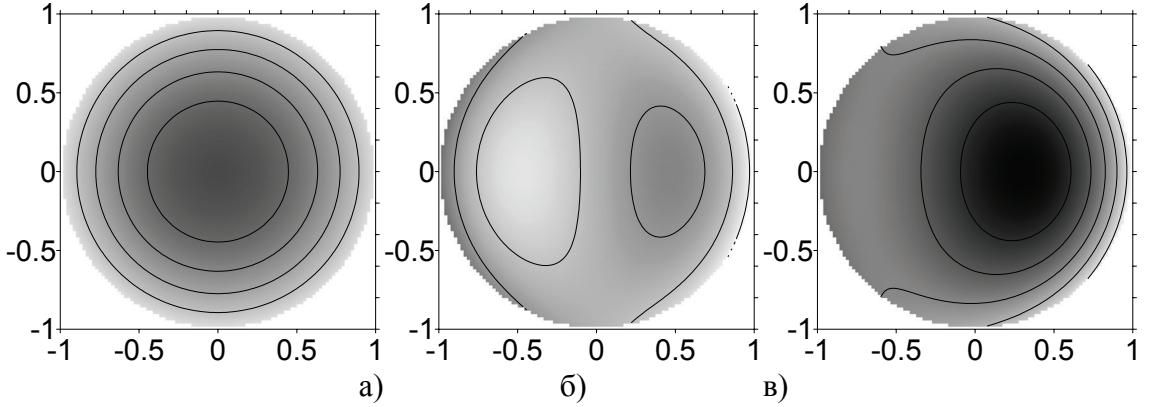


Рис. 2. Результаты моделирования формы волнового фронта, измеренного сенсором с предкомпенсацией аберраций: а) волновой фронт, использованный для предкомпенсации; б) измеренный волновой фронт, в) восстановленный волновой фронт, который есть суммой предкомпенсированного и измеренного.

Для записи на голографическую пластину аберрации для предкомпенсации был создан эталон РО – синтезированная амплитудная голограмма, которая математически может быть рассчитана следующим образом:

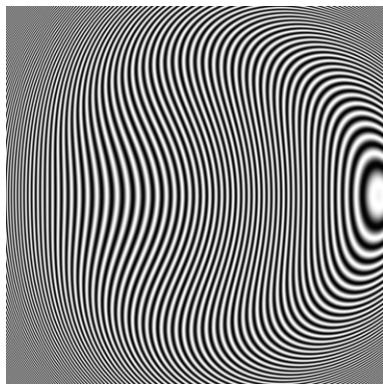
$$I^*(x, y) = I_0 \cdot \left| e^{iw(x, y)} + e^{\frac{i2\pi}{\lambda} x \sin \phi} \right|^2, \quad (1)$$

где I_0 – интенсивность излучения; ϕ – угол между нулевым и первым порядком восстановления; $w(x, y)$ – произвольная аберрация волнового фронта задается, как суперпозиция стандартных аберраций с некоторыми весовыми коэффициентами [5]:

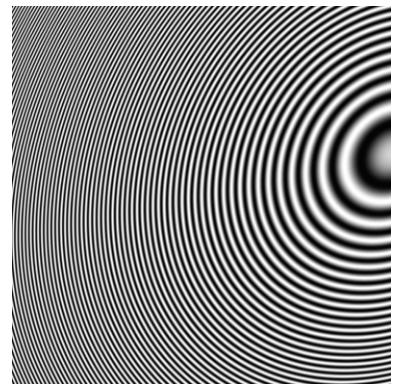
$$w(x, y) = \sum_{n,m} \alpha_n^m w_n^m(x, y), \quad (2)$$

где w_n^m – полином Цернике, α_n^m – коэффициент соответствующего полинома.

В результате синтезированная дифракционная решетка будет иметь вид, как показано на рис. 3.



а) дефокусировка: $\alpha_0^2 = 3.185$,
трилистник: $\alpha_1^3 = 1.592$.



б) дефокусировка: $\alpha_0^2 = 14.393$,
астигматизм: $\alpha_2^2 = 3.148$.

Рис. 3. Интерферограммы плоской волны и волны с суперпозицией aberrаций ($\varphi=5^0$).

Ошибка восстановления фазы такой дифракционной решеткой не превышает 4% [6] (для определения ошибки измеряется дисперсия фазы восстановленного волнового фронта по отношению к дисперсии фазы синтезированного волнового фронта).

Таким образом, в представленной работе предложен метод записи матриц голограммических микролинз для сенсора волнового фронта. Показано, что применение aberrационного волнового фронта при записи голограмм позволяет в дальнейшем компенсировать часть искажений волнового фронта. Такой сенсор может найти применение в оптической метрологии, например, для тестирования деформаций отбивающей поверхности в реальном масштабе времени.

Литература

1. Alloin D. M., Mariotti J. -M. Adaptive optics for astronomy, Kluwer academic publishers, 1999.
2. Pfund J., Lindlein N., Schwider J. Applied optics **37**, 22 (1998).
3. Podanchuk D., Dan'ko V., Kotov M., Son J.-Y., Choi Y.-J. Optical Engineering **45**(05), 053605 (2006).
4. Son J. -Y., Podanchuk D., Dan'ko V., Kwak K. -D. Optical Engineering **42**(11), 3389 (2003).
5. Борн М., Вольф Э. Основы оптики, М.: Наука, 1973.
6. Goloborodko A. A., Zakrevsky Yu. V. Proceedings of the VII International Young Scientists Conference on Applied Physics, 14, Kyiv, 2007.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ОБЪЕМНЫХ АКУСТИЧЕСКИХ ВОЛН С ВРАЩАЮЩИМСЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКИМ ПОЛЕМ В КЕРАМИКЕ НА ОСНОВЕ ТИТАНАТА БАРИЯ

С. А. Хахомов, И. В. Семченко, С. Д. Барсуков

*Гомельский государственный университет имени Ф. Скорины,
кафедра оптики, ул. Советская 104, 246019, Гомель, Беларусь, khakh@gsu.unibel.by*

К настоящему времени показана возможность наблюдения эффектов преобразования частоты, параметрического усиления и генерации обращенной волны, обнаружен эффект электроакустической памяти и изучено взаимодействие поперечных ультразвуковых волн с вращающимся электрическим полем [1]. Возможность подавления поглощения ультразвука вращающимся электрическим полем и усиления ультразвуковых волн в условиях спряжения фазы акустических волн с вращающейся анизотропией в кристалле в резонансном частотном диапазоне была доказана теоретически [2-4]. Чтобы подтверждать теоретически предсказанные эффекты в статье, приводятся результаты экспериментальных исследований данного класса явлений.

Из литературы известны особенности электроакустического взаимодействия в диэлектриках [5-7]. В [8] показана возможность управления поляризацией акустической волны электрическим полем, вызывающим искусственную спиральную анизотропию, а в [1] – формирования вращающейся акустической анизотропии в диэлектрических кристаллах под влиянием внешнего электрического поля. Детальное исследование электроакустического взаимодействия в полупроводниках приведено в [9, 10]. Случай резонансного взаимодействия (без влияния пространственной дисперсии), когда частота акустической волны ω_0 совпадает с частотой Ω вращающегося электрического поля, рассмотрен в статьях [11, 12]. Различные варианты взаимодействия в условиях отсутствия резонанса акустических волн с вращающимся электрическим полем обсуждены в [6]. В [13] изучалось пространственное влияние дисперсии на передачу и отражение акустических волн в диэлектрических кристаллах. Аналогичные исследования для полупроводников без учета влияния электронного дрейфа были проведены в [14]. Эффекты дрейфа носителей заряда при резонансном взаимодействии акустических волн и вращающегося электрического поля в пьезоэлектрических полупроводниках без учета пространственной дисперсии были изучены в [15]. Результаты детального исследования взаимодействия акустических волн и вращающегося электрического поля были приведены в [2].

Для реализации электроакустического взаимодействия в кристаллах нелинейного

пьезоэлектрика требуется применение высокочастотных электрических полей высокой напряженности порядка 10-100 кВ/см [16-18]. Создание такого электрического поля связано с существенными экспериментальными трудностями. В материалах с нелинейным электрострикционным порогом эффект может наблюдаться в области меньших напряженностей электрического поля (порядка 1-10 кВ/см) [19]. Если напряженность электрического поля превышает пороговое значение и взаимодействие является резонансным по частоте и поляризации, то все собственные моды имеют действительные волновые числа, несмотря на наличие вязкости среды. Следовательно, можно говорить об эффекте подавления поглощения ультразвука вращающимся электрическим полем.

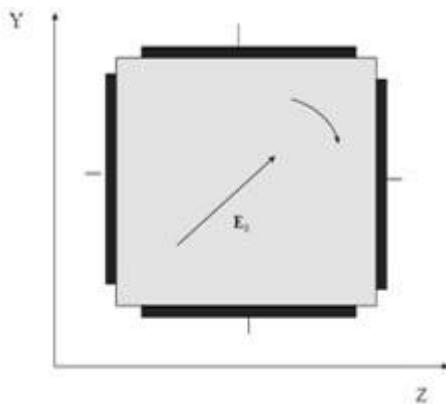


Рис. 1. Схема создания вращающегося электрического поля: E_0 – вектор напряженности вращающегося электрического поля с компонентами: $E_{0x} = 0$, $E_{0y} = -E_0 \sin(\Omega t)$, $E_{0z} = E_0 \cos(\Omega t)$

Вращение вектора напряженности электрического поля может быть создано в конфигурации, показанной на рисунке 1. Электрические поля с соответствующим смещением фазы существуют между парными электродами, которые расположены на гранях волновода [1, 2]. Смещение фазы между полями в парах электродов определено числом электродов, и для случая, который представлен на рисунке 1, изменение фазы равно $\pi/2$.

Мы полагаем, что электрическое поле вращается вокруг оси X и распространяется в том же направлении.

Акустические свойства кристалла с аномально высокой диэлектрической проницаемостью (например, центросимметричной сегнетокерамики на основе титаната бария) будем описывать с помощью обобщенного закона Гука, учитывающего вязкость среды: [1]:

$$\sigma_{ik} = C_{ijlm} \gamma_{lm} + \eta_{iklm} \frac{\partial \gamma_{lm}}{\partial t}, \quad (1)$$

где σ_{ik} , γ_{lm} , C_{iklm} – тензоры напряжений, деформаций и упругих постоянных; η_{iklm} – тензор вязкости. Вращение внешнего электрического поля может изменить акустические свойства кристалла. В результате уравнение упругого распространения волны с вектором смещения u принимает форму:

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \Lambda(t) \frac{\partial^2 u_i}{\partial z^2} + \mathbf{B}(t) \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial^2 u_i}{\partial z^2}, \quad (2)$$

где ρ – плотность среды, $\Lambda(t)$ – тензоры упругих констант и $\mathbf{B}(t)$ – тензор вязкости.

Согласно [1], решение уравнения упругого распространения волн находится в форме связанных между собой плоских монохроматических волн:

$$u = (A_- n_- \exp[-i(\omega - \Omega)t] + A_+ n_+ \exp[-i(\omega + \Omega)t]) \exp[ik(\omega)x], \quad (3)$$

имеющих одинаковые волновые числа $k(\omega)$, различные частоты $\omega \pm \Omega$ и противоположные циркулярные поляризации, описанные векторами $n_{\pm} = (y_0 \pm iz_0)/\sqrt{2}$, где y_0 и z_0 – единичные векторы декартовой системы координат. Здесь ω_0 – частота акустической волны, Ω – частота вращающегося электрического поля, и $\omega = (\omega_0 - \Omega)$; A_{\pm} – амплитуды циркулярных компонент собственных мод.

Мы рассмотрели случай, когда на границе кристалла $x = 0$ существует циркулярно-поляризованная акустическая волна

$$u_e = u_0 n_- \exp[-i\omega t] \quad (4)$$

с частотой $\omega_0 \approx \Omega$. Вектор смещения этой акустической волны имеет то же самое направление вращения, что и внешнее электрическое поле. Эта волна может взаимодействовать в условиях резонанса с вращающимся электрическим полем, потому что ее частота близка к частоте вращения анизотропии, сформированной электрическим полем. В результате взаимодействия распространяющейся волны с вращающимся электрическим полем в кристалле возможно усиление акустической волны и генерация обращенной волны [8, 2]. Векторы смещения этих волн на границах кристалла ($x = 0$ и $x = L$, L – толщина кристалла), могут быть описаны следующими уравнениями:

$$\begin{aligned} U_{\tau} &= u_0 n_- \exp[-i\omega_0 t + ik_0 L] \\ &\dots \\ U_c &= u_c n_+ \exp[-i(\omega_0 - 2\Omega)t] \end{aligned} \quad (5)$$

Акустическая волна в кристалле может быть представлена в форме суперпозиции двух составляющих [2]:

$$u = \sum_{m=1}^2 A_m \{ n_- \exp[-i\omega_0 t] + \xi_m^{-1} (\omega_0 - \Omega) n_+ \exp[i(\omega_0 - 2\Omega)t] \} \exp[ik_m(\omega_0 - \Omega)x]. \quad (6)$$

где $\xi_m = A_- / A_+$ – отношение амплитуд составляющих. Из условия непрерывности векторов смещения на границах кристалла можно получить систему следующих уравнений:

$$\begin{aligned}
\sum_{m=1}^2 A_m = u_0 & \quad \sum_{m=1}^2 A_m \xi_m^{-1} (\omega_0 - \Omega) \exp[i k_m (\omega_0 - \Omega) L] = 0, \\
\sum_{m=1}^2 A_m \exp[i k_m (\omega_0 - \Omega) L] = u_t \exp[i k_0 L] & \quad \sum_{m=1}^2 A_m \xi_m^{-1} (\omega_0 - \Omega) = u_c
\end{aligned} \quad (7)$$

Решение этой системы позволяет определять амплитуды отраженных и падающих акустических волн (рис. 2).

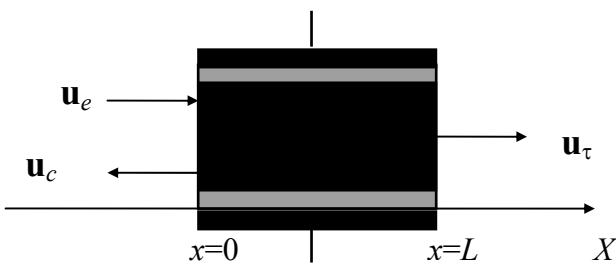


Рис. 2. Геометрия граничной величины. Волна распространяется по оси X , L – типовая толщина, \mathbf{u}_e , \mathbf{u}_t и \mathbf{u}_c – векторы смещения переданной и обращенной акустических волн.

Как пример, были сделаны вычисления со следующими значениями параметров [20-23]: $\bar{\Lambda} = 10^{11}$ Н/м², $\delta = -4.465 \cdot 10^9$ Н/м², $\bar{\mathbf{B}} = 100$ ед. СИ, $\chi = 5$ ед. СИ, $E_0 = 400$ кВ/м, $\Omega = 10^7$ рад/с, $\rho = 5.7 \cdot 10^3$ кг/м³. Здесь ρ – плотность кристалла, δ и χ – учитывают изменение упругих констант и вязкости под действием внешнего электрического поля, соответственно [18, 2].

$\text{Lg } I$

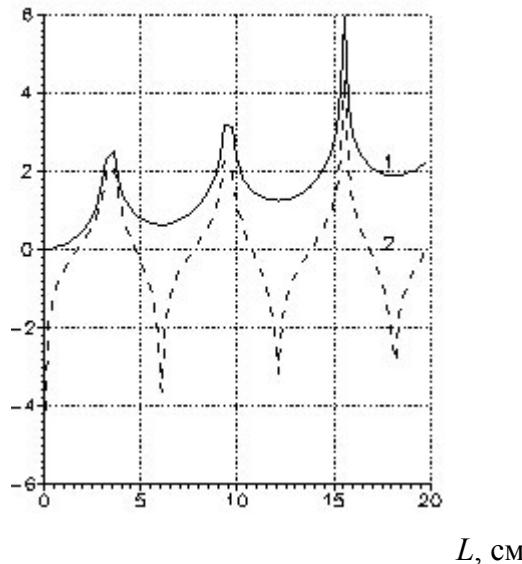


Рис. 3. Интенсивности прошедшей (1) и обращённой (2) волн как функции толщины кристалла

Φ , рад

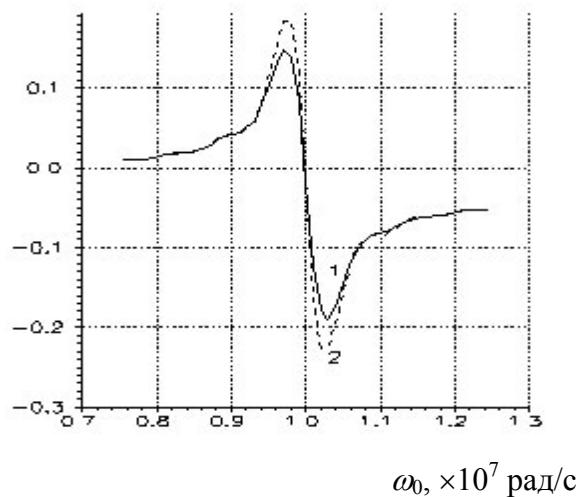
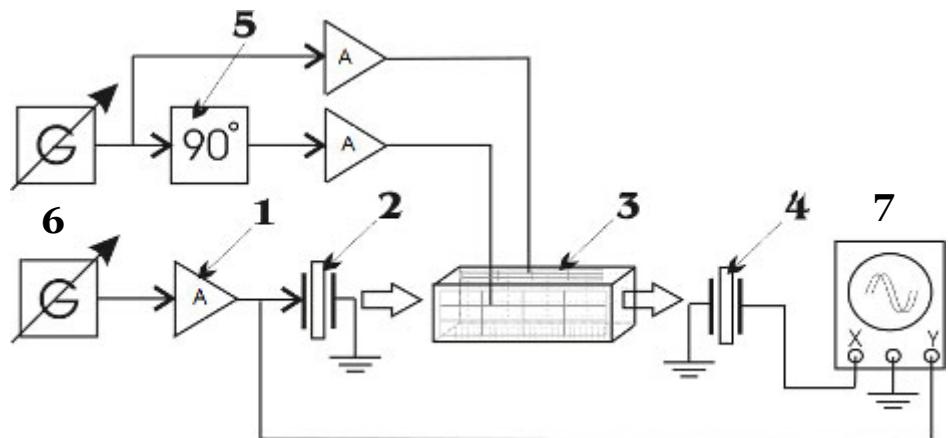


Рис. 4. Вращение плоскости поляризации в зависимости от частоты: 1 – с учётом вязкости; 2 – без учёта вязкости; ($L = 2$ см, $\Omega = 10^7$ рад/с)

Полученные теоретические результаты показывают, что в центросимметричной сегнетокерамике могут проявляться ряд явлений, таких как генерация обращенных акустиче-

ских волн (рис. 3), поворот плоскости поляризации ультразвуковой волны (рис. 4), параметрическое усиление.

С целью подтверждения теоретически предсказанных результатов, мы провели предварительные экспериментальные исследования в данной области. Принципиальная схема эксперимента представлена на рисунке 5.



1 – усилители, 2 – излучатель ультразвука, 3 – волновод с электродами, 4 – регистрирующий элемент, 5 – электронный фазовращатель на 90 градусов, 6 – управляемые генераторы, 7 – электронный осциллограф

Рис. 5. Принципиальная схема экспериментальной установки

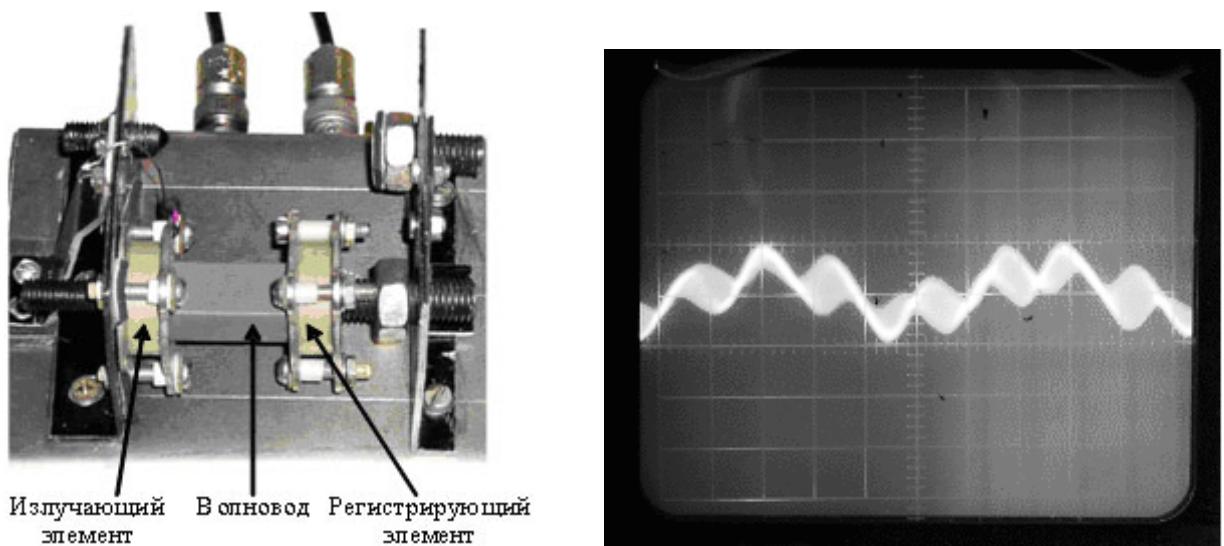


Рис. 6. Конструкция и расположение элементов в экспериментальной установке

Рис. 7. Осциллограмма модуляции акустической волны

Нами ведется работа по созданию экспериментального комплекса (рис. 6) для изучения описанного класса явлений. Уже проведены пробные экспериментальные исследования по излучению и регистрации акустических волн. Как пример регистрации акустиче-

ской волны, на рисунке 7 представлен результат модуляции акустической волны внешним вращающимся электрическим полем. Следует отметить, что исследования в данной области связаны с существенными проблемами, главной из которых является сложность формирования вращающегося электрического поля высокой напряженности до нескольких киловольт. Несмотря на то, что на данном этапе эксперимент находится на стадии постановки, уже полученные результаты говорят о потенциальной возможности проведения детальных исследований в данной области.

Литература

1. В. Н. Белый, Б. Б. Севрук. Параметрическое взаимодействие циркулярно поляризованных электромагнитных и акустических волн в кристаллах с электрострикционной нелинейностью // Сб.: Ковариантные методы в теоретической физике. Мн., 1986. С. 132—141.
2. И. В. Семченко, С. А. Хахомов. Взаимодействие ультразвука с вращающимся электрическим полем в кристаллах различных классов симметрии // Кристаллография. 1993. Т.38, № 6. С. 19—24.
3. И. В. Семченко, С. А. Хахомов, А. Н. Сердюков. Поворот плоскости поляризации ультразвуковой волны во вращающемся электрическом поле // Сб.: Волны и дифракция. М., 1990. Т.1. С. 352—354.
4. И. В. Семченко, С. А. Хахомов, А. Н. Сердюков. Подавление поглощения акустических волн при их резонансном взаимодействии с вращающимся электрическим полем // Сб.: Ковариантные методы в теоретической физике. Оптика и акустика. Мн., 1991. С. 64—70.
5. И. В. Семченко, А. Н. Сердюков, С. А. Хахомов. Усиление акустических волн в кристалле, помещенном во вращающееся электрическое поле // Кристаллография. 1993. Т.38, № 1. С. 144—149.
6. С. А. Хахомов, И. В. Семченко. Влияние пространственной дисперсии на распространение акустических волн в кристаллах в присутствии вращающегося электрического поля // Сб.: Ковариантные методы в теоретической физике. Оптика и акустика. Мн., 1996. С. 99—106.
7. M. Ohno, K. Takagi. High-efficiency generation of acoustic phase generate waves by piezoelectricity of PZT ceramics / Proc. of Ultrasonics International'93. Austria: Vienna, 1993. Р. 97.
8. В. Н. Белый, Б. Б. Севрук, А. Г. Хаткевич. Воздействие внешнего электрического поля на акустические оси в центросимметричных кубических кристаллах // Кристаллография. 1986. Т. 31, № 1. С. 5—11.
9. С. И. Бурков. Влияние постоянного электрического поля на распространение упругих волн в пьезокристаллах: Автореф. дис. канд. физ.-мат. наук. Красноярск, 1989. 16 с.
10. Дж. Такер, В. Рэмптон. Гиперзвук в физике твердого тела. М., 1975. 455 с.
11. И. В. Семченко, С. А. Хахомов, Б. Б. Севрук. Частотная зависимость взаимодействия ультразвука с вращающимся электрическим полем в проводящей сегнетокерамике // Весці АН Беларусі. Сер. фіз.-мат. науки . 1995. № 4. С. 44—50.
12. И. В. Семченко, С. А. Хахомов. Влияние дрейфа носителей заряда на резонансное взаимодействие акустических волн с вращающимся электрическим полем в пьезопо-

- лупроводниках // Кристаллография. 1997. Т. 42. № 2. С. 238—243.
13. Заявка на изобретение РФ. Способ и устройство для поворота плоскости поляризации ультразвуковой волны / И. В. Семченко, А. Н. Сердюков, С. А. Хахомов. № 94028174/28 (028226); Заявл. 27.07.94. Опубл. 27.12.95. Бюл. № 36.
14. Устройство поворота плоскости поляризации ультразвуковой волны: А. с. SU 1278038: А1, В 06 В 1/06.
15. И. В. Семченко, П. И. Ропот. Особенности акустооптического взаимодействия в кристаллах, помещенных во вращающееся электрическое поле // Журн. техн. физики. 1990. Т.60, № 7. С. 90—95.
16. И. В. Семченко, А. Н. Сердюков, С. А. Хахомов. Влияние вязкости среды на усиление акустических волн в кристаллах в присутствии вращающегося электрического поля // Кристаллография. 1991. Т. 36, № 2. С. 298—303.
17. E. Kittinger, G. Reider, J. Tichy. Dependence of ultrasonic propagation velocities and transit times on an electric biasing field in alpha quartz // J. Acoust. Soc. Am. 1983. Vol. 73, N 6. P.
18. I. L. Bajak. Nonlinear interaction of acoustic vibrations and high frequency electric field // Wiss. Beitr. M. Luther — Univ., Halle — Wittenberg. O. 1989. N 26. P. 83—90.
19. Ф. В. Бункин, Ю. А. Кравцов, Г. А. Ляхов. Акустические аналоги нелинейных оптических явлений // Успехи физ. наук. 1986. Т. 149, № 3. С. 391—411.
20. С. Ю. Веневцев, В. М. Плужников, В. А. Копчик. Уточненные матрицы нелинейных пьезоэлектрических констант для кристаллов точечных групп симметрии 32 и 3m // Кристаллография. 1985. Т. 30, № 2. С. 388—391.
21. В. З. Партон, Б. А. Кудрявцев. Электромагнитоупругость пьезоэлектрических и электропроводных тел. М., 1988. 472 с.
22. С. А. Хахомов, И. В. Семченко. Пространственные акустические волны, распространяющиеся в кристаллах во вращающемся электрическом поле, Известия Гомельского государственного университета, 3 (30), 2005. С. 288-291.
23. С. А. Хахомов, С. Д. Барсуков, И.Н. Яковцов. Исследование амплитудно-частотных характеристик пьезокерамического элемента на основе соединения цирконий-титанат-свинец, Известия Гомельского государственного университета имени Ф. Скорины, №6 (39), ч.1, 2006. С. 148-151.

Алфавитный указатель авторов

А

Афанасенко Д. А. 131

Б

Балмаков А. П. 203
Барсуков С. Д. 215
Барсукова Е. Л. 208
Бедрик А. И. 164
Бобрик А. Л. 10
Борботко Е. П. 121
Борисевич С. А. 173
Бусько Д. Н. 65, 97
Быкова Е. А. 144

В

Вихренко В. С. 26
Выдай Ю. Т. 164

Г

Гаврилюк В. П. 198
Гайна Б. С. 126
Гапонов Д. А. 79
Голобородько А. А. 212
Гончарова Н. В. 134
Горбачева Т. Е. 164
Грицай О. А. 134
Грода Я. Г. 21, 26, 30
Гуринович В. Ю. 107

Д

Данько В. П. 212
Дремук И. А. 116

Е

Егоров А. Н. 53
Елисеев Д. А. 164
Ерчак Е. Д. 139

З

Зорин В. П. 131, 153
Зыков А. Л. 183, 188
Зыков Г. Л. 183, 188

И

Ивченко В. А. 149

К

Камлюк А. Н. 168, 173
Карпенко Н. В. 42
Карпович В. А. 158
Кирис В. В. 107, 111
Кожурова Е. Я. 164
Козловский А. Н. 116
Колесенко В. М. 121
Конколович А. В. 69, 74
Кононович А. А. 87
Корнеева И. А. 194
Котяшёв Е. О. 194
Крылова Н. Г. 177
Кузьмин В. С. 121
Кулагова Т. А. 177
Курашов В. Н. 212

Л

Левченко В. И. 208
Лисинецкий В. А. 65, 92, 97, 102
Лойко В. А. 69, 74, 134
Лойко П. А. 82
Лопатик Д. А. 144

М

Максименко П. Г. 69, 74
Максименко С. А. 139
Медведева Е. В. 149
Молчан М. А. 16

Н

Невар Е. А. 144
Незальзова Е. И. 126
Немцов В. Б. 168

П

Педаш В. Ю. 198
Поданчук Д. В. 212
Постнова Л. И. 208
Пряников А. Д. 79

P

- Раевский А. С. 198
 Решетов В. А. 153
 Рубан Г. И. 134

C

- Савицкий В. П. 131
 Семенкова Г. Н. 177
 Семченко И. В. 203, 215
 Сердюков А. Н. 53
 Сивцов И. А. 35
 Скорбанова Е. А. 126
 Слепян Г. Я. 139, 158
 Сутягина Н. С. 212

T

- Тарасенко А. Н. 47
 Тарасов В. А. 164

Ф

- Филипенок О. В. 158

X

- Хахомов С. А. 215

Ч

- Чулков Р. В. 65

Ш

- Шершуков В. М. 164
 Ширко А. В. 168, 173
 Шуляковский Р. Г. 58

Ю

- Юмашев К. В. 82

Примеры оформления ссылок по ГОСТ 7.1-2003

На сборник в целом:

«Современные проблемы физики», конф. молодых учёных и специалистов (2008 ; Минск). Конференция молодых учёных и специалистов «Современные проблемы физики» – 2008 , 10–12 июня 2008 г. [Текст] : [сб. науч. тр. конф.] / под ред. В. В. Машко, В. З. Зубелевича. Минск : Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси, 2008. – 224 с. ; 21 см. – В надзаг. : Национальная академия наук Беларуси, Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси, Белорусский республиканский фонд фундаментальных исследований, Белорусское физическое общество. – 70 экз.

На статью из сборника:

Вихренко, В. С. Диффузия ленгмюровского решеточного газа на статически неупорядоченной решетке с экспоненциальным распределением барьеров [Текст] / В. С. Вихренко, Я. Г. Града // Современные проблемы физики : сб. науч. тр. конф. – Минск: Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси, 2008. – С. 26–29. – Библиогр.: с. 30.

Сборник научных трудов
конференции молодых учёных и специалистов

Современные проблемы физики

Минск, 10-12 июня 2008

Под редакцией В. В. Машко, В. З. Зубелевича

Подписано к печати 8.12.2008 г.
Тип бумаги: офисная.
Объём: 13.7 уч.-изд. л., 25.9 усл. печ. л.
Заказ № 32

Формат 60× 90 ¼.
Печать: офсетная.
Тираж: 70 экз.

Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси
220072 Минск, пр. Независимости, 68
Отпечатано на ризографе ИФ НАН Беларуси
