БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ЖУРНАЛ
БЕЛОРУССКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА

ФИЗИКА

JOURNAL
OF THE BELARUSIAN STATE UNIVERSITY

PHYSICS

Издается с января 1969 г.
(до 2017 г. – под названием «Вестник БГУ.
Серия 1, Физика. Математика. Информатика»)

Выходит три раза в год

2 **2018**

МИНСК
БГУ

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

Главный редактор — **АНИЩИК В. М.** – доктор физико-математических наук, профессор; декан физического факультета Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь.
E-mail: anishchik@bsu.by

Заместитель главного редактора — **ВОРОПАЙ Е. С.** – доктор физико-математических наук, профессор; заведующий кафедрой лазерной физики и спектроскопии физического факультета Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь.
E-mail: voropay@bsu.by

Ануфрик С. С. Гродненский государственный университет им. Янки Купалы, Гродно, Беларусь.

Бондаренко Г. Г. Московский институт электроники и математики Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики», Москва, Россия.

Гусев О. К. Белорусский национальный технический университет, Минск, Беларусь.

Жуковский П. В. Люблинский технический университет, Люблин, Польша.

Казак Н. С. Институт физики им. Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь.

Килин С. Я. Национальная академия наук Беларуси, Минск, Беларусь.

Кислицин С. Б. Институт ядерной физики Министерства энергетики Республики Казахстан, Алма-Ата, Казахстан.

Кононов В. А. СП «ЛОТИС ТИИ», Минск, Беларусь.

Кучинский П. В. НИУ «Институт прикладных физических проблем им. А. Н. Севченко» Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь.

Максименко С. А. НИУ «Институт ядерных проблем» Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь.

Малый С. В. Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь.

Маляревич А. М. Белорусский национальный технический университет, Минск, Беларусь.

Маскевич С. А. Международный государственный экологический институт им. А. Д. Сахарова Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь.

Машлан М. Оломоуцкий университет им. Палацкого, Оломоуц, Чехия.

Патрин А. А. Кошалинский технический университет, Кошалин, Польша.

Пенязьков О. Г. Институт тепло- и массообмена им. А. В. Лыкова Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь.

Пилипенко В. А. Государственный центр «Белмикроанализ» филиала НТЦ «Белмикросистемы» ОАО «Интеграл» – управляющей компании холдинга «Интеграл», Минск, Беларусь.

Плетюхов В. А. Брестский государственный университет им. А. С. Пушкина, Брест, Беларусь.

Погребняк А. Д. Сумский государственный университет, Сумы, Украина.

Ремнев Г. Е. Томский политехнический университет, Томск, Россия.

Семченко И. В. Гомельский государственный университет им. Франциска Скорины, Гомель, Беларусь.

Толстик А. Л. Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь.

Федосюк В. М. ГНПО «Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению», Минск, Беларусь.

Хайнтцманн Р. Институт физической химии Йенского университета, Йена, Германия.

Шкадаревич А. П. Научно-производственное унитарное предприятие «Научно-технический центр “ЛЭМТ” БелОМО», Минск, Беларусь.

EDITORIAL BOARD

Editor-in-chief — **ANISHCHIK V. M.**, doctor of science (physics and mathematics), full professor; dean of the faculty of physics of the Belarusian State University, Minsk, Belarus.
E-mail: anishchik@bsu.by

Deputy editor-in-chief — **VOROPAY E. S.**, doctor of science (physics and mathematics), full professor; head of the department of laser physics and spectroscopy of the faculty of physics of the Belarusian State University, Minsk, Belarus.
E-mail: voropay@bsu.by

Anufrik S. S. Yanka Kupala State University of Grodno, Grodno, Belarus.
Bondarenko G. G. Moscow Institute of Electronics and Mathematics of the National Research University «Higher School of Economics», Moscow, Russia.
Gusev O. K. Belarusian National Technical University, Minsk, Belarus.
Zhukowski P. V. Lublin University of Technology, Lublin, Poland.
Kazak N. S. B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus.
Kilin S. Y. National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus.
Kislitsin S. B. Institute of Nuclear Physics of the Ministry of Energy of the Republic of Kazakhstan, Almaty, Kazakhstan.
Kononov V. A. «LOTIS TII», Minsk, Belarus.
Kuchinski P. V. A. N. Sevchenko Institute of Applied Physical Problems of the Belarusian State University, Minsk, Belarus.
Maksimenko S. A. Institute for Nuclear Problems of the Belarusian State University, Minsk, Belarus.
Maly S. V. Belarusian State University, Minsk, Belarus.
Malyarevich A. M. Belarusian National Technical University, Minsk, Belarus.
Maskevich S. A. International Sakharov Environmental Institute of the Belarusian State University, Minsk, Belarus.
Maslan M. Palacký University, Olomouc, Czech Republic.
Patryn A. A. Politechnika Koszalińska, Koszalin, Poland.
Penyazkov O. G. A. V. Luikov Heat and Mass Transfer Institute of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus.
Pilipenko V. A. JSC «Integral», Minsk, Belarus.
Pletyukhov V. A. Brest State University named after A. S. Pushkin, Brest, Belarus.
Pogrebnjak A. D. Sumy State University, Sumy, Ukraine.
Remnev G. E. Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russia.
Semchenko I. V. Francisk Scorina Gomel State University, Gomel, Belarus.
Tolstik A. L. Belarusian State University, Minsk, Belarus.
Fedosyuk V. M. SSPA «Scientific and Practical Materials Research Centre of NAS of Belarus», Minsk, Belarus.
Heintzmann R. Institute of Physical Chemistry of the Jena University, Jena, Germany.
Shkadarevich A. P. Unitary Enterprise «STC "LEMT" of the BelOMO», Minsk, Belarus.

Оптические приборы

Optical instruments

УДК 681.785.554

МНОГОЩЕЛЕВОЙ СПЕКТРОМЕТР С ДИФРАКЦИОННОЙ РЕШЕТКОЙ И ЗЕРКАЛЬНЫМИ ОБЪЕКТИВАМИ ДЛЯ СПЕКТРОСКОПИИ С ПРОСТРАНСТВЕННЫМ РАЗРЕШЕНИЕМ

И. М. ГУЛИС[1)]***, А. Г. КУПРЕЕВ***[1)]***, И. Д. ДЕМИДОВ***[1)]

[1)]*Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Беларусь*

Отмечено, что одной из разновидностей приборов для спектроскопии с пространственным разрешением являются многощелевые дисперсионные спектрометры для единовременной регистрации полного куба данных $I(x, y, \lambda)$. Констатируется, что применение дифракционной решетки вместо обычных для таких приборов призм позволяет существенно увеличить число регистрируемых спектральных каналов. Предложено схемное решение многощелевого дисперсионного спектрометра, в котором в качестве объективов выступают зеркала (внеосевые параболы). Благодаря этому достигается ахроматичность оптической системы, спектральный рабочий диапазон расширяется до ~0,3–2,0 мкм, упрощается оптическая система. В схемном решении использовано зеркало с фокусным расстоянием образующей параболы 127 мм, эффективным фокусным расстоянием 136,12 мм, диаметром рабочей области 50,8 мм, углом отклонения оптической оси 30°. Численное моделирование в программе оптического дизайна показало, что такая система позволяет обеспечить единовременный охват, в частности, видимого диапазона (450–750 нм), причем полуширина кружка рассеяния в направлении дисперсии не превышает 15 мкм (предел разрешения $\delta\lambda \leq 10$ нм). Проанализирована возможность изменения дисперсии и спектрального рабочего диапазона заменой решетки либо перемещением ее вдоль оптической оси.

Ключевые слова: мультиспектральный; дисперсионный; дифракционная решетка; многощелевой; зеркальный параболический объектив.

Образец цитирования:
Гулис И. М., Купреев А. Г., Демидов И. Д. Многощелевой спектрометр с дифракционной решеткой и зеркальными объективами для спектроскопии с пространственным разрешением // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2018. № 2. С. 4–10.

For citation:
Gulis I. M., Kupreyeu A. G., Demidov I. D. Multislit diffraction grating spectrometer with mirror lens for imaging spectroscopy. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2018. No. 2. P. 4–10 (in Russ.).

Авторы:
Игорь Михайлович Гулис – доктор физико-математических наук; профессор кафедры лазерной физики и спектроскопии физического факультета.
Александр Геннадьевич Купреев – кандидат физико-математических наук; научный сотрудник лаборатории нелинейной оптики и спектроскопии кафедры лазерной физики и спектроскопии и кафедры физической оптики физического факультета.
Иван Дмитриевич Демидов – аспирант кафедры лазерной физики и спектроскопии физического факультета. Научный руководитель – И. М. Гулис.

Authors:
Igor M. Gulis, doctor of science (physics and mathematics); professor at the department of laser physics and spectroscopy, faculty of physics.
gulis@bsu.by
Alexander G. Kupreyeu, PhD (physics and mathematics); researcher at the laboratory of nonlinear optics and spectroscopy, department of laser physics and spectroscopy and department of physical optics, faculty of physics.
kupreev@bsu.by
Ivan D. Demidov, postgraduate student at the department of laser physics and spectroscopy, faculty of physics.
ivandemidov@tut.by

MULTISLIT DIFFRACTION GRATING SPECTROMETER WITH MIRROR LENS FOR IMAGING SPECTROSCOPY

***I. M. GULIS*[a], *A. G. KUPREYEU*[a], *I. D. DEMIDOV*[a]**

[a]*Belarusian State University, 4 Niezaliežnasci Avenue, Minsk 220030, Belarus*
Corresponding author: A. G. Kupreyeu (kupreev@bsu.by)

Multislit dispersion spectrometers with the snapshot $I(x, y, \lambda)$ data cube registration are effectively used for imaging spectroscopy. Using a diffraction grating, instead of a common prism, enables one to increase substantially the number of registered spectral channels. In the present paper we propose the optical design of a multislit dispersion spectrometer with off-axis parabolic mirror lenses. Owing to these mirrors, the optical system becomes simpler and mostly achromatic, possible working spectral range is extended to ~ 0.3–2.0 μm. For the mirror lens in the scheme described, the focal distance of a parent parabola is 127 mm, the effective focal distance is 136.12 mm, the working diameter – 50.8 mm, the optical axis deflection angle – 30°. As demonstrated by computer simulation using the optical design program, the proposed scheme makes it possible to cover the whole, e. g., visible range (450–750 nm), FWHM in the dispersion direction being no more than 15 μm at the resolution limit $\delta\lambda \leq 10$ nm. The possibility for variations in the dispersion and spectral range by the grating replacement or movement along the optical axis is analyzed.

Key words: multispectral; dispersive; diffraction grating; multislit; mirror parabolic lens.

Спектроскопия с пространственным разрешением (СПР) используется во множестве приложений (в числе которых дистанционное зондирование земной поверхности, медицина, биология, контроль качества продукции) как самостоятельно [1–5], так и в сочетании с другими аналитическими методами [6]. Поскольку важное значение имеет анализ нестационарных объектов [2; 3; 7], перспективны направления СПР, в рамках которых разрабатываются подходы к получению $I(x, y, \lambda)$ в одном акте измерения (snapshot hyperspectroscopy [8], или мгновенная гиперспектроскопия – МГС).

Одним из методов МГС является получение спектров от совокупности малых фрагментов промежуточного изображения объекта (функциональный аналог системы входных щелей дисперсионного спектрометра), где пространственная фильтрация может осуществляться матрицей микролинз [9] либо маской, содержащей множество расположенных регулярным образом отверстий (щелей) [10]. В таких приборах в качестве дисперсионного элемента обычно используются призмы, существенная спектральная зависимость дисперсии которых ограничивает возможность работы в широком спектральном диапазоне. В [11] предложено решение, основанное на использовании дифракционной решетки (ДР) в качестве диспергирующего элемента, что позволяет обеспечить пренебрежимо малую спектральную вариацию угловой дисперсии даже в широком спектральном диапазоне. Подход предусматривает размещение пропускающей ДР в непосредственной близости от многощелевой маски, что дает возможность в широких пределах варьировать дисперсию системы перемещением ДР вдоль оптической оси и существенно увеличить эффективность использования площади фотоприемника за счет направления на него только одного порядка дисперсии решетки (второй и более высокие отсекаются светофильтром, более низкие – пространственной фильтрацией посредством дополнительной диафрагмы).

Предложенное в [11] схемное решение многощелевого дисперсионного спектрометра (МДС) на основе объективов Nikon Nikkor AF 50 mm 1.4D (Япония), согласно результатам численного моделирования, обеспечивает полуширину кружков рассеяния в направлении дисперсии ≤15 мкм, лишь для края диапазона в отдельных точках поля она составляет ≤20 мкм (при пропускающей дифракционной решетке с 300 штрих/мм). Однако из-за использования рефрактивных объективов со стеклянной оптикой спектральный рабочий диапазон такого инструмента фактически ограничен видимой областью; кроме того, качество изображения снижается за счет хроматических аберраций. В связи с этим представляет интерес разработка схемного решения на основе рефлективной системы.

Для формирования промежуточного изображения объекта на многощелевой маске спектрометра может применяться любая изображающая система, обеспечивающая достаточно малые числовые апертуры (NA) падающих на маску пучков от отдельных точек объекта. Последнее требование обусловлено необходимостью уменьшения аберраций, вносимых решеткой, работающей в неколлимированных пучках (оценки показывают, что при NA ≤ 0,05 указанные аберрации не вносят заметного вклада в размеры кружка рассеяния, формируемого в оптической системе моделируемого спектрометра). Микроскопные объективы при входной NA ~ 0,5 и более чем 10-кратном увеличении, как правило, удовлетворяют требованию малости NA для пучков в области изображения.

Для обеспечения эффективного блокирования пучков неиспользуемых порядков дифракции применяется диафрагма. Преимущественно симметричное прохождение световых лучей через нее достигается за счет реализации оптической системы как телецентрической: оси пучков от отдельных точек изображения на входе параллельны друг другу, а для центральной длины волны – и оптической оси. Поскольку после микроскопа оси пучков от разных точек поля существенно неколлинеарны, требуемая телецентричность при падении на многощелевую маску обеспечивается размещенной перед многощелевой маской плоско-выпуклой линзой, практически не вносящей искажений в изображение, получаемое на фотодетекторе.

Как и в рефрактивной системе из [11], разработанный спектрометрический модуль предусматривает «встречную» установку объективов таким образом, что их передние фокальные плоскости совпадают. Входное и выходное поля размещены в задних фокальных плоскостях первого и второго объективов соответственно. Благодаря этому пучки с параллельными оптическими осями на входе и на выходе также имеют параллельные оптические оси (так как система телецентрическая), в то же время размер отверстия в диафрагме минимален. При численном моделировании исходили из числовой апертуры пучков на входе в многощелевую маску – NA = 0,042 (относительное отверстие 1 : 12). Базовое моделирование проводилось для рабочего спектрального диапазона 450–750 нм.

На первом этапе рассматривалась система со сферическими зеркальными объективами. Численное моделирование проводилось для *z*-образной и Δ-образной конфигурации пучков и объективов в нулевом порядке дифракции, входное поле – квадрат со стороной 16 мм. Результаты показали высокий уровень аберраций: в *z*-образной схеме доминирует астигматизм при небольшой коме, в Δ-образной астигматизм невелик, но кома существенна. Размеры кружков рассеяния в такой системе неприемлемо велики, хотя существует возможность уменьшения аберраций, к примеру астигматизма зеркал посредством наклонной плоскопараллельной пластинки, расположенной в пучке [12].

Снижение аберраций может быть достигнуто в схеме с параболическими зеркалами в качестве объективов. Наименьший размер кружков рассеяния при моделировании прохождения нулевого порядка отмечен в Δ-образной схеме. В связи с этим именно такая система взята за основу для построения спектрального модуля. Для дальнейшего моделирования принималось, что толщина подложки многощелевой маски и дифракционной решетки составляет 2 мм, дифракционная решетка – пропускающая (300 штрих/мм). Материал подложки маски и решетки – кварц (n = 1,458).

В отличие от рефрактивной системы при использовании зеркальных объективов необходимо учитывать затенение пучка оптическими элементами при изломе оптической оси. В случае протяженного входного поля угол поворота оптической оси, необходимый для прохождения без затенения, может быть велик даже при малой числовой апертуре. Для построения системы применялись внеосевые параболы, которые обеспечивают наклон оптической оси без существенного увеличения аберрационного вклада. Поскольку в дальнейшем планируется макетирование схемы, параметры оптических элементов выбирались с учетом доступности для изготовления либо приобретения.

Общий вид оптической системы МДС приведен на рис. 1. При конструировании использовались следующие параметры объективов *8* и *10* (соответствуют параметрам одной из промышленно выпускаемых моделей внеосевой параболы): угол отклонения оптической оси $\alpha = 30°$, диаметр рабочей области составляет 50,8 мм, радиус кривизны – 254 мм, эффективное фокусное расстояние – 136,12 мм, фокусное расстояние образующей параболы – 127 мм, минимальная толщина зеркал – 2,7 мм, расстояние между базовыми плоскостями зеркал – 297,65 мм. Штриховая структура решетки и покрытие маски располагаются на поверхностях, обращенных к зеркалу *7* (последнее делает возможным нанесение светопоглощающего покрытия на материал маски для уменьшения рассеянного света в системе).

Для формирования изображения на маске использован 4-линзовый микроскопный объектив (МО) (увеличение составило ~8,5 раза). Диаметр рабочего поля изображения – 16 мм (соответствует минимальному размеру детектора камеры Nikon D3300, планируемой к использованию в качестве фоторегистратора), что позволяет наблюдать в предметной плоскости МО поле диаметром 1,95 мм. Расходящиеся после микроскопа пучки от разных точек поля коллинеаризуются плоско-выпуклой линзой *4*, расположенной вблизи плоскости маски (материал – кварц, радиус – 80 мм, толщина – 1 мм). Наклон линзы и пластинок к оптической оси МО нужен для обеспечения выхода по нормали к ДР пучков средней длины волны рабочего диапазона (600 нм). Моделирование в режиме непоследовательной трассировки проводилось для набора длин волн 450; 520; 600; 680; 750 нм.

Результаты численного моделирования показывают (рис. 2), что при размещении щелей маски в ряду через 400 мкм (ряд – в направлении дисперсии) со сдвигом последующих рядов на 100 мкм в направлении дисперсии оптическая система обеспечивает отображение кружков рассеяния в спектральном диапазоне 450–750 нм. При размере щелей в маске 5 × 20 мкм полуширина кружков в направлении дисперсии (рис. 3) преимущественно $\Delta l \leq 10$ мкм (лишь в отдельных точках поля $\Delta l \leq 15$ мкм), что

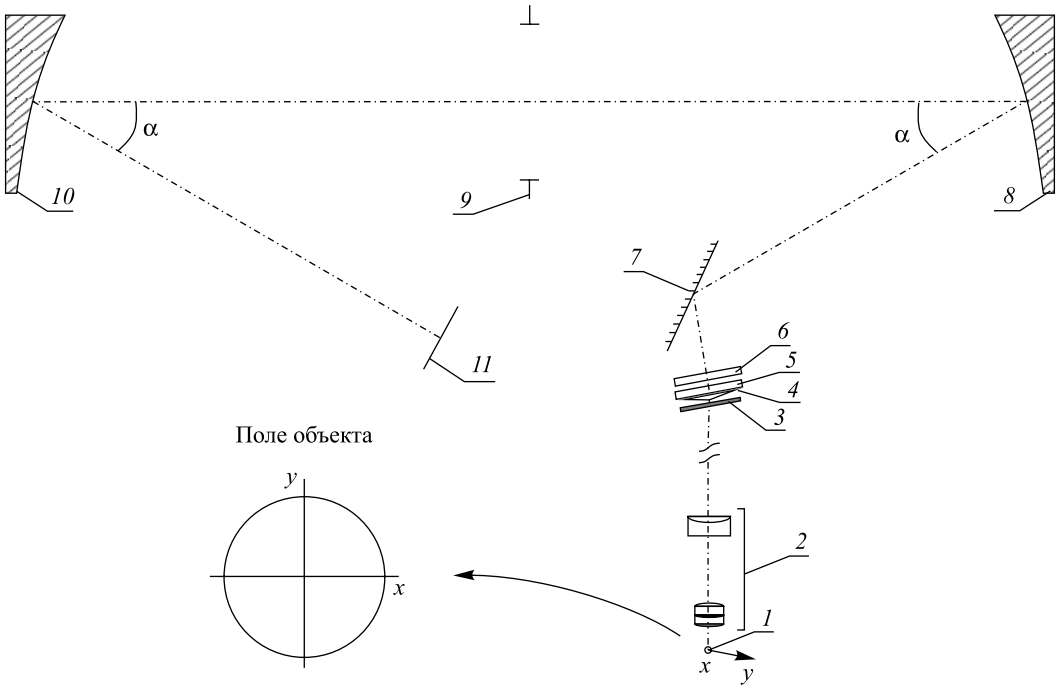


Рис. 1. Оптическая система МДС: *1* – объект; *2* – микроскоп; *3* – полосовой светофильтр; *4* – плоско-выпуклая линза; *5* – маска на стеклянной подложке; *6* – пропускающая дифракционная решетка; *7* – плоское зеркало; *8*, *10* – зеркальные объективы (внеосевая парабола); *9* – диафрагма; *11* – фотодетектор. Ось, лежащая в плоскости дисперсии, – *y*; ось, ортогональная плоскости дисперсии, – *x*

Fig. 1. Optical design of multislit dispersive spectrometer: *1* – object; *2* – microscope; *3* – bandpass filter; *4* – plain-convex lens; *5* – mask on a glass substrate; *6* – transmissive diffractive grating; *7* – flat mirror; *8*, *10* – mirror lenses (off-axis parabola); *9* – window; *11* – photodetector. Axis laying in dispersion direction is *y*, axis normal to dispersion direction is *x*

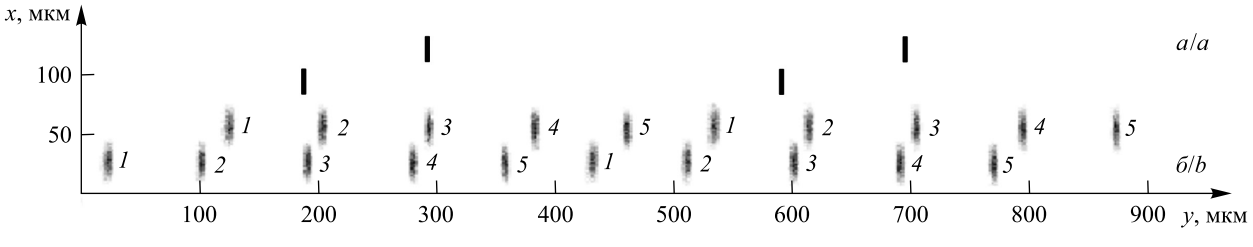


Рис. 2. Результаты моделирования спот-диаграмм от 4 щелей маски (*а*) для длин волн (*б*), нм: *1* – 750; *2* – 680; *3* – 600; *4* – 520; *5* – 450

Fig. 2. Modeled spot-diagrams for a mask with 4 slits (*a*) and beams of following wavelengths (*b*), nm: *1* – 750; *2* – 680; *3* – 600; *4* – 520; *5* – 450

соответствует спектральному разрешению не хуже 10 нм (линейная дисперсия ~1,2 · 10^{-3} мм/нм). Полуширина в направлении оси *x* (ортогональном дисперсии) не превышает 25–30 мкм. Таким образом, рассматриваемая рефлективная схема пригодна для реализации на ее основе МДС. Более того, спектральное разрешение в ней превосходит полученное в рефрактивной системе [11]. Схемное решение допускает применение зеркальных объективов с параметрами, выбор которых определяется требованиями по линейной дисперсии и габаритам системы. Однако при использовании зеркал с большим углом отклонения оптической оси α вероятно увеличение аберраций, также следует учитывать, что для объективов с большим α может оказаться затруднительным обеспечить размещение диафрагмы (см. рис. 1, *9*) (необходимой для блокирования 0-го и –1-го порядков без виньетирования +1-го порядка) в общем переднем фокусе.

Разработанное схемное решение МДС благодаря применению рефлективных объективов предоставляет возможность расширить рабочий спектральный диапазон до ~0,3–2,0 мкм (полоса пропускания кварцевых элементов), обеспечивая предел разрешения не хуже δλ = 10 нм. При этом система сохраняет все преимущества использования дифракционной решетки в качестве диспергирующего элемента –

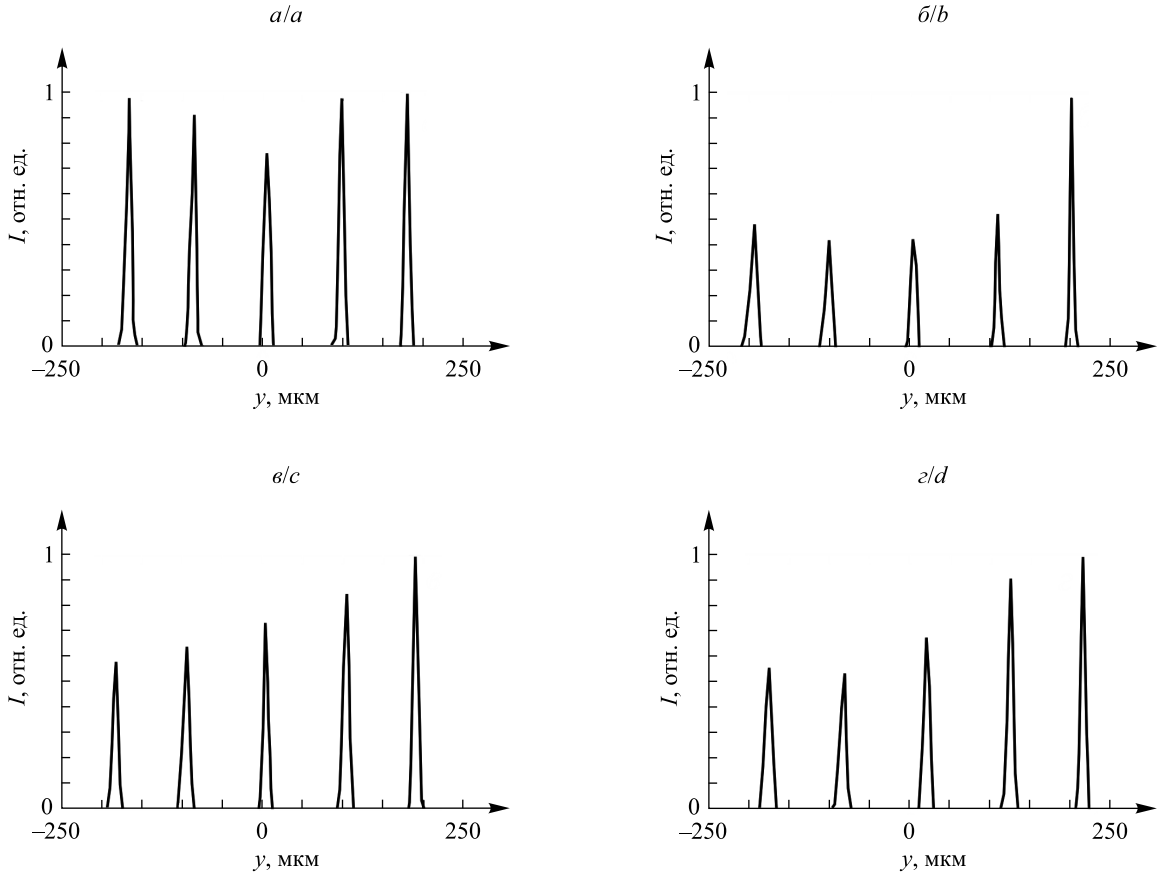


Рис. 3. Сечения кружков рассеяния в направлении дисперсии для точечных источников, лежащих в центре поля объекта (*а*), на краю поля в направлении дисперсии *y* (см. рис. 1) (*б*) и перпендикулярно направлению дисперсии *x* (*в*), а также точки на краю поля, равноудаленной от точек в направлениях *x* и *y* (*г*).
Длины волн (слева направо), нм: 750; 680; 600; 520; 450

Fig. 3. Cross-section of spots in dispersion direction for point sources: in object field center (*a*), on the edge of field in dispersion direction *y* (see fig. *1*) (*b*) and direction orthogonal to dispersion direction *x* (*c*), on the edge of field equidistant of edge points in *x*- and *y*-directions (*d*).
Wavelengths (left-to right), nm: 750; 680; 600; 520; 450

единовременную регистрацию куба данных с практически неизменной во всем рабочем спектральном диапазоне дисперсией, которую можно варьировать в широких пределах продольным сдвигом решетки. Последнее обстоятельство обеспечивает высокую функциональную гибкость системы. Так, в рамках промоделированной схемы можно, например, удвоить спектральное разрешение, увеличив вдвое расстояние от маски до решетки. При этом, естественно, вдвое сокращается спектральный диапазон, укладывающийся на фотоприемную матрицу без перекрытия спектров от соседних по горизонтали щелей. Важно отметить, что вследствие малости длины спектров переход к новому диапазону, например от 450–600 к 600–750 нм, в обсуждаемом случае реализуется простым переключением соответствующих полосовых фильтров и не требует поворота диспергирующего элемента.

Дисперсию и рабочий спектральный диапазон можно перестраивать как изменением расстояния от маски до решетки, так и заменой дифракционной решетки. Например, при решетке с 300 штрих/мм, расположенной на расстоянии 2,4 мм от подложки маски (вдоль нормали), ширина рабочего спектрального диапазона составляет 300 нм. Другие примеры реализации различных спектральных диапазонов приведены в таблице. Минимально допустимое расстояние между подложкой и решеткой определяется требуемым теоретическим пределом разрешения системы, так как чем ближе решетка к маске, тем меньше эффективное число штрихов дифракционной решетки и спектральный предел разрешения.

Отметим, что аберрации системы оказывают существенное влияние на достижимый предел спектрального разрешения. Так, в случаях, когда углы падения пучков на объективы больше или пучки имеют большой диаметр, аберрации также выше и предел разрешения увеличивается (например, при максимальном сближении решетки и маски их рабочие поверхности разделяет стеклянная подложка толщиной 2 мм – для решетки с 600 штрих/мм, а также для решетки с 150 штрих/мм). С другой стороны, в случае

пучков малого диаметра, падающих практически только на центральную область зеркал, качество изображения существенно улучшается (для решетки с 600 штрих/мм). Моделирование подтверждает, что во всех указанных случаях пучки нулевого порядка дифракции отсекаются диафрагмой (см. рис. 1, *9*). Размер отверстия диафрагмы определяется из соображений минимизации виньетирования при полном затенении пучков прочих порядков дифракции. В упомянутой системе с решеткой, имеющей 300 штрих/мм, моделировалась диафрагма с круглым отверстием диаметром 20 мм, которая оставалась пригодной и при смещении дифракционной решетки вдоль оптической оси.

Возможности перестройки дисперсии и рабочего спектрального диапазона в МДС

Possible dispersion and working spectral range variants in multislit dispersive spectrometer

Дифракционная решетка, штрих/мм	Расстояние от подложки маски до решетки, мм	Ширина рабочего спектрального диапазона, нм	Пример спектрального диапазона, нм	Предел спектрального разрешения*, нм
300	2,4	300	450–750	10
300	5,0	180	320–500	5
300	0	560	330–890	22
600	3,0	120	240–360	3
150	3,0	800**	700–1500	60

*Для большинства точек поля. **Отображается на 200–250 мкм детектора.

Благодаря возможности оперативного получения пространственно-спектральной информации с повышенным спектральным разрешением в широком спектральном диапазоне и технологической простоте использование приборов на базе МДС представляется перспективным для многих приложений СПР, в том числе спектроскопии биообъектов (флуоресцентной микроспектрометрии) и медицинских приложений (фотодинамической терапии). Применение промышленно выпускаемых зеркал позволяет упростить макетирование и производство приборов, сократить их стоимость.

Библиографические ссылки

1. *Lu G., Fei B.* Medical hyperspectral imaging : a review // J. Biomed. Opt. 2014. Vol. 19, № 1. Article ID: 010901. DOI: 10.1117/1.JBO.19.1.010901.

2. *Thompson D. R., Leifer I., Bovensmann H., et al.* Real-time remote detection and measurement for airborne imaging spectroscopy: a case study with methane // Atmos. Meas. Tech. 2015. Vol. 8, № 10. P. 4383–4397. DOI: 10.5194/amt-8-4383-2015.

3. *Gao L., Smith R. T.* Optical hyperspectral imaging in microscopy and spectroscopy – a review of data acquisition // J. Biophotonics. 2015. Vol. 8, issue 6. P. 441–456. DOI: 10.1002/jbio.201400051.

4. *Kuula J., Pölönen I., Puupponen H.-H., et al.* Using VIS/NIR and IR spectral cameras for detecting and separating crime scene details // Proc. SPIE. 2012. Vol. 8359. P. 83590P-1–83590P-11. DOI: 10.1117/12.918555.

5. *Qin J., Chao K., Kim M. S., et al.* Hyperspectral and multispectral imaging for evaluating food safety and quality // J. Food Eng. 2013. Vol. 118, issue 2. P. 157–171. DOI: 10.1016/j.jfoodeng.2013.04.001.

6. *Torabzadeh H., Morsdorf F., Schaepman M. E.* Fusion of imaging spectroscopy and airborne laser scanning data for characterization of forest ecosystems : a review // ISPRS J. Photogramm. Remote Sens. 2014. Vol. 97. P. 25–35. DOI: 10.1109/igarss.2014.6946660.

7. *Lefebvre J.* Real time hyperspectroscopy for dynamical study of carbon nanotubes // ACS Nano. 2016. Vol. 10, issue 10. P. 9602–9607. DOI: 10.1021/acsnano.6b05077.

8. *Hagen N., Kudenov M. W.* Review of snapshot spectral imaging technologies // Opt. Eng. 2013. Vol. 52, № 9. P. 090901-1–090901-23. DOI: 10.1117/1.OE.52.9.090901.

9. *Sugai H., Hattori T., Kawai A., et al.* The Kyoto tridimensional spectrograph II on Subaru and the University of Hawaii 88-in telescopes // Publ. Astron. Soc. Pac. 2010. Vol. 122, № 887. P. 103–118. DOI: 10.1086/650397.

10. *Bodkin A., Sheinis A., Norton A., et al.* Snapshot hyperspectral imaging – the hyperpixel array camera // Algorithms and technologies for multispectral, hyperspectral, and ultraspectral imagery XV (Orlando, 13–17 April, 2009) : proc. SPIE. 2009. Vol. 7334. P. 73340H-1–73340H-11.

11. *Гулис И. М., Купреев А. Г., Демидов И. Д. и др.* Многощелевой спектрометр с дифракционной решеткой для спектроскопии с пространственным разрешением // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2017. № 3. С. 4–11.

12. *Voropai E. S., Gulis I. M., Kupreev A. G.* Astigmatism correction for a large-aperture dispersive spectrometer // J. Appl. Spectrosc. 2008. Vol. 75, issue 1. P. 150–155. DOI: 10.1007/s10812-008-9000-2.

References

1. Lu G., Fei B. Medical hyperspectral imaging : a review. *J. Biomed. Opt.* 2014. Vol. 19, No. 1. Article ID: 010901. DOI: 10.1117/1.JBO.19.1.010901.

2. Thompson D. R., Leifer I., Bovensmann H., et al. Real-time remote detection and measurement for airborne imaging spectroscopy: a case study with methane. *Atmos. Meas. Tech.* 2015. Vol. 8, No. 10. P. 4383–4397. DOI: 10.5194/amt-8-4383-2015.

3. Gao L., Smith R. T. Optical hyperspectral imaging in microscopy and spectroscopy – a review of data acquisition. *J. Biophotonics*. 2015. Vol. 8, issue 6. P. 441–456. DOI: 10.1002/jbio.201400051.

4. Kuula J., Pölönen I., Puupponen H.-H., et al. Using VIS/NIR and IR spectral cameras for detecting and separating crime scene details. *Proc. SPIE*. 2012. Vol. 8359. P. 83590P-1–83590P-11. DOI: 10.1117/12.918555.

5. Qin J., Chao K., Kim M. S., et al. Hyperspectral and multispectral imaging for evaluating food safety and quality. *J. Food Eng*. 2013. Vol. 118, issue 2. P. 157–171. DOI: 10.1016/j.jfoodeng.2013.04.001.

6. Torabzadeh H., Morsdorf F., Schaepman M. E. Fusion of imaging spectroscopy and airborne laser scanning data for characterization of forest ecosystems : a review. *ISPRS J. Photogramm. Remote Sens*. 2014. Vol. 97. P. 25–35. DOI: 10.1109/igarss.2014.6946660.

7. Lefebvre J. Real time hyperspectroscopy for dynamical study of carbon nanotubes. *ACS Nano*. 2016. Vol. 10, issue 10. P. 9602–9607. DOI: 10.1021/acsnano.6b05077.

8. Hagen N., Kudenov M. W. Review of snapshot spectral imaging technologies. *Opt. Eng*. 2013. Vol. 52, No. 9. P. 090901-1–090901-23. DOI: 10.1117/1.OE.52.9.090901.

9. Sugai H., Hattori T., Kawai A., et al. The Kyoto tridimensional spectrograph II on Subaru and the University of Hawaii 88-in telescopes. *Publ. Astron. Soc. Pac*. 2010. Vol. 122, No. 887. P. 103–118. DOI: 10.1086/650397.

10. Bodkin A., Sheinis A., Norton A., et al. Snapshot hyperspectral imaging – the hyperpixel array camera. *Algorithms and technologies for multispectral, hyperspectral, and ultraspectral imagery XV* (Orlando, 13–17 April, 2009) : proc. SPIE. 2009. Vol. 7334. P. 73340H-1–73340H-11.

11. Gulis I. M., Kupreyeu A. G., Demidov I. D., et al. Multislit diffraction grating spectrometer for imaging spectroscopy. *J. Belarus. State Univ. Phys*. 2017. No. 3. P. 4–11 (in Russ.).

12. Voropai E. S., Gulis I. M., Kupreev A. G. Astigmatism correction for a large-aperture dispersive spectrometer. *J. Appl. Spectrosc*. 2008. Vol. 75, issue 1. P. 150–155. DOI: 10.1007/s10812-008-9000-2.

Статья поступила в редколлегию 25.11.2017.
Received by editorial board 25.11.2017.

Физика лазеров

Laser physics

УДК 520.874.7

ВЛИЯНИЕ МАТРИЦЫ НА ГЕНЕРАЦИЮ НЕПРЕРЫВНОГО КВАЗИТРЕХУРОВНЕВОГО НЕОДИМОВОГО ЛАЗЕРА ПРИ НЕОДНОРОДНОЙ НАКАЧКЕ

В. И. ГЕРАСИМЕНКО[1)]***, И. В. СТАШКЕВИЧ***[1)]

[1)]*Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Беларусь*

Анализируются генерационные характеристики неодимового лазера с квазитрехуровневой схемой для наиболее распространенных кристаллических матриц. Теоретическое исследование энергетических характеристик излучения такого лазера с различными матрицами проведено для стационарного режима генерации. Анализ выполнялся для модели лазера как с продольной накачкой лазерным диодом, так и с поперечной с учетом пространственной неоднородности пучка накачки. Результаты расчетов показывают, что учет пространственной неоднородности пучка накачки при продольном и поперечном возбуждении приводит к росту расчетного значения пороговой мощности накачки и снижению параметра эффективности генерации по сравнению с результатами для точечной модели лазера. Показано, что оптимальными значениями пороговой мощности накачки и параметра эффективности генерации обладают матрицы YAG и GGG по причине более низких значений реабсорбционных потерь.

Ключевые слова: неодимовый лазер; квазитрехуровневая схема; пространственная неоднородность пучка накачки; параметр эффективности; пороговая мощность накачки; Nd : KGW; Nd : GVO; Nd : YVO; Nd : YAG; Nd : GGG; Nd : YAP.

Образец цитирования:
Герасименко В. И., Сташкевич И. В. Влияние матрицы на генерацию непрерывного квазитрехуровневого неодимового лазера при неоднородной накачке // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2018. № 2. С. 11–16 (на англ.).

For citation:
Gerasimenko V. I., Stashkevitch I. V. The matrix effect on generation of quasi-three-level continuous wave neodymium laser under inhomogeneous pumping. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2018. No. 2. P. 11–16.

Авторы:
Валерия Игоревна Герасименко – магистрант кафедры лазерной физики и спектроскопии физического факультета. Научный руководитель – И. В. Сташкевич.
Игорь Вячеславович Сташкевич – кандидат физико-математических наук, доцент; доцент кафедры лазерной физики и спектроскопии физического факультета.

Authors:
Valeryia I. Gerasimenko, masters degree student at the department of laser physics and spectroscopy, faculty of physics.
gerasimenkovaleriya.i@gmail.com
Ihar V. Stashkevitch, PhD (physics and mathematics), docent; associate professor at the department of laser physics and spectroscopy, faculty of physics.
stashkevitch@bsu.by

Журнал Белорусского государственного университета. Физика. 2018. № 2. С. 11–16
Journal of the Belarusian State University. Physics. 2018. No. 2. P. 11–16

THE MATRIX EFFECT ON GENERATION OF QUASI-THREE-LEVEL CONTINUOUS WAVE NEODYMIUM LASER UNDER INHOMOGENEOUS PUMPING

V. I. GERASIMENKO[a], *I. V. STASHKEVITCH*[a]

[a]*Belarusian State University, 4 Niezaliežnasci Avenue, Minsk 220030, Belarus*
Corresponding author: I. V. Stashkevitch (stashkevitch@bsu.by)

The main generation characteristics of a neodymium-doped laser with a quasi-three-level scheme are analyzed for most common crystalline matrices. The energy characteristics of radiation from such a laser with different matrices in the stationary mode are studied theoretically. The operation of both the end-pumped and transversely-pumped laser has been simulated. The results of the calculations show that allowance for the spatial inhomogeneity of the pump beam, both for longitudinal and transverse excitation, leads to the increased calculated value of the pump threshold power and to the decreased generation efficiency parameter compared to the results for the point model of laser. It is demonstrated that the two matrices YAG and GGG have optimal threshold pump powers and slope efficiencies due to lower reabsorption losses.

Key words: neodymium laser; quasi-three-level scheme; spatial beam inhomogeneity; slope efficiency; pump power threshold; Nd : KGW; Nd : GVO; Nd : YVO; Nd : YAG; Nd : GGG; Nd : YAP.

Introduction

Diode-pumped solid-state lasers featuring stable frequency of lasing, high energy efficiency and compactness are widely applied in science and technology. Nd-doped lasers are most commonly used. Due to rapid progress in the field of nonlinear optics, it is possible to realize the IR-to-visible frequency conversion with a high efficiency and hence to expand the field of applications for solid-state diode-pumped lasers. At the present state of the art, one of the important tasks is to obtain laser generation in the blue region of the spectrum to meet the requirements of information and communications technologies, hologram recording, medicine, atmospheric sounding, etc.

Coherent radiation in the blue region can be realized by the *nonlinear frequency conversion* of solid-state lasers operating in the near-IR range. To this end, Nd-doped solid-state lasers are most frequently used with a quasi-three-level scheme operating on transition from the $^4F_{3/2}$ manifold to the lower manifold $^4I_{9/2}$. When a frequency of the $^4F_{3/2} - {}^4I_{9/2}$ transition is doubled, it is possible to obtain coherent radiation over the range 450–470 nm with the use of different Nd-doped matrices. The most important parameters of an active medium are the following: Stark splitting of the levels, lifetime of the upper state, maximum concentration of neodymium ions (doping level), absorption and stimulated emission cross-sections.

Figure 1 shows the energy level diagram for an active ion and transitions in a neodymium laser based on a quasi-three-level scheme.

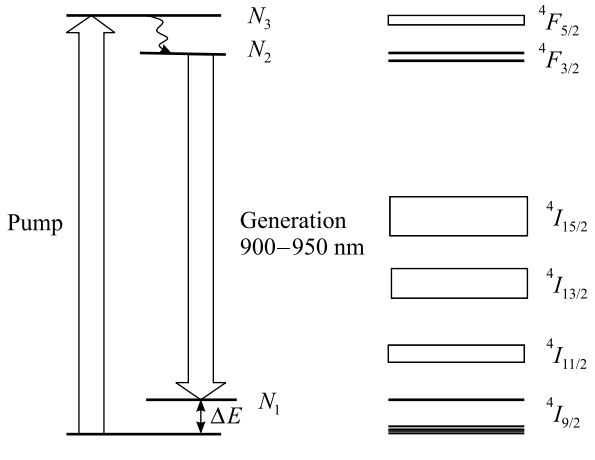


Fig. 1. Energy level diagram and transitions in a neodymium laser based on a quasi-three-level scheme. Populations of the upper and lower laser levels are given by N_2 and N_1, respectively

The diagram in its general form is the same for all crystals, only the energy levels of the excited $^4F_{3/2}$ and ground $^4I_{9/2}$ manifolds vary. A lifetime of the $^4F_{3/2}$ level is on the order of 10 ns; transitions to the metastable upper $^4F_{3/2}$ level are nonradiative. Generation occurs between the lower energy level of the $^4F_{3/2}$ manifold with the population N_2 and the upper energy level of the ground $^4I_{9/2}$ manifold with the population N_1.

This paper presents the results of numerical simulation for the performance of a longitudinally and transversely pumped quasi-three-level neodymium laser with different matrices. The threshold and slope efficiencies are calculated taking into account the spatial distribution of pump beam in the radial direction. The results obtained have been compared with the data given in [1] for a point model of laser. All spectroscopic characteristics of the matrices (YAG, YVO, GVO, GGG, YAP, KGW) were taken from [1; 2].

Simulation and calculations

Calculations for quasi-three-level Nd-laser with longitudinal pumping. The model of a quasi-three-level laser used in this article is valid for the general energy level diagram of fig. 1, with the population density of the lower laser level N_1 assumed to have a low thermal population [3].

Relative populations of the levels in the lower manifold are given by the Boltzmann distribution. Then the lower laser level is given by

$$N_1 = \frac{N_l}{Z_l}\exp\left(-\frac{E_{l5}}{kT}\right) = f_1 N_l,$$

where N_1 is the lower laser level population, E_{l5} is its energy, N_l is the population of the lower manifold $^4I_{9/2}$, $Z_l = \sum_{i=1}^{m}\exp\left(-\frac{E_{li}}{kT}\right)$ is the partition function of the lower manifold, f_2 is the fraction of the total $^4F_{3/2}$ population density at the lower Stark-splitting energy level, f_1 is the fraction of the total $^4I_{9/2}$ population density at the upper Stark-splitting energy level, k is the Boltzmann constant, T is the temperature. In the case of steady-state pumping, relative populations of the levels in the upper manifold can also be described by the Boltzmann distribution if relaxation between the levels in the upper manifold is rapid. Exact values of f_1 and f_2 are given in table 1.

Table 1

Theoretically calculated values of f_1 and f_2

Matrix	YAG	YVO	GVO	GGG	YAP	KGW
f_1	0.008	0.049	0.057	0.01	0.019	0.077
f_2	0.60	0.52	1.00	0.55	0.65	0.62

If depletion of a population in the ground state can be neglected, the laser rate equations for the population density in the upper and lower laser levels can be written as

$$\frac{dN_2(r,z)}{dt} = f_2 R_p \varphi_p(r,z) - \frac{N_2(r,z)}{\tau} - \frac{f_2 c\sigma\left[N_2(r,z) - N_1(r,z)S\varphi_l(r,z)\right]}{n}, \quad (1)$$

$$\frac{dN_1(r,z)}{dt} = -f_1 R_p \varphi_p(r,z) - \frac{N_1(r,z) - N_s f_1}{\tau} - \frac{f_1 c\sigma\left[N_2(r,z) - N_1(r,z)S\varphi_l(r,z)\right]}{n}, \quad (2)$$

where $R_p = \frac{P_{\text{inc}}\left[1-\exp[-\alpha l]\right]}{h\nu_p}$ is the total pump rate; P_{inc} is the incident pump power; $h\nu_p$ is the pump photon energy; α is the absorption coefficient; c is the speed of light; σ is the stimulated emission cross section; n is the index of refraction; τ is the upper state lifetime; N_s is the doping level [cm^{-3}]; $\varphi_p(r,z)$ and $\varphi_l(r,z)$ are the spatial distributions of the pump beam and laser beam, respectively. It has been assumed that relaxation from $^4F_{5/2}$ to the upper laser level is extremely fast. The energy transfer upconversion and excited state absorption may be neglected. Since we are considering the stationary mode, the time derivatives are equated to zero.

The total number of photons in the cavity S as a function of the incident pump power at the threshold is found from the equation derived from the radiative transfer equation:

$$\frac{ds}{dt} = \frac{c\sigma}{n}\iiint\limits_{\text{crystal}} \Delta N(r, z) S \varphi_l(r, z) dV - \frac{s}{\tau_q} = 0,$$

where $\Delta N(r, z) = N_2(r, z) - N_1(r, z)$ is the inversion-population density at thermal equilibrium from equations (2) and (3); $\tau_q = \frac{2l_c^*}{c(2\gamma l + T)}$ is the cold-cavity photon lifetime; T is the output transmission; γ is the intrinsic cavity loss factor [cm^{-1}]; l is the length of the active medium; $l_c^* = l_c + (n-1)l$ is the optical path length of the cavity; P_{out} is the laser output power from the cavity; $h\nu_l$ is the laser photon energy. This equation enables one to calculate the incident pump power at the threshold. To calculate the slope efficiency, it is necessary to take into account the effect of overlapping pump and laser fields [3].

Relation between the total number of photons in the cavity S and the output power from the laser cavity is given by:

$$S = \frac{2l_c^* P_{\text{out}}}{ch\nu_l T}.$$

The pump and laser beams are modeled as circularly symmetric (TEM_{00}) Gaussian beams which do not diffract significantly within the active medium. It is assumed that the pump light passes just once through the gain medium, so the unabsorbed pump light is assumed not to be reflected back into the active medium.

In this calculation a length of the active medium is l = 3 mm, the mode waist ratio $\frac{\omega_p}{\omega_L}$ is equal to 1, ω_p = 200 μm, the output transmission T is 3 %, the intrinsic loss coefficient in the cavity is $\gamma = 2 \cdot 10^{-3}$ cm^{-1}.

Figure 2 shows the laser output power as a function of the incident pump power for different matrices.

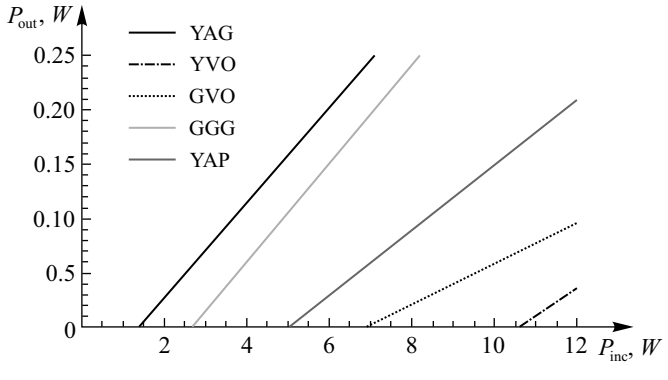


Fig. 2. Calculated laser output power as a function of the incident pump power

Theoretically calculated values of the slope efficiencies and the threshold pump powers for different matrices are given in table 2.

As seen, the maximum slope efficiency corresponds to matrices GGG and YAG since they have lower reabsorption losses because of the lower population N_1 of neodymium ions at the upper energy level of the ground manifold ($\Delta E > kT$ [1]). To increase the slope efficiency, the doping level can be lowered: for example, for the KGW matrix with a doping level of 2 at. % the slope efficiency is growing to 18 %. A similar situation is observed for the threshold pumping power – minimum values correspond to two given matrices with minimal reabsorption losses.

Table 2

Theoretically calculated laser parameters

Matrix	Incident pump power at the threshold, P_{inc}, W	Slope efficiency, $\frac{dP_{\text{out}}}{dP_{\text{inc}}} \cdot 100$ %
YAG	1.40	43.8
YVO	10.6	26.1
GVO	6.92	19.0

Ending table 2

Matrix	Incident pump power at the threshold, P_{inc}, W	Slope efficiency, $\frac{dP_{out}}{dP_{inc}} \cdot 100\ \%$
GGG	2.70	45.4
YAP	5.04	30.1
KGW	57.7	4.7

If the spatial distribution of the pump beam is taken into account, the threshold pump power significantly increases in comparison with the data calculated using the point model of laser since the latter takes into account neither the spatial distribution of the pump radiation along the cylindrical coordinates z and r nor the presence of reabsorption losses. The point model of laser gives higher values of the slope efficiency for the same reasons.

Figure 3 shows the threshold pump power depending the length of the gain medium with the same doping level as in [1]. On the one hand, with an increase in the length of the active medium, the absorbed pump power increases and, on the other hand, the reabsorption losses increase too. Therefore, for each matrix there is an optimal length of the gain medium associated with a minimal threshold pump power.

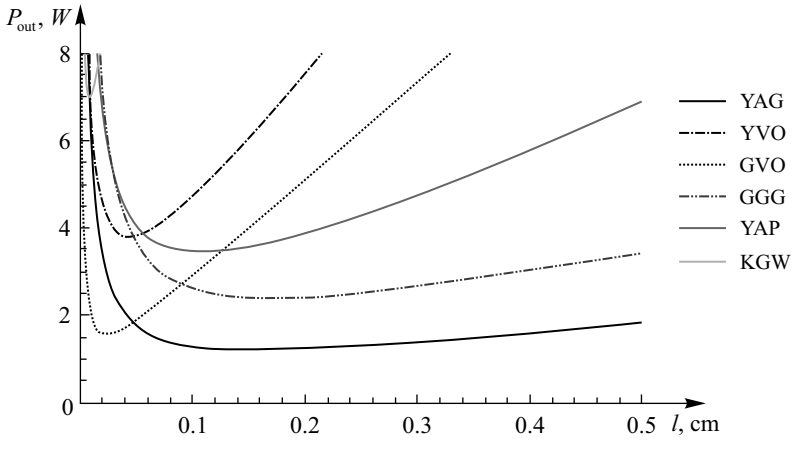


Fig. 3. Pump power at the threshold depending on the length of the gain medium

Calculations for quasi-three-level Nd-laser with transverse pumping. Assuming that the distribution of pump radiation along the z coordinate is uniform, the spatial distribution of the pump beam is given by

$$\varphi_p(x, y) = \frac{1}{\sqrt{1+\left(\frac{\lambda x}{\pi w_0^2}\right)^2}} \exp\left[-2\frac{y^2}{w_0^2\left[1+\left(\frac{\lambda x}{\pi w_0^2}\right)^2\right]}\right].$$

Table 3 shows the calculated values of the absorbed pump power at threshold and the slope efficiency in the case of transverse pumping.

Table 3

Theoretically calculated laser parameters

Matrix	Absorbed pump power at the threshold, P_{abs}, W	Slope efficiency, $\frac{dP_{out}}{dP_{abs}}$, %
YAG	3.1	28.4
YVO	31.7	10.8
GVO	21.6	7.1

Ending table 3

Matrix	Absorbed pump power at the threshold, P_{abs}, W	Slope efficiency, $\frac{dP_{out}}{dP_{abs}}$, %
GGG	5.8	30.5
YAP	12.6	14.9
KGW	190.0	1.5

The gain rod (l = 10 mm) is directed along the z axis with a cross-sectional diameter of 5 mm (plane XY). Laser diode bars (three-side pumping scheme) were chosen as a pump source 10 mm in length. The angular divergence of the pump beam in the XY plane is 30°. For transverse pumping the situation is similar: minimual threshold pump powers correspond to two matrices YAG and GGG.

Summary

In this paper, the main generation characteristics – the threshold pump power and the slope efficiency – of a neodymium doped laser with the quasi-three-level scheme are calculated and analyzed. Two matrices – YAG and GGG – have the optimal threshold pump powers and slope efficiencies due to lower values of the reabsorption losses. Optimum lengths of the active medium are different for different matrices. The results obtained are associated with the parameter values which are identical for all the matrices but not optimal for some of them.

To reduce reabsorption losses, one can lower the doping level, thereby reducing the threshold pump power. The latter can also be reduced by choosing an optimal length of the active medium for the considered matrices. The proposed model takes into account both the spatial distribution of the pump radiation along the cylindrical coordinate r and the reabsorption losses. The model may be improved further by inclusion of the non-Gaussian spatial distribution of the generated beam.

References

1. Stashkevich I. V., Gerasimenko V. I. The matrix effect on the generation of quasi-three-level neodymium laser in the stationary mode. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2017. No. 1. P. 88–94 (in Russ.).

2. Stashkevich I. V., Novitskaya R. I. The lasing characteristics of quasi-three-level diode-pumped Nd : KGW laser. *Vestnik BGU. Ser.1, Fiz. Mat. Inform.* 2016. No. 3. P. 71–75 (in Russ.).

3. Risk W. P. Modeling of longitudinally pumped solid-state lasers exhibiting reabsorption losses. *J. Opt. Soc. Am.* 1988. Vol. 5, issue 7. P. 1412–1423.

Received by editorial board 12.01.2018.

УДК 621.373.8

ПЕРЕХОДНЫЕ ПРОЦЕССЫ ПРИ ПОЛЯРИЗАЦИОННЫХ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯХ В ПОВЕРХНОСТНО ИЗЛУЧАЮЩИХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ЛАЗЕРАХ

Л. И. БУРОВ[1)]***, А. С. ГОРБАЦЕВИЧ***[1)]***, П. М. ЛОБАЦЕВИЧ***[1)]

[1)]*Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Беларусь*

На основе численного моделирования проведено исследование поляризационного гистерезиса в поверхностно излучающих полупроводниковых лазерах. Характерной особенностью являлось возбуждение полупроводниковых лазеров треугольным импульсом, в котором ток линейно возрастал от нуля до значения, существенно превышающего точку поляризационного переключения, а затем с такой же скоростью спадал до нуля. Результаты численных расчетов показывают, что все особенности формирования петли поляризационного гистерезиса связаны с инерционностью формирования поляризационных характеристик в области поляризационных переключений. В частности, показано, что диапазон линейности формирования петли поляризационного гистерезиса может быть расширен за счет сдвига точки поляризационного переключения в область больших значений инжекционного тока.

Ключевые слова: поляризационное переключение; поляризационный гистерезис; поверхностно излучающий полупроводниковый лазер; анизотропия.

POLARIZATION SWITCHING TRANSIENTS IN SURFACE-EMITTING SEMICONDUCTOR LASERS

L. I. BUROV[a]***, A. S. GORBATSEVICH***[a]***, P. M. LOBATSEVICH***[a]

[a]*Belarusian State University, 4 Niezaliežnasci Avenue, Minsk 220030, Belarus*
Corresponding author: L. I. Burov (burov@bsu.by)

Based on numerical simulation, polarization hysteresis (PH) in surface-emitting semiconductor lasers (VCSEL) has been studied. In the process the characteristic feature was initiation of VCSEL by the triangular pulse, in which the current was linearly increasing from zero to the value significantly exceeding the polarization switching point (PS) and subsequently decreasing to zero at the same rate. The obtained numerical results demonstrated that all the peculiarities of the PH loop generation were associated with the lag effect of the polarization characteristics formation in the region of polarization switching. In particular, it has been shown that the range of the PH loop generation linearity can be expanded by shifting the PS point to the region of high injection currents.

Key words: polarization switching; polarization hysteresis; surface-emitting semiconductor lasers; anisotropy.

Образец цитирования:
Буров Л. И., Горбацевич А. С., Лобацевич П. М. Переходные процессы при поляризационных переключениях в поверхностно излучающих полупроводниковых лазерах // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2018. № 2. С. 17–24.

For citation:
Burov L. I., Gorbatsevich A. S., Lobatsevich P. M. Polarization switching transients in surface-emitting semiconductor lasers. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2018. No. 2. P. 17–24 (in Russ.).

Авторы:
Леонид Иванович Буров – кандидат физико-математических наук, доцент; доцент кафедры общей физики физического факультета.
Александр Сергеевич Горбацевич – кандидат физико-математических наук; доцент кафедры общей физики физического факультета.
Павел Михайлович Лобацевич – аспирант кафедры общей физики физического факультета. Научный руководитель – Л. И. Буров.

Authors:
Leonid I. Burov, PhD (physics and mathematics), docent; associate professor at the department of general physics, faculty of physics.
burov@bsu.by
Alexander S. Gorbatsevich, PhD (physics and mathematics); associate professor at the department of general physics, faculty of physics.
alex.gorbatsevich@gmail.com
Pavel M. Lobatsevich, postgraduate student at the department of general physics, faculty of physics.
pavel.lobatsevich@mail.ru

Введение

Явление поляризационной бистабильности (ПБ) было обнаружено в торцевых полупроводниковых инжекционных лазерах (ИЛ) при низкой температуре [1] и проявляется в том, что при нарастании инжекционного тока его значение, при котором происходит переключение с ТМ- на ТЕ-моду (или наоборот), смещено в область величин больших, чем при снижении значений тока. Такое явление связывали [2] с наличием положительной обратной связи между поляризационными модами, т. е. с различием в коэффициентах насыщения мод одинаковой (self-saturation) и ортогональной (cross-saturation) поляризаций вследствие слабой анизотропии коэффициента усиления. Несколько позднее явление ПБ широко исследовалось в гребневых ИЛ [3; 4], в которых дополнительным фактором обратной связи являлось наличие волноводного эффекта.

Однако быстро было выявлено, что для эффективного управления этой обратной связью лучше использовать внешний резонатор и (или) внешнюю инжекцию оптического излучения. На такой схеме основано научно-техническое направление [5], использующее ПБ в качестве основы для разработки разнообразных устройств оптоэлектроники.

После обнаружения [6] эффекта поляризационного переключения (ПП) для поверхностно излучающих полупроводниковых лазеров (VCSEL) проявление ПБ не считалось чем-то особенным [7], однако изучение этого эффекта развивалось в направлении стандартной схемы реализации обратной связи [7; 8]. Причем для объяснения явления ПБ в VCSEL использовался тот же стандартный подход на основе поляризационных мод, который был предложен ранее [2]. Однако в этом случае интерпретации эффектов ПБ сталкивалась с определенными трудностями (например, при большой частоте модуляции инжекционного тока [9; 10]), преодолеть которые пытались за счет введения дополнительных допущений [11]. Основная причина затруднений связана с аксиоматикой метода – считается, что исходно формируются две поляризованные моды, нелинейное взаимодействие которых и определяет поляризационную динамику лазерной системы, причем параметры такого взаимодействия являются строго определенными характеристиками самой лазерной системы. Однако результаты исследований [9; 11] показывают, что такие параметры должны отражать характер процесса, т. е. быть, вообще говоря, динамическими переменными. Преодолеть такое противоречие в рамках метода поляризационных мод до настоящего времени не удалось.

В то же время в развиваемом авторами подходе [12] такая динамика включена исходно в процесс формирования поляризационного излучения в лазерной системе – неполяризованное (или слабо поляризованное) спонтанное излучение последовательно усиливается в активном слое с анизотропией активной среды и (или) анизотропией потерь. В стационарном решении процессы формирования стационарных значений интенсивности и степени поляризации идут параллельно, при этом степень поляризации стремится достичь предельных значений ± 1, что соответствует линейной поляризации. Для большинства VCSEL характерна достаточно слабая анизотропия коэффициентов усиления и потерь [12], которая нарушает исходную аксиальную симметрию системы. Как следствие, скорость выхода поляризации на стационарное значение значительно меньше скорости установления суммарной интенсивности [12]. В результате суммарная интенсивность выходит на свое стационарное значение значительно быстрее, и дальнейшая эволюция излучения идет только за счет перераспределения интенсивности отдельных поляризационных компонент в пользу тех, для которых условия усиления оказываются более благоприятными. Этот процесс имеет гораздо большую длительность, которая оказывается обратно пропорциональной относительной степени анизотропии коэффициентов усиления и (или) потерь [12]. При достаточно быстром нарастании тока поляризация выходного излучения лазера не успевает выстраиваться по мгновенному значению тока и происходит сдвиг кривой $P(I)$ в область больших значений инжекционного тока. При последовательном спаде величины тока имеет место обратный сдвиг кривой $P(I)$ и, следовательно, образуется типичная петля гистерезиса.

Таким образом, процесс ПБ является естественным следствием динамики формирования поляризованного излучения в рамках подхода [12], однако это качественная картина и она требует детального подтверждения и изучения влияния различных параметров (скорости изменения инжекционного тока, времени жизни неравновесных носителей, внутренних потерь) на характеристики процесса ПБ. Результаты такого исследования представлены в настоящей работе.

Теоретическая модель

В качестве базовой принята полуфеноменологическая (в смысле определения зависимости коэффициента усиления от плотности инжекционного тока) модель для полупроводниковых поверхностно излучающих лазеров, детально описанная в работе [12], однако в данном случае мы будем использовать

несколько более общее представление параметров лазерной системы. В частности, в работе [12] в качестве основной расчетной величины используется интенсивность отдельной поляризационной компоненты $I_{\psi}(\psi)$, т. е. интенсивность линейно-поляризованной компоненты суммарной интенсивности, вектор поляризации которой ориентирован под углом ψ к направлению выделенной оси [12]. Однако в теории полупроводниковых лазеров вместо интенсивности обычно используется плотность фотонов [13]. Поэтому, используя простое соотношение $I(\psi) = \frac{h\bar{v}^2}{2\lambda} S(\psi)$, где v и λ – скорость и длина волны соответственно, введем ориентационную компоненту плотности фотонов $S(\psi)$ в резонаторе. Более того, систему уравнений для ориентационной компоненты плотности фотонов $S(\psi)$ и концентрации неравновесных носителей заряда N представим в общем виде [14]:

$$\frac{dS(\psi)}{dt} = \Gamma\beta\frac{N}{\pi\tau_N} - v\left(\Gamma G(\psi) - \rho - k_R\right)S(\psi),$$

$$\frac{dN}{dt} = \frac{j}{ed} - v\int G(\psi)S(\psi)d\psi - \frac{N}{\tau_N},$$

где $G(\psi)$ – ориентационная компонента коэффициента усиления; ρ, k_R – коэффициенты внутренних потерь и потерь на зеркалах резонатора соответственно; v – скорость света в активном слое; Γ – фактор оптического ограничения; d – толщина активного слоя; e – заряд электрона; j – плотность инжекционного тока; τ_N – время жизни неравновесных носителей заряда; β – доля фотонов спонтанного излучения, попадающая в моду генерации. Угол ψ определяет ориентацию вектора поляризации компоненты плотности фотонов $S(\psi)$ относительно выделенной оси. В соответствии с принятой моделью ориентационная компонента коэффициента усиления определяется как [12]

$$G(\psi) = g_0\left(N - N_{\text{tr}}\right)\left(1 + k_0\left(1 - \frac{j}{j_{\text{ps}}}\right)\cos 2\psi\right),$$

где $g_0\left(N - N_{\text{tr}}\right)$ – стандартное выражение для коэффициента усиления полупроводниковых инжекционных лазеров; N_{tr} – концентрация прозрачности; j_{ps} – значение плотности инжекционного тока, соответствующего точке ПП; k_0 – безразмерный параметр, определяющий скорость изменения степени анизотропии коэффициента усиления η [12].

Для коэффициентов внутренних потерь ρ и потерь на зеркалах резонатора k_R пренебрегаем возможной зависимостью от угла ψ, поскольку для ρ такая зависимость может быть учтена в эффективном коэффициенте усиления [14], а ориентационная зависимость k_R практически не влияет на характер поляризационных переключений [14]. Отметим также, что в условиях эксперимента задается не плотность инжекционного тока j, а его величина I, в дальнейшем будем оперировать этой величиной, предполагая, что ток инжекции равномерно распределен по площади активного слоя.

Поскольку исходно ПБ рассматривается как динамический эффект, т. е. она – следствие особенности динамики формирования поляризации выходного излучения, то для исследования используем подход, который широко применяется для таких явлений [9], – треугольные импульсы с одинаковой скоростью нарастания и спада. Однако в отличие от классического подхода [9] такие импульсы не являются слабой модуляцией, накладываемой на статическую составляющую, а представляют собой полностью самостоятельное возбуждение, когда плотность инжекционного тока растет от нуля до фиксированной величины (в численных расчетах бралась величина 6 мА), а затем спадает опять до нуля. Это позволяет исследовать именно динамику ПБ целиком, а не ограничиваться проблемой линейности отклика системы в условиях слабой модуляции [9], что является более частным вопросом, хотя и важным для разработки систем передачи и обработки информации. Более того, в качестве максимального принимаем фиксированное значение инжекционного тока, что упрощает проведение сравнительного анализа динамических зависимостей. В этом случае основной характеристикой импульса накачки может служить время нарастания (и спада) тока T.

Выбор такой формы импульса возбуждения непосредственно связан с основной задачей настоящей работы – показать, что поляризационная бистабильность отражает особенности полной динамики формирования поляризационных характеристик выходного излучения, в том числе и в области поляризационной неустойчивости. При численных расчетах использовались значения параметров лазерной системы, приведенные в работе [12], которые являются характерными для VCSEL.

Результаты численного моделирования

Сразу же отметим, что результаты численных расчетов в основном подтвердили исходные предположения, изложенные в разделе «Введение». Например, уменьшение длительности импульса $2T$ ведет к уширению петли гистерезиса и увеличению ее наклона, что и демонстрируют зависимости, приведенные на рис. 1. Однако выявить сами зависимости этих параметров на основе численных данных достаточно сложно.

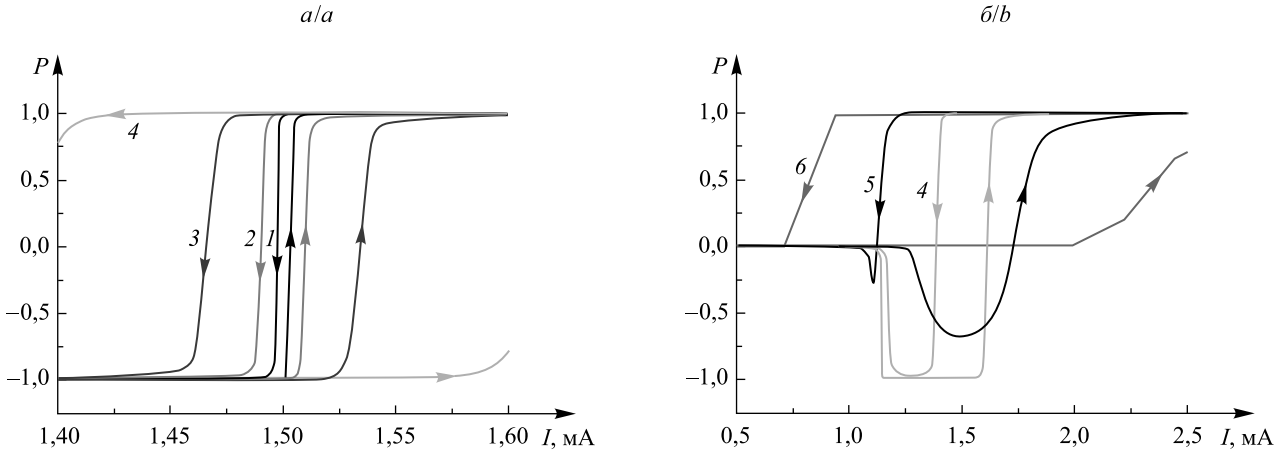


Рис. 1. Эволюция петли поляризационного гистерезиса при возбуждении треугольным импульсом с полупериодом T: $T = 10^{-3}$ с (*1*), $T = 10^{-4}$ с (*2*), $T = 10^{-5}$ с (*3*), $T = 10^{-6}$ с (*4*) (*а*); $T = 10^{-6}$ с (*4*), $T = 10^{-7}$ с (*5*), $T = 10^{-8}$ с (*6*) (*б*). $I_{ps} = 1{,}5$ мА; $k_0 = 10^{-2}$

Fig. 1. Evolution of the polarization hysteresis loop excited by triangular pulses with the half-period T: $T = 10^{-3}$ s (*1*), $T = 10^{-4}$ s (*2*), $T = 10^{-5}$ s (*3*), $T = 10^{-6}$ s (*4*) (*a*); $T = 10^{-6}$ s (*4*), $T = 10^{-7}$ s (*5*), $T = 10^{-8}$ s (*6*) (*b*). $I_{ps} = 1.5$ мА; $k_0 = 10^{-2}$

Действительно, если в качестве характеристики петли ПБ принять разность значений инжекционного тока ΔI_H, при которых поляризация достигает нулевого значения в случаях нарастания и спада тока (аналогичная характеристика вводилась авторами [9] для режима слабой модуляции), то численные значения дают существенно нелинейный рост величины ΔI_H при уменьшении T, что во многом связано с нелинейным искажением петли ПБ при временах нарастания тока меньше чем $3 \cdot 10^{-7}$ с (см. рис. 1, *б*). Следует отметить, что такие искажения в данном случае связаны и с относительно близким положением значения I_{ps} к пороговому значению. Так, при увеличении скорости нарастания тока происходит нелинейное смещение всей кривой $P(I)$ в область больших значений тока (для разных точек кривой $P(I)$ это смещение различно), что связано с инерционностью процесса формирования поляризации выходного излучения, которое подробно рассмотрено в работе [12]. При высокой скорости нарастания ($T < 3 \cdot 10^{-7}$ с) после преодоления порога генерации степень поляризации излучения не успевает достичь предельного значения –1, а значения плотности инжекционного тока уже попадают в область ПП (см. рис. 1, *б*, кривая *5*). Далее, кривая $P(I)$ приобретает привычный вид, хотя и сдвигается в область больших I, т. е. процесс ПП приобретает квазистационарный характер. При сбросе зависимость $P(I)$ проявляет еще более несимметричный характер, поскольку падение степени поляризации развивается уже в околопороговой области. Зависимость $P(I)$ при $t = 10^{-8}$ с вряд ли стоит анализировать, поскольку, как показывают расчеты, процесс формирования усиленного излучения приобретает осциллирующий характер в течение всего времени нарастания I. То, что при этом зависимость $P(I)$ имеет вид плавной кривой, не является необычным, что отмечалось в работе [15]. Однако близость значения I_{ps} к пороговому не принципиальное условие и обычно связана с условием одномодовости режима генерации [16]. В то же время рост значений I_{ps} позволяет снизить искажения зависимости $P(I)$ даже для достаточно малых значений T, что иллюстрируют зависимости, представленные на рис. 2. Стоит отметить, что выбранная предельная величина инжекционного тока 6 мА обеспечивала выход на предельное значение степени поляризации +1 для всех использованных значений I_{ps}.

Эффект затягивания порога при нарастании тока хорошо проявляется только при малых значениях T (см. рис. 2, *а*), что является следствием инерционности процесса формирования усиленного излучения [12], однако он практически не зависит от величины I_{ps}, что связано с малым значением

параметра k_0 и, следовательно, слабой зависимостью коэффициента усиления $G(\psi)$ от I_{ps}. Более того, хорошо наблюдаемый эффект увеличения наклона кривой $P(I)$ в области ПП при уменьшении полупериода импульса накачки T также практически не зависит от величины I_{ps}.

В то же время из представленных на рис. 2 зависимостей хорошо видно, что с увеличением I_{ps} растет и ширина петли ПГ ΔI_H. Действительно, если согласно [17] считать, что процесс ПП происходит в области, где величина степени анизотропии коэффициента усиления $\eta(j)$ [12] лежит в области $\eta < 5 \cdot 10^{-5}$, то тогда $\Delta I_H \sim I_{ps}$. Приведенные на рис. 3 зависимости показывают, что такая линейная пропорциональность сохраняется в широком диапазоне значений T (небольшие изменения начинают проявляться лишь при $T < 2 \cdot 10^{-7}$ с).

Следует отметить, что, например, при полупериоде нарастания тока $T = 10^{-7}$ с время прохождения области ПП составляет $\sim 10^{-10}$ с. Если учесть, что время жизни фотона в резонаторе VCSEL обычно лежит в области нескольких пикосекунд [16], то для формирования интенсивности условие квазиста-

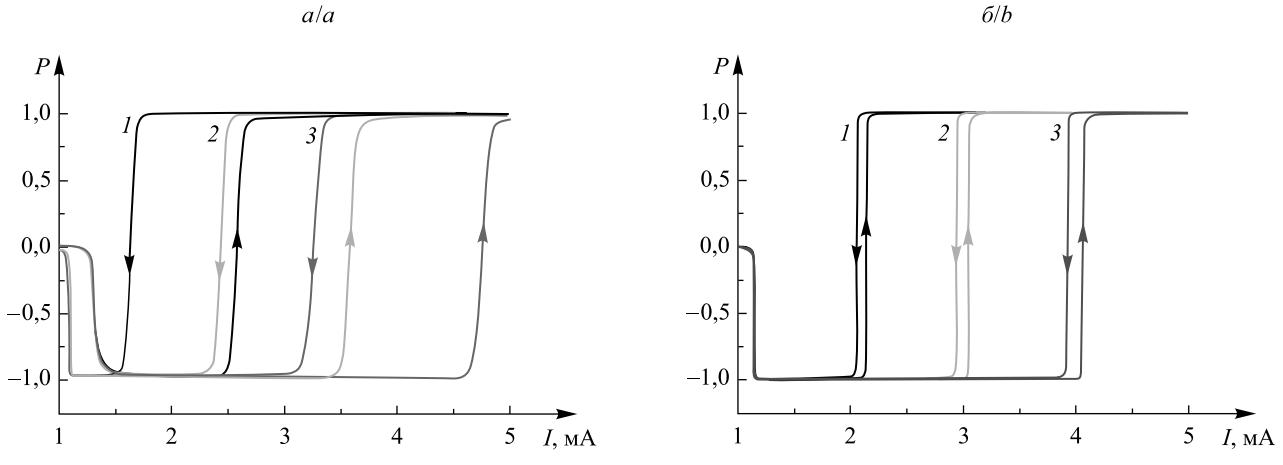


Рис. 2. Эволюция петли поляризационного гистерезиса при возбуждении треугольным импульсом с полупериодом T при изменении величины I_{ps}: $T = 10^{-7}$ с (*а*); $T = 10^{-5}$ с (*б*). $I_{ps} = 2$ мА (*1*), $I_{ps} = 3$ мА (*2*), $I_{ps} = 4$ мА (*3*) (*а* и *б*); $k_0 = 10^{-2}$

Fig. 2. Evolution of the polarization hysteresis loop excited by triangular pulses with the half-period T for varying values of I_{ps}: $T = 10^{-7}$ s (*a*); $T = 10^{-5}$ s (*b*). $I_{ps} = 2$ mA (*1*), $I_{ps} = 3$ mA (*2*), $I_{ps} = 4$ mA (*3*) (*a* and *b*); $k_0 = 10^{-2}$

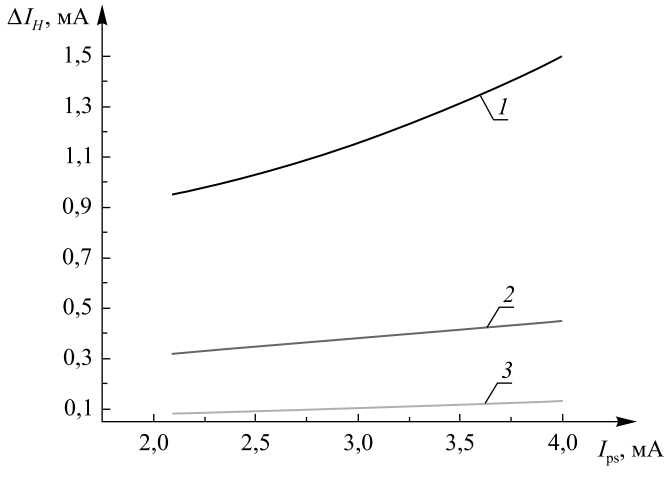


Рис. 3. Зависимость ширины петли ПБ ΔI_H от положения точки ПП I_{ps} для различных значений полупериода импульса T: $T = 10^{-7}$ с (*1*), $T = 10^{-6}$ с (*2*), $T = 10^{-5}$ с (*3*)

Fig. 3. The polarization hysteresis loop width ΔI_H as a function of the PS point position I_{ps} for different values of the half-period T: $T = 10^{-7}$ s (*1*), $T = 10^{-6}$ s (*2*), $T = 10^{-5}$ s (*3*)

ционарности выполняется достаточно хорошо для всего диапазона $T > 10^{-7}$ с. Однако процесс формирования поляризации выходного излучения в области ПП обладает гораздо большей инерционностью. В частности, согласно результатам [12] характеристическое время t_p достижения стационарного значения для $k_0 = 0{,}01$ составляет несколько сотен наносекунд. Это и приводит к увеличению смещения и наклона кривой $P(I)$ с увеличением скорости нарастания тока. Данный эффект достаточно хорошо наблюдается по зависимостям, приведенным на рис. 1 и 2.

Понятно, что сразу же возникает вопрос о характере изменения ПБ при изменении времени жизни фотона в резонаторе. Эта величина определяется полными потерями в резонаторе, т. е. его добротностью. С практической точки зрения добротность резонатора проще всего изменять за счет вариации коэффициентов отражения зеркал *R*. (Следует иметь в виду, что для VCSEL в качестве зеркал используются брэгговские отражатели, коэффициент отражения которых можно менять за счет изменения числа слоев. Будем считать коэффициенты отражения одинаковыми, хотя выпускаются VCSEL и с разными коэффициентами отражения.) Результаты численных расчетов, характерный пример которых приведен на рис. 4, полностью укладываются в рамки рассматриваемого механизма.

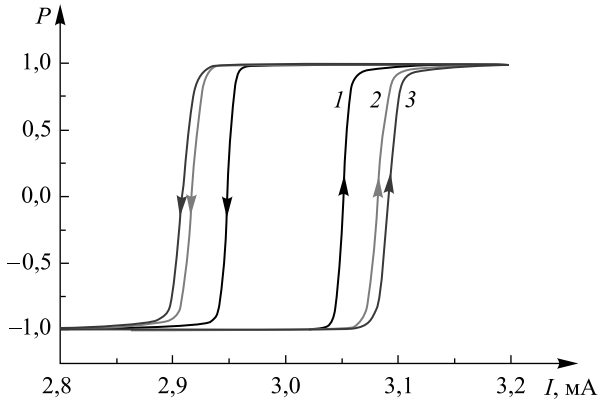


Рис. 4. Эволюция петли ПБ от величины *I* при различных значениях коэффициента отражения зеркал резонатора *R*: $T = 10^{-5}$ с; $R = 0{,}995$ (*1*), $R = 0{,}999$ (*2*), $R = 0{,}999\ 5$ (*3*); $I_{ps} = 3$ мА

Fig. 4. Evolution of the polarization hysteresis loop versus *I* for different values of the resonator mirror reflectivity *R*: $T = 10^{-5}$ s; $R = 0.995$ (*1*), $R = 0.999$ (*2*), $R = 0.999\ 5$ (*3*); $I_{ps} = 3$ mA

Действительно, рост параметра *R* ведет к увеличению времени жизни фотона, т. е. лазерная система становится более инерционной, что приводит к сдвигу и увеличению наклона кривой $P(I)$. В то же время этот эффект является нелинейным (вследствие логарифмической зависимости коэффициента внутренних потерь от коэффициента отражения *R*) и при $R > 0{,}999$ становится незначительным даже для $T = 10^{-7}$ с.

Заключение

Таким образом, согласно полученным результатам явление ПБ следует трактовать как результат внутренней инерционности процесса формирования поляризации выходного излучения в области ПП при последовательном изменении величины инжекционного тока, что приводит к сдвигу кривой $P(I)$ в область бóльших значений тока при его нарастании и, соответственно, меньших – при его спаде. При этом с ростом скорости изменения тока величина сдвига и угол наклона $P(I)$ возрастают.

При большой скорости изменения инжекционного тока происходят нелинейные искажения петли ПБ, однако, как показывают результаты моделирования, граница этих нелинейных искажений может быть сдвинута при увеличении значения тока ПП. Этот факт будет весьма полезным при разработке оптоэлектронных систем, использующих явление ПБ.

Важно также отметить, что и сама ПБ как явление, и поведение петли ПБ при вариации параметров лазерной системы и режимов ее работы полностью укладываются в рамки обобщенной модели формирования поляризованного излучения в VCSEL, развиваемой авторами [12].

Библиографические ссылки

1. *Chen Y. C., Liu J. M.* Polarization bistability in semiconductor lasers // Appl. Phys. Lett. 1985. Vol. 46, issue 1. P. 16–18. DOI: 10.1063/1.95834.

2. *Chen Y. C., Liu J. M.* Polarization bistability in semiconductor lasers: Rate equation analysis // Appl. Phys. Lett. 1987. Vol. 50, issue 20. P. 1406–1408. DOI: 10.1063/1.97835.

3. *Klehr A., Barwolf A., Muller R., et al.* Ultrafast polarization switching in ridge waveguide laser diodes // Electron. Lett. 1991. Vol. 27, № 18. P. 1680–1682.

4. *Klehr A., Muller R., Voss M., et al.* Gigahertz switching behavior of polarization-bistable InGaAsP/InP lasers under high-frequency current modulation // Appl. Phys. Lett. 1994. Vol. 64, issue 7. P. 830–832. DOI: 10.1063/1.111028.

5. *Kawaguchi H.* Bistable laser diodes and their applications: state of art // IEEE J. Sel. Topics Quant. Electron. 1997. Vol. 3, issue 5. P. 1254–1270. DOI: 10.1109/2944.658606.

6. *Chang-Hasnain C. J., Harbison J. P., Florez L. T., et al.* Polarization characteristics of quantum well vertical cavity surface emitting lasers // Electron. Lett. 1991. Vol. 27, № 2. P. 163–164.

7. *Yu S. F.* Theoretical analysis of polarization bistability in vertical cavity surface emitting semiconductor lasers // J. Lightwave Technol. 1997. Vol. 15, № 6. P. 1032–1041.

8. *Kawaguchi H.* Recent progress in polarization-bistable VCSELs and their applications to all-optical signal processing // Adv. lasers. New York : Springer, 2015. P. 1–17.

9. *Paul J., Masoller C., Mandel P., et al.* Experimental and theoretical study of dynamical hysteresis and scaling laws in the polarization switching of vertical-cavity surface-emitting lasers // Phys. Rev. A. 2008. Vol. 77, issue 4. Article ID: 043803. DOI: 10.1103/PhysRevA.77.043803.

10. *Quirce A., Perez P., Lin H., et al.* Polarization switching region of optically injected long-wavelength VCSELs // IEEE J. Quant. Electron. 2014. Vol. 50, № 11. P. 921–928.

11. *Virte M., Mirisola E., Sciamanna M., et al.* Asymmetric dwell-time statistics of polarization chaos from free-running VCSEL // Opt. Lett. 2015. Vol. 40, № 8. P. 1865–1867. DOI: 10.1364/OL.40.001865.

12. *Буров Л. И., Горбацевич А. С., Лобацевич П. М.* Наведенный дихроизм усиления в поверхностно излучающих полупроводниковых лазерах // Вестн. БГУ. Сер. 1, Физика. Математика. Информатика. 2016. № 3. С. 63–70.

13. *Coldren L. A., Corzine S. W.* Diode Lasers and Photonic Integrated Circuits. New York : Wiley, 1995.

14. *Буров Л. И., Горбацевич А. С., Лобацевич П. М.* Влияние ориентационной анизотропии параметров поверхностно излучающих полупроводниковых лазеров на возможность получения поляризационных переключений // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2018. № 1. С. 51–57.

15. *Jadan M., Burov L. I., Gorbatsevich A. S.* Point model for describing the polarization parameters of a single-mode semiconductor laser // J. Appl. Spectrosc. 2012. Vol. 79, issue 4. P. 577–582. DOI: 10.1007/s10812-012-9642-y.

16. *Panajotov K., Prati F.* Polarization Dynamics of VCSELs, VCSELs // Springer Ser. in Opt. Sci. 2013. Vol. 166. P. 181–231.

17. *Verschaffelt G., Panajotov K., Albert J., et al.* Polarization switching in vertical-cavity surface-emitting lasers: from experimental observations to applications // Opto-Electron. Rev. 2001. Vol. 9. P. 257–268.

References

1. Chen Y. C., Liu J. M. Polarization bistability in semiconductor lasers. *Appl. Phys. Lett.* 1985. Vol. 46, issue 1. P. 16–18. DOI: 10.1063/1.95834.

2. Chen Y. C., Liu J. M. Polarization bistability in semiconductor lasers: Rate equation analysis. *Appl. Phys. Lett.* 1987. Vol. 50, issue 20. P. 1406–1408. DOI: 10.1063/1.97835.

3. Klehr A., Barwolf A., Muller R., et al. Ultrafast polarization switching in ridge waveguide laser diodes. *Electron. Lett.* 1991. Vol. 27, No. 18. P. 1680–1682.

4. Klehr A., Muller R., Voss M., et al. Gigahertz switching behavior of polarization-bistable InGaAsP/InP lasers under high-frequency current modulation. *Appl. Phys. Lett.* 1994. Vol. 64, issue 7. P. 830–832. DOI: 10.1063/1.111028.

5. Kawaguchi H. Bistable laser diodes and their applications: state of art. *IEEE J. Sel. Topics Quant. Electron*. 1997. Vol. 3, issue 5. P. 1254–1270. DOI: 10.1109/2944.658606.

6. Chang-Hasnain C. J., Harbison J. P., Florez L. T., et al. Polarization characteristics of quantum well vertical cavity surface emitting lasers. *Electron. Lett.* 1991. Vol. 27, No. 2. P. 163–164.

7. Yu S. F. Theoretical analysis of polarization bistability in vertical cavity surface emitting semiconductor lasers. *J. Lightwave Technol.* 1997. Vol. 15, No. 6. P. 1032–1041.

8. Kawaguchi H. Recent progress in polarization-bistable VCSELs and their applications to all-optical signal processing. In: *Adv. lasers.* New York : Springer, 2015. P. 1–17.

9. Paul J., Masoller C., Mandel P., et al. Experimental and theoretical study of dynamical hysteresis and scaling laws in the polarization switching of vertical-cavity surface-emitting lasers. *Phys. Rev. A*. 2008. Vol. 77, issue 4. Article ID: 043803. DOI: 10.1103/PhysRevA.77.043803.

10. Quirce A., Perez P., Lin H., et al. Polarization switching region of optically injected long-wavelength VCSELs. *IEEE J. Quant. Electron.* 2014. Vol. 50, No. 11. P. 921–928.

11. Virte M., Mirisola E., Sciamanna M., et al. Asymmetric dwell-time statistics of polarization chaos from free-running VCSEL. *Opt. Lett.* 2015. Vol. 40, No. 8. P. 1865–1867. DOI: 10.1364/OL.40.001865.

12. Burov L. I., Gorbatsevich A. S., Lobatsevich P. M. The induced amplification dichroism in surface-emitting semiconductor lasers. *Vestnik BGU. Ser. 1, Fiz. Mat. Inform.* 2016. No. 3. P. 63–70 (in Russ.).

13. Coldren L. A., Corzine S. W. Diode Lasers and Photonic Integrated Circuits. New York : Wiley, 1995.

14. Burov L. I., Gorbatsevich A. S., Lobatsevich P. M. The effect of the orientational anisotropy of VCSEL parameters on the possibility to implement polarization switching. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2018. No. 1. P. 51–57 (in Russ.).

15. Jadan M., Burov L. I., Gorbatsevich A. S. Point model for describing the polarization parameters of a single-mode semiconductor laser. *J. Appl. Spectrosc.* 2012. Vol. 79, issue 4. P. 577–582. DOI: 10.1007/s10812-012-9642-y.

16. Panajotov K., Prati F. Polarization Dynamics of VCSELs, VCSELs. *Springer Ser. in Opt. Sci.* 2013. Vol. 166. P. 181–231.

17. Verschaffelt G., Panajotov K., Albert J., et al. Polarization switching in vertical-cavity surface-emitting lasers: from experimental observations to applications. *Opto-Electron. Rev.* 2001. Vol. 9. P. 257–268.

Статья поступила в редколлегию 23.02.2018.
Received by editorial board 23.02.2018.

Физика наноструктур

Physics of nanostructures

УДК 535.343

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ГИБРИДНЫХ ПЛАЗМОННЫХ НАНОКОМПОЗИТОВ

Р. А. ДЫНИЧ [1)]***, А. Д. ЗАМКОВЕЦ*** [1)]***, А. Н. ПОНЯВИНА*** [1)]

[1)] *Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68-2, 220072, г. Минск, Беларусь*

С использованием теории Ми проанализированы особенности распределения локального поля вблизи наночастиц Ag при отсутствии поглощения в матрице и его наличии. Показано, что наличие поглощения приводит к изменению картины распределения «горячих пятен» у поверхности плазмонной частицы. Изучено влияние ближнеполевых эффектов на спектральные свойства планарных гибридных наноструктур, в которых нанометровые пленки органических материалов, таких как родамин 6G (R6G), фталоцианин никеля (NiPc), фталоцианин меди (CuPc), контактируют с плотноупакованными монослоями (островковыми структурами) наночастиц серебра. Обнаружено возрастание эффективного поглощения органических пленок при размещении их вблизи поверхности островковых металлических наноструктур. Установлено, что чувствительность эффективного поглощения тонкой пленки органического полупроводника к наличию наночастиц Ag в исследованных нанокомпозитах возрастает в ряду R6G – NiPc – CuPc. Присутствие плазмонных наночастиц наиболее значительно усиливает эффективное поглощение органической пленки в длинноволновом относительно полосы поверхностного плазмонного резонанса спектральном диапазоне (550–800 нм). Эффект зависит от топологии композита и достигает наибольших значений при сопоставимости толщин органической пленки с размерами плазмонных наночастиц.

Ключевые слова: органический полупроводник; полоса поглощения; металлические наночастицы; поверхностный плазмонный резонанс поглощения; локальное поле.

Благодарность. Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (грант № Ф16В2-003).

Образец цитирования:
Дынич Р. А., Замковец А. Д., Понявина А. Н. Оптические свойства гибридных плазмонных нанокомпозитов // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2018. № 2. С. 25–34.

For citation:
Dynich R. A., Zamkovets A. D., Ponyavina A. N. Optical properties of hybrid plasmonic nanocomposits. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2018. No. 2. P. 25–34 (in Russ.).

Авторы:
Роман Анатольевич Дынич – кандидат физико-математических наук; старший научный сотрудник лаборатории физики инфракрасных лучей.
Анатолий Дмитриевич Замковец – кандидат физико-математических наук; старший научный сотрудник лаборатории физики инфракрасных лучей.
Алина Николаевна Понявина – доктор физико-математических наук, доцент; главный научный сотрудник лаборатории физики инфракрасных лучей.

Authors:
Roman A. Dynich, PhD (physics and mathematics); senior researcher at the laboratory of physics of infrared rays.
dynich@solo.by
Anatoly D. Zamkovets, PhD (physics and mathematics); senior researcher at the laboratory of physics of infrared rays.
a.zamkovets@dragon.bas-net.by
Alina N. Ponyavina, doctor of science (physics and mathematics), docent; chief researcher at the laboratory of physics of infrared rays.
a.ponyavina@ifanbel.bas-net.by

Журнал Белорусского государственного университета. Физика. 2018. № 2. С. 25–34
Journal of the Belarusian State University. Physics. 2018. No. 2. P. 25–34

OPTICAL PROPERTIES OF HYBRID PLASMONIC NANOCOMPOSITS

***R. A. DYNICH*[a], *A. D. ZAMKOVETS*[a], *A. N. PONYAVINA*[a]**

[a]*B. I. Stepanov Institute of Physics, National Academy of Sciences of Belarus, 68-2 Niezaliežnasci Avenue, Minsk 220072, Belarus*
Corresponding author: A. D. Zamkovets (a.zamkovets@dragon.bas-net.by)

With the use of the Mie theory, the features of the local field distribution near Ag nanoparticles in transparent and absorptive media are analyzed. It is shown that the presence of absorption leads to changes in a picture of the «hot spots» distribution near the plasmon nanoparticle surface. The near-field effects on the spectral properties of planar hybrid nanostructures, where nanometer films of organic materials such as rhodamine 6G (R6G), nickel phthalocyanine (NiPc) or copper phthalocyanine (CuPc) contact with close-packed monolayers (island structures) of silver nanoparticles, are investigated. It has been found that effective absorption of organic films increases when located near the surface of island metallic nanostructures. It has been established that sensitivity of effective absorption of organic semiconductor thin films to the presence of Ag nanoparticles in the nanocomposites under study grows in line with the series R6G – NiPc – CuPc. The most considerable enhancement of effective absorption of organic films due to the presence of plasmonic nanoparticles is realized in the longer wavelength range with respect to band of the surface plasmon resonance (550–800 nm). The effect is dependent on the composite topology, being maximal when the organic film thickness is compareable with sizes of plasmonic nanoparticles.

Key words: organic semiconductor; absorption band; metal nanoparticle; surface plasmonic resonance of absorption; local field.

Acknowledgements. This work was partial financially supported by Belarusian Republican Foundation for Fundamental Research (grant No. Ф16В2-003).

Введение

Органические полупроводники привлекают повышенное внимание исследователей. Это обусловлено относительно невысокой стоимостью, а также существенным упрощением технологических процессов по сравнению с традиционными кристаллическими материалами. На основе органических полупроводников разрабатываются эффективные устройства и приборы для применений в оптике и квантовой электронике, биологии и медицине [1].

В настоящее время также активно исследуется возможность применения в функциональных оптических элементах и гибридных материалах, содержащих в своем составе как неорганические, так и органические компоненты, металлических плазмонных наночастиц. Значительные перспективы при этом связывают с быстрым и регулируемым оптическим откликом таких частиц на световые воздействия, а также с их способностью существенно усиливать электромагнитные поля вблизи своей поверхности. Сравнительный анализ оптических свойств наноструктурированных благородных металлов показывает, что наиболее высокие коэффициенты усиления могут быть достигнуты для наноструктур серебра [2], для которых полосы поверхностного плазмонного резонансного поглощения (ППРП) достаточно хорошо отделены спектрально от полос межзонного поглощения и значения мнимой части диэлектрической проницаемости в области частот плазмонного резонанса невелики.

До настоящего времени основное внимание исследователей было сосредоточено на изучении особенностей усиления локального поля в прозрачных средах, в которых полностью отсутствует поглощение излучения. Установлено, что в этом случае величины коэффициентов усиления локального поля для наночастиц серебра существенно зависят от их размеров и оптических характеристик окружающей матрицы [3].

В настоящей работе анализируются особенности распределения локального поля для наночастиц Ag при отсутствии и наличии поглощения в матрице, а также оценивается влияние плазмонных наночастиц на оптические свойства экспериментально изготовленных гибридных нанокомпозитов Ag – R6G, Ag – CuPc и Ag – NiPc, состоящих из плотноупакованных монослоев серебра (островковых пленок) и контактирующих с ними тонких слоев органического полупроводника.

Методика расчетов

Для определения внутренних полей и полей вблизи поверхности сферической наночастицы применялась теория Ми. Основой метода служит разложение падающего, рассеянного частицей и внутреннего

полей по векторным сферическим гармоникам и последующее численное решение системы алгебраических уравнений для определения коэффициентов этого разложения [2; 4; 5].

Фактор эффективности рассеяния в ближней зоне Q_{NF}, который описывает эффект усиления поля вблизи металлической наночастицы, характеризует увеличение интенсивности поля по поверхности сферы радиусом R при введении наночастицы в центр этой сферы. При расчете Q_{NF} использовалось приведенное в [6] выражение и применялась компьютерная программа, разработанная для случая, когда окружающая частицу среда является поглощающей.

Использованные при расчетах оптические постоянные серебра взяты из [7]. Размерная зависимость оптических постоянных металлических наночастиц учитывалась в рамках модели ограничения длины свободного пробега электронов [8].

Усиление ближнего поля наночастицами серебра в поглощающих матрицах

Как уже отмечалось, одним из важнейших свойств плазмонных наночастиц является их уникальная способность существенно усиливать локальное поле вблизи своей поверхности. В работе [2] проведено детальное исследование топологии распределения ближнего поля для наночастиц серебра с различными размерами, а также изучена зависимость достигаемых значений коэффициентов усиления локального поля от размеров наночастиц и свойств окружающей матрицы. При этом рассматривались прозрачные матрицы, в которых полностью отсутствует поглощение излучения. Для таких систем фактор эффективности рассеяния в ближней зоне может более чем в 10 раз превышать значение фактора эффективности рассеяния в дальней зоне. При небольших размерах наночастицы (радиус $a = 5$ нм) локальное поле симметрично как внутри, так и вне частицы для всех основных плоскостей сечений (перпендикулярных направлению распространения и вектору поляризации падающего излучения). «Горячие пятна» при этом также сосредоточены преимущественно на поверхности частицы, с удалением от которой поле быстро ослабевает.

Наличие поглощения в матрице приводит к уменьшению значений фактора Q_{NF} и еще более быстрому ослаблению поля при удалении от поверхности наночастицы. Следует отметить также, что топология распределения ближнего поля может значительно изменяться, когда рассматриваются сечения частиц на разных длинах волн относительно полосы плазмонного резонанса. В первую очередь это происходит за счет дисперсии оптических постоянных плазмонной частицы и матрицы. В этом случае симметрия распределения локального поля вне частицы в поглощающей матрице может нарушаться и для малых частиц. Это видно из рис. 1, где представлены центральные сечения для серебряной сферы радиусом $a = 5$ нм во фталоцианине меди на длинах волн 450 нм (*а*) и 650 нм (*б*). Значения комплексного показателя преломления фталоцианина меди на этих длинах волн составляют: $m = 1{,}757 - 0{,}026i$ и $m = 2{,}2 - 0{,}625i$ соответственно. Отметим, что изменение цвета от черного к белому означает увеличение коэффициента усиления поля. Падающее излучение поляризовано перпендикулярно плоскости рис. 1. Из рис. 1 видно, что если для $\lambda = 450$ нм локальное поле симметрично в рассматриваемом сечении, то на длине волны $\lambda = 650$ нм симметрия картины распределения локального поля нарушается. Симметрия локального поля также нарушается для крупных частиц Ag ($a = 75$ нм), для моделирования оптических свойств которых необходимо использовать набор диполей. В этом случае, как и для прозрачных матриц, наблюдается смещение областей усиления локального поля в направлении распространения падающего излучения.

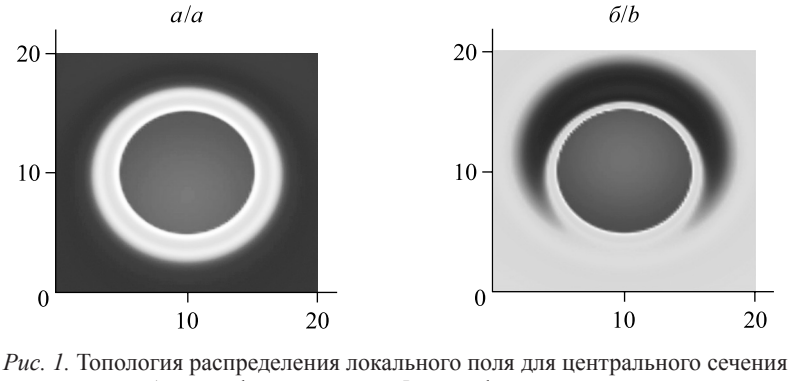


Рис. 1. Топология распределения локального поля для центрального сечения серебряной сферы радиусом 5 нм во фталоцианине меди. Длина волны: 450 нм (*а*), 650 нм (*б*)

Fig. 1. The local field distribution for the central cross-section of a silver sphere with a radius of 5 nm in copper phthalocyanine. Wavelength: 450 nm (*a*), 650 nm (*b*)

На рис. 2 приведены зависимости фактора эффективности рассеяния в ближней зоне Q_{NF} для серебряной наночастицы радиусом $a = 2{,}5$ нм, расположенной во фталоцианине никеля, от расстояния R от ее поверхности для различных длин волн: 500; 600 и 700 нм. Видно, что на всех длинах волн наибольшие значения Q_{NF} достигаются для областей, непосредственно примыкающих к поверхности наночастицы. С увеличением расстояния от поверхности наночастицы эффективность ее влияния ослабевает и стремится к нулю уже при $R/a = 2$–3. Максимальные значения Q_{NF} наблюдаются в области плазмонного резонанса на длине волны $\lambda = 500$ нм.

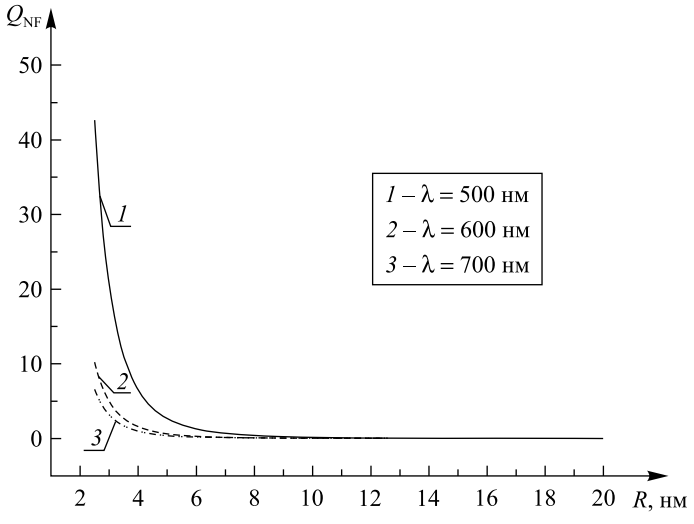


Рис. 2. Зависимость фактора эффективности рассеяния в ближней зоне Q_{NF} для серебряной наночастицы радиусом $a = 2{,}5$ нм, расположенной во фталоцианине никеля, от расстояния R от ее поверхности на различных длинах волн

Fig. 2. The scattering efficiency in the near-field zone Q_{NF} for a silver nanoparticle, with a radius of 2.5 nm, in nickel phthalocyanine as a function of the distance from its surface R at different wavelengths

Методика эксперимента

Экспериментальные образцы изготавливались на вакуумной установке ВУ-1А (Беларусь) последовательным термическим испарением материалов матрицы (органического полупроводника) и серебра на стеклянные и кварцевые подложки. Давление остаточных газов составляло $\sim 2 \cdot 10^{-3}$ Па. Температуры подложек были комнатными. Толщина осаждаемых слоев контролировалась кварцевым датчиком. Оптические спектры записывались на спектрофотометре Cary 500 (США).

Плотноупакованные монослои наночастиц серебра

Спектральное положение максимума полосы ППРП зависит от размеров плазмонных наночастиц и сдвигается в длинноволновую область при увеличении их диаметра d. Однако длинноволновый сдвиг полосы ППРП может наблюдаться и для одинаковых по размеру плазмонных частиц при переходе от их редкой упаковки в монослое к плотной. Такой переход сопровождается появлением значительных коллективных электродинамических взаимодействий между близко расположенными наночастицами, усиливающихся при увеличении их поверхностной концентрации c_s. В условиях эксперимента монослои характеризуются средним размером частиц $d_{ср}$, а повышение c_s достигается ростом поверхностной плотности массы (ППМ) серебра. Уже на первой стадии самоорганизации монослоев увеличение концентрации островков приводит к формированию плотноупакованных ансамблей наночастиц. Появляется ближняя упорядоченность в расположении наночастиц, сопровождаемая повышением локальной неоднородности ближнего поля и формированием нового дифракционного масштаба в монослое. Этот дифракционный масштаб соразмерен с длиной пространственной коррелированности частично упорядоченных наночастиц и обусловлен многократным переоблучением частично когерентными электромагнитными волнами [9]. Совокупность наночастиц, эффективно взаимодействующих в области корреляции, проявляет себя подобно частице более крупного размера, для которой характерна более низкая частота полосы ППРП [2].

Оптические свойства гибридных нанокомпозитов. Нанокомпозиты Ag – R6G

Органический краситель R6G известен как активный материал лазерных сред. Он также перспективен для применений в голографии [10] и может оказаться полезным при разработке новых функциональных материалов и сенсоров. Как известно из исследований растворов данного красителя, наиболее сильная полоса поглощения R6G имеет максимум в области ~530 нм, однако ее точное спектральное положение зависит от конкретного растворителя, поскольку из-за эффектов сольватации происходит изменение энергии электронного состояния [11]. Несмотря на достаточно сложную структуру молекул родамина 6G, тонкие пленки данного материала и композитных гибридных образцов на его основе могут быть получены термическим испарением в вакууме.

Спектр оптической плотности пленки родамина 6G толщиной порядка 15 нм на кварцевой подложке приведен на рис. 3, *а* (кривая *1*). Из рис. 3 видно, что в видимом диапазоне имеется интенсивная полоса поглощения с максимумом на длине волны $\lambda = 558$ нм. Ее полуширина составляет около 80 нм. В УФ-области спектра пленка R6G также имеет полосы поглощения, максимум наиболее интенсивной из которых расположен на длине волны $\lambda \sim 240$ нм, менее интенсивной – на $\lambda \sim 300$ нм и самой слабой – на $\lambda \sim 350$ нм. На рис. 3, *а*, кривая *2* соответствует плотноупакованному монослою серебра с ППМ $\sim 2 \cdot 10^{-6}$ г/см^2. В области спектра $\lambda \sim 400–550$ нм для этого слоя наблюдается полоса ППРП с максимумом на длине волны $\lambda = 480$ нм. Проведенные микроскопические исследования показали, что средний размер частиц в монослое Ag составляет ~5 нм, а поверхностная концентрация соответствует параметру перекрытия $\eta \sim 0{,}40–0{,}45$.

На рис. 3, *а*, кривая *3* является спектральной характеристикой двухслойной системы R6G – Ag. Для этой системы в спектральном диапазоне $\lambda \sim 450–550$ нм проявляется полоса ППРП, а на длинах волн $\lambda \sim 500–620$ нм наблюдается электронная полоса поглощения R6G. Видно, что в присутствии наночастиц серебра достигается значительное увеличение оптической плотности пленки родамина 6G в спектральном диапазоне $\lambda \sim 500–600$ нм, т. е. в области длинноволновой полосы поглощения органического полупроводника. Такое увеличение D связано с эффективным увеличением поглощения пленкой R6G из-за усиления локального поля вблизи поверхности плазмонных наночастиц.

Для того чтобы получить более наглядное представление о влиянии плазмонных наночастиц на поглощение R6G в рассматриваемом композите, была проведена обработка его спектра, заключающаяся в вычитании из него поглощения монослоя Ag. Разностный спектр оптической плотности ($D_{\text{R6G}-\text{Ag}} - D_{\text{Ag}}$) для системы R6G – Ag в спектральном диапазоне $\lambda > 450$ нм приведен на рис. 3, *б* (кривая *1*). Кривая *2* на рис. 3, *б*, является спектральной характеристикой пленки R6G. Сравнивая кривые *1* и *2* на рис. 3, *б*, следует отметить, что увеличение эффективного поглощения пленки R6G за счет присутствия плазмонных наночастиц в системе R6G – Ag невелико – менее 10 % в области максимума полосы поглощения. Частично это может быть связано с эффектом поглощающей матрицы. Наличие поглощения в нанослое R6G, на котором размещены наночастицы серебра, может способствовать ослаблению полосы ППРП подобно тому, как это происходит в поглощающих матрицах (см. рис. 4, *а*, и 4, *б*).

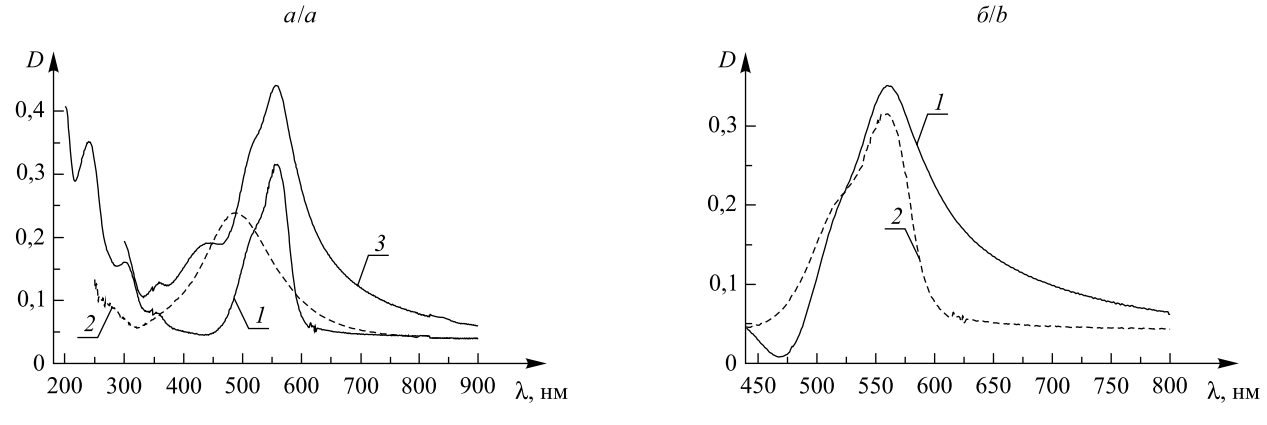


Рис. 3. Оптическая плотность: *а* – пленки R6G (*1*), монослоя Ag (*2*) и двухслойной системы Ag – R6G (*3*) на кварцевых подложках; R6G – $l \sim 15$ нм; Ag – $d_{\text{ср}} \sim 5$ нм; $\eta \sim 0{,}4–0{,}45$; *б* – разностный спектр оптической плотности ($D_{\text{R6G}-\text{Ag}} - D_{\text{Ag}}$) для системы R6G – Ag (*1*) и оптическая плотность чистой пленки R6G такой же толщины (*2*). R6G – $l \sim 15$ нм; Ag – $d_{\text{ср}} \sim 5$ нм; $\eta \sim 0{,}4–0{,}45$

Fig. 3. Optical density: *a* – of the R6G film (*1*), the Ag monolayer (*2*) and the two-layered Ag – R6G system (*3*) on quartz substrates; R6G – $l \sim 15$ nm; Ag – $d_{\text{m}} \sim 5$ nm; $\eta \sim 0.4–0.45$; *b* – differential spectrum of the optical density ($D_{\text{R6G}-\text{Ag}} - D_{\text{Ag}}$) for the R6G – Ag system (*1*) and optical density of the clean R6G film of the same thickness (*2*). R6G – $l \sim 15$ nm; Ag – $d_{\text{m}} \sim 5$ nm; $\eta \sim 0.4–0.45$

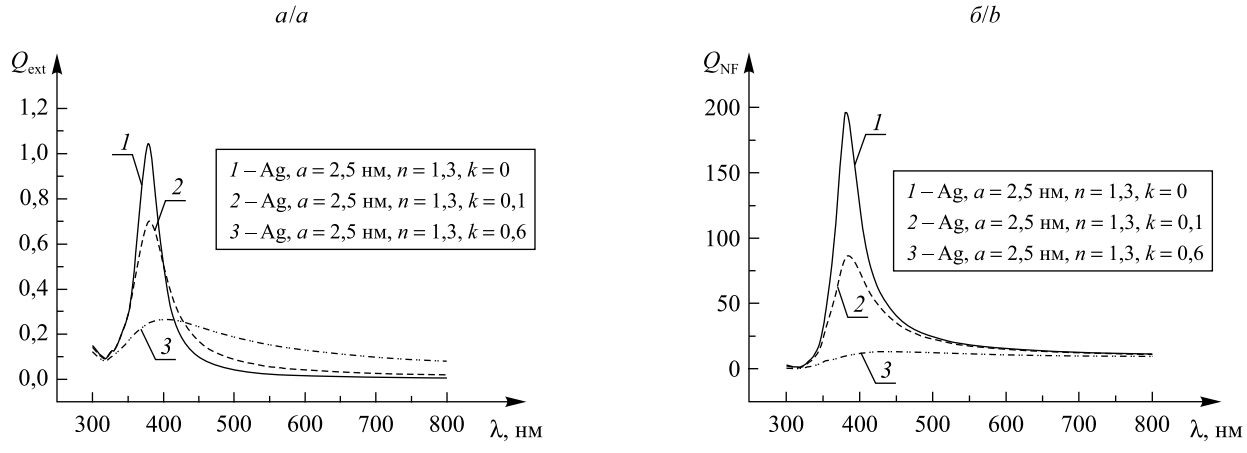


Рис. 4. Рассчитанные с использованием теории Ми факторы эффективности ослабления (*а*) и рассеяния в ближней зоне (*б*) для наносферы серебра ($a = 2{,}5$ нм) в матрице с $n = 1{,}3$ без поглощения (*1*) и с поглощением (*2*, *3*)

Fig. 4. The extinction (*a*) and scattering efficiencies in the near-field zone (*b*) for a silver nanosphere ($a = 2.5$ nm) in the $n = 1.3$ matrix without absorption (*1*) and with absorption (*2*, *3*)

Нанокомпозиты Ag – NiPc

Одно из центральных мест среди органических полупроводников занимают фталоцианины [12], характеризующиеся наличием делокализованных электронных состояний в цепях сопряжения, а также обладающие достаточно высокой устойчивостью к повышенным температурам и агрессивным средам. Эти свойства обусловливают их практическое применение. Фталоцианины представляют интерес для создания светоизлучающих устройств [13], фотовольтаических ячеек [14]. Они обладают высокой чувствительностью к газам и могут использоваться как активные элементы сенсорных устройств [15].

Спектр оптической плотности пленки NiPc толщиной ~10 нм приведен на рис. 5, *а* (кривая *1*). Данная пленка имеет полосы поглощения в УФ-диапазоне и на длинах волн 600–700 нм, связанные с электронными переходами (полосы Соре и *Q* соответственно [16]). На рис. 5, *а*, кривая *2* является спектральной характеристикой нанослоя серебра с ППМ ~$2 \cdot 10^{-6}$ г/см^2, а кривая *3* соответствует спектру

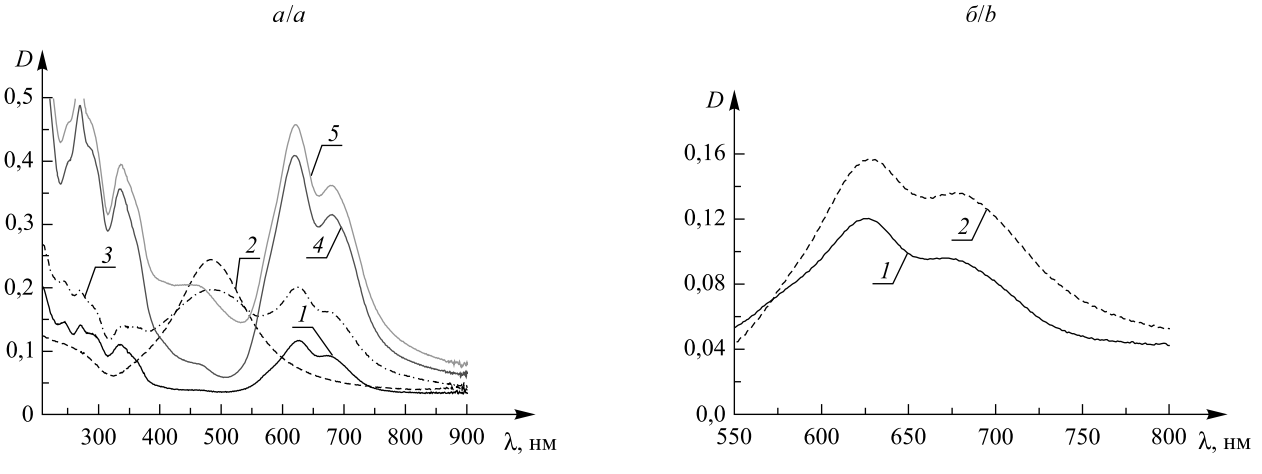


Рис. 5. Оптическая плотность: *а* – пленки NiPc (*1*, *4*), нанослоя Ag (*2*) и двухслойной наноструктуры NiPc – Ag (*3*, *5*) на кварцевых подложках; NiPc – *l* ~ 10 нм (*1*, *3*) и *l* ~ 30 нм (*4*, *5*); Ag – ППМ ~$2 \cdot 10^{-6}$ г/см^2; η ~ 0,4–0,45; *б* – пленки NiPc толщиной ~10 нм (*1*) и разностный спектр ($D_{NiPc-Ag} - D_{Ag}$) такой же по толщине пленки NiPc, расположенной в наноструктуре NiPc – Ag (*2*)

Fig. 5. Optical density: *a* – of the NiPc film (*1*, *4*), the Ag nanolayer (*2*) and the two-layered NiPc – Ag nanostructure (*3*, *5*) on quartz substrates; NiPc – *l* ~ 10 nm (*1*, *3*) and *l* ~ 30 nm (*4*, *5*); Ag – MSD ~$2 \cdot 10^{-6}$ g/cm^2; η ~ 0.4–0.45; *b* – optical density of the NiPc film of the thickness ~10 nm (*1*) and the differential spectrum ($D_{NiPc-Ag} - D_{Ag}$) of the NiPc film of the same thickness situated into the NiPc – Ag nanostructure (*2*)

оптической плотности двухслойной системы NiPc – Ag. Присутствие наночастиц серебра в композите приводит к существенному увеличению оптической плотности пленки фталоцианина никеля в спектральном диапазоне $\lambda > 550$ нм [17], т. е. в области длинноволновых полос поглощения органического полупроводника. Разностный спектр оптической плотности ($D_{\text{NiPc – Ag}} - D_{\text{Ag}}$) для системы NiPc – Ag в спектральном диапазоне $\lambda > 550$ нм приведен на рис. 5, *б* (кривая *1*). На рис. 5, *б*, кривая *2* является спектральной характеристикой пленки NiPc толщиной 10 нм. Сравнивая кривые *1* и *2*, можно видеть, что для пленки NiPc, расположенной в наноструктуре NiPc – Ag, наличие наночастиц Ag приводит к увеличению оптической плотности на длине волны $\lambda = 625$ нм более чем на 30 %.

На рис. 5, *а*, кривые *4* и *5* соответствуют спектрам оптической плотности пленки NiPc толщиной ~30 нм и двухслойной системы NiPc – Ag, где такая же по толщине пленка NiPc граничит с монослоем наночастиц Ag. Увеличение толщины приводит к возрастанию интенсивности полос поглощения органического полупроводника в ультрафиолетовом и видимом диапазонах. Однако относительный эффект усиления эффективного поглощения пленки NiPc в области 550–700 нм в присутствии плазмонных наночастиц существенно ниже по сравнению с более тонкой пленкой NiPc. Это связано с тем, что в пленке NiPc большей толщины лишь малая часть органического полупроводника попадает в зону усиления локального поля вблизи поверхности плазмонных наночастиц [18].

Нанокомпозиты Ag – CuPc

Из рассматриваемых нами органических материалов фталоцианин меди привлекает наибольшее внимание исследователей и находит применение в нанофотонике, оптоэлектронике, фотовольтаике [12; 19–21]. Как и NiPc, данный органический полупроводник характеризуется наличием интенсивных полос электронного поглощения в красной области видимого диапазона.

На рис. 6, *а*, приведены спектры оптической плотности пленки CuPc толщиной ~25 нм (кривая *1*) и двухслойной системы Ag* – CuPc, представляющей собой островковую пленку серебра Ag* с ППМ ~$8{,}7 \cdot 10^{-6}$ г/см^2 (кривая *2*), закрытую слоем фталоцианина меди такой же толщины (~25 нм), на стеклянных подложках. Средний размер частиц в монослое Ag* составляет порядка 15 нм, а их поверхностная концентрация соответствует параметру перекрытия $\eta \sim 0{,}65$. Из рис. 6, *а*, видно, что оптическая плотность композита Ag* – CuPc (кривая *3*) в спектральном диапазоне $\lambda \sim 600$–700 нм ненамного превышает оптическую плотность монослоя Ag*, а максимум полосы ППРП для монослоя Ag* попадает в область максимального поглощения CuPc. Это приводит к существенному ослаблению полосы ППРП, что маскирует эффект усиления поглощения органического полупроводника. В результате оптическая плотность в разностном спектре ($D_{\text{Ag* – CuPc}} - D_{\text{Ag*}}$) композита Ag* – CuPc и монослоя Ag* меньше, чем у чистой пленки CuPc (см. рис. 6, *б*).

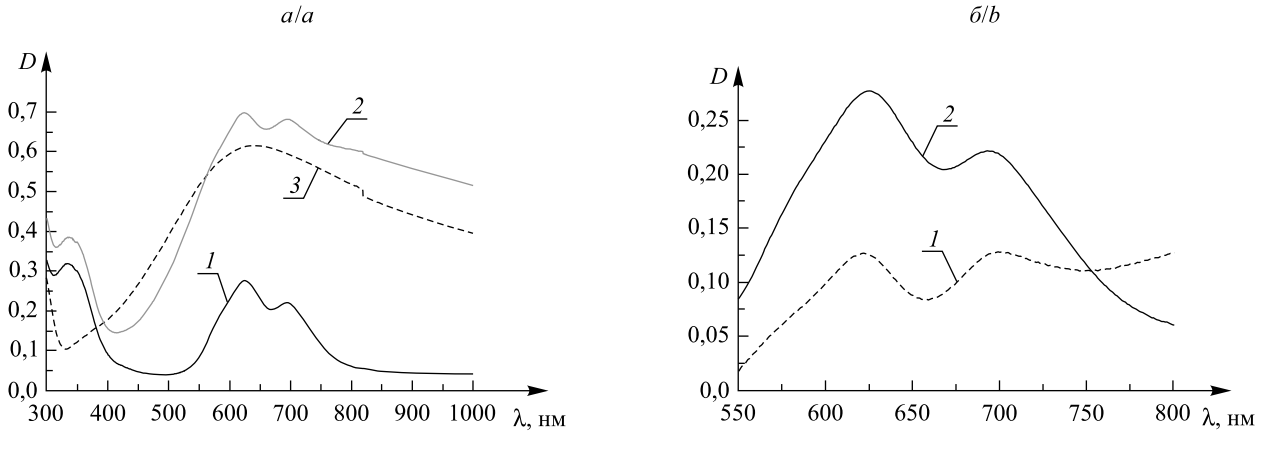


Рис. 6. Оптическая плотность: *а* – пленки CuPc (*1*), композита Ag* – CuPc (*2*) и монослоя Ag* (*3*); CuPc – *l* ~ 25 нм; Ag* – ППМ ~$8{,}3 \cdot 10^{-6}$ г/см^2; $d_{\text{ср}} \sim 15$ нм; $\eta \sim 0{,}65$; *б* – разностный спектр ($D_{\text{Ag* – CuPc}} - D_{\text{Ag*}}$) композита Ag* – CuPc и монослоя Ag* (*1*) и оптическая плотность пленки CuPc толщиной ~25 нм (*2*); Ag* – ППМ ~$8{,}3 \cdot 10^{-6}$ г/см^2; $d_{\text{ср}} \sim 15$ нм; $\eta \sim 0{,}65$

Fig. 6. Optical density: *a* – of the CuPc film (*1*), the Ag* – CuPc composite (*2*) and the Ag* monolayer (*3*); CuPc – *l* ~ 25 nm; Ag* – MSD ~$8.3 \cdot 10^{-6}$ g/cm^2; $d_{\text{m}} \sim 15$ nm; $\eta \sim 0.65$; *b* – differential spectrum ($D_{\text{Ag* – CuPc}} - D_{\text{Ag*}}$) of the Ag* – CuPc composite and the Ag* monolayer (*1*), as well as the optical density of the CuPc film of the thickness ~25 nm (*2*); Ag* – MSD ~$8.3 \cdot 10^{-6}$ g/cm^2; $d_{\text{m}} \sim 15$ nm; $\eta \sim 0.65$

На рис. 7, *а* (кривая *1*), представлен спектр оптической плотности пленки CuPc толщиной ~7 нм. На рис. 7, *а*, кривая *2* соответствует композиту, содержащему такую же по толщине пленку CuPc, контактирующую с монослоем наночастиц Ag со средним размером частиц $d_{ср}$ ~ 5 нм и η ~ 0,4–0,45. На рис. 7, *а*, кривая *3* является спектральной характеристикой пленки CuPc толщиной ~ 7 нм, обрамленной с обеих сторон монослоями Ag с такими же конструктивными параметрами. Сравнивая на рис. 7, *а*, кривые *1–3*, можно отметить, что наличие плазмонных наночастиц в композите приводит к значительному увеличению оптической плотности гибридной системы по сравнению с простым аддитивным сложением оптических плотностей компонентов. Разностные спектры оптической плотности ($D_{Ag-CuPc} - D_{Ag}$) и ($D_{Ag-CuPc-Ag} - D_{2Ag}$) для систем Ag – CuPc и Ag – CuPc – Ag в спектральном диапазоне λ > 550 нм приведены на рис. 7, *б* (кривые *2* и *3* соответственно). Из рис. 7, *б*, видно, что для пленки CuPc, расположенной в композите Ag – CuPc – Ag, достигается более высокое эффективное поглощение по сравнению с пленкой CuPc, расположенной в композите Ag – CuPc и контактирующей с одним монослоем Ag.

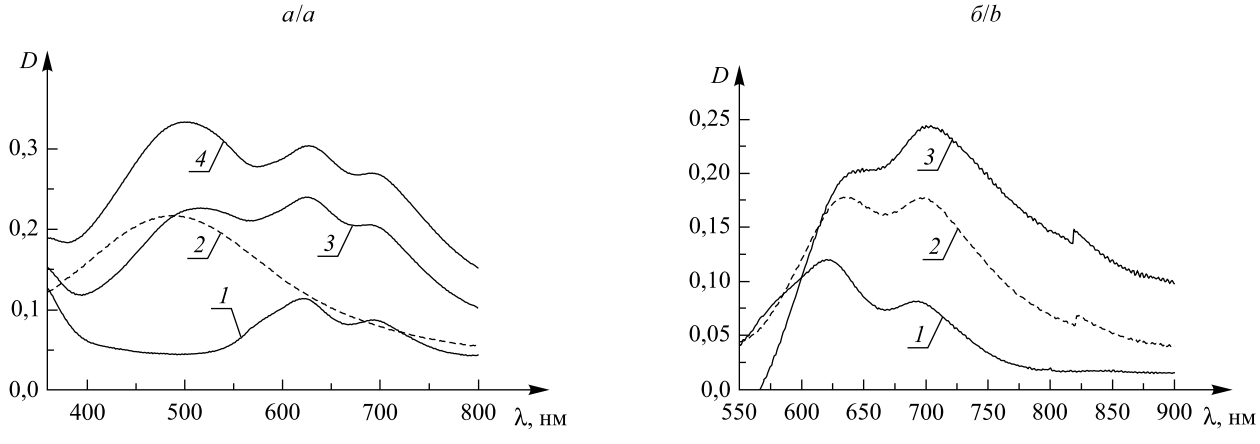


Рис. 7. Оптическая плотность: *а* – пленки CuPc (*1*), монослоя Ag (*2*), композитов Ag – CuPc (*3*) и Ag – CuPc – Ag (*4*); CuPc – *l* ~ 7 нм; Ag – $d_{ср}$ ~ 5 нм; η ~ 0,4–0,45; *б* – пленки CuPc толщиной ~ 7 нм (*1*) и разностные спектры ($D_{Ag-CuPc} - D_{Ag}$) (*2*) и ($D_{Ag-CuPc-Ag} - D_{2Ag}$) (*3*) соответствующих гибридных систем и плазмонных монослоев; CuPc – *l* ~ 7 нм; Ag – $d_{ср}$ ~ 5 нм; η ~ 0,4–0,45

Fig. 7. Optical density: *a* – of the CuPc film (*1*), the Ag monolayer (*2*), the Ag – CuPc (*3*) and Ag – CuPc – Ag (*4*) composites; CuPc – *l* ~ 7 nm; Ag – d_m ~ 5 nm; η ~ 0.4–0.45; *b* – optical density of the CuPc film of the thickness ~ 7 nm (*1*) and the differential spectra ($D_{Ag-CuPc} - D_{Ag}$) (*2*) and ($D_{Ag-CuPc-Ag} - D_{2Ag}$) (*3*) of the corresponding hybrid systems and plasmonic monolayeres; CuPc – *l* ~ 7 nm; Ag – d_m ~ 5 nm; η ~ 0.4–0.45

Для тонкой пленки CuPc, граничащей с двумя монослоями Ag, в области длинноволновых полос электронного поглощения увеличение эффективного поглощения составляет более 100 % по сравнению с чистой пленкой CuPc такой же толщины. Данный результат обусловлен тем, что в композите Ag – CuPc – Ag подсветка локальным полем осуществляется с обеих сторон органической пленки и весь объем CuPc попадает в зону усиления локального поля вблизи поверхности плазмонных наночастиц. Кроме этого, в данных композитах достигается достаточно хорошее спектральное разделение полос ППРП и полос поглощения фталоцианина меди, в отличие от систем Ag^* – CuPc, где такое разделение не обеспечивается.

Увеличение количества плазмонных слоев в гибридной системе приводит к уменьшению эффективного ослабления. Это может быть связано со снижением интенсивности излучения, приходящего на каждый последующий монослой Ag, из-за его ослабления предыдущими элементами композита. Вследствие такого экранирования формируемые третьим, четвертым и последующими монослоями Ag локальные поля оказываются менее сильными, чем локальные поля, формируемые первым и вторым плазмонными монослоями. К такому же эффекту (уменьшению эффективного ослабления) приводит увеличение толщины органической пленки в композите.

Заключение

Проведенные с использованием теории Ми для поглощающих матриц расчеты свидетельствуют о том, что наличие поглощения в матрице обусловливает изменение картины распределения «горячих пятен» вблизи поверхности плазмонной частицы. Экспериментально показано, что присутствие наночастиц

серебра в композите наиболее значительно усиливает эффективное поглощение наноструктурированной пленки органического полупроводника в длинноволновом относительно полосы ППРП спектральном диапазоне и достигает наибольших значений при сопоставимости толщин органических пленок с размерами плазмонных наночастиц. Оптимизация условий для модификации спектров поглощения органической компоненты за счет проявления ближнепольных взаимодействий может достигаться изменением топологии гибридного композита, например использованием сэндвич-конфигурации, когда подсветка тонких органических пленок локальным полем осуществляется с обеих сторон их поверхностей. Полученные результаты могут быть полезными для применений в нанофотонике и фотовольтаике.

Библиографические ссылки

1. *Farges J.-P.* Organic conductors. Fundamentals and applications. New York : Marcel Dekker, 1994.

2. *Bohren C., Huffman D*. Absorption and Scattering of Light by Small Particles. New York : Wiley, 1983.

3. *Dynich R. A., Ponyavina A. N.* Effect of metallic nanoparticle sizes on the local field near their surface // J. Appl. Spectr. 2008. Vol. 75, issue 6. P. 832–838. DOI: 10.1007/s10812-009-9125-y.

4. *Mishchenko M. I., Travis L. D., Lacis A. A.* Scattering, absorption and emission of light by small particles. Cambridge : Univ. Press, 2002.

5. *Astaf'eva L. G., Babenko V. A., Kuzmin V. A.* Electromagnetical scattering in disperse media: Ingomogeneous and anisotropic particles. Berlin : Springer-Prexis, 2003.

6. *Messinger B. J., Von Raben K. U., Chang R. K., et al.* Local fields atthe surface of noble-metal microsphere // Phys. Rev. B. 1981. Vol. 24, issue 2. P. 649–657. DOI: 10.1103/PhysRevB.24.649.

7. *Palik E. D.* Handbook of optical constants of solid II. San Diego : Academic Press, 1991.

8. *Kreibig U., Vollmer M.* Optical properties of metal clusters. Berlin : Springer, 1995.

9. *Kachan S. M., Ponyavina A. N.* Spectral properties of close-packed monolayers consisting of metal nanospheres // J. Phys.: Condens. Matter. 2002. Vol. 14, № 1. P. 103–111. DOI: 10.1088/0953-8984/14/1/309.

10. *Katarkevich V. M., Rubinov A. N., Efendiev T. Sh.* Highly efficient volume hologram multiplexing in thick dye-doped jelly-like gelatin // Opt. Lett. 2014. Vol. 39, issue 15. P. 4627–4630. DOI: 10.1364/OL.39.004627.

11. *Бахшиев Н. Г.* Спектроскопия межмолекулярных взаимодействий. Л. : Наука, 1972.

12. *Leznoff C. C., Lever A. B. P.* Phthalocyanines: properties and applications : in 4 vols. Weinheim : VCH, 1996. Vol. 4.

13. *Hohnholza D., Steinbrecherb S., Hanacka M.* Applications of phthalocyanines in organic light emitting devices // J. Mol. Struct. 2000. Vol. 521. P. 231–237.

14. *Itoh Eiji, Ohmori Yuji, Miyairi Keiichi.* Photovoltaic properties of organic $p - n$ junction devices consisting of phthalocyanine and *n*-type porphyrin deposited on an *n*-type TiO_2 layer // Jpn. J. Appl. Phys. 2004. Vol. 43, № 2. P. 817–821. DOI: 10.1143/JJAP.43.817.

15. *Van Flassen E., Kerp H.* Explanation of the low oxigen sensitivity of thin film phthalocyanine gas sensors // Sens. Actuators B. 2003. Vol. 88. P. 329–333.

16. *Cheng W.-D., Wu D.-S., Zhang H., et al.* Electronic structure and spectrum third-order nonlinear optics of the metal phthalocyanines Pc*M* (*M* = Zn, Ni, Ti) // Phys. Rev. B. 2001. Vol. 64, issue 12. P. 125109–125111. DOI: 10.1103/PhysRevB.64.125109.

17. *Замковец А. Д., Понявина А. Н., Баран Л. В.* Плазмонный резонанс в планарных слоистых наноструктурах серебро-фталоцианин никеля // Изв. НАН Беларуси. Сер. физ.-матем. наук. 2016. № 4. С. 98–105.

18. *Zamkovets A. D., Ponyavina A. N.* Near-field effects on spectral properties of layered silver-copper phthalocyanine nanocomposites // J. Appl. Spectrosc. 2013. Vol. 79, issue 6. P. 908–913. DOI: 10.1007/s10812-013-9693-8.

19. *Stenzel O., Stendal A., Voigtsberger K., et al.* Enhancement of the photovoltaic conversion efficiency of copper phthalocyanine thin film devices by incorporation of metal clusters // Solar Energy Mater. and Solar Cells. 1995. Vol. 37, issues 3–4. P. 337–348. DOI: 10.1016/0927-0248(95)00027-5.

20. *Aristova I., Vilkov O., Pietzsch A., et al.* Morphology and electronic properties of hybrid organic-inorganic system: Ag nanoparticles embedded into CuPc matrix // Advanc. in Mater. Phys. and Chem. 2012. Vol. 2, № 4B. P. 60–62. DOI: 10.4236/ampc.2012.24B017.

21. *Hayashi S., Kozaru K., Yamamoto K.* Show more Enhancement of photoelectric conversion efficiency by surface plasmon excitation: A test with an organic solar cell // Solid State Communic. 1991. Vol. 79, issue 9. P. 763–767.

References

1. Farges J.-P. Organic conductors. Fundamentals and applications. New York : Marcel Dekker, 1994.

2. Bohren C., Huffman D. Absorption and Scattering of Light by Small Particles. New York : Wiley, 1983.

3. Dynich R. A., Ponyavina A. N. Effect of metallic nanoparticle sizes on the local field near their surface. *J. Appl. Spectr.* 2008. Vol. 75, issue 6. P. 832–838. DOI: 10.1007/s10812-009-9125-y.

4. Mishchenko M. I., Travis L. D., Lacis A. A. Scattering, absorption and emission of light by small particles. Cambridge : Univ. Press, 2002.

5. Astaf'eva L. G., Babenko V. A., Kuzmin V. A. Electromagnetical scattering in disperse media: Ingomogeneous and anisotropic particles. Berlin : Springer-Prexis, 2003.

6. Messinger B. J., Von Raben K. U., Chang R. K., et al. Local fields atthe surface of noble-metal microsphere. *Phys. Rev. B.* 1981. Vol. 24, issue 2. P. 649–657. DOI: 10.1103/PhysRevB.24.649.

7. Palik E. D. Handbook of optical constants of solid II. San Diego : Academic Press, 1991.

8. Kreibig U., Vollmer M. Optical properties of metal clusters. Berlin : Springer, 1995.

9. Kachan S. M., Ponyavina A. N. Spectral properties of close-packed monolayers consisting of metal nanospheres. *J. Phys.: Condens. Matter.* 2002. Vol. 14, No. 1. P. 103–111. DOI: 10.1088/0953-8984/14/1/309.

10. Katarkevich V. M., Rubinov A. N., Efendiev T. Sh. Highly efficient volume hologram multiplexing in thick dye-doped jelly-like gelatin. *Opt. Lett.* 2014. Vol. 39, issue 15. P. 4627–4630. DOI: 10.1364/OL.39.004627.

11. Bakhshiev N. G. Spektroskopiya mezhmolekulyarnykh vzaimodeistvii [Spectroscopy of Intermolecular Interactions]. Leningrad : Nauka, 1972 (in Russ.).

12. Leznoff C. C., Lever A. B. P. Phthalocyanines: properties and applications : in 4 vols. Weinheim : VCH, 1996. Vol. 4.

13. Hohnholza D., Steinbrecherb S., Hanacka M. Applications of phthalocyanines in organic light emitting devices. *J. Mol. Struct.* 2000. Vol. 521. P. 231–237.

14. Itoh Eiji, Ohmori Yuji, Miyairi Keiichi. Photovoltaic properties of organic $p - n$ junction devices consisting of phthalocyanine and *n*-type porphyrin deposited on an *n*-type TiO_2 layer. *Jpn. J. Appl. Phys.* 2004. Vol. 43, No. 2. P. 817–821. DOI: 10.1143/JJAP.43.817.

15. Van Flassen E., Kerp H. Explanation of the low oxigen sensitivity of thin film phthalocyanine gas sensors. *Sens. Actuators B.* 2003. Vol. 88. P. 329–333.

16. Cheng W.-D., Wu D.-S., Zhang H., et al. Electronic structure and spectrum third-order nonlinear optics of the metal phthalocyanines Pc*M* (*M* = Zn, Ni, Ti). *Phys. Rev. B.* 2001. Vol. 64, issue 12. P. 125109–125111. DOI: 10.1103/PhysRevB.64.125109.

17. Zamkovets A. D., Ponyavina A. N., Baran L. V. [Plasmon resonanse in the planar layered silver-nickel phthalocyanine nanostructures]. *Proc. of the Natl. Acad. of Sci. of Belarus. Phys.-math. ser.* 2016. No. 4. P. 98–105 (in Russ.).

18. Zamkovets A. D., Ponyavina A. N. Near-field effects on spectral properties of layered silver-copper phthalocyanine nanocomposites. *J. Appl. Spectrosc.* 2013. Vol. 79, issue 6. P. 908–913. DOI: 10.1007/s10812-013-9693-8.

19. Stenzel O., Stendal A., Voigtsberger K., et al. Enhancement of the photovoltaic conversion efficiency of copper phthalocyanine thin film devices by incorporation of metal clusters. *Solar Energy Mater. and Solar Cells.* 1995. Vol. 37, issues 3–4. P. 337–348. DOI: 10.1016/0927-0248(95)00027-5.

20. Aristova I., Vilkov O., Pietzsch A., et al. Morphology and electronic properties of hybrid organic-inorganic system: Ag nanoparticles embedded into CuPc matrix. *Advanc. in Mater. Phys. and Chem.* 2012. Vol. 2, No. 4B. P. 60–62. DOI: 10.4236/ampc.2012.24B017.

21. Hayashi S., Kozaru K., Yamamoto K. Show more Enhancement of photoelectric conversion efficiency by surface plasmon excitation: A test with an organic solar cell. *Solid State Communic.* 1991. Vol. 79, issue 9. P. 763–767.

Статья поступила в редколлегию 21.12.2017.
Received by editorial board 21.12.2017.

УДК 535.016

ГЕНЕРАЦИЯ БЕССЕЛЕВЫХ ПЛАЗМОН-ПОЛЯРИТОНОВ В МЕТАМАТЕРИАЛАХ

***НГУЕН ФАМ КУИНЬ АНЬ*[1)], *С. Н. КУРИЛКИНА*[1), 2)]**

[1)]*Белорусский государственный университет,*
пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Беларусь
[2)]*Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси,*
пр. Независимости, 68-2, 220072, г. Минск, Беларусь

Развита теория генерации бесселевых плазмон-поляритонов в структуре, содержащей слой одноосного метаматериала, отделенного от подложки внешней среды дополнительными изотропными диэлектрическими слоями. Получено и проанализировано дисперсионное уравнение для случаев симметричной и асимметричной структур. Показано, что если гиперболический метаматериал обладает экстремально большой анизотропией, то в структуре возможна генерация бесселева плазмон-поляритона, продольная компонента вектора электрической напряженности которого монотонно возрастает внутри слоя метаматериала. Установлена зависимость условий возбуждения бесселевых плазмон-поляритонов от толщины дополнительных слоев структуры. Показано, что внедрение дополнительного (промежуточного или защитного) слоя в структуру обусловливает уменьшение центрального максимума бесселева плазмон-поляритона, при этом оно оказывается тем более заметно, чем толще указанный слой. Полученные результаты могут быть использованы при разработке новых приборов и устройств тестирования поверхностей, основанных на применении бесселевых плазмон-поляритонов.

Ключевые слова: бесселев плазмон-поляритон; метаматериал; металлодиэлектрическая среда; диэлектрическая проницаемость; анизотропия.

GENERATION OF BESSEL PLASMON-POLARITONS IN METAMATERIALS

***NGUYEN PHAM QUYNH ANH*[a], *S. N. KURILKINA*[a, b]**

[a]*Belarusian State University, 4 Niezaliežnasci Avenue, Minsk 220030, Belarus*
[b]*B. I. Stepanov Institute of Physics, National Academy of Sciences of Belarus,*
68-2 Niezaliežnasci Avenue, Minsk 220072, Belarus
Corresponding author: S. N. Kurilkina (s.kurilkina@ifanbel.bas-net.by)

In the paper it is developed the theory of Bessel plasmon-polaritons generation in a structure containing a layer of a uniaxial metamaterial separated from the substrate and the external medium by additional isotropic dielectric layers. The dispersion equation for the cases of symmetric and asymmetric structures is obtained and analyzed. It is shown that if a hyperbolic metamaterial possesses an extremely large anisotropy, the Bessel plasmon-polariton generation in the

Образец цитирования:
Нгуен Фам Куинь Ань, Курилкина С. Н. Генерация бесселевых плазмон-поляритонов в метаматериалах // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2018. № 2. С. 35–45.

For citation:
Nguyen Pham Quynh Anh, Kurilkina S. N. Generation of Bessel plasmon-polaritons in metamaterials. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2018. No. 2. P. 35–45 (in Russ.).

Авторы:
Нгуен Фам Куинь Ань – аспирант кафедры физической оптики и прикладной информатики физического факультета. Научный руководитель – С. Н. Курилкина.
Светлана Николаевна Курилкина – доктор физико-математических наук, профессор; профессор кафедры физической оптики и прикладной информатики физического факультета[1)]; главный научный сотрудник[2)].

Authors:
Nguyen Pham Quynh Anh, postgraduate student at the department of physical optics and applied informatics, faculty of physics.
Svetlana N. Kurilkina, doctor of science (physics and mathematics), full professor; professor at the department of physical optics and applied informatics, faculty of physics[a]; chief researcher[b].
s.kurilkina@ifanbel.bas-net.by

structure is possible for which the longitudinal component of the electric vector increases monotonically inside the metamaterial layer. The dependence of the excitation conditions of Bessel plasmon-polaritons on the thickness of additional layers of the structure is established. It is shown that the implementation of an additional (intermediate or protective) layer in the structure causes a decrease of the central maximum of the Bessel-plasmon-polariton. Meanwhile, it becomes more noticeable for the thick layers. The obtained results can be used while elaborating new devices for surface testing.

Key words: Bessel plasmon-polariton; metamaterial; metal-dielectric medium; dielectric permittivity; anisotropy.

Введение

В последнее время внимание исследователей привлекает новый класс композитных сред – метаматериалов (ММ), обладающих уникальными свойствами [1–3] и вследствие этого представляющих интерес для управления излучением, получения изображений со сверхвысоким разрешением, в литографии [4]. Одним из видов ММ являются гиперболические метаматериалы (ГММ), оптические свойства которых в приближении эффективной среды описываются диагональным тензором диэлектрической проницаемости $\varepsilon = \mathrm{diag}\{\varepsilon_t, \varepsilon_t, \varepsilon_l\}$, имеющим главные значения (поперечную ε_t и продольную ε_l проницаемости), различающиеся знаком [5]. Это обусловливает появление гиперболической (а не эллиптической, наблюдаемой у обычных диэлектриков) дисперсии. Существуют два типа ГММ: а) тип I ($\varepsilon_l < 0$, $\varepsilon_t > 0$), характеризуемый дисперсионной поверхностью, представляющей собой двухполостный гиперболоид; б) тип II ($\varepsilon_l > 0$, $\varepsilon_t < 0$), дисперсионная поверхность для которого является однополостным гиперболоидом.

В 1987 г. Дж. Дурнин предложил новый тип волн, получивших название бесселевых световых пучков (БСП). Их особенностями являются бездифракционная природа (значительно меньшая дифракционная расходимость приосевой области в сравнении с традиционными, например гауссовыми, пучками) и способность к самовосстановлению волнового фронта после препятствий [6; 7]. Поперечный профиль амплитуды этих пучков описывается бесселевой функцией первого рода. В среде пространственных частот БСП можно рассматривать как суперпозицию плоских волн с волновыми векторами, расположенными на конической поверхности. Особенности взаимодействия бесселевых световых пучков с кристаллами и диэлектрическими структурами рассмотрены в работах [8–12]. Одна из возможностей использования преимуществ БСП для микроскопии заключается в создании бесселевых плазмон-поляритонов (БПП) – квазибездифракционных световых полей, формируемых на границе сред с различающимися по знаку диэлектрическими проницаемостями. В работах [13–15] найдены условия существования и изучены свойства БПП, генерируемых в изотропной металлической пленке. Представляет интерес исследование возможности генерации БПП в метаматериалах с экстремально большой анизотропией. Решение данной проблемы будет реализовано в настоящей работе.

Условие генерации бесселевых плазмон-поляритонов в структуре, содержащей слой метаматериала

Рассмотрим гиперболический метаматериал на основе наноструктуры, образованной чередующимися слоями металла и диэлектрика с проницаемостями и толщинами ε_m, d_m и ε_d, d_d соответственно. При этом диэлектрическая проницаемость металла описывается модифицированной формулой Друде

$$\varepsilon_m(\omega) = \varepsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega\Gamma} = \varepsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \Gamma^2} + \frac{i\omega_p^2\Gamma}{\left[\omega\left(\omega^2 + \Gamma^2\right)\right]}, \quad (1)$$

где $\omega = \dfrac{2\pi c}{\lambda}$ – циклическая частота; ω_p – плазменная частота; ε_∞ – константа; $\Gamma = \dfrac{V_F}{l}$ – константа затухания; V_F – скорость Ферми; l – длина свободного пробега электронов в объемном металле. Для серебра, например, имеем $\varepsilon_\infty = 5$, $\omega_p = 14 \cdot 10^{15}$ с$^{-1}$, $\Gamma = 32 \cdot 10^{12}$ с$^{-1}$, $V_F = 1{,}4 \cdot 10^6$ мс$^{-1}$ [16].

При малой толщине каждого слоя в приближении эффективной среды данную структуру можно рассматривать как одноосную среду, диэлектрические свойства которой описываются тензором диэлектрической проницаемости $\hat{\varepsilon} = \mathrm{diag}\{\varepsilon_t, \varepsilon_t, \varepsilon_l\}$:

$$\varepsilon_t = (1 - f)\varepsilon_d + f\varepsilon_m, \quad \varepsilon_l^{-1} = \frac{1 - f}{\varepsilon_d} + \frac{f}{\varepsilon_m}, \quad (2)$$

где $f = \dfrac{d_{\mathrm{m}}}{d_{\mathrm{m}} + d_{\mathrm{d}}}$ – фактор заполнения (объемная доля металла в наноструктуре); ε_{m} определяется формулой (1).

Используя выражения (2), проанализируем возможность реализации ГММ на основе наноструктуры ITO – Ag при $f = 0{,}5$ ($d_{\mathrm{m}} = d_{\mathrm{d}} = 20$ нм). Как видно из рис. 1, данная структура проявляет свойства ГММ типа I в спектральном диапазоне 306 нм $< \lambda_{\mathrm{I}} <$ 414 нм и типа II – при $\lambda_{\mathrm{II}} >$ 414 нм. Отметим, что на длине волны $\lambda_S = 414$ нм гиперболический метаматериал обладает экстремально большой анизотропией, когда $\mathrm{Re}(\varepsilon_{\mathrm{t}}) \approx 0$, $\mathrm{Re}(\varepsilon_{\mathrm{l}}^{-1}) \approx 0$.

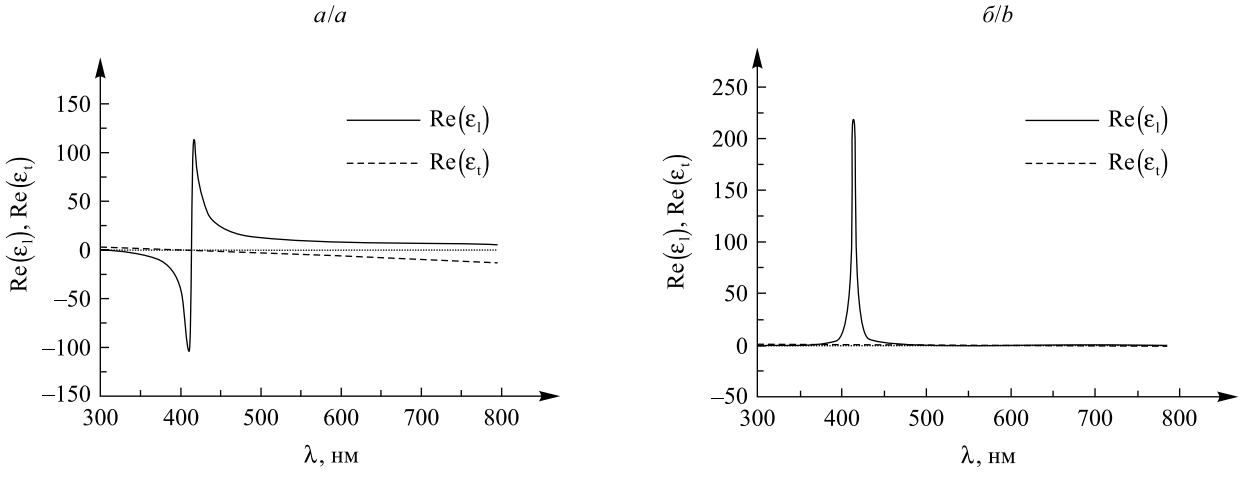


Рис. 1. Спектральные зависимости действительной (*а*) и мнимой (*б*) частей продольной (сплошная кривая) и поперечной (пунктирная кривая) диэлектрических проницаемостей металлодиэлектрической слоистой структуры ITO – Ag с толщиной диэлектрических и металлических слоев 20 нм

Fig. 1. Spectral dependences of real (*a*) and imaginal (*b*) parts of longitudinal (solid line) and transversal (dashed line) dielectric permittivity of metal-dielectric layered structure ITO – Ag. Thickness of dielectric and metal layers is 20 nm

Положим далее, что слой гиперболического метаматериала с толщиной L_{c} расположен между двумя диэлектрическими слоями – промежуточным и защитным с толщиной L_1, L_2 соответственно, которые отделяют его от диэлектрической подложки и внешней диэлектрической среды (рис. 2). Будем использовать цилиндрическую систему координат, при этом выберем ее таким образом, чтобы ее начало ($z = 0$) было расположено на границе раздела подложка – промежуточный слой (см. рис. 2).

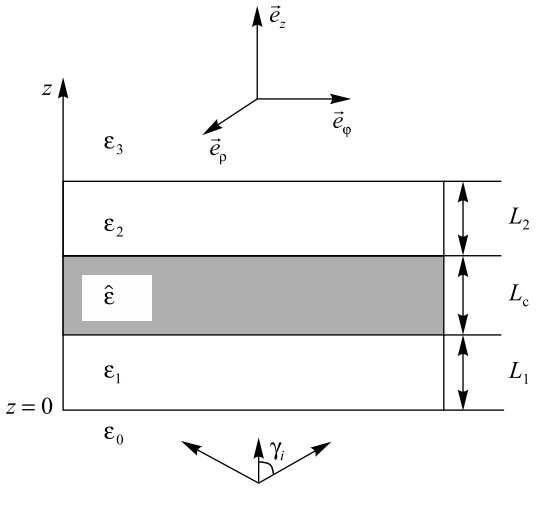


Рис. 2. Слоистая структура: подложка ε_0 – промежуточный диэлектрический слой ε_1 – слой ГММ – защитный диэлектрический слой ε_2 – внешняя диэлектрическая среда ε_3

Fig. 2. Layered structure: substrate ε_0 – intermediate dielectric layer ε_1 – HMM layer – protective dielectric layer ε_2 – external dielectric medium ε_3

Из уравнений Максвелла следуют выражения для продольной (z), радиальной (ρ) и азимутальной (φ) компонент векторов электрической $\vec{E}(R)$ и магнитной $\vec{H}(R)$ напряженности бесселева светового пучка e-типа, распространяющегося вдоль оси z в одноосной среде:

$$E_\rho^{\mathrm{e}} = i\frac{k_{ze}}{\varepsilon_{\mathrm{t}}}J_m'(q\rho),\ E_\varphi^{\mathrm{e}} = -\frac{k_{ze}}{\varepsilon_{\mathrm{t}}}\frac{m}{q\rho}J_m(q\rho),\ E_z^{\mathrm{e}} = \frac{q}{\varepsilon_{\mathrm{l}}}J_m(q\rho),$$
$$H_\rho^{\mathrm{e}} = k_0\frac{m}{q\rho}J_m(q\rho),\ H_\varphi^{\mathrm{e}} = ik_0J_m'(q\rho),\ H_z^{\mathrm{e}} = 0, \tag{3}$$

где общий фазовый множитель $\exp\left[i\left(k_{ze}z + m\varphi\right)\right]$ опущен; $k_0 = \frac{2\pi}{\lambda}$; q и k_{ze} – поперечная и продольная компоненты волновых векторов, формирующих БСП, соответственно; $J_m(q\rho)$, $J_m'(q\rho) = \frac{\partial J_m(q\rho)}{\partial(q\rho)}$ – функция Бесселя m-го порядка и ее производная; m – индекс; $R = (\rho, \varphi, z)$ – цилиндрическая система координат. При этом

$$k_{ze} = \left[k_0^2\varepsilon_{\mathrm{t}} - \frac{\varepsilon_{\mathrm{t}}}{\varepsilon_{\mathrm{l}}}q^2\right]^{1/2}. \tag{4}$$

Выражения для ТМ-поляризованных БСП, распространяющихся в изотропной среде, могут быть получены из (3) с учетом равенства продольной и поперечной проницаемостей $\varepsilon_{\mathrm{t}} = \varepsilon_{\mathrm{l}}$.

Векторы электрической $\vec{E}(R)$ и магнитной $\vec{H}(R)$ напряженности внутри подложки ε_0 и внешней диэлектрической среды ε_3 могут быть представлены в виде

$$\vec{E}_0(R) = \vec{E}_0^{\mathrm{tr}}(R) + \vec{E}_0^{\mathrm{l}}(R),\ \vec{E}_0^{\mathrm{l}}(R) = A_{\mathrm{inc}}\frac{q}{k_0\sqrt{\varepsilon_0}}\exp i\left[m\varphi - k_{z0}z\right]J_m(q\rho)\vec{e}_z,$$
$$\vec{E}_0^{\mathrm{tr}}(R) = -\frac{iA_{\mathrm{inc}}}{\sqrt{2}}\frac{k_{z0}}{k_0\sqrt{\varepsilon_0}}\exp i\left[(m-1)\varphi - k_{z0}z\right]\left[J_{m-1}(q\rho)\vec{e}_+ - J_{m+1}(q\rho)\exp(2i\varphi)\vec{e}_-\right].$$
$$\vec{H}_0(R) = \vec{H}_0^{\mathrm{l}}(R) + \vec{H}_0^{\mathrm{tr}}(R),\ \vec{H}_0^{\mathrm{l}}(R) = 0, \tag{5}$$
$$\vec{H}_0^{\mathrm{tr}}(R) = \frac{A_{\mathrm{inc}}}{\sqrt{2}}\sqrt{\varepsilon_0}\exp i\left[(m-1)\varphi - k_{z0}z\right]\left[J_{m-1}(q\rho)\vec{e}_+ + J_{m+1}(q\rho)\exp(2i\varphi)\vec{e}_-\right].$$

$$\vec{E}_3(R) = \vec{E}_3^{\mathrm{tr}}(R) + \vec{E}_3^{\mathrm{l}}(R),\ \vec{E}_3^{\mathrm{l}}(R) =$$
$$= A_{\mathrm{inc}}\frac{q}{k_0\sqrt{\varepsilon_3}}t\exp i\left[m\varphi + k_{z3}\left(z - L_1 - L_{\mathrm{c}} - L_2\right)\right]J_m(q\rho)\vec{e}_z,$$
$$\vec{E}_3^{\mathrm{tr}}(R) = \frac{iA_{\mathrm{inc}}}{\sqrt{2}}\frac{k_{z3}}{k_0\sqrt{\varepsilon_3}}t\exp i\left[(m-1)\varphi + k_{z3}\left(z - L_1 - L_{\mathrm{c}} - L_2\right)\right]\times$$
$$\times\left[J_{m-1}(q\rho)\vec{e}_+ - J_{m+1}(q\rho)\exp(2i\varphi)\vec{e}_-\right].$$
$$\vec{H}_3(R) = \vec{H}_3^{\mathrm{l}}(R) + \vec{H}_3^{\mathrm{tr}}(R),\ \vec{H}_3^{\mathrm{l}}(R) = 0, \tag{6}$$
$$\vec{H}_3^{\mathrm{tr}}(R) = \frac{A_{\mathrm{inc}}}{\sqrt{2}}t\sqrt{\varepsilon_3}\exp i\left[(m-1)\varphi + k_{z3}\left(z - L_1 - L_{\mathrm{c}} - L_2\right)\right]\times$$
$$\times\left[J_{m-1}(q\rho)\vec{e}_+ + J_{m+1}(q\rho)\exp(2i\varphi)\vec{e}_-\right],$$

где символы «tr» и «l» обозначают поперечную и продольную компоненты электрического (магнитного) вектора соответственно; t – коэффициент пропускания слоистой структуры; $k_{z0,3} = \left[k_0^2\varepsilon_{0,3} - q^2\right]^{1/2}$ –

продольные компоненты волнового вектора (проекция волнового вектора на ось z) в средах ε_0 и ε_3 соответственно. Векторы электрической и магнитной напряженности внутри промежуточного и защитного слоев определяются выражениями:

$$\vec{E}_{1,2}(R)=\vec{E}^{\,\mathrm{tr}}_{1,2}(R)+\vec{E}^{\,\mathrm{l}}_{1,2}(R),\ \vec{E}^{\,\mathrm{l}}_{1,2}(R)=\left(\vec{E}^{\,\mathrm{l}}_{1,2}\right)^{\mathrm{f}}+\left(\vec{E}^{\,\mathrm{l}}_{1,2}\right)^{\mathrm{b}},\ \vec{E}^{\,\mathrm{tr}}_{1,2}(R)=\left(\vec{E}^{\,\mathrm{tr}}_{1,2}\right)^{\mathrm{tr}}+\left(\vec{E}^{\,\mathrm{tr}}_{1,2}\right)^{\mathrm{b}},$$

$$\left(\vec{E}^{\,\mathrm{l}}_{1,2}\right)^{\mathrm{f,\,b}}=A_{\mathrm{inc}}\frac{q}{k_0\sqrt{\varepsilon_{1,2}}}s^{\mathrm{f,\,b}}_{1,2}\exp i\left[m\varphi\pm k_{z1,2}z\right]J_m(q\rho)\vec{e}_z,$$

$$\left(\vec{E}^{\,\mathrm{tr}}_{1,2}(R)\right)^{\mathrm{f,\,b}}=\pm\frac{iA_{\mathrm{inc}}}{\sqrt{2}}\frac{k_{z1,2}}{k_0\sqrt{\varepsilon_{1,2}}}s^{\mathrm{f,\,b}}_{1,2}\exp i\left[(m-1)\varphi\pm k_{z1,2}z\right]\times$$

$$\times\left[J_{m-1}(q\rho)\vec{e}_{+}-J_{m+1}(q\rho)\exp(2i\varphi)\vec{e}_{-}\right]. \qquad (7)$$

$$\vec{H}_{1,2}(R)^{\mathrm{f,\,b}}=\frac{A_{\mathrm{inc}}}{\sqrt{2}}\sqrt{\varepsilon_{1,2}}s^{\mathrm{f,\,b}}_{1,2}\exp i\left[(m-1)\varphi\pm k_{z1,2}z\right]\times$$

$$\times\left[J_{m-1}(q\rho)\vec{e}_{+}+J_{m+1}(q\rho)\exp(2i\varphi)\vec{e}_{-}\right],$$

$$\vec{E}_{\mathrm{c}}(R)=\vec{E}^{\,\mathrm{tr}}_{\mathrm{c}}(R)+\vec{E}^{\,\mathrm{l}}_{\mathrm{c}}(R),\ \vec{E}^{\,\mathrm{l}}_{\mathrm{c}}(R)=\left(\vec{E}^{\,\mathrm{l}}_{\mathrm{c}}\right)^{\mathrm{f}}+\left(\vec{E}^{\,\mathrm{l}}_{\mathrm{c}}\right)^{\mathrm{b}},$$

$$\vec{E}^{\,\mathrm{tr}}_{\mathrm{c}}(R)=\left(\vec{E}^{\,\mathrm{tr}}_{\mathrm{c}}\right)^{f}+\left(\vec{E}^{\,\mathrm{tr}}_{\mathrm{c}}\right)^{\mathrm{b}},$$

$$\left(\vec{E}^{\,\mathrm{l}}_{\mathrm{c}}\right)^{\mathrm{f,\,b}}=A_{\mathrm{inc}}\frac{q}{\varepsilon_l}s^{\mathrm{f,\,b}}_{\mathrm{c}}\exp i\left[m\varphi\pm k_{z\mathrm{e}}z\right]J_m(q\rho)\vec{e}_z,$$

$$\left(\vec{E}^{\,\mathrm{tr}}_{\mathrm{c}}(R)\right)^{\mathrm{f,\,b}}=\pm\frac{iA_{\mathrm{inc}}}{\sqrt{2}}\frac{k_{z\mathrm{e}}}{\varepsilon_{\mathrm{t}}}s^{\mathrm{f,\,b}}_{\mathrm{c}}\exp i\left[(m-1)\varphi\pm k_{z\mathrm{e}}z\right]\times \qquad (8)$$

$$\times\left[J_{m-1}(q\rho)\vec{e}_{+}-J_{m+1}(q\rho)\exp(2i\varphi)\vec{e}_{-}\right].$$

$$\vec{H}_{\mathrm{c}}(R)^{\mathrm{f,\,b}}=\frac{A_{\mathrm{inc}}}{\sqrt{2}}k_0 s^{\mathrm{f,\,b}}_{\mathrm{c}}\exp i\left[(m-1)\varphi\pm k_{z\mathrm{e}}z\right]\times$$

$$\times\left[J_{m-1}(q\rho)\vec{e}_{+}+J_{m+1}(q\rho)\exp(2i\varphi)\vec{e}_{-}\right],$$

где $k_{z1,2}=\left[k_0^2\varepsilon_{1,2}-q^2\right]^{1/2}$ – z-компоненты волнового вектора в средах ε_1, ε_2 соответственно; $s^{\mathrm{f}}_{1,\mathrm{c},2}=\dfrac{A^{\mathrm{f}}_{1,\mathrm{c},2}}{A_{\mathrm{inc}}}$, $s^{\mathrm{b}}_{1,\mathrm{c},2}=\dfrac{A^{\mathrm{b}}_{1,\mathrm{c},2}}{A_{\mathrm{inc}}}$ – амплитудные коэффициенты для БСП, распространяющегося в прямом (вдоль оси z, обозначаются символом «f») и встречном ему направлениях (обозначаются символом «b») внутри каждого слоя; $k_{z\mathrm{e}}$ определяется формулой (4).

Из граничных условий с учетом (5)–(8) следует

$$t=\frac{e^{i\left(k_{z1}L_1+k_{z\mathrm{e}}L_{\mathrm{c}}+k_{z2}L_2\right)}t^{\mathrm{TM}}_{01}t^{\mathrm{TM}}_{1\mathrm{c}}t^{\mathrm{e}}_{\mathrm{c}2}t^{\mathrm{TM}}_{23}}{F}, \qquad (9)$$

$$F=1+e^{2ik_{z1}L_1}r^{\mathrm{TM}}_{01}r^{\mathrm{TM}}_{1\mathrm{c}}+e^{2i\left(k_{z1}L_1+k_{z\mathrm{e}}L_{\mathrm{c}}+k_{z2}L_2\right)}r^{\mathrm{TM}}_{01}r^{\mathrm{TM}}_{23}+e^{2i\left(k_{z2}L_2+k_{z\mathrm{e}}L_{\mathrm{c}}\right)}r^{\mathrm{TM}}_{1\mathrm{c}}r^{\mathrm{TM}}_{23}+$$

$$+e^{2i\left(k_{z1}L_1+k_{z\mathrm{e}}L_{\mathrm{c}}\right)}r^{\mathrm{TM}}_{01}r^{\mathrm{e}}_{\mathrm{c}2}+e^{2ik_{z\mathrm{e}}L_{\mathrm{c}}}r^{\mathrm{TM}}_{1\mathrm{c}}r^{\mathrm{e}}_{\mathrm{c}2}+e^{2ik_{z2}L_2}r^{\mathrm{TM}}_{23}r^{\mathrm{e}}_{\mathrm{c}2}+e^{2i\left(k_{z1}L_1+k_{z2}L_2\right)}r^{\mathrm{TM}}_{01}r^{\mathrm{TM}}_{1\mathrm{c}}r^{\mathrm{e}}_{\mathrm{c}2}r^{\mathrm{TM}}_{23}, \qquad (10)$$

$$s^{\mathrm{f}}_{1,2}=\frac{t^{\mathrm{TM,\,e}}_{0\ 1,2}}{1+r^{\mathrm{TM,\,e}}_{0\ 1,2}r^{\mathrm{TM,\,e}}_{1,2\ 3}\exp\left(2ik_{z1,2}L_{1,2}\right)},\ s^{\mathrm{b}}_{1,2}=\frac{t^{\mathrm{TM,\,e}}_{0\ 1,2}r^{\mathrm{TM,\,e}}_{1,2\ 3}\exp\left(2ik_{z1,2}L_{1,2}\right)}{1+r^{\mathrm{TM,\,e}}_{0\ 1,2}r^{\mathrm{TM,\,e}}_{1,2\ 3}\exp\left(2ik_{z1,2}L_{1,2}\right)}, \qquad (11)$$

$$s_{\mathrm{c}}^{\mathrm{f}} = \frac{t_{0\mathrm{c}}^{\mathrm{TM,e}}}{1 + r_{0\mathrm{c}}^{\mathrm{TM,e}} r_{\mathrm{c}3}^{\mathrm{TM,e}} \exp\left(2ik_{z\mathrm{e}}L_{\mathrm{c}}\right)},\ s_{\mathrm{c}}^{\mathrm{b}} = \frac{t_{0\mathrm{c}}^{\mathrm{TM,e}} r_{\mathrm{c}3}^{\mathrm{TM,e}} \exp\left(2ik_{z\mathrm{e}}L_{\mathrm{c}}\right)}{1 + r_{0\mathrm{c}}^{\mathrm{TM,e}} r_{\mathrm{c}3}^{\mathrm{TM,e}} \exp\left(2ik_{z\mathrm{e}}L_{\mathrm{c}}\right)}, \tag{12}$$

где $t_{mn}^{\mathrm{TM,e}}$, $r_{mn}^{\mathrm{TM,e}}$ ($m = 0, 1, \mathrm{c}$; $n = \mathrm{c}, 2, 3$; $n - m \geq 2$) определяются следующими соотношениями:

$$r_{mn}^{\mathrm{TM,e}} = \frac{r_{ms}^{\mathrm{TM,e}} + r_{sn}^{\mathrm{TM,e}} \exp\left(2ik_{zs}L_s\right)}{1 + r_{ms}^{\mathrm{TM,e}} r_{sn}^{\mathrm{TM,e}} \exp\left(2ik_{zs}L_s\right)},\ t_{mn}^{\mathrm{TM,e}} = \frac{t_{ms}^{\mathrm{TM,e}} t_{sn}^{\mathrm{TM,e}} \exp\left(ik_{zs}L_s\right)}{1 + r_{ms}^{\mathrm{TM,e}} r_{sn}^{\mathrm{TM,e}} \exp\left(2ik_{zs}L_s\right)},\ s = m + 1. \tag{13}$$

$$t_{01}^{\mathrm{TM}} = \frac{2\sqrt{\varepsilon_0}\sqrt{\varepsilon_1}k_{z0}}{\varepsilon_0 k_{z1} + \varepsilon_1 k_{z0}},\ t_{1\mathrm{c}}^{\mathrm{e}} = \frac{2\sqrt{\varepsilon_1}\sqrt{\varepsilon_0}k_{z1}}{\varepsilon_0 k_{z1} + \varepsilon_1 k_{z\mathrm{e}}},\ t_{\mathrm{c}2}^{\mathrm{TM}} = \frac{2\sqrt{\varepsilon_0}\sqrt{\varepsilon_2}k_{z\mathrm{e}}}{\varepsilon_2 k_{z\mathrm{e}} + \varepsilon_0 k_{z2}},\ t_{23}^{\mathrm{TM}} = \frac{2\sqrt{\varepsilon_3}\sqrt{\varepsilon_2}k_{z2}}{\varepsilon_2 k_{z3} + \varepsilon_3 k_{z2}}, \tag{14}$$

$$r_{01}^{\mathrm{TM}} = \frac{\varepsilon_1 k_{z0} - \varepsilon_0 k_{z1}}{\varepsilon_0 k_{z1} + \varepsilon_1 k_{z0}},\ r_{1\mathrm{c}}^{\mathrm{TM}} = \frac{\varepsilon_0 k_{z1} - \varepsilon_1 k_{z\mathrm{e}}}{\varepsilon_1 k_{z\mathrm{e}} + \varepsilon_0 k_{z1}},\ r_{\mathrm{c}2}^{\mathrm{e}} = \frac{\varepsilon_2 k_{z\mathrm{e}} - \varepsilon_0 k_{z2}}{\varepsilon_0 k_{z2} + \varepsilon_2 k_{z\mathrm{e}}},\ r_{23}^{\mathrm{TM}} = \frac{\varepsilon_3 k_{z2} - \varepsilon_2 k_{z3}}{\varepsilon_2 k_{z3} + \varepsilon_3 k_{z2}}.$$

Как следует из (9), дисперсионное уравнение, определяющее условие генерации бесселевых плазмон-поляритонов в слоистой структуре, имеет вид

$$F = 0, \tag{15}$$

где выражение для F находится с использованием формул (10)–(14).

Определение значений параметра конусности q, удовлетворяющих уравнению (15), является весьма сложной задачей. Метод полюсов коэффициентов отражения позволяет решить данную проблему. Рассмотрим зависимость $F\left(n^*\right)$, где $n^* = \frac{q}{k_0}$ – эффективное модовое число для бесселева плазмон-поляритона. Условие генерации бесселева плазмон-поляритона соответствует быстрому изменению аргумента функции F. При этом максимум производной аргумента этой функции соответствует действительной части эффективного модового числа БПП, а ширина этого максимума по уровню 0,5 – мнимой части n^*.

Свойства бесселевых плазмон-поляритонов в слоистой структуре, содержащей слой метаматериала

Рассмотрим слоистую структуру, включающую подложку (например, стекло SF10 с проницаемостью $\varepsilon_0 = 2{,}965$), промежуточный диэлектрический слой (плавленый кварц, $\varepsilon_1 = 2{,}181$), слой гиперболического метаматериала с экстремально большой анизотропией, сформированного на основе наноструктуры ITO – Ag при $f = 0{,}5$ ($\lambda = 414$ нм), защитный диэлектрический слой из плавленого кварца, внешнюю диэлектрическую среду (стекло SF10). На рис. 3 приведена зависимость производной аргумента функции F от величины $\mathrm{Re}\left(n^*\right)$. Видно, что вблизи длины волны 414 нм наблюдается уменьшение числа генерируемых бесселевых плазмон-поляритонов в структуре. Так, если при $\lambda = 420$ нм наблюдаются два пика зависимости производной аргумента функции F, соответствующих большему $n_2^* = 4{,}596 + 1{,}811i$ и меньшему $n_1^* = 1{,}992 + 0{,}024i$ эффективным модовым числам для бесселева плазмон-поляритона, то на длине волны $\lambda = 414$ нм наблюдаем один максимум, соответствующий $n^* = 2{,}01 + 0{,}034i$.

При этом положение данного максимума оказывается зависящим от толщины слоя метаматериала. Как видно из рис. 4, при $L_{\mathrm{c}} = 50$ нм имеем $n^* = 1{,}858 + 0{,}008i$; для $L_{\mathrm{c}} = 70$ нм получаем $n^* = 2{,}01 + 0{,}034i$, для $L_{\mathrm{c}} = 100$ нм максимум наблюдается при $n^* = 2{,}352 + 0{,}092i$. Таким образом, при увеличении толщины L_{c} как действительная $\mathrm{Re}\left(n^*\right)$, так и мнимая $\mathrm{Im}\left(n^*\right)$ часть модового числа БПП возрастают. Поскольку радиус центрального максимума БПП нулевого порядка R_1 определяется выражением $R_1 = \frac{2{,}4}{k_0 \mathrm{Re}\, n^*}$, получаем, что с увеличением L_{c} величина R_1 уменьшается.

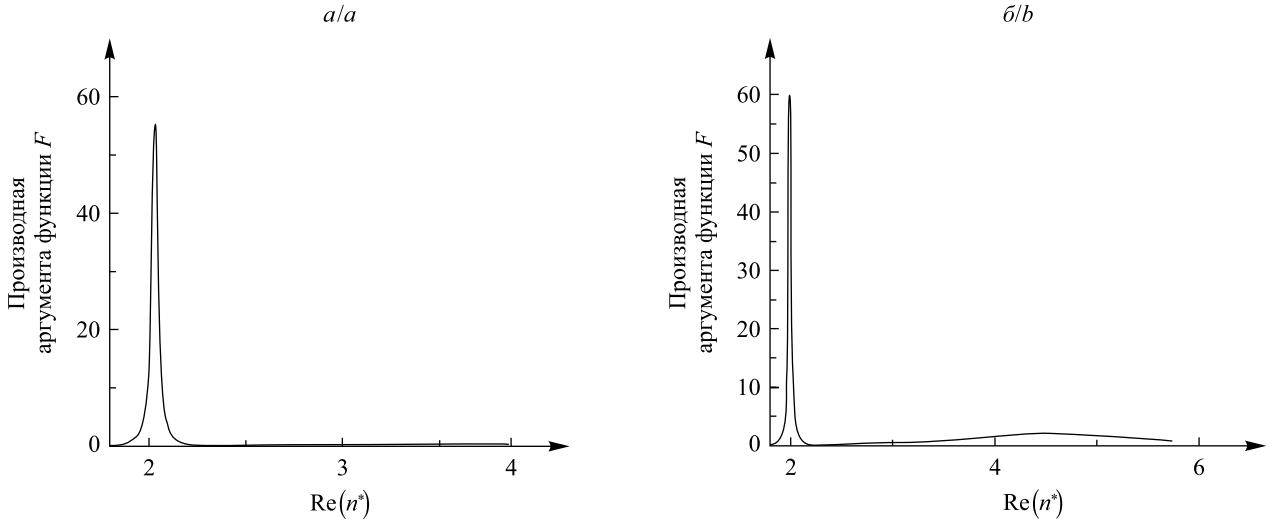


Рис. 3. Зависимость производной аргумента функции F от $\mathrm{Re}(n^*)$
для симметричной структуры подложка (стекло марки SF10) –
промежуточный слой (плавленый кварц) – ГММ на основе наноструктуры ITO – Ag (f = 0,5) –
защитный слой (плавленый кварц) – внешняя среда (стекло марки SF10).
$L_1 = L_2$ = 25 нм; L_c = 70 нм; λ = 414 нм (*а*); λ = 420 нм (*б*)

Fig. 3. Dependence of derivative of argument of the F function on $\mathrm{Re}(n^*)$
for symmetrical structure substrate (glass SF10) – intermediate layer (fused quartz) –
HMM formed from the ITO – Ag nanostructure (f = 0.5) –
protective layer (fused quartz) – external medium (glass SF10).
$L_1 = L_2$ = 25 nm; L_c = 70 nm; λ = 414 nm (*a*); λ = 420 nm (*b*)

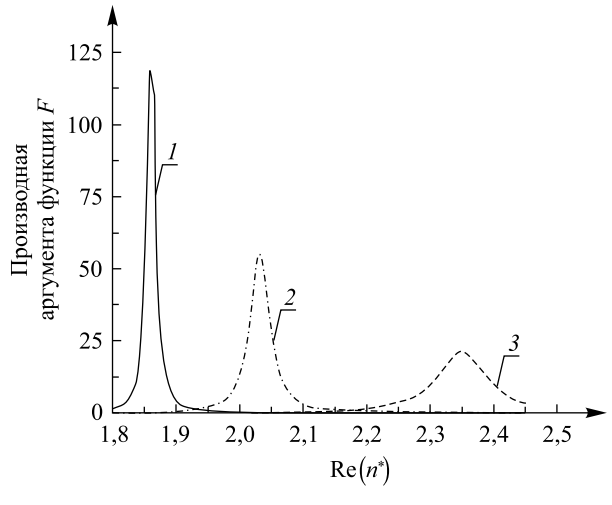


Рис. 4. Зависимость производной аргумента функции F от $\mathrm{Re}(n^*)$
для структуры подложка (стекло марки SF10) – промежуточный слой (плавленый кварц) –
ГММ на основе структуры ITO – Ag (f = 0,5) – защитный слой (плавленый кварц) –
внешняя среда (стекло марки SF10) для $L_1 = L_2$ = 25 нм; L_c = 50 нм (*1*),
L_c = 70 нм (*2*), L_c = 100 нм (*3*); λ = 414 нм

Fig. 4. Dependence of derivative of argument of the F function on $\mathrm{Re}(n^*)$
for symmetrical structure substrate (glass SF10) – intermediate layer (fused quartz) –
HMM formed from the ITO – Ag nanostructure (f = 0.5) – protective layer (fused quartz) –
external medium (glass SF10) for $L_1 = L_2$ = 25 nm; L_c = 50 nm (*1*),
L_c = 70 nm (*2*), L_c = 100 nm (*3*); λ = 414 nm

Рассмотрим теперь асимметричную слоистую структуру: подложка (стекло марки SF10) – промежуточный диэлектрический слой (плавленый кварц) – ГММ с экстремально большой анизотропией на основе структуры ITO – Ag ($\lambda = 414$ нм) – защитный диэлектрический слой (плавленый кварц) – внешняя диэлектрическая среда (воздух). Положение максимумов зависимости и их ширина оказываются зависящими от того, симметричная или несимметричная структура рассматривается. Из рис. 5 находим, что $n^* = 1{,}792 + 0{,}024i$ для $\lambda = 414$ нм; $n_1^* = 1{,}758 + 0{,}026i$ и $n_2^* = 4{,}592 + 1{,}806i$ для $\lambda = 420$ нм. Отсюда следует, что для случая асимметричного диэлектрического окружения как действительная $\mathrm{Re}\left(n^*\right)$, так и мнимая $\mathrm{Im}\left(n^*\right)$ часть модового числа БПП уменьшаются в сравнении со случаем симметричной структуры.

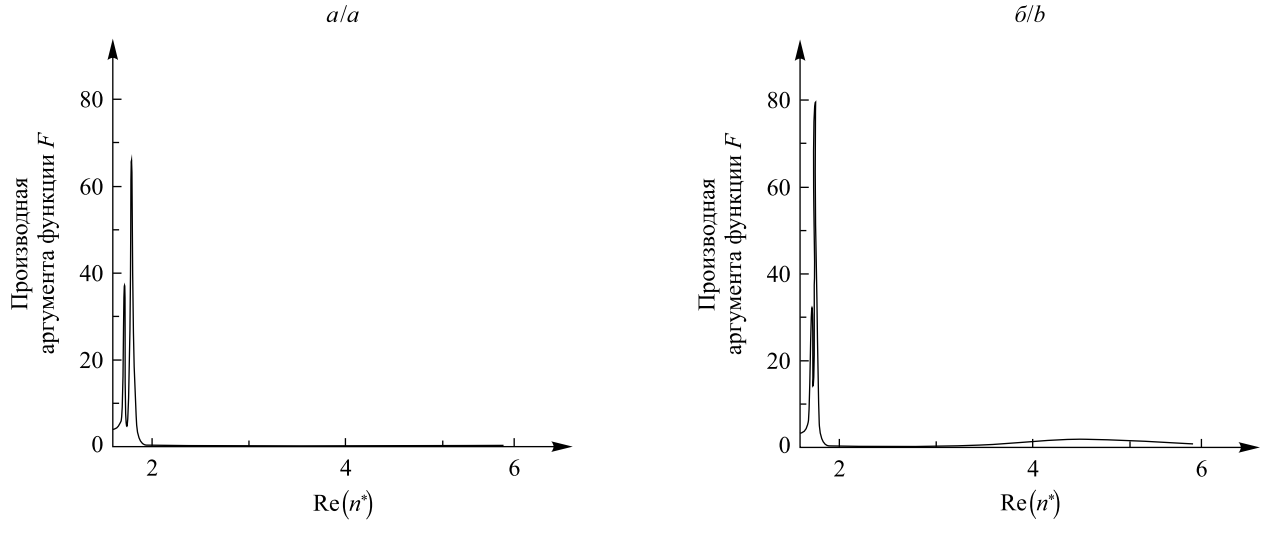


Рис. 5. Зависимость производной аргумента функции F от $\mathrm{Re}\left(n^*\right)$ для асимметричной структуры подложка (стекло марки SF10) – промежуточный слой (плавленый кварц) – ГММ на основе структуры ITO – Ag ($f = 0{,}5$) – защитный слой (плавленый кварц) – внешняя среда (воздух). $L_1 = L_2 = 25$ нм; $L_c = 70$ нм; $\lambda = 414$ нм (*а*), $\lambda = 420$ нм (*б*)

Fig. 5. Dependence of derivative of argument of the F function on $\mathrm{Re}\left(n^*\right)$ for asymmetrical structure substrate (glass SF10) – intermediate layer (fused quartz) – HMM formed from the ITO – Ag nanostructure ($f = 0.5$) – protective layer (fused quartz) – external medium (air). $L_1 = L_2 = 25$ nm; $L_c = 70$ nm; $\lambda = 414$ nm (*a*), $\lambda = 420$ nm (*b*)

Рассмотрим влияние присутствия промежуточного и защитного слоев на положение и ширину плазмонного резонанса. Из рис. 6, *а*, находим, что $n^* = 2{,}326 + 0{,}066i$ при $L_1 = L_2 = 0$; $n^* = 2{,}102 + 0{,}04i$ при $L_1 = L_2 = 15$ нм; $n^* = 2{,}01 + 0{,}034i$ при $L_1 = L_2 = 25$ нм; $n^* = 1{,}931 + 0{,}028i$ при $L_1 = L_2 = 55$ нм. Видно, что с увеличением толщины промежуточного и защитного слоев как действительная, так и мнимая часть модового индекса уменьшаются.

Кроме того, как следует из рис. 6, *б*, если структура подложка – ГММ – внешняя среда дополняется диэлектрическим (промежуточным или защитным) слоем, плазмонный резонанс не зависит от места его имплементации, но существенно зависит от его толщины. При возрастании толщины дополнительного диэлектрического слоя как действительная $\mathrm{Re}\left(n^*\right)$, так и мнимая $\mathrm{Im}\left(n^*\right)$ часть модового числа БПП уменьшаются (см. рис. 6, *б*).

Используя формулы (8), проанализируем изменение поля внутри слоя гиперболического метаматериала с экстремально большой анизотропией.

Зависимость нормированной действительной части продольной составляющей электрического вектора E_c^1 от расстояния z внутри слоя ГММ, созданного на основе структуры ITO – Ag, приведена на рис. 7. Видно, что профиль продольной составляющей электрического вектора внутри слоя ГММ существенно изменяется, если метаматериал обладает экстремально большой анизотропией: данная составляющая возрастает с увеличением z.

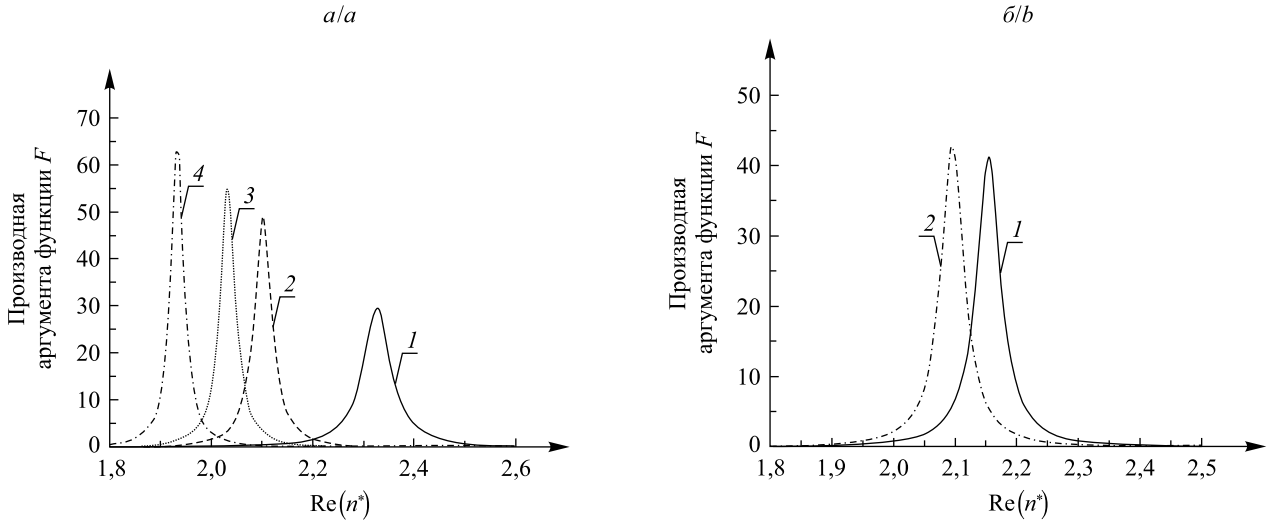


Рис. 6. Зависимость производной аргумента функции F от $\mathrm{Re}(n^*)$ для симметричной структуры подложка (стекло марки SF10) – промежуточный слой (плавленый кварц) – ГММ на основе структуры ITO – Ag ($f = 0{,}5$) – защитный слой (плавленый кварц) – внешняя среда (стекло марки SF10):
а – $L_1 = L_2 = 0$ (*1*), $L_1 = L_2 = 15$ нм (*2*), $L_1 = L_2 = 35$ нм (*3*), $L_1 = L_2 = 55$ нм (*4*);
б – $L_1 = 25$ нм, $L_2 = 0$ и $L_2 = 25$ нм, $L_1 = 0$ (*1*), $L_1 = 0$, $L_2 = 55$ нм
и $L_2 = 0$, $L_1 = 55$ нм (*2*); $L_c = 70$ нм; $\lambda = 414$ нм

Fig. 6. Dependence of derivative of argument of the F function on $\mathrm{Re}(n^*)$ for symmetrical structure substrate (glass SF10) – intermediate layer (fused quartz) – HMM formed from the ITO – Ag nanostructure ($f = 0.5$) – protective layer (fused quartz) – external medium (glass SF10):
a – $L_1 = L_2 = 0$ (*1*), $L_1 = L_2 = 15$ nm (*2*), $L_1 = L_2 = 35$ nm (*3*), $L_1 = L_2 = 55$ nm (*4*);
b – $L_1 = 25$ nm, $L_2 = 0$ and $L_2 = 25$ nm, $L_1 = 0$ (*1*), $L_1 = 0$, $L_2 = 55$ nm
and $L_2 = 0$, $L_1 = 55$ nm (*2*); $L_c = 70$ nm; $\lambda = 414$ nm

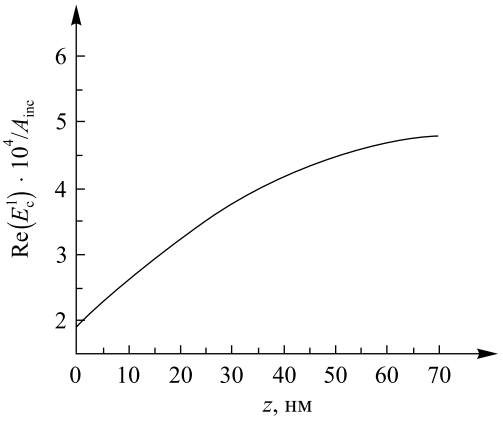


Рис. 7. Зависимость нормированной действительной части продольной составляющей электрического вектора E_c^l от расстояния z внутри слоя ГММ, расположенного в структуре подложка (стекло марки SF10) – промежуточный слой (плавленый кварц) – ГММ на основе структуры ITO – Ag ($f = 0{,}5$) – защитный слой (плавленый кварц) – внешняя среда (стекло марки SF10).
$L_1 = L_2 = 25$ нм; $L_c = 70$ нм; $\lambda = 414$ нм

Fig. 7. Dependence of normalized real part of longitudinal component of electric vector E_c^l on z-distance inside the HMM layer located in the structure substrate (glass SF10) – intermediate layer (fused quartz) – HMM formed from the ITO – Ag nanostructure ($f = 0.5$) – protective layer (fused quartz) – external medium (glass SF10). $L_1 = L_2 = 25$ nm; $L_c = 70$ nm; $\lambda = 414$ nm

Заключение

Таким образом, в настоящей работе развита теория генерации бесселевых плазмон-поляритонов в структуре, содержащей слой одноосного метаматериала, отделенного от подложки и внешней среды дополнительными диэлектрическими слоями. Рассмотрены случаи симметричной и асимметричной структур. Получено и проанализировано дисперсионное уравнение для этих случаев. Показано, что, если гиперболический метаматериал обладает экстремально большой анизотропией, в структуре возможна генерация БПП, продольная компонента вектора электрической напряженности которого монотонно возрастает внутри слоя ГММ. Установлена зависимость условий возбуждения бесселевых плазмон-поляритонов от толщины слоя L_c гиперболического метаматериала. Показано, что с возрастанием L_c радиус центрального максимума БПП нулевого порядка уменьшается.

Показано, что внедрение дополнительного (промежуточного или защитного) слоя в структуру обусловливает увеличение центрального максимума бесселева плазмон-поляритона, при этом оно тем заметнее, чем толще указанный слой.

Полученные результаты могут быть использованы при разработке новых приборов и устройств тестирования поверхностей, основанных на использовании бесселевых плазмон-поляритонов.

Библиографические ссылки

1. *Pendry J. B.* Negative refraction makes a Perfect Lens // Phys. Rev. Lett. 2000. Vol. 85, issue 18. P. 3966–3969. DOI: 10.1103/PhysRevLett.85.3966.

2. *Fang N., Lee H., Sun C., et al.* Sub-diffraction-limited optical imaging with a silver superlens // Science. 2005. Vol. 308. P. 534–537. DOI: 10.1126/science.1108759.

3. *Pendry J. B., Schuring D., Smith D. R.* Controlling Electromagnetic Fields // Science. 2006. Vol. 312. P. 1780–1782. DOI: 10.1126/science.1125907.

4. *Shelby R. A., Smith D. R., Schultz S.* Experimental Verification of a Negative Index of Refraction // Science. 2001. Vol. 292. P. 77–79. DOI: 10.1126/science.1058847.

5. *Drachev V. P., Podolsky V. A., Kildishev A. V.* Hyperbolic metamaterials: new physics behind a classical problem // Opt. Express. 2013. Vol. 21. P. 15048–15064. DOI: 10.1364/OE.21.015048.

6. *Durnin J.* Exact solutions for nondiffracting beams // J. Opt. Soc. Am. 1987. Vol. A4. P. 651–654. DOI: 10.1364/JOSAA.4.000651.

7. *Durnin J., Muceli J., Eberly J. H.* Diffraction-free beams // Phys. Rev. Lett. 1987. Vol. 58. P. 1499–1501. DOI: 10.1103/PhysRevLett.58.1499.

8. *Kurilkina S. N., Belyi V. N., Kazak N. S.* Features of evanescent Bessel light beams formed in structures containing a dielectric layer // Opt. Commun. 2010. Vol. 283. P. 3860–3868. DOI: 10.1016/j.optcom.2010.05.076.

9. *Zhan Q.* Evanescent Bessel beam generation via surface plasmon resonance excitation by a radially polarized beam // Opt. Lett. 2006. Vol. 31, issue 11. P. 1726–1728. DOI: 10.1364/OL.31.001726.

10. *Jiefeng X., Qing L., Jia W.* Numerical simulation of evanescent Bessel beams and apodization of evanescent field in near-field optical virtual probe // Proc. of the SPIE. 2005. Vol. 5636. P. 42–51. DOI: 10.1117/12.576458.

11. *Muhanna K. Al-Muhanna, Kurilkina S. N., Belyi V. N., et al.* Energy flow patterns in an optical field formed by a superposition of evanescent Bessel light beams // J. Optics. 2011. Vol. 13, issue 10. P. 105703. DOI: 10.1088/2040-8978/13/10/105703.

12. *Grosjean T., Courjon T. D., Labeke D. V.* Bessel beams as virtual tips for near-field optics // J. Microscopy. 2003. Vol. 210. P. 319–323. DOI: 10.1046/j.1365-2818.2003.01163.x.

13. *Kano H., Nomura D., Shibuya H.* Excitation of surface-plasmon polaritons by use of a zeroth-order Bessel beam // Appl. Opt. 2004. Vol. 43. P. 2409–2411. DOI: 10.1364/AO.43.002409.

14. *Zapata-Rodriguez C. J., Vuković S., Belić M. R., et al.* Nondiffracting Bessel plasmons // Opt. Express. 2011. Vol. 19. P. 19572–19581. DOI: 10.1364/OE.19.019572.

15. *Kurilkina S. N., Belyi V. N., Kazak N. S.* Generation of Bessel surface plasmon-polaritons in a finite thickness metal film // Int. J. Opt. 2013. Vol. 2013. Article ID: 253692. DOI: 10.1155/2013/253692.

16. *Cai W., Shalaev V.* Optical Metamaterials: Fundamentals and Applications. New York : Springer, 2010. DOI: 10.1007/978-1-4419-1151-3.

References

1. Pendry J. B. Negative refraction makes a Perfect Lens. *Phys. Rev. Lett.* 2000. Vol. 85, issue 18. P. 3966–3969. DOI: 10.1103/PhysRevLett.85.3966.

2. Fang N., Lee H., Sun C., et al. Sub-diffraction-limited optical imaging with a silver superlens. *Science.* 2005. Vol. 308. P. 534–537. DOI: 10.1126/science.1108759.

3. Pendry J. B., Schuring D., Smith D. R. Controlling Electromagnetic Fields. *Science.* 2006. Vol. 312. P. 1780–1782. DOI: 10.1126/science.1125907.

4. Shelby R. A., Smith D. R., Schultz S. Experimental Verification of a Negative Index of Refraction. *Science.* 2001. Vol. 292. P. 77–79. DOI: 10.1126/science.1058847.

5. Drachev V. P., Podolsky V. A., Kildishev A. V. Hyperbolic metamaterials: new physics behind a classical problem. *Opt. Express.* 2013. Vol. 21. P. 15048–15064. DOI: 10.1364/OE.21.015048.

6. Durnin J. Exact solutions for nondiffracting beams. *J. Opt. Soc. Am.* 1987. Vol. A4. P. 651–654. DOI: 10.1364/JOSAA.4.000651.

7. Durnin J., Muceli J., Eberly J. H. Diffraction-free beams. *Phys. Rev. Lett.* 1987. Vol. 58. P. 1499–1501. DOI: 10.1103/PhysRevLett.58.1499.

8. Kurilkina S. N., Belyi V. N., Kazak N. S. Features of evanescent Bessel light beams formed in structures containing a dielectric layer. *Opt. Commun.* 2010. Vol. 283. P. 3860–3868. DOI: 10.1016/j.optcom.2010.05.076.

9. Zhan Q. Evanescent Bessel beam generation via surface plasmon resonance excitation by a radially polarized beam. *Opt. Lett.* 2006. Vol. 31, issue 11. P. 1726–1728. DOI: 10.1364/OL.31.001726.

10. Jiefeng X., Qing L., Jia W. Numerical simulation of evanescent Bessel beams and apodization of evanescent field in near-field optical virtual probe. *Proc. of the SPIE.* 2005. Vol. 5636. P. 42–51. DOI: 10.1117/12.576458.

11. Muhanna K. Al-Muhanna, Kurilkina S. N., Belyi V. N., et al. Energy flow patterns in an optical field formed by a superposition of evanescent Bessel light beams. *J. Optics.* 2011. Vol. 13, issue 10. P. 105703. DOI: 10.1088/2040-8978/13/10/105703.

12. Grosjean T., Courjon T. D., Labeke D. V. Bessel beams as virtual tips for near-field optics. *J. Microscopy.* 2003. Vol. 210. P. 319–323. DOI: 10.1046/j.1365-2818.2003.01163.x.

13. Kano H., Nomura D., Shibuya H. Excitation of surface-plasmon polaritons by use of a zeroth-order Bessel beam. *Appl. Opt.* 2004. Vol. 43. P. 2409–2411. DOI: 10.1364/AO.43.002409.

14. Zapata-Rodriguez C. J., Vuković S., Belić M. R., et al. Nondiffracting Bessel plasmons. *Opt. Express.* 2011. Vol. 19. P. 19572–19581. DOI: 10.1364/OE.19.019572.

15. Kurilkina S. N., Belyi V. N., Kazak N. S. Generation of Bessel surface plasmon-polaritons in a finite thickness metal film. *Int. J. Opt.* 2013. Vol. 2013. Article ID: 253692. DOI: 10.1155/2013/253692.

16. Cai W., Shalaev V. Optical Metamaterials: Fundamentals and Applications. New York : Springer, 2010. DOI: 10.1007/978-1-4419-1151-3.

Статья поступила в редколлегию 20.02.2018.
Received by editorial board 20.02.2018.

Физика конденсированного состояния

Condensed state physics

УДК 539.2:669.(6-8)

МИКРОСТРУКТУРА БЫСТРОЗАТВЕРДЕВШЕЙ ФОЛЬГИ СПЛАВОВ СИСТЕМЫ ВИСМУТ – ОЛОВО

В. Г. ШЕПЕЛЕВИЧ [1], ***Л. П. ЩЕРБАЧЕНКО*** [2]

[1] *Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Беларусь*
[2] *Брестский государственный технический университет, ул. Московская, 267, 224017, г. Брест, Беларусь*

Установлено, что в быстрозатвердевшей фольге сплавов системы висмут – олово объемная доля фаз не зависит от расстояния до их внешней поверхности, это свидетельствует об однородном распределении фаз в объеме фольги. Формирование дисперсной структуры в фольге эвтектического состава вызвано действием спинодального распада пересыщенного жидкого раствора, способствующего однородному распределению зародышей кристаллических фаз, независимости средних длин хорд случайных секущих на сечениях фаз и удельной поверхности межфазной границы от расстояния до поверхности фольги. Зависимость средних длин хорд случайных секущих на сечениях фаз и удельной поверхности межфазной границы от расстояния до поверхности фольги сплавов, состав которых значительно отличается от эвтектики, обусловлена уменьшением переохлаждения расплава по мере перемещения фронта кристаллизации.

Ключевые слова: система висмут – олово; высокоскоростная кристаллизация; быстрозатвердевшая фольга; микроструктура; дисперсная структура; объемная доля; средняя длина хорд фаз; удельная поверхность межфазной границы.

Образец цитирования:
Шепелевич В. Г., Щербаченко Л. П. Микроструктура быстрозатвердевшей фольги сплавов системы висмут – олово // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2018. № 2. С. 46–51.

For citation:
Shepelevich V. G., Shcherbachenko L. P. Microstructure of rapidly solidified foils of alloys of the bismuth – tin system. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2018. No. 2. P. 46–51 (in Russ.).

Авторы:
Василий Григорьевич Шепелевич – доктор физико-математических наук; профессор кафедры физики твердого тела физического факультета.
Лилия Павловна Щербаченко – старший преподаватель кафедры физики.

Authors:
Vasiliy G. Shepelevich, doctor of science (physics and mathematics); professor at the department of solid-state physics, faculty of physics.
shepelevich@bsu.by
Liliya P. Shcherbachenko, senior lecturer at the department of physics.
sch_liliya@mail.ru

MICROSTRUCTURE OF RAPIDLY SOLIDIFIED FOILS OF ALLOYS OF THE BISMUTH − TIN SYSTEM

V. G. SHEPELEVICH [a], ***L. P. SHCHERBACHENKO*** [b]

[a]*Belarusian State University, 4 Niezaliežnasci Avenue, Minsk 220030, Belarus*
[b]*Brest State Technical University, 267 Maskoŭskaja Street, Brest 224017, Belarus*
Corresponding author: V. G. Shepelevich (shepelevich@bsu.by)

It is established that in the rapid-quenched foils of the bismuth-tin alloys the volume fraction of the phases does not depend on the distance to their outer surface, which indicates a homogeneous distribution of phases in the volume of the foil. The formation of a dispersed structure in foils of a eutectic composition is caused by the action of the spinodal decomposition of a supersaturated liquid solution that promotes a homogeneous distribution of the nuclei of the crystalline phases, the independence of the mean chord lengths of random secants on the phase sections and the specific surface of the interface from the distance to the foil surface. The dependence of the average lengths of the chords of random secants on the phase sections and the specific surface of the interface from the distance to the surface of the foil of alloys, whose composition differs significantly from the eutectic, is due to a decrease in the supercooling of the melt as the crystallization front moves.

Key words: bismuth – tin system; high-speed crystallization; rapidly solidified foils; microstructure; disperse structure; volume fraction; average length of chords of phase sections; interface specific surface area.

В связи с ограничением применения в электронной промышленности свинца из-за его высокой токсичности в настоящее время широко изучаются сплавы, в которых свинец заменяется висмутом, индием и цинком [1–3]. Однако по причине высокой стоимости указанных компонентов по сравнению со стоимостью свинца целесообразно при использовании легкоплавких сплавов применять энерго- и ресурсосберегающие технологии. К таким относится, например, высокоскоростное затвердевание [4; 5], которое позволяет создать микроструктуру и обеспечить механические свойства сплава, недостижимые при использовании традиционных технологий получения и обработки сплавов [6]. В настоящей работе исследовано пространственное распределение фаз в быстрозатвердевшей фольге сплавов системы Sn – Bi и изучена зависимость параметров микроструктуры (объемной доли фаз V, средней длины хорд случайных секущих на сечениях выделений фаз d и удельной поверхности межфазной границы S) от расстояния до поверхности фольги, контактирующей с поверхностью кристаллизатора.

Сплавы системы Sn – Bi получены сплавлением в кварцевых ампулах компонентов, чистота которых не менее 99,99 %. Затем из них изготовлены фольги высокоскоростным затвердеванием капли расплава на внутренней полированной поверхности быстровращающегося медного цилиндра диаметром 20 см. Скорость охлаждения расплава, как показал расчет [5], находится в пределах 10^5–10^6 К/с. В результате кристаллизации получалась фольга длиной до 5 см, шириной до 1 см и толщиной 20−80 мкм. Исследование микроструктуры фольги проведено с помощью растрового электронного микроскопа LEO 1455VP (Германия), имеющего приставку для проведения рентгеноспектрального микроанализа. Определение объемной доли фаз и удельной поверхности межфазных границ быстрозатвердевшей фольги сплава системы Sn – Bi осуществлено методом секущих [7]. Погрешность измерения параметров микроструктуры равна 8 %.

Изображение микроструктуры быстрозатвердевшей фольги сплавов системы Bi – Sn представлено на рис. 1. Были рассмотрены три образца различного состава: Bi – 10 мас. % Sn (см. рис. 1, *а*), эвтектика Bi – 42 мас. % Sn (см. рис. 1, *б*), Bi – 80 мас. % Sn (см. рис. 1, *в*). С помощью рентгеноспектрального микроанализа установлено, что светлым областям на фотографиях соответствует фаза висмута, темным – фаза олова. Обнаружено, что для быстрозатвердевшей фольги рассматриваемых сплавов характерна дисперсная структура.

Для сплавов Bi – 42 мас. % Sn, Bi – 80 мас. % Sn параметры микроструктуры фольги были рассчитаны для фазы висмута, для сплава Bi – 10 мас. % Sn – для фазы олова. Зависимость объемной доли выделившихся фаз от расстояния до поверхности фольги, контактирующей с кристаллизатором, представлена на рис. 2. Было обнаружено, что объемная доля фаз не зависит от расстояния до поверхности фольги для всех рассматриваемых сплавов. Для сплава Bi – 10 мас. % Sn объемная доля олова $V_{Sn} = 0{,}06$, для эвтектического сплава Bi – 42 мас. % Sn объемная доля висмута $V_{Bi} = 0{,}52$, а для сплава Bi – 80 мас. % Sn $V_{Bi} = 0{,}17$. Данные графики свидетельствуют об однородном пространственном распределении фаз в быстрозатвердевших фольгах, что имеет важное прикладное значение для припоев, так как повышает качество пайки [8].

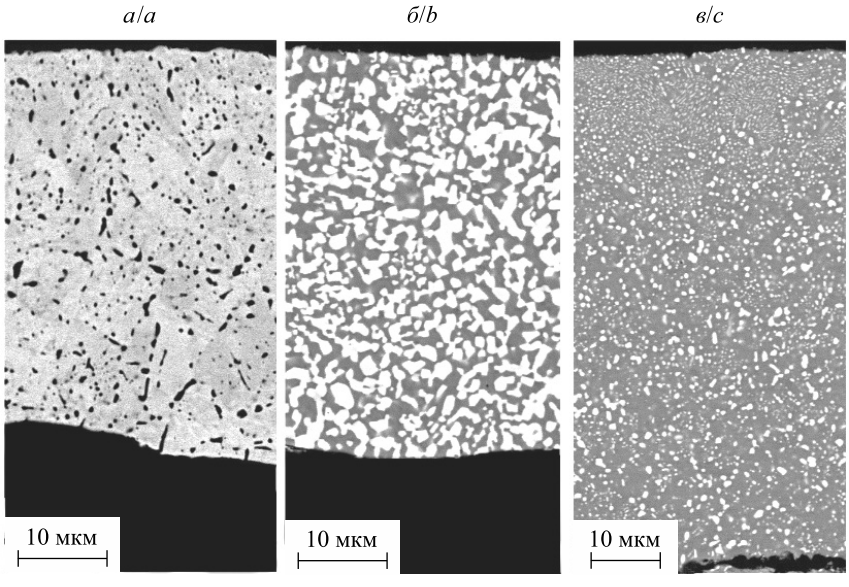


Рис. 1. Микроструктура быстрозатвердевшей фольги сплавов:
Bi – 10 мас. % Sn (*а*); эвтектика Bi – 42 мас. % Sn (*б*); Bi – 80 мас. % Sn (*в*)

Fig. 1. Microstructure of rapidly solidified foils of alloys:
Bi – 10 wt. % Sn (*a*); eutectic Bi – 42 wt. % Sn (*b*); Bi – 80 wt. % Sn (*c*)

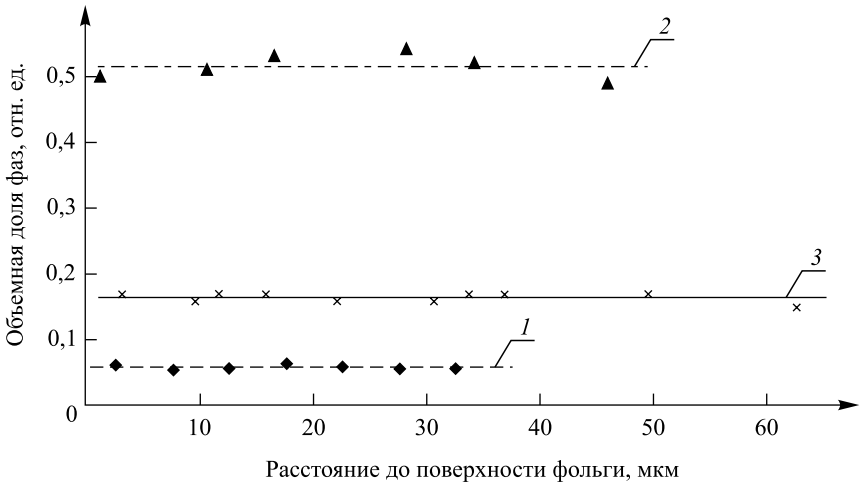


Рис. 2. Зависимость объемной доли фаз для быстрозатвердевшей фольги
от расстояния до поверхности фольги:
Bi – 10 мас. % Sn (*1*); Bi – 42 мас. % Sn (*2*); Bi – 80 мас. % Sn (*3*)

Fig. 2. Dependence of the volume fraction of phases for rapidly solidified foils
from the distance to the foil surface:
Bi – 10 wt. % Sn (*1*); Bi – 42 wt. % Sn (*2*); Bi – 80 wt. % Sn (*3*)

Зависимость среднего размера хорд случайных секущих, приходящихся на выделенные фазы, от расстояния до поверхности быстрозатвердевших фольг сплавов системы Bi – Sn представлена на рис. 3.

Установлено, что для эвтектического сплава Bi – 42 мас. % Sn средний размер хорд не зависит от расстояния до поверхности фольги и составляет d_{Bi} = 1,3 мкм. Для сплавов Bi – 10 мас. % Sn и Bi – 80 мас. % Sn наблюдается монотонное возрастание среднего размера d хорд случайных секущих по мере удаления от поверхности фольги, контактирующей с кристаллизатором. Для сплава Bi – 10 мас. % Sn d_{Sn} увеличивается приблизительно в 1,8 раза и достигает значения 0,45 мкм, для Bi – 80 мас. % Sn d_{Bi} возрастает в 2,5 раза до значения 0,61 мкм.

Зависимость удельной поверхности S межфазных границ от расстояния до поверхности быстрозатвердевшей фольги сплавов системы Bi – Sn представлена на рис. 4. Обнаружено, что для эвтектического сплава Bi – 42 мас. % Sn удельная поверхность межфазных границ не зависит от расстояния до поверхности фольги и составляет S = 1,7 мкм$^{-1}$. Для сплавов Bi – 10 мас. % Sn и Bi – 80 мас. % Sn

наблюдается монотонное убывание удельной поверхности *S* межфазных границ по мере удаления от поверхности фольги, контактирующей с кристаллизатором. При этом для сплава Bi – 10 мас. % Sn удельная поверхность уменьшается приблизительно в 1,9 раза (от 0,98 до 0,51 мкм$^{-1}$), для Bi – 80 мас. % Sn – в 2,0 раза (от 1,36 до 0,67 мкм$^{-1}$). Следует отметить, что образование дисперсной структуры с однородным распределением фаз наблюдалось и в быстрозатвердевшей эвтектике системы висмут – кадмий [9].

Установленные зависимости можно объяснить различными механизмами кристаллизации и последующего роста выделенных фаз в сплавах эвтектического и не эвтектического состава. Сверхвысокие скорости охлаждения тонкого слоя расплава на поверхности кристаллизатора приводят к его значительному переохлаждению, которое уменьшается при удалении от поверхности кристаллизатора. При этом переохлажденный эвтектический расплав является и жидким раствором, пересыщенным обоими компонентами [10].

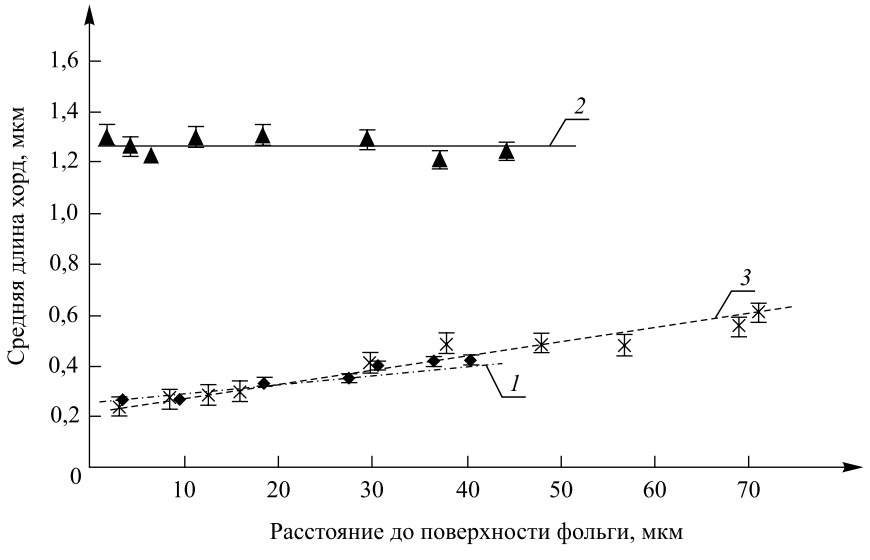


Рис. 3. Зависимость средней длины хорд от расстояния до поверхности фольги для сплавов: Bi – 10 мас. % Sn (*1*); Bi – 42 мас. % Sn (*2*); Bi – 80 мас. % Sn (*3*)

Fig. 3. Dependence of the average chord length from the distance to the foil surface for alloys: Bi – 10 wt. % Sn (*1*); Bi – 42 wt. % Sn (*2*); Bi – 80 wt. % Sn (*3*)

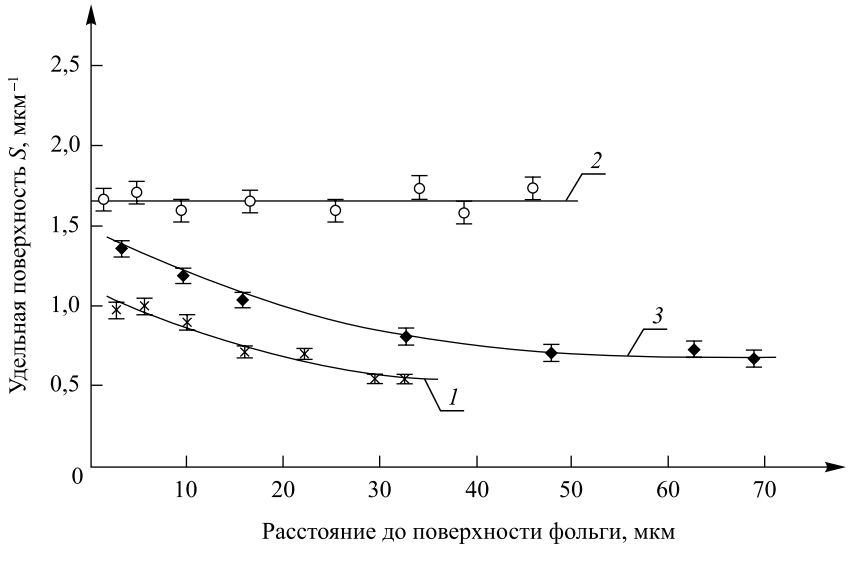


Рис. 4. Зависимость удельной поверхности от расстояния до поверхности фольги для сплавов: Bi – 10 мас. % Sn (*1*); Bi – 42 мас. % Sn (*2*); Bi – 80 мас. % Sn (*3*)

Fig. 4. Dependence of the specific surface from the distance to the foil surface for alloys: Bi – 10 wt. % Sn (*1*); Bi – 42 wt. % Sn (*2*); Bi – 80 wt. % Sn (*3*)

Зависимость свободной энергии F пересыщенного жидкого раствора от концентрации компонентов c имеет W-образный вид [11]. При этом вторая производная свободной энергии по концентрации $\frac{\partial^2 F}{\partial c^2} < 0$ для эвтектики и сплавов, составы которых близки к ней, а для остальных сплавов $\frac{\partial^2 F}{\partial c^2} > 0$. Распад пересыщенных жидких растворов легкоплавкой эвтектики системы олово – свинец рассмотрен в работе [12]. В пересыщенной жидкой эвтектике системы висмут – олово происходит спинодальный распад, связанный с огромным числом небольших энергетических и концентрационных флуктуаций, в результате которых образуются дисперсные области, обогащенные разными компонентами и гомогенно распределенные в объеме расплава. Эти области затем становятся зародышами кристаллических фаз, и при кристаллизации формируется дисперсная структура с однородным распределением фаз, что проявляется в независимости объемной доли фаз, средней длины хорд случайных секущих на сечениях фаз и удельной поверхности межфазной границы от расстояния до поверхности фольги.

Вторая производная свободной энергии по концентрации $\frac{\partial^2 F}{\partial c^2} > 0$ имеет место для пересыщенных жидких растворов, составы которых значительно отличаются от состава эвтектики. Их распад происходит в результате появления малого числа, но больших по уровню энергетических и концентрационных флуктуаций [11; 12]. Для таких жидких растворов скорость зародышеобразования новой фазы зависит от их переохлаждения. Зародышеобразованию в слое расплава, прилегающего к кристаллизатору, способствует поверхность кристаллизатора. Кристаллизация начинается с этого слоя и сопровождается выделением теплоты, которая уменьшает переохлаждение последующих слоев, обусловливая тем самым уменьшение скорости образования зародышей. В связи с этим по мере перемещения фронта кристаллизации от поверхности кристаллизатора происходит укрупнение структуры, проявляющееся в увеличении средней длины хорд случайных секущих, расположенных на сечениях фаз, и уменьшении удельной поверхности межфазной границы, что наблюдается для фольги сплавов Bi – 10 мас. % Sn и Bi – 80 мас. % Sn.

Таким образом, установлено, что в быстрозатвердевшей фольге сплавов системы висмут – олово объемная доля фаз не зависит от расстояния до их внешней поверхности, что свидетельствует об однородном распределении фаз в объеме фольги. Формирование дисперсной структуры в фольге эвтектического состава вызвано действием спинодального распада пересыщенного жидкого раствора, способствующего однородному распределению зародышей кристаллических фаз, независимости средних длин хорд случайных секущих на сечениях фаз и удельной поверхности межфазной границы от расстояния до поверхности фольги, что имеет важное прикладное значение для использования припоев данной системы. Зависимость средних длин хорд случайных секущих на сечениях фаз и удельной поверхности межфазной границы от расстояния до поверхности фольги сплавов, состав которых значительно отличается от эвтектики, обусловлена уменьшением переохлаждения расплава по мере перемещения фронта кристаллизации.

Библиографические ссылки

1. *Ochoa F., Williams J. J., Chawla N.* The effects of cooling rate on microstructure and mechanical behavior of Sn-3.5Ag solder // JOM. 2003. Vol. 55, issue 6. P. 56–60. DOI: 10.1007/s11837-003-0142-7.

2. *Hui-Wei Miao, Jenq-Gong Duh.* Thermal cycling test in Sn – Bi and Sn – Bi – Cu solder joints // J. mater. sci.: mater. in electron. 2000. Vol. 11, issue 8. P. 609–618. DOI: 10.1023/A:1008928729212.

3. *Пивненко В.* Актуальность перехода к сплавам, используемым в бессвинцовых припоях // Радиокомпоненты. 2006. № 3 (9). С. 8–35.

4. *Васильев В. А., Митин Б. С., Пашков И. И. и др.* Высокоскоростное затвердевание расплавов (теория, технология и материалы) / под ред. Б. С. Митина. М. : СП «Интермет инжиниринг», 1998.

5. *Мирошниченко И. С.* Закалка из жидкого состояния. М. : Металлургия, 1982.

6. *Калиниченко А. С., Бергманн Г. В.* Управляемое направленное затвердевание и лазерная обработка: теория и практика. Минск : Технопринт, 2001.

7. *Салтыков С. А.* Стереометрическая металлография. М. : Металлургия, 1976.

8. *Пашков И. Н., Пикунов М. В., Товалжанский С. А. и др.* Разработка процессов получения и применения сплавов припоев в дисперсионном состоянии с микрокристаллической или аморфной структурой // Металлург. 2010. № 6. С. 43–45.

9. *Шепелевич В. Г.* Структура, свойства и стабильность быстрозатвердевшей эвтектики Bi – 40 мас. % Cd // Материаловедение. 2013. № 10. С. 26–30.

10. *Таран Ю. М., Мазур В. И.* Структура эвтектических сплавов. М. : Металлургия, 1978.

11. *Глазов В. М., Павлова Л. М.* Химическая термодинамика и фазовые равновесия. М. : Металлургия, 1988.

12. *Merkele T.* The Cahn-Larche system: A model for spinodal decomposition in eutectic solder. Modelling, analysis and simulation. Stuttgart : Universität, 2005.

References

1. Ochoa F., Williams J. J., Chawla N. The effects of cooling rate on microstructure and mechanical behavior of Sn-3.5Ag solder. *JOM*. 2003. Vol. 55, issue 6. P. 56–60. DOI: 10.1007/s11837-003-0142-7.

2. Hui-Wei Miao, Jenq-Gong Duh. Thermal cycling test in Sn – Bi and Sn – Bi – Cu solder joints. *J. mater. sci.: mater. in electron.* 2000. Vol. 11, issue 8. P. 609–618. DOI: 10.1023/A:1008928729212.

3. Pivnenko V. [Actuality of transition to alloys, using in lead-free solders]. *Radiokomponenty.* 2006. No. 3 (9). P. 8–35 (in Russ.).

4. Vasil'ev V. A., Mitin B. S., Pashkov I. I., et al. Vysokoskorostnoe zatverdevanie rasplavov (teoriya, tekhnologiya i materialy) [Repidly solidification of melt (theory, technology and materials)]. Moscow : JV «Intermet inzhiniring», 1998 (in Russ.).

5. Miroshnichenko I. S. Zakalka iz zhidkogo sostoyaniya [Quenching from the liquid state]. Moscow : Metallurgiya, 1982 (in Russ.).

6. Kalinichenko A. S., Bergmann G. V. Upravlyaemoe napravlennoe zatverdevanie i lazernaya obrabotka: teoriya i praktika [Controlled directional solidification and laser processing: theory and practice]. Minsk : Tekhnoprint, 2001 (in Russ.).

7. Saltykov S. A. Stereometricheskaya metallografiya [Stereometric metallography]. Moscow : Metallurgiya, 1976 (in Russ.).

8. Pashkov I. N., Pikunov M. V., Tavolzhansky S. A., et al. Development of production and use of solder alloys with microcrystalline or amorphous structure. *Metallurg.* 2010. No. 6. P. 43–45 (in Russ.).

9. Shepelevich V. G. [Structure, properties and stability of rapidly solidified Bi – 40 wt. % Cd]. *Materialovedenie.* 2013. No. 10. P. 26–30 (in Russ.).

10. Taran Yu. M., Mazur V. I. Struktura evtekticheskikh splavov [Structure eutectic alloys]. Moscow : Metallurgiya, 1978 (in Russ.).

11. Glazov V. M., Pavlova L. M. Khimicheskaya termodinamika i fazovye ravnovesiya [Chemical thermodynamics and phase equilibrites]. Moscow : Metallurgiya, 1988 (in Russ.).

12. Merkele T. The Cahn-Larche system: A model for spinodal decomposition in eutectic solder. Modelling, analysis and simulation. Stuttgart : Universität, 2005.

Статья поступила в редколлегию 12.01.2018.
Received by editorial board 12.01.2018.

Журнал Белорусского государственного университета. Физика. 2018. № 2. С. 52–60
Journal of the Belarusian State University. Physics. 2018. No. 2. P. 52–60

УДК 538.9

ОПТИЧЕСКИЕ И ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ ГЕРМАНИЙ – КРЕМНИЙ

***О. Ю. СМИРНОВА*[1)], *Г. Ф. СТЕЛЬМАХ*[1)], *Ю. М. ПОКОТИЛО*[1)], *А. Н. ПЕТУХ*[1)], *В. П. МАРКЕВИЧ*[2)], *О. В. КОРОЛИК*[1)], *А. В. МАЗАНИК*[1)]**

[1)]*Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Беларусь*
[2)]*Университет Манчестера, Институт науки о фотонах, ул. Саквилл, Манчестер M601QD, Великобритания*

Электронные и структурные свойства твердых растворов $Ge_{1-x}Si_x$ ($x = 0–0{,}062$), выращенных методом Чохральского и имплантированных водородом, изучались с помощью нестационарной спектроскопии глубоких уровней и комбинационного рассеяния света. Установлено, что с увеличением доли кремния в растворе однофононный пик комбинационного рассеяния света, обусловленный колебаниями Ge — Ge, смещается в область более низких частот со скоростью $\Delta\omega_{Ge-Ge}/\Delta x = (31{,}3 \pm 0{,}7)$ см$^{-1}$, а температура максимума пика нестационарной спектроскопии глубоких уровней и комбинационного рассеяния света основного радиационного дефекта при постоянной скорости эмиссии электронов e_n возрастает. Соответствующее увеличение свободной энергии ионизации для эмиссии электронов составляет $\Delta E_e/\Delta x = (2{,}9 \pm 0{,}1)$ эВ. В ангармоническом приближении потенциала взаимодействия атомов в кристалле из анализа смещения пика комбинационного рассеяния света найдена зависимость уменьшения постоянной решетки $Ge_{1-x}Si_x$, соответствующая закону Вегарда $a(x) = a_{Ge} - (a_{Ge} - a_{Si})x = 5{,}623 - (0{,}25 \pm 0{,}3)x$ Å, с ростом содержания Si. Установлена линейная зависимость изменения энергии активации дефекта от параметра решетки $\Delta E_e/\Delta a = (1{,}6 \pm 0{,}2)$ мэВ/Å. Показано, что увеличение энергии ионизации дефекта связано с уменьшением средней длины связи Ge — Ge.

Ключевые слова: твердые растворы; кремний; германий; ионы; водород; комбинационное рассеяние; фонон; энергия ионизации; радиационный дефект.

Образец цитирования:
Смирнова О. Ю., Стельмах Г. Ф., Покотило Ю. М., Петух А. Н., Маркевич В. П., Королик О. В., Мазаник А. В. Оптические и электронные свойства твердых растворов германий – кремний // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2018. № 2. С. 52–60.

For citation:
Smirnova O. Yu., Stelmach G. F., Pokotilo Yu. M., Petukh A. N., Markevich V. P., Korolik O. V., Mazanik A. V. Optical and electronic properties of germanium – silicon solid solutions. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2018. No. 2. P. 52–60 (in Russ.).

Авторы:
Ольга Юрьевна Смирнова – преподаватель кафедры физической оптики и прикладной информатики физического факультета.
Георгий Фомич Стельмах – кандидат физико-математических наук, доцент; доцент кафедры физической оптики и прикладной информатики физического факультета.
Юрий Мефодиевич Покотило – кандидат физико-математических наук, доцент; доцент кафедры энергофизики физического факультета.
Алла Николаевна Петух – кандидат физико-математических наук; старший научный сотрудник кафедры энергофизики физического факультета.
Владимир Павлович Маркевич – кандидат физико-математических наук; научный сотрудник.
Ольга Васильевна Королик – кандидат физико-математических наук; старший научный сотрудник кафедры энергофизики физического факультета.
Александр Васильевич Мазаник – кандидат физико-математических наук, доцент; доцент кафедры энергофизики физического факультета.

Authors:
Olga Yu. Smirnova, lecturer at the department of physical optics and applied informatics, faculty of physics.
smirnova@bsu.by
Georgy F. Stelmach, PhD (physics and mathematics), docent; associate professor at the department of physical optics and applied informatics, faculty of physics.
stelmach@bsu.by
Yuri M. Pokotilo, PhD (physics and mathematics), docent; associate professor at the department of energy physics, faculty of physics.
pokotilo@bsu.by
Alla N. Petukh, PhD (physics and mathematics); senior researcher at the department of energy physics, faculty of physics.
petuch@bsu.by
Vladimir P. Markevich, PhD (physics and mathematics); researcher.
v.markevich@manchester.as.uk
Olga V. Korolik, PhD (physics and mathematics); senior researcher at the department of energy physics, faculty of physics.
zinchuk@bsu.by
Alexander V. Mazanik, PhD (physics and mathematics), docent; associate professor at the department of energy physics, faculty of physics.
mazanik@bsu.by

OPTICAL AND ELECTRONIC PROPERTIES OF GERMANIUM – SILICON SOLID SOLUTIONS

***O. Yu. SMIRNOVA*[a], *G. F. STELMACH*[a], *Yu. M. POKOTILO*[a], *A. N. PETUKH*[a], *V. P. MARKEVICH*[b], *O. V. KOROLIK*[a], *A. V. MAZANIK*[a]**

[a]*Belarusian State University, 4 Niezaliežnasci Avenue, Minsk 220030, Belarus*
[b]*University of Manchester, Sackville Street, Manchester M601QD, United Kingdom*
Corresponding author: A. N. Petukh (petuch@bsu.by)

The electronic and structural properties of $Ge_{1-x}Si_x$ solid solutions ($x = 0–0.062$) grown by the Czochralski method and implanted with proton were studied using deep level transient spectroscopy (DLTS) and Raman scattering. It was found that with an increase of the silicon fraction in the solution, the single-phonon peak corresponding to Ge—Ge vibrations shifts in the Raman spectra to lower frequencies with a rate $\Delta\omega_{Ge—Ge}/\Delta x = (31.3 \pm 0.7)$ cm^{-1}, and the temperature of the maximum of the DLTS peak for the main radiation defect at a constant electron emission rate e_n increases. The corresponding rate of increase in the free activation energy for electron emission is $\Delta E_e/\Delta x = (2.9 \pm 0.1)$ eV. The correlation between increasing Si content and decreasing in the lattice constant of $Ge_{1-x}Si_x$, corresponding to Vegard's law $a(x) = a_{Ge} - (a_{Ge} - a_{Si})x = 5{,}623 - (0.25 \pm 0.3)x$ Å, was found from the Raman peak shift in the anharmonic approximation for the atomic interaction in a crystal. A linear dependence of the change in the activation energy of a defect on the lattice parameter $\Delta E_e/\Delta a = (1.6 \pm 0.2)$ meV/Å was found to occur. It was shown that an increasing in the ionization energy of defect is associated with a decreasing in the average length of the Ge—Ge bond.

Key words: solid solutions; silicon; germanium; ions; hydrogen; Raman scattering; phonon; ionization energy; radiation defect.

Введение

Твердые растворы GeSi – перспективные материалы для микроэлектронной промышленности вследствие возможности инженерии электронного спектра, позволяющей создавать новые оптические и высокочастотные полупроводниковые приборы [1]. В связи с этим актуальными являются исследования структурной трансформации кристаллической решетки в зависимости от компонентного состава растворов и механизмов ее влияния на свойства дефектов и примесей, особенно проявляющих электрическую активность в полупроводниках [2].

В настоящей работе изучается корреляция между смещением частоты однофононного пика комбинационного рассеяния света и изменением энергии ионизации радиационных дефектов, образованных имплантацией ионов водорода, при различной концентрации компонентов твердого раствора.

Методика эксперимента

Исследования проводились на объемных монокристаллических образцах твердых растворов $Ge_{1-x}Si_x$ ($x = 0–0{,}062$) *n*-типа с удельным сопротивлением 1 Ом · см. Имплантация ионов водорода флюенсом 10^{15} см$^{-2}$ с энергией 300 кэВ и облучение электронами с энергией 6 МэВ осуществлялись при комнатной температуре.

Спектры комбинационного рассеяния света (КРС) записывались при комнатной температуре с помощью конфокального спектрометра Nanofinder HE (LOTIS TII, Германия). Регистрация спектров осуществлялась по схеме обратного рассеяния, разрешение спектрометра составляло 0,3 см$^{-1}$. Подводимая к образцу оптическая мощность равнялась 2 мВт, а диаметр возбуждающего пучка составлял около 1 мкм. Использовалось возбуждение излучением твердотельного лазера с длиной волны 532 нм. КРС измерялись до имплантации и после нее.

Емкостные измерения проводились на диодах Шоттки, которые изготавливались путем термического напыления золота на поверхность кристаллов непосредственно после травления в растворе $1\,HF + 10\,HNO_3$. Качество Au—Ge, барьеров Шоттки, контролировалось путем измерения вольт-амперных характеристик при различных (77–290 К) температурах.

Глубокие электронные уровни характеризовались с помощью стандартной методики нестационарной спектроскопии глубоких уровней (НСГУ) [3]. В основе этого метода лежит измерение разности емкостей $C(t_1) - C(t_2)$ на кривой релаксации емкости в процессе перезарядки центра при двух фиксированных значениях времени t_1 и t_2. При изменении температуры функция

$$S(T) = \frac{\left[C(t_1) - C(t_2)\right]}{C}, \quad (1)$$

где C – стационарное значение емкости при обратном смещении, имеет вид спектральной линии. При постоянном значении отношения $\frac{t_1}{t_2}$ амплитуда $S(T)$ функции (1) однозначным образом связана с концентрацией дефекта, а постоянная времени термической эмиссии электронов с уровней дефектов τ_m, соответствующая температуре максимума пика, определяется соотношением

$$\tau_m = \frac{t_1 - t_2}{\ln\left(\frac{t_1}{t_2}\right)}. \quad (2)$$

При изменении величины t_2 (окна регистрации) температуры максимумов пиков будут смещаться. Таким образом, измеряя спектры НСГУ при различных окнах регистрации, можно найти температурную зависимость скорости эмиссии носителей заряда $e_n = \frac{1}{\tau_m}$, которая, как следует из (2), связана с энтальпией H и энтропией S ионизации дефекта следующим соотношением [4]:

$$e_n = V_e \sigma_0 N_c \exp\left(-\frac{S}{k}\right)\exp\left(-\frac{H + E_\sigma}{kT}\right), \quad (3)$$

где $V_e = \left(\frac{3kT}{m_n}\right)^{0,5}$ – тепловая скорость электронов; $N_c = 2{,}5 \cdot 10^{19}\left(\frac{m_n}{m_0}\right)^{1,5}\left(\frac{T}{300}\right)^{1,5}$ – эффективная плотность состояний в зоне проводимости; m_n – эффективная масса электрона; m_0 – масса свободного электрона; σ_0 – сечение захвата при $T \to \infty$; E_σ – энергетический барьер при захвате носителей заряда. Фактически из измерений скорости эмиссии не удается определить отдельно H и S из формулы (3). Эти величины можно измерить лишь в сочетании с сечением захвата при $T \to \infty$ и энергетическим барьером для захвата, а именно: $\sigma = \sigma_0 \exp\left(-\frac{S}{k}\right)$ и $E_e = H + E_\sigma$, где E_e – энергия активации для эмиссии электронов или дырок. Для определения значений энергии ионизации используются кривые Аррениуса, которые выражены в следующем виде [3]:

$$\frac{e_n}{T^2} = A_e \exp\left(-\frac{E_e}{kT}\right), \quad (4)$$

где введен предэкспоненциальный фактор A_e, а скорость эмиссии электронов поделена на T^2, так как произведение $\left(V_e \cdot N_c\right)$ является квадратичной функцией температуры.

Результаты эксперимента и их обсуждение

Спектр КРС для образца $Ge_{1-x}Si_x$ ($x = 0{,}062$), где наблюдаются три пика, обусловленных колебаниями связей Ge—Ge (1), Ge—Si (2) и Si—Si (3) [5], представлен на рис. 1.

Пики КРС, обусловленные колебаниями связи (Ge—Ge), при различных значениях x приведены на рис. 2. Видно, что наличие примеси кремния сдвигает однофононный пик Ge (см. рис. 2, пик *1*) в область более низких частот. Согласно [5] это объясняется сжатием решетки германия при добавлении атомов кремния, что приводит к изменению силовой константы связи Ge—Ge. Зависимость максимума частоты пика от атомной доли кремния представлена на рис. 3. Полученная зависимость хорошо совпадает с результатами численного моделирования [6] (сплошная линия), в соответствии с которыми

$$\omega_{Ge-Ge} = \omega^0_{Ge-Ge} - 32x + 12x^2, \quad (5)$$

где ω^0_{Ge-Ge}, $см^{-1}$, – частота оптического фонона в чистом германии; ω_{Ge-Ge} – частота оптического фонона в твердом растворе. Для небольших значений концентрации кремния зависимость (5) может быть представлена линейным выражением $\omega^0_{Ge-Ge} - \omega_{Ge-Ge} \approx 32x$. На рис. 3 сплошная линия соответствует соотношению $\omega_{Ge-Ge} = \omega^0_{Ge-Ge} - (31{,}3 \pm 0{,}7)x$ $см^{-1}$.

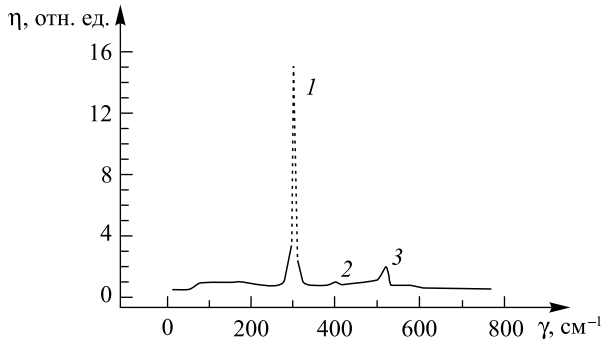


Рис. 1. Спектр КРС в твердом растворе $Ge_{1-x}Si_x$ (x = 0,062).
Наблюдаемые пики соответствуют частотам колебаний мод:
1 – (Ge—Ge); *2* – (Ge—Si); *3* – (Si—Si)

Fig. 1. Raman spectrum in the solid solution $Ge_{1-x}Si_x$ (x = 0.062).
The observed peaks correspond to the mode oscillation frequencies:
1 – (Ge—Ge); *2* – (Ge—Si); *3* – (Si—Si)

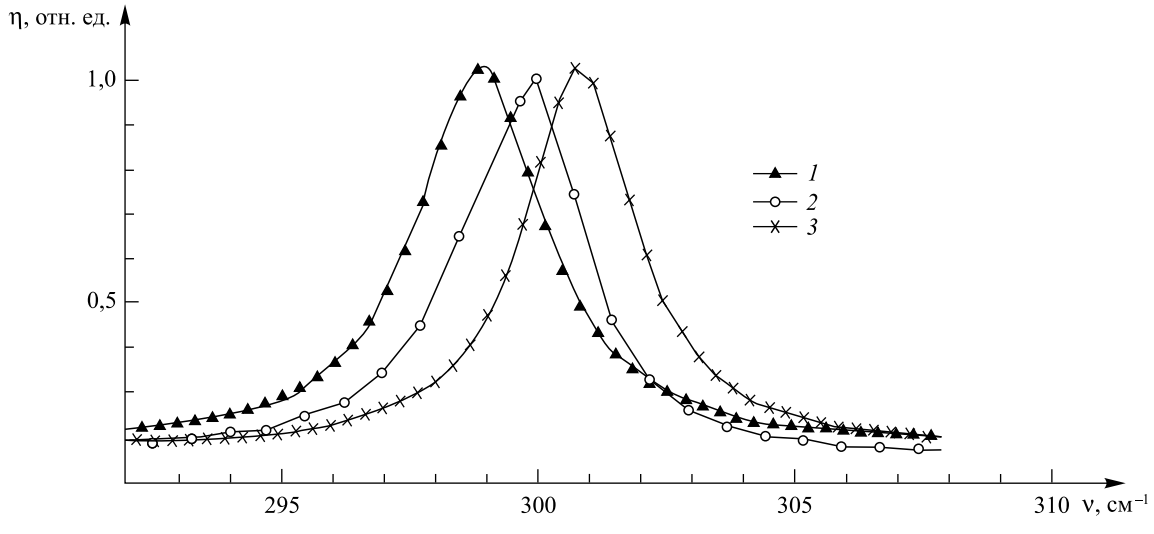


Рис. 2. Спектр комбинационного рассеяния света в области однофононного рассеяния
для $Ge_{1-x}Si_x$ с различным содержанием кремния (x: *1* – 0; *2* – 0,031; *3* – 0,062)

Fig. 2. Raman spectrum in the region of single-phonon scattering
for $Ge_{1-x}Si_x$ with different Si content (x: *1* – 0; *2* – 0.031; *3* – 0.062)

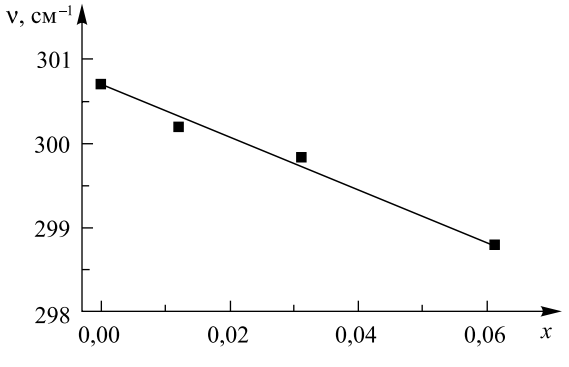


Рис. 3. Зависимость положения максимума пика КРС, обусловленного
колебаниями связи Ge—Ge, от атомной доли кремния (x)
в образцах $Ge_{1-x}Si_x$. Сплошная линия – расчет из работы [6]

Fig. 3. Position of the Raman peak maximum
caused by the Ge—Ge bond vibrations versus the atomic fraction
of silicon (x) in $Ge_{1-x}Si_x$ samples. Solid line is for calculations [6]

Зависимость изменения частоты пика, обусловленного колебаниями связи Ge—Ge, от содержания кремния x (см. рис. 2) может быть объяснена в модели ангармонического кристалла за счет изменения длины связи между атомами при релаксации решетки в процессе образования твердого раствора. Действительно, в ангармоническом приближении следует учитывать, что возвращающая сила не подчиняется закону Гука, а нелинейно зависит от смещения в соответствии с выражением [7]

$$F = -\beta\left(R - R_0\right) + \gamma\left(R - R_0\right)^2, \tag{6}$$

где β – коэффициент квазиупругой силы; γ – коэффициент ангармоничности; $\left(R - R_0\right)$ – отклонение атома от положения равновесия. В поле силы, как следует из (6), приводящей к растяжению или сжатию решетки кристалла, атомы будут занимать новое положение равновесия $\left(R_0 + \Delta R_0\right)$. Тогда для изменения частоты пика $\Delta\omega = \omega^0_{\mathrm{Ge}-\mathrm{Ge}} - \omega_{\mathrm{Ge}-\mathrm{Ge}}$ можно получить соотношение [7]

$$\frac{\Delta\omega}{\omega_{\mathrm{Ge}-\mathrm{Ge}}} = \frac{\gamma\Delta R_0}{\beta}. \tag{7}$$

Из анализа (7) видно, что только в ангармоническом приближении, когда величина γ не равна нулю, будет наблюдаться изменение частоты пика при изменении длины связи. Это позволяет определить зависимость параметра решетки германия от содержания неосновного компонента раствора кремния в соответствии с соотношением Грюнайзена [8]:

$$\frac{\omega^0_{\mathrm{Ge}-\mathrm{Ge}}}{\omega_{\mathrm{Ge}-\mathrm{Ge}}} = \left(\frac{V}{V_0}\right)^{\gamma_{\mathrm{Ge}}}, \tag{8}$$

где V_0 – объем недеформированной элементарной ячейки; V – объем элементарной ячейки в твердом растворе; γ_{Ge} – параметр Грюнайзена. Для германия эти параметры имеют следующие значения: постоянная решетки $a_{\mathrm{Ge}} = 0{,}565\,79$ нм, параметр Грюнайзена для связи Ge—Ge $\gamma_{\mathrm{Ge}} = (1{,}1–1{,}15)$ в диапазоне $(0{,}0 < x < 0{,}10)$ [9], $\omega_0 = 300$ см$^{-1}$ [8].

Из данных рис. 3 на основании соотношения Грюнайзена найдена зависимость постоянной решетки в твердом растворе $\mathrm{Ge}_{1-x}\mathrm{Si}_x$ от x, которая представлена на рис. 4. Сплошная линия на рис. 4 представляет собой аппроксимацию, соответствующую линейному закону Вегарда

$$a(x) = a_{\mathrm{Ge}} - \left(a_{\mathrm{Ge}} - a_{\mathrm{Si}}\right)x = 5{,}623 - (0{,}25 \pm 0{,}3)x,\ \text{Å}\ \ [10].$$

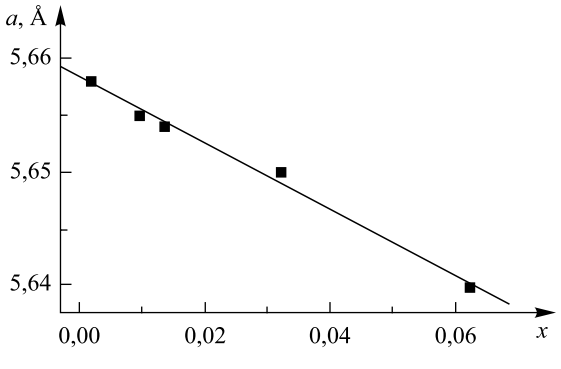


Рис. 4. Зависимость постоянной решетки твердых растворов $\mathrm{Ge}_{1-x}\mathrm{Si}_x$ от x
Fig. 4. The lattice constant of $\mathrm{Ge}_{1-x}\mathrm{Si}_x$ solid solutions as a function of x

В теории релаксированных твердых растворов обычно рассматривают два предельных случая изменения структуры решетки [11]:

а) длина связи между атомами есть величина постоянная, равная сумме радиусов составных элементов и не зависящая от состава, т. е. релаксация упругих напряжений происходит за счет незначительного искажения углов между связями (предел Паулинга [12]);

б) если энергетически более выгодно, длины связей между атомами изменяются линейно, без искажения углов между связями (предел Вегарда [10]).

В нашем случае слабого твердого раствора $Ge_{1-x}Si_x$ ($x < 0{,}062$) релаксация напряжения решетки происходит за счет линейного уменьшения длины связи Ge—Ge при добавлении атомов кремния (см. рис. 4).

Из анализа спектров НСГУ, представленных на рис. 5, следует, что максимум пика для образцов $Ge_{1-x}Si_x$, имплантированных ионами водорода, смещается в область низких температур с уменьшением содержания кремния при постоянной скорости эмиссии, что в соответствии с выражением (4) свидетельствует о снижении энергии активации для эмиссии E_e электронов.

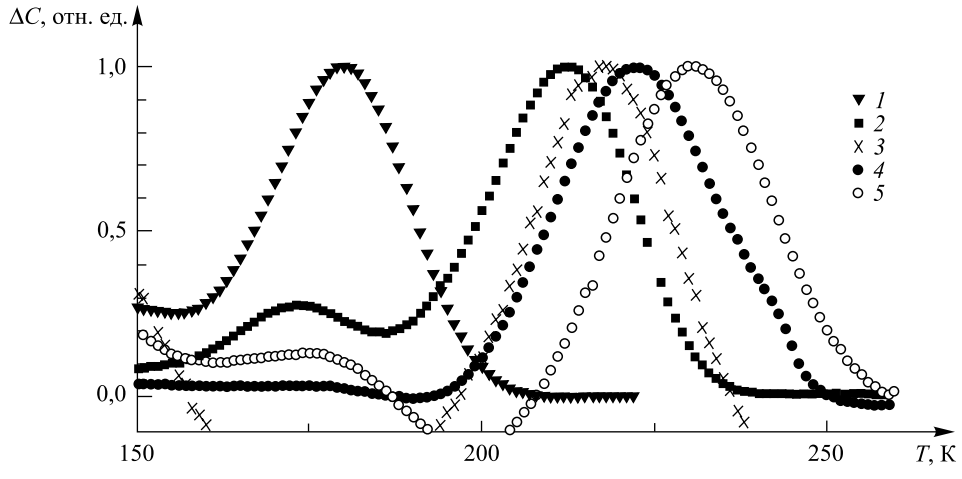


Рис. 5. Спектры НСГУ для $Ge_{1-x}Si_x$ с различным содержанием кремния (кривые *2–5*), имплантированных ионами водорода флюенсом $1 \cdot 10^{15}$ см$^{-2}$, и для $Ge_{1-x}Si_x$, облученного электронами флюенсом $1 \cdot 10^{15}$ см$^{-2}$ (кривая *1*).
Параметры измерения: скорость эмиссии $e_n = 2 \cdot 10^3$ с$^{-1}$, напряжение смещения базы $U_b = -5$ В, длительность импульса заполнения $t_p = 1 \cdot 10^4$ с. Доля кремния *x*: *1*, *4* – 0,012; *2* – 0; *3* – 0,008; *5* – 0,031

Fig. 5. DLTS spectra for $Ge_{1-x}Si_x$ samples with different content of silicon (curves *2–5*) implanted with hydrogen ions at the fluence $1 \cdot 10^{15}$ cm^{-2}, and for $Ge_{1-x}Si_x$ (curve *1*) irradiated with electrons at the fluence $1 \cdot 10^{15}$ cm^{-2}.
Measuring parameters: emission rate $e_n = 2 \cdot 10^3$ s^{-1}, bias voltage of the base $U_b = -5$ V, filling pulse duration $t_p = 1 \cdot 10^4$ s. Silicon content *x*: *1*, *4* – 0.012; *2* – 0; *3* – 0.008; *5* – 0.031

Кроме того, значения этих температур существенно отличаются от таковых для пика в образце, облученном электронами, поэтому при этих видах облучения образуются различные дефекты. Действительно, дефект при облучении электронами является известным компенсирующим радиационным дефектом – *E*-центром (комплекс фосфор – вакансия) со значениями параметров E_e = 0,30 эВ и $\sigma_0 = 2{,}7 \cdot 10^{-15}$ см^2 [12; 13]. Значения параметров дефекта при имплантации ионами водорода, найденные из зависимостей Аррениуса (рис. 6), приведены в таблице.

Параметры радиационных дефектов в твердых растворах $Ge_{1-x}Si_x$
Parameters of radiation defects in $Ge_{1-x}Si_x$ solid solutions

x	$A_e(1 \cdot 10^5)$, с$^{-1} \cdot$ К$^{-2}$	E_e, эВ	σ_0, см^2
0	1,09	0,27	$2{,}5 \cdot 10^{-17}$
0,008	2,0	0,29	$4{,}6 \cdot 10^{-17}$
0,012	6,6	0,32	$1{,}46 \cdot 10^{-16}$
0,031	46,0	0,36	$1{,}05 \cdot 10^{-15}$

Из анализа полученных данных видно, что энергия ионизации и сечение захвата дефектов существенно изменяются в зависимости от величины *x*. Можно предположить, что это связано с различной природой образующихся дефектов. Однако зависимость $\ln A_e = f(E_e)$ (рис. 7) подчиняется правилу Мейера – Нельделя [12] и тем самым подтверждает одинаковую природу дефектов, образующихся в растворах $Ge_{1-x}Si_x$, при имплантации ионами водорода [12].

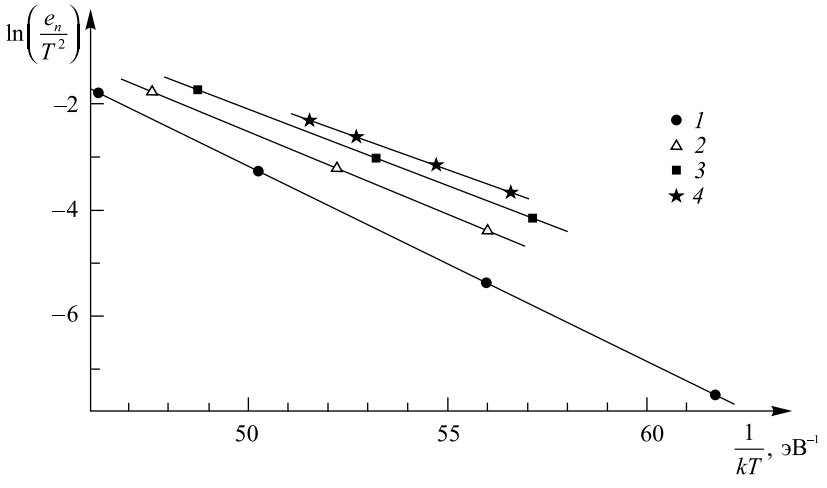


Рис. 6. Зависимости Аррениуса для центров, образованных в $Ge_{1-x}Si_x$ имплантацией ионами водорода. Параметры дефектов представлены в таблице, приведенной ниже.
Для *x*: *1* – 0,031; *2* – 0,012; *3* – 0,008; *4* – 0

Fig. 6. Arrhenius plots for the centers formed in $Ge_{1-x}Si_x$ by implantation with hydrogen ions. Parameters of the traps derived from the plots are listed in the table.
For *x*: *1* – 0.031; *2* – 0.012; *3* – 0.008; *4* – 0

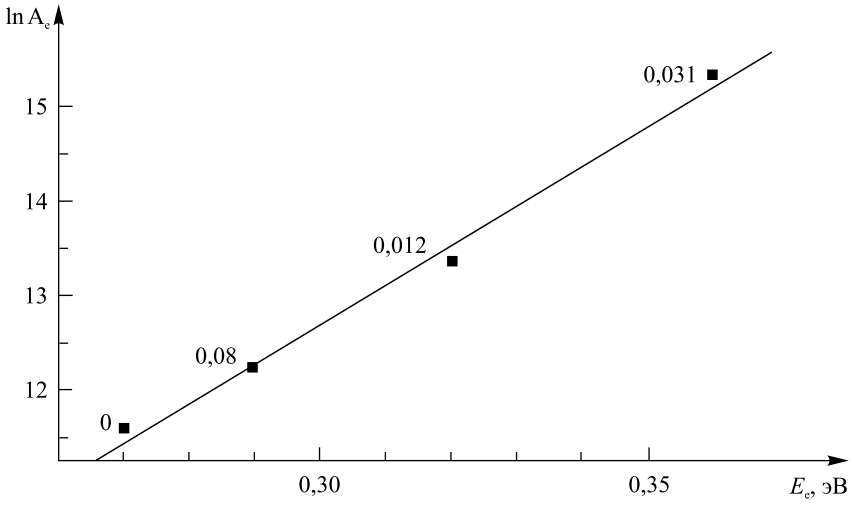


Рис. 7. Зависимость предэкспоненциального фактора $\ln A_e$ от энергии ионизации электронов E_e для дефектов в образцах $Ge_{1-x}Si_x$, имплантированных протонами

Fig. 7. Dependence of the pre-exponential factor $\ln A_e$ on the electron ionization energy E_e for the defects in proton implanted $Ge_{1-x}Si_x$ solid solutions

Следовательно, изменение параметров наблюдаемого радиационного дефекта, по-видимому, связано с деформацией решетки в области их локализации.

Зависимость энергии ионизации радиационных дефектов от состава твердых растворов кремния с примесью германия наблюдалась и ранее [12; 14]. Причиной этого, по мнению авторов [12; 14], являлось изменение параметра решетки (длины связи Si — Si).

В нашем случае так же, как и в [12; 14], наблюдается линейное изменение энергии ионизации электронов водородосодержащего дефекта в образцах $Ge_{1-x}Si_x$ в зависимости от атомной доли кремния *x* (рис. 8) с наклоном $\Delta E_e/\Delta x = (2{,}9 \pm 0{,}1)$ эВ.

Кроме того, изменение энергии ионизации $\Delta E_e = E_0 - E_x$ линейно уменьшается со снижением параметра решетки $\Delta E_e/\Delta a = (1{,}6 \pm 0{,}2)$ мэВ/Å (рис. 9).

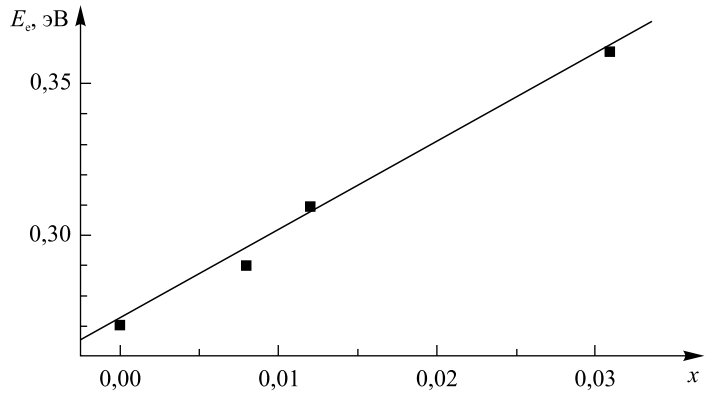


Рис. 8. Зависимость энергии ионизации электронов водородосодержащего дефекта в твердых растворах $Ge_{1-x}Si_x$ от атомной доли кремния x
Fig. 8. The electron ionization energy of a hydrogen-related defect in $Ge_{1-x}Si_x$ solid solutions versus the atomic fraction of silicon x

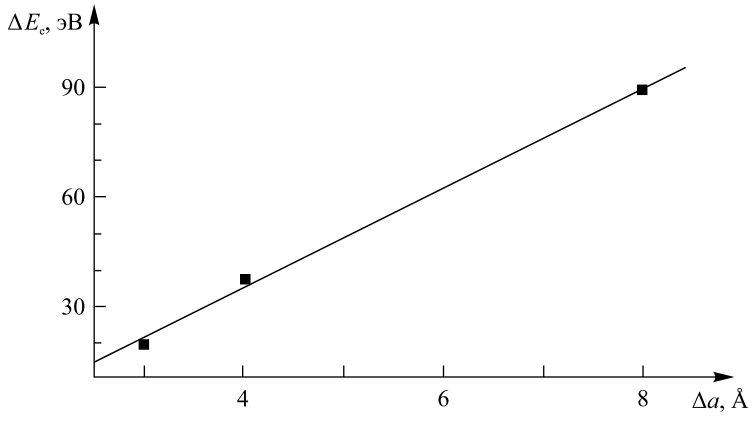


Рис. 9. Изменение энергии ионизации электронов водородосодержащего дефекта в твердых растворах $Ge_{1-x}Si_x$ при изменении параметра решетки
Fig. 9. Variations in the electron ionization energy for a hydrogen-related defect in the $Ge_{1-x}Si_x$ solid solutions versus the lattice parameter

Заключение

Таким образом, наблюдаемые линейные зависимости частоты пика КРС и параметра решетки в твердых растворах $Ge_{1-x}Si_x$ ($x = 0-0{,}062$) обусловлены уменьшением связей Ge — Ge при увеличении содержания кремния. Следовательно, обнаруженное линейное возрастание энергии ионизации радиационного дефекта $\Delta E_e/\Delta x = (2{,}9 \pm 0{,}1)$ эВ и ее изменение $\Delta E_e/\Delta a = (1{,}6 \pm 0{,}2)$ мэВ/Å от параметра решетки обусловлены структурной деформацией твердых растворов при изменении длин связей атомов германия.

Библиографические ссылки

1. *Claus C., Simoen E.* Germanium Based Technologies. From Materials to Devices. Amsterdam : Elsevier, 2007.
2. *Balsas A., Countinho J., Torres J. B., et al.* Calculation of deep states in SiGe alloys. Interstitial carbon-oxygen complexes // Phys. Rev. B. 2004. Vol. 70, issue 8. Article ID: 085201-7. DOI: 10.1103/PhysRevB.70.085201.
3. *Dast A., Singht V. F., Lang D. V.* Deep level transient spectroscopy (DLTS) analysis of defect levels in semiconductors alloys // Semicond. Sci. Technol. 1988. Vol. 3, № 12. P. 1177–1183. DOI: 10.1088/0268-1242/3/12/005.
4. *Markevich A. V., Litvinov V. V., Emtsev V. V., et al.* Phonon-assisted changes in charge states of deep level defects in germanium // Phys. B: Condens. Matter. 2006. Vols 376–377. P. 61–65. DOI: 10.1016/j.physb.2005.12.017.
5. *Wenli Z., Tinghui L.* Compositional dependence of Raman frequencies in SiGe alloys // J. Semicond. 2012. Vol. 33, issue 11. Article ID: 112001-5. DOI: 10.1088/1674-4926/33/11/112001.

6. *Володин В. А., Ефремов В. Д., Дерябин А. С. и др.* Определение состава и механических деформаций в GeSi гетероструктурах из данных спектроскопии комбинационного рассеяния света: уточнение параметров модели // ФТП. 2006. Т. 40, вып. 11. С. 1349–1355.

7. *Ансельм А. И.* Введение в теорию полупроводников : монография. М. : Наука, 1978.

8. *Гайслер В. А., Кузнецов О. А., Неизвестный И. Г. и др.* Комбинационное рассеяние света на локальных колебаниях твердых растворов Ge_xSi_{1-x} // ФТТ. 1989. Т. 31, вып. 11. С. 292–297.

9. *Sui Z., Burke H. H., Herman I. P.* Raman scattering in germanium-silicon alloys under hydrostatic pressure // Phys. Rev. B. 1993. Vol. 48, issue 4. P. 2162–2168. DOI: 10.1103/PhysRevB.48.2162.

10. *Vegard L.* Die Konstitucion der Mischkristalle und die Raumfulling der Atome // Zeitschrift für Physic. 1921. Vol. 5. P. 17–26. DOI: 10.1007/BF01349680.

11. *Васин А. С.* Моделирование локальных структурных свойств твердого раствора SiGe с использованием эмпирических потенциалов // Вестн. Нижегор. ун-та им. Н. И. Лобачевского. 2010. № 5 (2). С. 371–375.

12. *Markevich V. P., Hawkins I. D., Peaker A. R., et al.* Vacancy-group-V impurity atom pairs in Ge crystals doped with P, As, Sb and Bi // Phys. Rev. B. 2004. Vol. 70, issue 23. Article ID: 235213-7. DOI: 10.1103/PhysRevB.70.235213.

13. *Покотило Ю. М., Петух А. Н., Литвинов В. В. и др.* Формирование доноров в твердых растворах $Ge_{1-x}Si_x$, имплантированных протонами // Вестн. БГУ. Сер. 1, Физика. Математика. Информатика. 2014. № 2. С. 56–60.

14. *Markevich V. P., Peaker A. R., Coutinho I., et al.* Structure and properties of vacancy-oxygen complexes in $Si_{1-x}Ge_x$ alloys // Phys. Rev. B. 2004. Vol. 69, issue 12. Article ID: 125218. DOI: 10.1103/PhysRevB.69.125218.

15. *Pauling L.* The nature of the chemical bond. New York : Cornell university press, 1960.

References

1. Claus C., Simoen E. Germanium Based Technologies. From Materials to Devices. Amsterdam : Elsevier, 2007.

2. Balsas A., Countinho J., Torres J. B., et al. Calculation of deep states in SiGe alloys. Interstitial carbon-oxygen complexes. *Phys. Rev. B.* 2004. Vol. 70, issue 8. Article ID: 085201-7. DOI: 10.1103/PhysRevB.70.085201.

3. Dast A., Singht V. F., Lang D. V. Deep level transient spectroscopy (DLTS) analysis of defect levels in semiconductors alloys. *Semicond. Sci. Technol.* 1988. Vol. 3, No. 12. P. 1177–1183. DOI: 10.1088/0268-1242/3/12/005.

4. Markevich A. V., Litvinov V. V., Emtsev V. V., et al. Phonon-assisted changes in charge states of deep level defects in germanium. *Phys. B: Condens. Matter.* 2006. Vols 376–377. P. 61–65. DOI: 10.1016/j.physb.2005.12.017.

5. Wenli Z., Tinghui L. Compositional dependence of Raman frequencies in SiGe alloys. *J. Semicond.* 2012. Vol. 33, issue 11. Article ID: 112001-5. DOI: 10.1088/1674-4926/33/11/112001.

6. Volodin V. A., Efremov V. D., Deryabin A. S., et al. [Determination of composition and mechanical deformations in GeSi heterostructures from spectroscopic data of Raman scattering of light: refinement of model parameters]. *Fiz. Tekh. Poluprovodn. = Semiconductors.* 2006. Vol. 40, issue 11. P. 1349–1355 (in Russ.).

7. Anselm A. I. [Introduction to the theory of semiconductors] : monograph. Moscow : Nauka, 1978 (in Russ.).

8. Geisler V. A., Kuznetsov O. A., Neizvestnyi I. G., et al. [Raman scattering on local oscillations of Ge_xSi_{1-x} solid solutions]. *Fiz. Tverd. Tela = Phys. Solid State.* 1989. Vol. 31, issue 11. P. 292–297 (in Russ.).

9. Sui Z., Burke H. H., Herman I. P. Raman scattering in germanium-silicon alloys under hydrostatic pressure. *Phys. Rev. B.* 1993. Vol. 48, issue 4. P. 2162–2168. DOI: 10.1103/PhysRevB.48.2162.

10. Vegard L. Die Konstitucion der Mischkristalle und die Raumfulling der Atome. *Zeitschrift für Physic.* 1921. Vol. 5. P. 17–26. DOI: 10.1007/BF01349680 (in Ger.).

11. Vasin A. S. [Modeling of local structural properties of SiGe solid solution using empirical potentials]. *Vestnik of N. I. Lobachevsky Univ. of Nizhni Novgorod.* 2010. No. 5 (2). P. 371–375 (in Russ.).

12. Markevich V. P., Hawkins I. D., Peaker A. R., et al. Vacancy-group-V impurity atom pairs in Ge crystals doped with P, As, Sb and Bi. *Phys. Rev. B.* 2004. Vol. 70, issue 23. Article ID: 235213-7. DOI: 10.1103/PhysRevB.70.235213.

13. Pokotilo Yu. M., Petukh A. N., Litvinov V. V., et al. Donors formation in solid solutions $Ge_{1-x}Si_x$ implanted with protons. *Vestnik BGU. Ser. 1, Fiz. Mat. Inform.* 2014. No. 2. P. 56–60 (in Russ.).

14. Markevich V. P., Peaker A. R., Coutinho I., et al. Structure and properties of vacancy-oxygen complexes in $Si_{1-x}Ge_x$ alloys. *Phys. Rev. B.* 2004. Vol. 69, issue 12. Article ID: 125218. DOI: 10.1103/PhysRevB.69.125218.

15. Pauling L. The nature of the chemical bond. New York : Cornell university press, 1960.

Статья поступила в редколлегию 12.01.2018.
Received by editorial board 12.01.2018.

УДК 539.21

МОДИФИКАЦИЯ ФАЗОВОГО СОСТАВА И МИКРОТВЕРДОСТИ ПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ БЫСТРОРЕЖУЩЕЙ СТАЛИ ПРИ КОМБИНИРОВАННОМ ПЛАЗМЕННОМ И ТЕРМИЧЕСКОМ ВОЗДЕЙСТВИИ

***Н. Н. ЧЕРЕНДА*[1)], *В. В. УГЛОВ*[1)],**
***А. М. КАШЕВСКИЙ*[1)], *В. М. АСТАШИНСКИЙ*[2)], *А. М. КУЗЬМИЦКИЙ*[2)]**

[1)]*Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Беларусь*
[2)]*Институт тепло- и массообмена им. А. В. Лыкова НАН Беларуси, ул. П. Бровки, 15, 220072, г. Минск, Беларусь*

Исследованы фазовый и элементный составы, микротвердость поверхностного слоя системы NbC – быстрорежущая сталь, подвергнутой комбинированному воздействию компрессионных плазменных потоков и термической обработке. Изучены структура и свойства модифицированного слоя с помощью рентгеноструктурного анализа, растровой электронной микроскопии, энергодисперсионного микроанализа и измерения микротвердости. Установлено, что плазменное воздействие на систему NbC – быстрорежущая сталь приводит к растворению карбидов и формированию нитридов ниобия ε-NbN и β-Nb_2N. С увеличением значения плотности энергии, поглощенной поверхностью, происходит уменьшение концентрации ниобия в анализируемом слое. Растворение карбидов ведет к снижению величины микротвердости. Последующий отжиг на воздухе при температуре 600 °С в течение 9 ч позволяет увеличить микротвердость в 1,3 раза по сравнению с исходным образцом стали.

Ключевые слова: быстрорежущая сталь; компрессионные плазменные потоки; отжиг; структурно-фазовые превращения; микротвердость.

Образец цитирования:
Черенда Н. Н., Углов В. В., Кашевский А. М., Асташинский В. М., Кузьмицкий А. М. Модификация фазового состава и микротвердости поверхностного слоя быстрорежущей стали при комбинированном плазменном и термическом воздействии // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2018. № 2. С. 61–70.

For citation:
Cherenda N. N., Uglov V. V., Kashevski A. M., Astashynski V. M., Kuzmitski A. M. Modification of high-speed steel phase composition and microhardness by combined plasma and thermal treatment. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2018. No. 2. P. 61–70 (in Russ.).

Авторы:
Николай Николаевич Черенда – кандидат физико-математических наук, доцент; доцент кафедры физики твердого тела физического факультета.
Владимир Васильевич Углов – доктор физико-математических наук, профессор; заведующий кафедрой физики твердого тела физического факультета.
Александр Михайлович Кашевский – инженер кафедры физики твердого тела физического факультета.
Валентин Миронович Асташинский – член-корреспондент НАН Беларуси, доктор физико-математических наук; заместитель директора по научной работе.
Антон Михайлович Кузьмицкий – кандидат физико-математических наук; старший научный сотрудник лаборатории физики плазменных ускорителей.

Authors:
Nikolai N. Cherenda, PhD (physics and mathematics), docent; associate professor at the department of solid state physics, faculty of physics.
cherenda@bsu.by
Vladimir V. Uglov, doctor of science (physics and mathematics), full professor; head of the department of solid state physics, faculty of physics.
uglov@bsu.by
Alexander M. Kashevski, engineer at the department of solid state physics, faculty of physics.
kashevskiiam@gmail.com
Valentin M. Astashynski, corresponding member of the National Academy of Sciences of Belarus, doctor of science (physics and mathematics); deputy director for research.
ast@hmti.ac.by
Anton M. Kuzmitski, PhD (physics and mathematics); senior researcher at the laboratory of plasma accelerators physics.
antey@hmti.ac.by

Журнал Белорусского государственного университета. Физика. 2018. № 2. С. 61–70
Journal of the Belarusian State University. Physics. 2018. No. 2. P. 61–70

MODIFICATION OF HIGH-SPEED STEEL PHASE COMPOSITION AND MICROHARDNESS BY COMBINED PLASMA AND THERMAL TREATMENT

***N. N. CHERENDA*[a], *V. V. UGLOV*[a], *A. M. KASHEVSKI*[a], *V. M. ASTASHYNSKI*[b], *A. M. KUZMITSKI*[b]**

[a]*Belarusian State University, 4 Niezaliežnasci Avenue, Minsk 220030, Belarus*
[b]*Heat and Mass Transfer Institute, National Academy of Sciences of Belarus, 15 P. Broŭki Street, Minsk 220072, Belarus*

Corresponding author: N. N. Cherenda (cherenda@bsu.by)

Phase and element composition, microhardness of the NbC – high-speed steel system subjected to the combined effect of compression plasma flows impact and heat treatment were investigated in this work. X-ray diffraction analysis, scanning electron microscopy, energy dispersion microanalysis and microhardness measurements were used for investigation of the modified layer structure and properties. The findings showed that the plasma impact on the NbC – high-speed steel system led to carbides dissolution and ε-NbN and β-Nb_2N nitrides formation. Growth of the energy absorbed by the surface resulted in niobium concentration decrease in the analyzed layer. Dissolution of carbides was the reason of microhardness diminishing. Subsequent annealing in air during 9 h at the temperature 600 °C led to microhardness increase by a factor of 1.3 compared with the initial steel sample.

Key words: high-speed steel; compression plasma flows; annealing; structural-phase transformations; microhardness.

Введение

В настоящее время происходит интенсивное развитие и совершенствование методов модификации эксплуатационных характеристик инструментальных сталей, что связано с необходимостью обработки новых материалов с улучшенным комплексом свойств, а также необходимостью повышения времени эксплуатации изготавливаемых инструментов. Среди различных видов стали, применяемых для изготовления режущего инструмента, наилучшими характеристиками (теплостойкостью и высокой твердостью) обладают быстрорежущие стали. Традиционно оптимальной структуры таких сталей, состоящей из карбидов легирующих элементов и мартенсита, как правило, добиваются термообработкой, включающей закалку при температуре 1200–1300 °С и последующий отпуск – при 550–560 °С.

В последние десятилетия получили развитие альтернативные методы упрочнения поверхностного слоя быстрорежущих сталей, основанные на воздействии концентрированными потоками высокоэнергетических частиц. Так, упрочнение стали лазерными и электронными пучками, как и в случае стандартной термообработки, заключается в формировании на этапе нагрева аустенитной структуры и ее последующем превращении в мартенсит на этапе сверхбыстрого охлаждения [1]. Как известно, для быстрорежущих сталей добиться повышения прочностных характеристик в случае такого воздействия можно лишь при оптимальных режимах обработки, обеспечивающих минимальное растворение карбидной фазы [1], или увеличении дисперсности мартенситно-карбидной смеси [2]. Однако обработка потоком частиц большей мощности может приводить к растворению карбидов, формированию легированного остаточного аустенита и уменьшению твердости. Так, высокоэнергетическое воздействие на быстрорежущие стали обусловливает гомогенизацию структуры – растворение карбидов типа Fe_3W_3C (M_6C) [3–5] и разупрочнение поверхностного слоя.

Несмотря на ухудшение прочностных характеристик поверхностного слоя, такое высокоэнергетическое воздействие может быть использовано как высокотемпературная закалка, обеспечивающая формирование однородной структуры, состоящей преимущественно из высоколегированного аустенита. Последующий отжиг позволяет восстановить структуру и получить более однородное распределение дисперсных карбидов [2; 6], что в целом ведет к повышению эксплуатационных характеристик по сравнению с традиционной термообработкой, которой, как правило, свойственна карбидная неоднородность. В этом направлении перспективным является использование компрессионных плазменных потоков (КПП), характеризующихся относительно бóльшим временем разряда (~100 мкс) и обеспечивающих длительное время существования расплава и протекание конвективных процессов массопереноса в расплаве [7], что ведет к гомогенизации структуры. Так, в работе [6] показано, что воздействие КПП на быстрорежущую сталь Р18 приводит к растворению в поверхностном слое толщиной до 25 мкм карбидов типа M_6C и формированию метастабильной фазы γ-Fe, включающей атомы легирующих элементов, относительное содержание которой зависит от плотности поглощенной энергии. При последующем отжиге в течение 3 ч

при 600 °С происходит формирование структуры с равноосными дисперсными зернами во всем модифицированном слое и выпадение мелкодисперсных карбидов по границам. Такая структура обеспечивает повышение микротвердости поверхностного слоя до ~12 ГПа.

Цель настоящей работы – использование комбинированной обработки, включающей в себя нанесение покрытия NbC, воздействие компрессионным плазменным потоком и последующий отжиг, для модификации структуры и свойств быстрорежущей стали марки Р18. Известно, что воздействие КПП на систему покрытие – подложка в режиме оплавления поверхностного слоя приводит к плавлению покрытия и поверхностного слоя подложки, жидкофазному перемешиванию под действием давления плазменного потока с последующим сверхбыстрым охлаждением [8]. В результате воздействия формируется поверхностный слой толщиной несколько десятков микрометров, легированный элементами покрытия и плазмообразующего газа. Таким образом, в поверхностный слой стали вводится как дополнительный углерод, так и карбидообразующий элемент, которые при последующем отжиге могут привести к повышению прочностных характеристик поверхностного слоя, без легирования всего объема режущего инструмента.

Методика эксперимента

Объектом исследования являлась быстрорежущая сталь Р18 (Fe – 73,9…76,5 мас. %, W – 17,0…18,5, Cr – 3,8…4,4, V – 1,0…1,4, Mo – 1,0, C – 0,7…0,8 мас. %). Модификация структуры и свойств поверхностного слоя проходила следующим образом. На первом этапе на образцы наносили покрытие из карбида ниобия методом вакуумного катодно-дугового осаждения при следующих параметрах процесса: ток горения дуги составлял 190 А, напряжение смещения – 120 В, время нанесения – 10 мин. Данный режим позволяет сформировать покрытие толщиной ~4 мкм. На втором этапе образцы обрабатывались компрессионными плазменными потоками, генерируемыми газоразрядным магнитоплазменным компрессором (МПК) компактной геометрии. В настоящих экспериментах МПК, плазмообразующим веществом которого являлся азот, работал в режиме «остаточного газа», при котором предварительно откачанная вакуумная камера заполнялась рабочим газом до заданного давления 400 Па, длительность разряда составляла 100 мкс. Обработку образцов производили 3 импульсами КПП. Плотность поглощенной энергии Q варьировалась в пределах от 13 до 27 Дж/см^2 путем изменения расстояния между образцом и катодом (8–14 см). На третьем этапе образец, обработанный КПП с параметрами Q = 18 Дж/см^2, подвергался отжигу на воздухе при температуре 600 °С в течение 3–9 ч.

Фазовый состав исследовался методом рентгеноструктурного анализа с помощью дифрактометра Rigaku Ultima IV (Япония) в излучении CuK_α в фокусировке параллельных пучков. Расчетная глубина проникновения рентгеновских лучей составляла 0,7–1,2 мкм в диапазоне углов 2θ = 32–101° с предполагаемым поглощением до 75 % излучения в образце.

Морфология поверхности изучалась методом растровой электронной микроскопии (РЭМ) на микроскопе LEO 1455 VP (Германия), контраст изображения формировался обратноотраженными электронами. Элементный состав образцов исследовался с помощью энергодисперсионного микроанализатора Oxford Instruments, сопряженного с растровым электронным микроскопом LEO 1455VP. Концентрация элементов определялась в поверхностном слое толщиной <1 мкм при минимальном увеличении. Относительная погрешность определения концентрации элементов не превышала 10 %.

Микротвердость исследуемых образцов измерялась на твердомере ПМТ3 (Россия) в диапазоне нагрузок 50–150 г.

Результаты эксперимента и их обсуждение

Воздействие КПП на образец системы NbC – сталь в использованном диапазоне режимов обработки приводит к плавлению его поверхностного слоя и последующей кристаллизации в условиях сверхбыстрого охлаждения. На рис. 1 представлены морфология поверхности исходного образца системы и образцов после воздействия КПП. Из рис. 1 видно, что при воздействии компрессионными плазменными потоками происходит растворение фаз, содержащих легирующие элементы с атомным номером большим, чем у железа. Области, включающие растворяющиеся фазы, соответствуют светлым участкам, которые выделяются на изображении из-за элементного контраста, формируемого благодаря использованию датчика отраженных электронов. В этом режиме съемки более светлые области содержат атомы с большей массой, что позволяет визуально судить о распределении элементов в поверхностном слое. Этими фазами могут являться карбиды Fe_3W_3C и нерастворенные в поверхностном слое участки покрытия NbC. Однако в условиях сверхбыстрой кристаллизации слоя процессы диффузии и выравнивания состава полностью пройти не успевают, вследствие чего образуются области с повышенным содержанием более тяжелых легирующих элементов (см. рис. 1, светлые зоны на фотографиях).

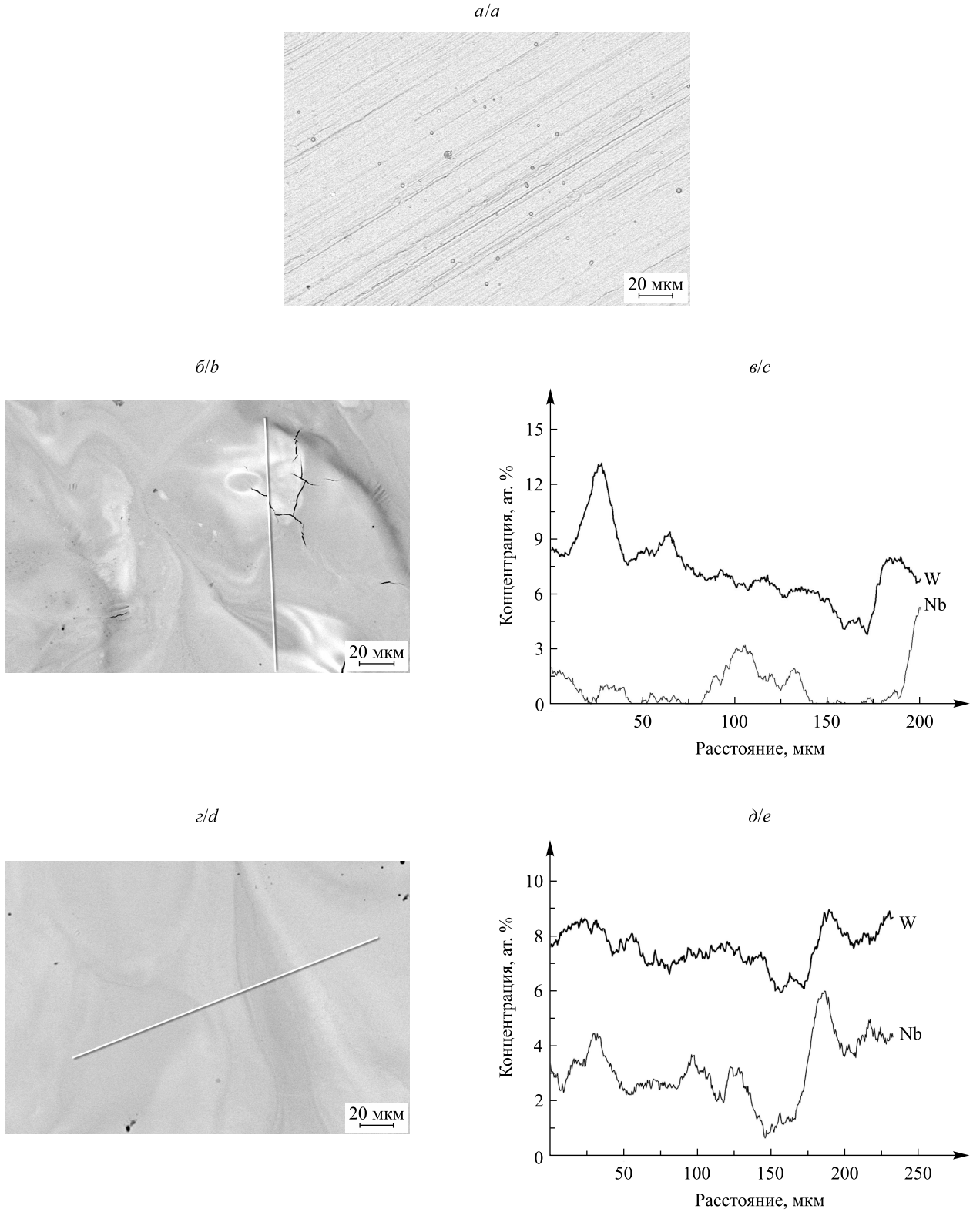


Рис. 1. Морфология поверхности (*а*, *б*, *г*) и распределение характеристического рентгеновского излучения Nb и W (*в*, *д*) образцов системы NbC – сталь:
а – до воздействия КПП; *б*, *в* – после воздействия КПП с $Q = 13$ Дж/см^2;
г, *д* – после воздействия КПП с $Q = 27$ Дж/см^2

Fig. 1. Surface morphology (*a*, *b*, *d*) and distribution of Nb and W characteristic X-ray radiation along the line (*c*, *e*) in samples of NbC – steel system:
a – before the compression plasma flows treatment;
b, *c* – after the compression plasma flows treatment with $Q = 13$ J/cm^2;
d, *e* – after the compression plasma flows treatment with $Q = 27$ J/cm^2

Увеличение плотности энергии, поглощенной поверхностью, приводит к более равномерному распределению легирующих элементов по исследуемому объему (см. рис. 1, *б* и *г*), что подтверждается распределением характеристического рентгеновского излучения Nb и W по линии (см. рис. 1, *в* и *д*). Этот эффект обусловлен повышением температуры поверхностного слоя при воздействии плазменных потоков и, соответственно, увеличением времени существования расплава и длительности конвективных потоков в расплаве, выравнивающих концентрацию элементов. Кроме того, на рис. 1, *б*, наблюдается присутствие трещин, локализованных на светлых участках, содержащих растворяющиеся карбиды. Формирование трещин может быть связано с процессом кристаллизации областей с различными элементным составом и плотностью в условиях сверхбыстрого охлаждения [9].

Элементный анализ (рис. 2) показал, что с увеличением плотности энергии, поглощенной поверхностью, происходит уменьшение концентрации ниобия в легированном слое, что может быть связано с возрастанием толщины проплавленного слоя и перераспределением легирующего элемента по всему проплавленному слою, а также с эрозией материала поверхности при воздействии [8]. Близкие значения концентрации Nb при Q, равном 13 и 18 Дж/см^2, могут быть обусловлены особенностями конвективного перемешивания при небольших плотностях энергии, приводящих к вытеснению нерастворенных участков покрытия NbC на дно ванны расплава, которая не попадает в область зондирования при элементном анализе.

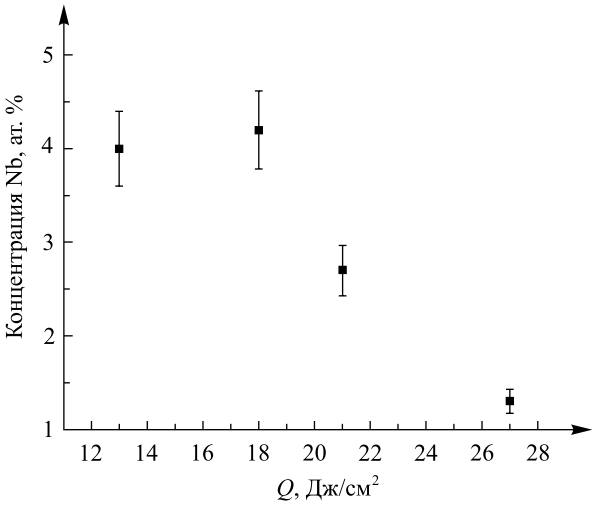


Рис. 2. Зависимость концентрации ниобия в образцах от плотности энергии, поглощенной поверхностью

Fig. 2. Dependence of niobium concentration in the samples on the energy density absorbed by the surface

Результаты фазового анализа поверхностного слоя до воздействия КПП и после него представлены на рис. 3, из которого видно, что в структуре исходной стали присутствует карбид Fe_3W_3C. После нанесения покрытия на дифракционной картине появляются линии, соответствующие карбиду NbC с гранецентрированной кубической кристаллической решеткой.

Воздействие КПП на образцы системы NbC – сталь в использованном диапазоне режимов приводит к растворению карбида Fe_3W_3C, что согласуется с результатами работ [3–6], а также карбида NbC, что коррелирует с результатами анализа морфологии поверхности и элементного состава (см. рис. 1 и 2). Линии этих карбидов отсутствуют на дифрактограммах обработанных образцов. С возрастанием плотности энергии, поглощенной поверхностью, происходит увеличение интенсивности дифракционной линии (200) α-Fe, что может свидетельствовать о формировании столбчатых кристаллов с преимущественной текстурой (100) [8]. После воздействия КПП на дифрактограммах появляются дифракционные линии низкотемпературной фазы ε-NbN с гексагональной структурой (пространственная группа $P6_3/mmc$), что может быть обусловлено присутствием азота как плазмообразующего газа в остаточной атмосфере вакуумной камеры. Преимущественное формирование нитрида ниобия в условиях одновременного существования в поверхностном слое атомов ниобия, углерода и азота определяется более низкой энтальпией образования нитрида ниобия (–234,3 кДж/моль в стандартных условиях [10]), чем карбида ниобия (–134,7 кДж/моль [11]). Согласно [12] нитрид ε-NbN имеет область гомогенности в интервале концентраций по азоту 48,0–50,6 ат. % и является стабильным при температуре ниже 1350 °С. При увеличении плотности энергии, поглощенной поверхностью, наблюдается тенденция к уменьшению интенсивности дифракционных линий этой фазы (см. рис. 3). Однако при плотностях поглощенной энергии

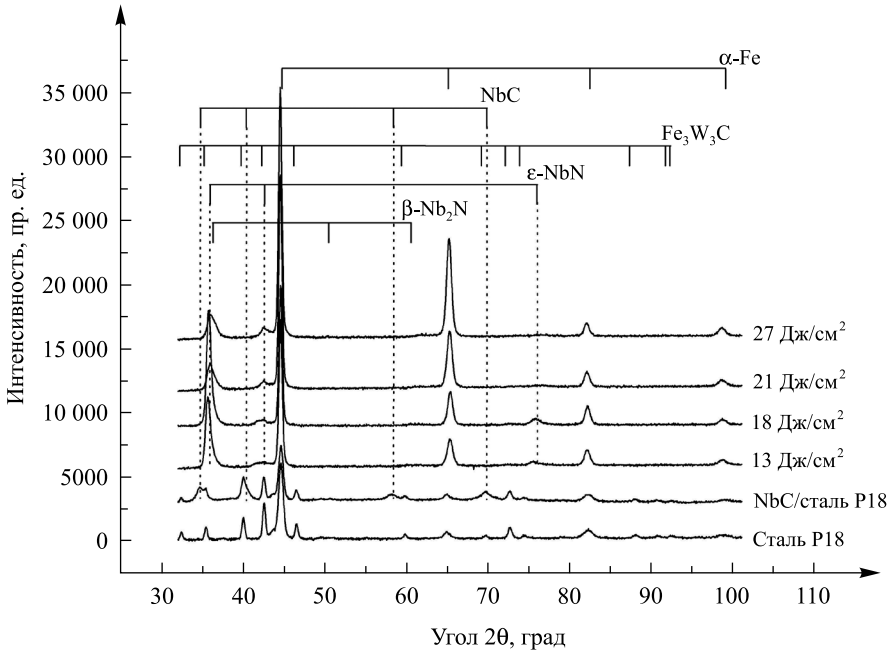


Рис. 3. Дифрактограммы образца стали и образцов системы NbC – сталь до воздействия КПП с различной плотностью энергии и после воздействия КПП с различной плотностью энергии, поглощенной поверхностью

Fig. 3. Diffraction patterns of steel sample and samples of NbC – steel system before compression plasma flows treatment with different densities of the energy and after compression plasma flows treatment with different densities of the energy absorbed by the surface

21 и 27 Дж/см^2 наблюдается появление «плеча» на дифракционной линии (101) ε-NbN (угол 2θ равен 35,9°), а также отдельно стоящая дифракционная линия малой интенсивности в области угла составляет ~61° (см. рис. 3). Эти линии могут быть отнесены к фазе β-Nb_2N (энтальпия образования – 248,9 кДж/моль [13]) с кристаллической решеткой, принадлежащей гексагональной сингонии и существующей в диапазоне концентраций по азоту 28,6–34,4 ат. % [12]. На основании данных фазового состава можно предположить, что увеличение плотности энергии, поглощенной поверхностью, ведет к уменьшению концентрации азота в поверхностном слое стали и, как следствие, к уменьшению объемной доли нитрида ε-NbN и появлению нитрида β-Nb_2N. Такое поведение согласуется с механизмом формирования азотированного слоя при воздействии на металлы компрессионных плазменных потоков, генерируемых в атмосфере азота [14].

Согласно [14] воздействие компрессионных плазменных потоков, генерируемых в атмосфере азота, на сталь и титан приводит к насыщению их поверхностного слоя азотом в результате диффузии, происходящей преимущественно после кристаллизации расплава. Содержание азота в поверхностном слое определяется параметрами плазменных потоков – плотностью поглощенной энергии и давлением азота. Рост энергии, поглощенной поверхностью материала, приводит к увеличению интенсивности испарения материала, который формирует ударно-сжатый слой, удерживаемый непосредственно у поверхности образца набегающим компрессионным плазменным потоком и препятствующий проникновению атомов азота из атмосферы плазмообразующего вещества в расплав. После окончания действия импульса происходит рассеяние ударно-сжатого слоя, заполнение приповерхностной области азотом из окружающей атмосферы и создание условий для эффективной диффузии атомов азота в материал. Длительность диффузионного насыщения поверхностного слоя азотом, определяемая интервалом времени между рассеянием ударно-сжатого слоя и охлаждением поверхности образца до комнатной температуры, уменьшается при возрастании плотности поглощенной энергии вследствие увеличения времени рассеяния ударно-сжатого слоя, что обусловливает уменьшение концентрации азота в поверхностном слое.

В отличие от результатов работы [6], где изучались структура и фазовый состав быстрорежущей стали, подвергнутой воздействию КПП, генерируемые в атмосфере азота, в условиях данного эксперимента не было обнаружено формирования аустенита. Согласно [6] наличие аустенита в поверхностном слое стали при комнатной температуре обусловлено его стабилизацией атомами азота, входящими в состав кристаллической решетки аустенита (так называемый азотистый аустенит). В присутствии легирующего элемента (ниобия), активно взаимодействующего с азотом, происходит преимущественно формирование

нитрида ниобия, и, вероятно, незначительная часть атомов азота могут участвовать в формировании азотистого аустенита.

Последующий отжиг приводит к изменению фазового состава исследуемых образцов (рис. 4). В поверхностном слое образца, отожженного в течение 3 ч, происходит формирование гематита α-Fe_2O_3. С дальнейшим возрастанием времени отжига интенсивность дифракционных линий α-Fe_2O_3 увеличивается, происходит уменьшение интенсивности дифракционных линий α-Fe, что косвенно свидетельствует об увеличении толщины оксидного слоя. Уже после 3 ч отжига исчезает отдельно стоящая дифракционная линия (202) ε-NbN (угол 2θ равен 75,9°). Другие дифракционные линии этой фазы перекрываются с дифракционными линиями α-Fe_2O_3, а также NbO. Дифракционные линии β-Nb_2N также перекрываются с дифракционными линиями α-Fe_2O_3 и Nb_2O_5. Таким образом, можно предположить, что не более чем после 3 ч отжига при температуре 600 °С происходит распад нитридных фаз и формирование оксидов ниобия. Образование оксидов NbO, Nb_2O_5, NbO_2 термодинамически более выгодно, чем нитридов. Их энтальпия образования при стандартных условиях варьируется в диапазоне –1897,8…–405,8 кДж/моль [11; 15; 16], что существенно меньше, чем у нитридов ниобия. Следует отметить, что однозначно сказать о присутствии оксидов ниобия по анализу дифракционной картины нельзя, так как наиболее интенсивные дифракционные линии этих фаз совпадают или близко расположены к дифракционным линиям других фаз. Формирования карбида Fe_3W_3C не удалось выявить даже после 9 ч отжига.

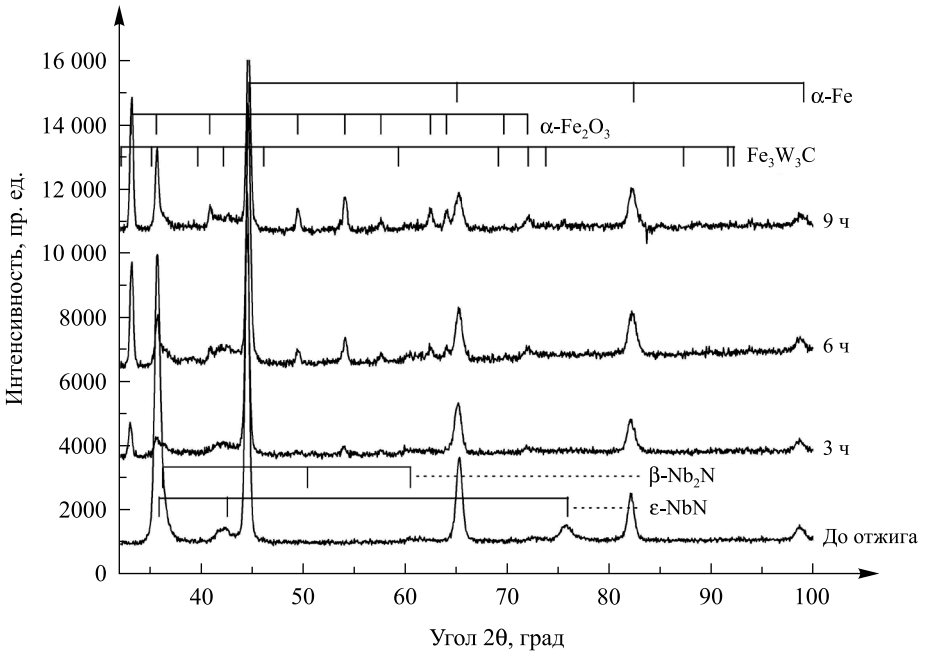


Рис. 4. Дифрактограммы образца системы NbC – сталь, обработанного КПП с $Q = 18$ Дж/см^2, до отжига и после него с различным временем выдержки

Fig. 4. Diffraction patterns of NbC – steel sample treated by compression plasma flows at $Q = 18$ J/cm^2 before and after annealing with different exposure times

Для анализа изменения механических свойств образцов системы после воздействия КПП были проведены измерения микротвердости. Результаты представлены на рис. 5. Как видно из рис. 5, после обработки КПП происходит уменьшение микротвердости с ~7,5 ГПа до ~5,5 ГПа, что согласно данным фазового анализа связано с растворением карбидов Fe_3W_3C и NbC. Изменение плотности энергии, поглощенной поверхностью образца, не влияет (в пределах погрешности измерения) на величину микротвердости.

После отжига в течение 6 ч микротвердость образца увеличилась по всей глубине индентируемого слоя (рис. 6). Это может быть связано с формированием дисперсных карбидов Fe_3W_3C и NbC в легированном слое. Аналогичный эффект наблюдался в [6], где формирование дисперсных карбидов на границах зерен в поверхностном слое при отжиге быстрорежущей стали было обнаружено по анализу морфологии поперечного сечения с помощью РЭМ. Малый размер карбидов (~100 нм) не позволял определить их существование по данным рентгеноструктурного анализа так же, как и в данной работе.

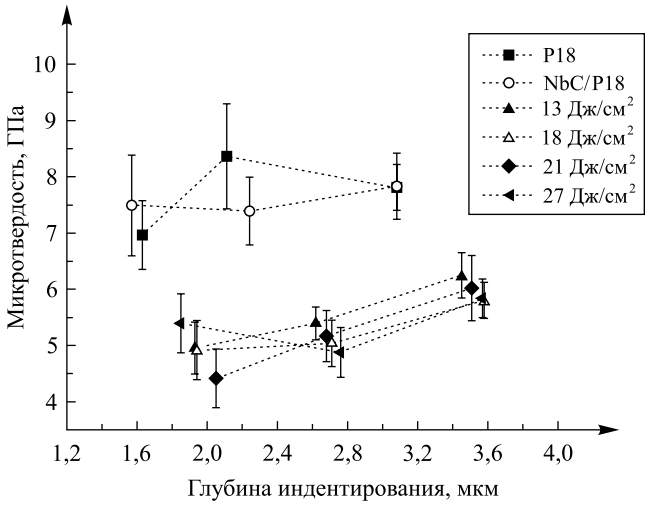


Рис. 5. Зависимость микротвердости от глубины проникновения индентора в исходном образце стали и образцах системы NbC – сталь Р18 до воздействия КПП с различной плотностью энергии, поглощенной поверхностью, и после него

Fig. 5. Dependence of microhardness on the indenter penetration depth in steel sample and samples of NbC – steel P18 system before and after compression plasma flows treatment with different densities of the energy absorbed by the surface

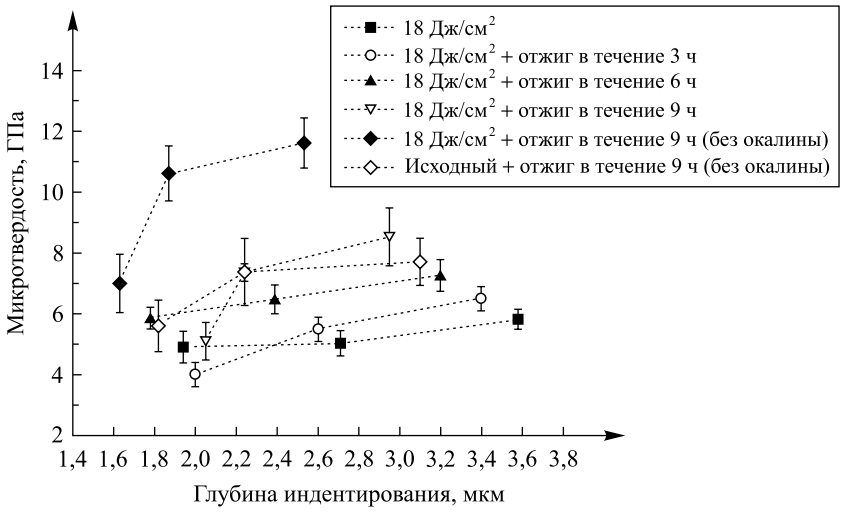


Рис. 6. Зависимость микротвердости от глубины проникновения индентора в образце системы NbC – сталь Р18, обработанном КПП с Q = 18 Дж/см^2, до отжига с различным временем выдержки и после него

Fig. 6. Dependence of microhardness on the indenter penetration depth in NbC – steel P18 sample treated by compression plasma flows at Q = 18 J/cm^2 before and after annealing with different exposure times

После 9 ч отжига микротвердость в объеме образца (8,5 ГПа) достигает уровня исходного образца (см. рис. 5 и 6). Однако в поверхностном слое микротвердость падает до значения 5 ГПа, что обусловлено присутствием на поверхности образца окалины с меньшей микротвердостью. Для того чтобы избежать влияния формирующегося при отжиге на воздухе слоя оксидов на измеряемое значение микротвердости, была проведена очистка от окалины. Проведенные после очистки измерения показали, что значение микротвердости образца после воздействия КПП с Q = 18 Дж/см^2 и последующим отжигом достигает ~11 ГПа, это в 1,3 раза больше микротвердости исходного образца. Для сравнения был проведен отжиг в тех же условиях исходного образца. Из рис. 6 видно, что отжиг не повлиял на микротвердость анализируемого слоя (в пределах погрешности измерения).

Таким образом, комбинированное воздействие КПП и последующего отжига на быстрорежущую сталь Р18 с предварительно нанесенным покрытием NbC позволяет сформировать поверхностный слой с более высокими прочностными характеристиками.

Заключение

Проведенные исследования показали, что воздействие компрессионных плазменных потоков, генерируемых в атмосфере азота, на систему NbC – сталь Р18 с плотностью поглощенной энергии 13–27 Дж/см^2 приводит к растворению карбидов Fe_3W_3C и NbC, а также формированию нитридов ε-NbN и β-Nb_2N. Увеличение плотности энергии, поглощенной поверхностью, ведет к уменьшению концентрации азота в поверхностном слое стали и, как следствие, к снижению объемной доли нитрида ε-NbN и появлению нитрида β-Nb_2N. С ростом плотности поглощенной энергии также уменьшается концентрация ниобия в анализируемом слое от 4,0 до 1,3 ат. %. Воздействие компрессионными плазменными потоками обусловливает уменьшение величины микротвердости с 7,5 до 5,5 ГПа, что связано с растворением карбидов Fe_3W_3C и NbC. Изменение плотности энергии, поглощенной поверхностью образца, не влияет (в пределах погрешности измерения) на величину микротвердости.

Последующий после обработки КПП с Q = 18 Дж/см^2 отжиг на воздухе при температуре 600 °С приводит к формированию на поверхности образца гематита α-Fe_2O_3 уже после 3 ч отжига и, вероятно, к распаду нитридов ниобия ε-NbN и β-Nb_2N. Проведенные измерения микротвердости после очистки от окалины показали, что значение микротвердости образца после воздействия КПП с Q, равным 18 Дж/см^2, и последующего отжига в течение 9 ч достигает ~11 ГПа, это в 1,3 раза больше микротвердости исходного образца. Увеличение микротвердости связывается с формированием дисперсных карбидов Fe_3W_3C и NbC в легированном слое.

Библиографические ссылки

1. *Григорьянц А. Г.* Основы лазерной обработки материалов. М. : Машиностроение, 1989.

2. *Самотугин С. С., Нестеров О. Ю.* Комплексная объемно-плазменная обработка быстрорежущей стали // Физика и химия обработки материалов. 2002. № 5. С. 14–17.

3. *Ivanov Yu., Matz W., Rotshtein V., et al.* Pulsed electron-beam melting of high-speed steel: structural phase transformations and wear resistance // Surf. Coat. Technol. 2002. Vol. 150. P. 188–198.

4. *Kac S., Kusinski J.* SEM and TEM microstructural investigation of high-speed tool steel after laser melting // Mater. Chem. Phys. 2003. Vol. 81. P. 510–512.

5. *Xian-xiu Mei, Sheng-zhi Hao, Teng-cai Ma, et al.* Microstructure and wear resistance of high-speed steel treated with intense pulsed ion beam // Nucl. Instrum. Methods in Phys. Res. 2005. Vol. B 239. P. 152–158.

6. *Cherenda N. N., Uglov V. V., Bibik N. V., et al.* Modification of Structure and Mechanical Properties of High Speed Steel P18 at Combined Plasmaand Thermal Treatment // J. Surf. Investig. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2011. Vol. 5, № 2. P. 305–309.

7. *Leyvi A. Ya., Cherenda N. N., Uglov V. V., et al.* The impact of a shock-compressed layer on the mass transfer of target material during processing compression plasma flows // Resour.-Effic. Technol. 2017. Vol. 3. P. 222–225.

8. *Черенда Н. Н., Малашевич А. А., Углов В. В. и др.* Структура и фазовый состав поверхностного слоя стали У9, легированного атомами хрома под действием компрессионных плазменных потоков // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2017. № 2. С. 102–107.

9. *Abdul Aleem B. J., Hashmi M. S. J., Yilbas B. S.* Laser controlled melting of pre-prepared inconel 718 alloy surface // Opt. Lasers in Eng. 2011. Vol. 49. P. 1314–1319.

10. *Mah A. D., Gellert N. L.* Heats of Formation of Niobium Nitride, Tantalum Nitride and Zirconium Nitride from Combustion Calorimetry // J. Am. Chem. Soc. 1956. Vol. 78. P. 3261–3263.

11. *Huber E. J., Head E. L., Holley C. E., et al.* The Heats of Combustion of Niobium Carbides // J. Phys. Chem. 1961. Vol. 65. P. 1846–1849.

12. *Лякишев Н. П.* Диаграммы состояния двойных металлических систем : в 3 т. М. : Машиностроение, 2001. Т. 3.

13. *Mah A. D.* Heats of Formation of Niobium Dioxide, Niobium Subnitride and Tantalum Subnitride // J. Am. Chem. Soc. 1958. Vol. 80. P. 3872–3874.

14. *Cherenda N. N., Shimanskii V. I., Uglov V. V., et al.* Nitriding of steel and titanium surface layers under the action of compression plasma flows // J. Surf. Investig. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2012. Vol. 6, № 2. P. 319–325.

15. *Worrell W.* The Free Energy of Formation of Niobium Dioxide between 1100 and 1700 K // J. Phys. Chem. 1964. Vol. 68. P. 952–953.

16. *Ignatowicz S., Davies M. W.* The Free Energy of Formation of NbO and Ta_2O_5 // J. Less-Common Met. 1968. Vol. 15. P. 100–102.

References

1. Grigoriants A. G. Osnovy lazernoi obrabotki materialov [Fundamentals of laser processing of materials]. Moscow : Mashinostroenie, 1989 (in Russ.).

2. Samotugin S. S., Nesterov O. Yu. [Complex volumetric-plasma treatment of high-speed steel]. *Fiz. i khim. obrabotki mater.* = *Inorg. Mater.: Appl. Res. Phys. Chem. Mater. Treat.* 2002. No. 5. P. 14–17 (in Russ.).

3. Ivanov Yu., Matz W., Rotshtein V., et al. Pulsed electron-beam melting of high-speed steel: structural phase transformations and wear resistance. *Surf. Coat. Technol.* 2002. Vol. 150. P. 188–198.

4. Kac S., Kusinski J. SEM and TEM microstructural investigation of high-speed tool steel after laser melting. *Mater. Chem. Phys.* 2003. Vol. 81. P. 510–512.

5. Xian-xiu Mei, Sheng-zhi Hao, Teng-cai Ma, et al. Microstructure and wear resistance of high-speed steel treated with intense pulsed ion beam. *Nucl. Instrum. Methods in Phys. Res.* 2005. Vol. B 239. P. 152–158.

6. Cherenda N. N., Uglov V. V., Bibik N. V., et al. Modification of Structure and Mechanical Properties of High Speed Steel P18 at Combined Plasmaand Thermal Treatment. *J. Surf. Investig. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques.* 2011. Vol. 5, No. 2. P. 305–309.

7. Leyvi A. Ya., Cherenda N. N., Uglov V. V., et al. The impact of a shock-compressed layer on the mass transfer of target material during processing compression plasma flows. *Resour.-Effic. Technol.* 2017. Vol. 3. P. 222–225.

8. Cherenda N. N., Malashevich A. A., Uglov V. V., et al. The structure and phase composition of the U9 steel surface layer alloyed with chromium atoms under the action of compression plasma flows. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2017. No. 2. P. 102–107 (in Russ.).

9. Abdul Aleem B. J., Hashmi M. S. J., Yilbas B. S. Laser controlled melting of pre-prepared inconel 718 alloy surface. *Opt. Lasers in Eng.* 2011. Vol. 49. P. 1314–1319.

10. Mah A. D., Gellert N. L. Heats of Formation of Niobium Nitride, Tantalum Nitride and Zirconium Nitride from Combustion Calorimetry. *J. Am. Chem. Soc.* 1956. Vol. 78. P. 3261–3263.

11. Huber E. J., Head E. L., Holley C. E., et al. The Heats of Combustion of Niobium Carbides. *J. Phys. Chem.* 1961. Vol. 65. P. 1846–1849.

12. Liakishev N. P. Diagrammy sostoyaniya dvoinykh metallicheskikh sistem [Diagrams of binary metallic systems] : in 3 vols. Moscow : Mashinostroenie, 2001. Vol. 3 (in Russ.).

13. Mah A. D. Heats of Formation of Niobium Dioxide, Niobium Subnitride and Tantalum Subnitride. *J. Am. Chem. Soc.* 1958. Vol. 80. P. 3872–3874.

14. Cherenda N. N., Shimanskii V. I., Uglov V. V., et al. Nitriding of steel and titanium surface layers under the action of compression plasma flows. *J. Surf. Investig. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques.* 2012. Vol. 6, No. 2. P. 319–325.

15. Worrell W. The Free Energy of Formation of Niobium Dioxide between 1100 and 1700 K. *J. Phys. Chem.* 1964. Vol. 68. P. 952–953.

16. Ignatowicz S., Davies M. W. The Free Energy of Formation of NbO and Ta_2O_5. *J. Less-Common Met.* 1968. Vol. 15. P. 100–102.

Статья поступила в редколлегию 08.02.2018.
Received by editorial board 08.02.2018.

УДК 531.19

РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПОТЕНЦИАЛА И КОНЦЕНТРАЦИИ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В ТВЕРДОТЕЛЬНОМ ЭЛЕКТРОЛИТЕ МЕЖДУ ПЛОСКИМИ ЭЛЕКТРОДАМИ

Г. С. БОКУН [1)]***, Д. ДИ КАПРИО*** [2)]

[1)]*Белорусский государственный технологический университет,*
ул. Свердлова, 13а, 220630, г. Минск, Беларусь
[2)]*Национальная высшая школа химии в Париже,*
ул. Пьера и Марии Кюри, 11, 75005, г. Париж, Франция

Статистически изучаются равновесные характеристики подсистемы подвижных зарядов одного знака с учетом наличия подсистемы неподвижных зарядов противоположного знака, создающих компенсирующий электрический фон. Распределение этих зарядов под воздействием внешнего поля не изменяется. Для представления свободной энергии подсистемы подвижных зарядов в виде функционала их плотности и вычисления ячеечных потенциалов средних сил методом условных распределений применено кумулянтное разложение по перенормированным майеровским функциям. Для учета эффектов экранирования использованы результаты метода коллективных переменных. Получена система интегральных уравнений для потенциалов средних сил с учетом эффектов близкого и дальнего действия, с помощью которой проведены расчеты в решеточном приближении. В выражении для бинарной функции распределения выделена корреляционная составляющая, что позволило рассчитать коррелированную и некоррелированную части электрического потенциала, используя уравнение Пуассона. Рассматривается случай достаточно малых электрических полей, допускающий линейное разложение химического потенциала по отклонению концентрации зарядов от однородного распределения. В окончательных расчетах корреляция между частицами учитывается в приближении первых соседей. В этом приближении распределение потенциала и концентрации заряда описывается линейным дифференциальным уравнением четвертого порядка. Выполнен анализ результатов его аналитического решения и последующих численных расчетов характеристик твердого электролита.

Ключевые слова: твердые электролиты; экранированный потенциал; близкодействие; функционал свободной энергии; электроемкость.

Благодарность. Авторы благодарят за финансовую поддержку Белорусский республиканский фонд фундаментальных исследований (грант № Ф16К-061), Министерство образования Республики Беларусь и научную программу Евросоюза Horizon-2020, подпрограмму Марии Склодовской-Кюри (грант № 73427 CONIN).

Образец цитирования:
Бокун Г. С., Ди Каприо Д. Распределения потенциала и концентрации носителей заряда в твердотельном электролите между плоскими электродами // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2018. № 2. С. 71–80.

For citation:
Bokun H. S., Di Caprio D. Potential and charge-carrier concentration distributions in solid electrolyte between flat electrodes. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2018. No. 2. P. 71–80 (in Russ.).

Авторы:
Георгий Станиславович Бокун – кандидат физико-математических наук; доцент кафедры механики и конструирования факультета химической технологии и техники.
Дунг Ди Каприо – доктор философии; научный сотрудник.

Authors:
Heorhi S. Bokun, PhD (physics and mathematics); associate professor at the department of mechanics and design, faculty of ChTiT.
gbokun12@gmail.com
Dung Di Caprio, PhD (philosophy); researcher.
dung.di-caprio@chimie-paristech.fr

Журнал Белорусского государственного университета. Физика. 2018. № 2. С. 71–80
Journal of the Belarusian State University. Physics. 2018. No. 2. P. 71–80

POTENTIAL AND CHARGE-CARRIER CONCENTRATION DISTRIBUTIONS IN SOLID ELECTROLYTE BETWEEN FLAT ELECTRODES

H. S. BOKUN[a]***, D. DI CAPRIO***[b]

[a]*Belarusian State Technological University, 13a Sviardlova Street, Minsk 220630, Belarus*
[b]*National Graduate School of Chemistry, 11 Pierre and Marie Curie Street, Paris 75005, France*
Corresponding author: H. S. Bokun (gbokun12@gmail.com)

Statistically studied are the equilibrium characteristics of a subsystem of mobile charges of one sort, taking into account the subsystem of fixed charges of the opposite sign creating a compensating electric background. The distribution of these charges under the influence of the external field is invariable. To represent free energy of the subsystem of mobile charges in the form of a functional of their density and to calculate cell potentials of the mean forces by the method of conditional distributions, a cumulant expansion with respect to the renormalized Mayer functions is used. To take into account the screening effects, the results of the collective variables method are used. A system of integral equations for the potentials of mean forces is obtained that accounts for the effects of near- and long-range interactions. The calculations are made in the lattice approximation. The correlation component distinguished in the expression for the binary distribution function makes it possible to calculate the correlated and uncorrelated parts of the electric potential using the Poisson equation. In the case of sufficiently small electric fields, a linear expansion of the chemical potential in terms of deviation of the charge concentration from the homogeneous distribution is considered. In final calculations the correlation between particles is taken into account in the approximation of the first neighbors. In this approximation the potential and charge concentration distribution is described by a linear differential equation of the fourth order. The results of its analytical solution and subsequent numerical calculations for the characteristics of solid electrolyte are analyzed.

Key words: solid electrolytes; shielded potential; short-range interaction; free energy functional; electric capacitance.

Acknowledgements. The authors acknowledge financial support from the Belarusian Republican Foundation for Fundamental Research (grant No. Ф16К-061), the Ministry of Education of Belarus and the European Union's Horizon-2020 research and innovation programme under the Marie Skłodowska-Curie (grant agreement No. 73427 CONIN).

Введение

Твердотельные керамические материалы являются ионными проводниками с преимущественной подвижностью зарядов одного знака. Они широко используются в электрохимических системах, в частности в высокотемпературных топливных элементах [1; 2], а также при разработке новых твердотельных электрохимических источников тока [3; 4] в целях повышения безопасности их эксплуатации за счет исключения из их конструкций жидких электролитов и ионных жидкостей. В связи с этим особую актуальность приобретает необходимость разработки надежных теоретических методов описания различных свойств таких материалов. Одним из проблемных факторов, усложняющих это описание, является наличие дальнодействующих межионных кулоновских взаимодействий, требующих разработки новых методов учета эффектов экранирования в ионных системах.

Предложенные ранее способы учета как короткодействующих, так и дальнодействующих взаимодействий в конденсированных средах [5] могут быть использованы для описания кристаллических ионных систем и токопроводящих керамик, основные особенности которых достаточно хорошо воспроизводятся решеточной теорией [6]. К таким способам можно при соответствующих аппроксимациях свести двухуровневый молекулярно-статистический метод описания неоднородных систем [7; 8], являющийся модификацией метода условных распределений [9; 10]. Основные характеристики систем, рассматриваемых в данной работе, рассчитываются с помощью кумулянтных (групповых) разложений по перенормированным майеровским функциям, когда в явном виде учитывается кристаллическая структура исследуемых материалов. Это позволяет описать эффекты корреляции в ионных системах с помощью функций распределения базисной системы, хотя последняя формально выглядит как некоррелированный физический объект.

Большая статистическая сумма твердого электролита

Для вычисления большой статистической суммы изучаемой системы воспользуемся кумулянтным разложением по обобщенным майеровским функциям, формируемым на основе функций распределения базисной системы, гамильтониан которой представим модифицированными за счет учета вакансий в кристаллах одночастичными ячеечными потенциалами $\varphi_j\left(q_{n_i}\right)$ метода условных распределений [7–10].

Переменная q_{n_i} определяет положение частицы ($n_i = 1_i$) либо вакансии ($n_i = 0_i$) в i-й ячейке объемом ω_i ($i = 1, 2, \ldots, M$, где M – общее число ячеек, на которые разделен весь объем V изучаемой кристаллической системы; $V = \sum_{i=1}^{M} \omega_i$). Потенциал $\varphi_j\left(q_{n_i}\right)$ имеет смысл потенциала локального поля, источник которого расположен в j-й ячейке решетки. Этот потенциал зависит не только от положения частицы в i-й ячейке, но и от параметров, характеризующих распределение частиц по объему V-системы. Гамильтониан H_0 базисной системы в формализме большого канонического ансамбля представим с помощью ячеечных потенциалов $\varphi_j\left(q_{n_i}\right)$ в виде, который допускает (обеспечивает) факторизацию ее функции распределения для всех частиц:

$$H_0 = \sum_{i=1}^{M} \mu_i n_i + \sum_{i=1}^{M} \sum_{j(i)}^{Z} \varphi_j\left(q_{n_i}\right). \tag{1}$$

Суммирование по j в (1) выполняется по всем узлам, окружающим избранный узел i в пределах первых Z координационных сфер.

Большая статистическая сумма $Z_V^{(0)}$ базисной системы имеет вид ($\beta = \frac{1}{kT}$):

$$Z_M^{(0)} = \sum_{n_1=0}^{1} \int_{\omega_1} dq_{n_1} \ldots \sum_{n_i=0}^{1} \int_{\omega_i} dq_{n_i} \ldots \sum_{n_M=0}^{1} \int_{\omega_M} dq_{n_M} \cdot \exp\left(-\beta\left(\sum_{l=1}^{M}\left(\mu_l n_l + U_{n_l}\right)\right)\right),\ U_{n_l} = \sum_{j(l)}^{Z} \varphi_j\left(q_{n_l}\right). \tag{2}$$

Далее, рассматривается система с постоянной температурой, с неоднородностью, характеризуемой полем средних чисел заполнения ячеек системы $\rho_{n_i} = \langle n_i \rangle_0$, связанных с ячеечными химическими потенциалами μ_i соотношениями, которые вытекают из (2).

$$\frac{\rho_{1_i}}{\rho_{0_i}} = \exp(\beta\mu_i)\frac{Q_{1_i}}{Q_{0_i}},\ Q_{n_i} = \int_{\omega_i} \exp\left(-\beta \sum_{k(i)}^{z} \varphi_k\left(q_{n_i}\right)\right) dq_{n_i}. \tag{3}$$

Поскольку в соответствии с представлением (1) функция распределения частиц базисной системы является факторизованной, это позволяет вычислять корреляторы, определяющие статистическую сумму реальной ионной системы. Ее гамильтониан, состоящий из парных вандерваальсовых короткодействующих потенциалов Φ и кулоновских дальнодействующих потенциалов V, записывается в следующем виде:

$$H_M = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{M}\sum_{j(=i)}^{Z} \Phi\left(q_{n_i}, q_{n_j}\right) + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{M}\sum_{j(=i)}^{Z} V\left(q_{n_i}, q_{n_j}\right) + \sum_{i=1}^{M} \mu_i n_i. \tag{4}$$

Выделяя из этого гамильтониана кулоновское взаимодействие, отклонение оставшейся части от гамильтониана базисной системы определим соотношениями:

$$\Delta H_M = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{M}\sum_{j(i)}^{Z} \Delta\varphi\left(q_{n_i}, q_{n_j}\right),\ \Delta\varphi\left(q_{n_i}, q_{n_j}\right) = \Phi\left(q_{n_i}, q_{n_j}\right) - \varphi_j\left(q_{n_i}\right) - \varphi_i\left(q_{n_j}\right).$$

Статистическую сумму Z_M системы с гамильтонианом (4) преобразуем с учетом выражения (1), в результате получим

$$Z_M = Z_M^{(0)} < e^{-\beta\Delta H_M} >_0. \tag{5}$$

Здесь обозначение $<\ldots>_0$ определяет усреднение, которое выполняется с помощью факторизованной функции распределения базисной системы, представленной произведением унарных функций $\hat{\rho}\left(q_{n_1}\right)$. Это усреднение для произвольной функции L имеет следующий вид:

$$< L >_0 = \sum_{n_1=0}^{1} \ldots \sum_{n_M=0}^{1} \int_{\omega_1} \hat{\rho}\left(q_{n_1}\right) dq_{n_1} \ldots \int_{\omega_M} \hat{\rho}\left(q_{n_M}\right) dq_{n_M} L \exp\left(-\frac{\beta}{2}\sum_{i=1}^{M}\sum_{j(=i)}^{Z} V\left(q_{n_i}, q_{n_j}\right)\right),$$

где $\hat{\rho}\left(q_{n_i}\right) = \hat{F}_1\left(q_{n_i}\right)\rho_{n_i}$.

Для вычисления статистической суммы (5) воспользуемся разложением по базисному распределению, в результате приходим к разложению по обобщенным майеровским функциям $f\left(q_{n_i},\, q_{n_j}\right)$ конденсированного состояния в виде

$$f\left(q_{n_i},\, q_{n_j}\right) = \exp\left(-\beta\Delta\varphi\left(q_{n_i},\, q_{n_j}\right)\right) - 1.$$

Оставляя два первых члена разложения, получим

$$Z_M = Z_M^{(0)}\left(1 + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{M}\sum_{j(i)}^{Z}\sum_{n_i=0}^{1}\sum_{n_j=0}^{1}\int_{\omega_i} dq_{n_i}\int_{\omega_j} dq_{n_j}\cdot\hat{\rho}\left(q_{n_i}\right)\hat{\rho}\left(q_{n_j}\right)g\left(q_{n_i},\, q_{n_j}\right)f\left(q_{n_i},\, q_{n_j}\right)\right), \tag{6}$$

где $g\left(q_{n_i},\, q_{n_j}\right)$ – бинарная функция распределения частиц в системе с дальнодействием, которое описывается одночастичными ячеечными потенциалами и входит в выражение для полной бинарной функции условных распределений:

$$\hat{\rho}\left(q_{n_i},\, q_{n_j}\right) = \rho_{n_i}\rho_{n_j}\exp\left\{-\beta\Phi\left(q_{n_i},\, q_{n_j}\right)\right\}\cdot g\left(n_i,\, n_j\right)\hat{F}_1\left(q_{n_i}\right)\hat{F}_1\left(q_{n_j}\right)\exp\left\{-\beta\left(\varphi_i\left(q_{n_j}\right) + \varphi_j\left(q_{n_i}\right)\right)\right\}.$$

Искомую статистическую сумму (6) преобразуем с учетом соотношения между полной унарной функцией $\hat{\rho}\left(q_{n_i}\right)$ и нормированной на единицу унарной функцией $\hat{F}_1\left(q_{n_i}\right)$ модифицированного метода условных распределений:

$$Z_M = Z_M^{(0)}\left(1 + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{M}\sum_{j(i)}^{Z}\sum_{n_i=0}^{1}\sum_{n_j=0}^{1}\rho_{n_i}\rho_{n_j}f_{n_in_j}\right),$$

где

$$f_{n_i,\, n_j} = \int_{\omega_i} dq_{n_i}\int_{\omega_j} dq_{n_j}\, g\left(q_{n_i},\, q_{n_j}\right)f\left(q_{n_i},\, q_{n_j}\right)\hat{F}_1\left(q_{n_i}\right)\hat{F}_1\left(q_{n_j}\right).$$

Уравнение для одночастичных потенциалов $\varphi_j\left(q_{n_i}\right)$ получим из условия экстремальности для статсуммы с двумя оставленными членами в разложении (6). Это условие следует из независимости суммы всех членов разложения от выбора одночастичных потенциалов. Выполнив варьирование (6) по потенциалам $\varphi_j\left(q_{n_i}\right)$, приходим к системе интегральных уравнений:

$$\exp\left(-\beta\varphi_k\left(q_{n_m}\right)\right) =$$

$$= \frac{1}{z_k^0}\sum_{n_k=0}^{1}\exp\left(\beta\mu_k n_k\right)\int_{\omega_k} dq_{n_k}\, g\left(q_{n_m},\, q_{n_k}\right)\exp\left(-\beta\left(\mathbf{\Phi}\left(q_{n_m},\, q_{n_k}\right) + \sum_{s\neq m,\, k}^{Z}\varphi_s\left(q_{n_k}\right)\right)\right), \tag{7}$$

где

$$z_k^0 = \sum_{n_k=0}^{1}\exp\left(\beta\mu_k n_k\right)\int_{\omega_k} dq_{n_k}\exp\left(-\beta\left(\sum_{s\neq m,\, k}^{Z}\varphi_s\left(q_{n_k}\right)\right)\right).$$

Полученные интегральные уравнения (7) отличаются от аналогичных уравнений для молекулярных систем тем, что их ядра, помимо парного короткодействующего потенциала Ф, содержат бинарную функцию *g* для системы частиц с кулоновским взаимодействием, приближенное выражение для которой получено в работе [5] и определяет корреляционную функцию $h\left(q_{n_i},\, q_{n_j}\right)$:

$$h\left(q_{n_i},\, q_{n_j}\right) = g\left(q_{n_i},\, q_{n_j}\right) - 1 = \exp\left(-\beta V_s\left(q_{n_i},\, q_{n_j}\right)\right) - 1, \tag{8}$$

где $V_s\left(q_{n_i},\, q_{n_j}\right)$ – уже не точечный кулоновский, а экранированный кулоновский потенциал. Таким образом, из (7) и (8) видно, что экранирование дальнодействия проявляется не только на кулоновском потенциале, но и на одночастичных ячеечных потенциалах базисной системы.

Решеточное описание

Для перехода к решеточному описанию конденсированных систем нужно в интегральных уравнениях (7) и других формулах предыдущего раздела все функции координат заменить их значениями, определенными для случая, когда частицы удерживаются в центрах своих ячеек, т. е. в соответствующих узлах решетки. В связи с этим введем обозначения для значений, необходимых для дальнейших расчетов функций:

$$W_{n_i, n_j} = \exp\left(-\beta\Phi\left(n_i, n_j\right)\right), \tag{9}$$

$$G_{n_i, n_j} = \exp\left(-\beta V_s\left(n_i, n_j\right)\right), \tag{10}$$

$$U_{n_i, n_j} = W_{n_i, n_j} G_{n_i, n_j}, \tag{11}$$

$$f_{j, n_i} = \exp\left(-\beta\varphi_j\left(n_i\right)\right), \tag{12}$$

где Φ, V_s, φ – значения близкодействующего, экранированного и ячеечного потенциалов, вычисленные для соответствующих узлов решетки.

В результате интегральные уравнения (7) с учетом обозначений (3), (9)–(12) приобретают следующий вид:

$$f_{j, 1_i} = \frac{\rho_{1j} \cdot U_{1_i, 1_j}}{f_{i, 1_j}} + \frac{\rho_{0_j}}{f_{i, 0_j}}, \quad f_{j, 0_i} = \frac{\rho_{1_j}}{f_{i, 1_j}} + \frac{\rho_{0j}}{f_{i, 0_j}}.$$

Все термодинамические характеристики ионной твердотельной системы рассчитываются с помощью коррелятивных функций $\hat{\rho}\left(q_{n_i}\right)$, $\hat{\rho}\left(q_{n_i}, q_{n_j}\right)$, которые для решеточных систем выражаются через средние значения чисел заполнения и соответствующие величины из обозначений (9)–(12):

$$\hat{\rho}\left(n_i\right) = \rho_{n_i}, \quad \hat{\rho}\left(n_i, n_j\right) = \rho_{n_i}\rho_{n_j} \frac{U_{n_i, n_j} f_{i, 0_j} f_{j, 0_i}}{f_{i, n_j} f_{j, n_i} f_{i, 0_j} f_{j, 0_i}}. \tag{13}$$

В дальнейшем учтем, что проводимость в твердых электролитах обеспечивается подвижностью катионов, тогда как анионы остаются неподвижными и создают компенсирующее электрическое поле. При этом их распределение не изменяется под действием внешнего поля заряженного плоского конденсатора, создающего электрическое поле в направлении оси x с напряженностью E = const и потенциалом $\Psi^e = -Ex$.

Таким образом, при построении функционала свободной энергии твердого электролита необходимо учесть взаимодействие катионов только между собой и с внешним полем $\Psi^e\left(x\right)$ конденсатора. В рассматриваемом подходе статистическая сумма ионной системы представляется статистической суммой формально некоррелированного кристалла, но с переопределенными за счет корреляции одночастичными потенциалами. В связи с этим выражение для свободной энергии ионного кристалла в первом приближении составим в виде суммы внутренней энергии решеточной системы и комбинаторной части энтропии. Переходя к сокращенным обозначениям $c_i = \rho_{1_i}$ ($\rho_{0_i} = \left(1 - c_i\right)$), записываем с учетом (9)–(13) выражение для функционала свободной энергии F подсистемы катионов во внешнем поле:

$$\beta F = \sum_{i=1}^{M}\left(c_i \ln\left(c_i\right) + \left(1 - c_i\right)_i \ln\left(1 - c_i\right) + r_b \sum_{j(i)}\left(\frac{c_j c_i}{r_{ij}} \right) + \beta \sum_{j \neq i} J_{ij} c_j c_i + \sum_{j \neq i} h_{ij} c_j c_i + \beta e c_i \Psi^e \right), \tag{14}$$

где $c_i = \rho_{1_i}$ – концентрация катионов; $\left(1 - c_i\right)$ – концентрация вакансий; e – величина заряда иона; r_b – радиус Бьеррума; r_{ij} – расстояние между узлами i и j; J_{ij} – средняя энергия короткодействия между двумя частицами, фиксированными в узлах i и j; h_{ij} – параметр, определяющий коррелированную часть кулоновской энергии двух частиц, фиксированных в узлах i и j, и выражаемый через функцию (10) по формуле

$$\tilde{h}_{ij} = \frac{r_b}{r_{ij}}\left(G_{1_i, 1_j} - 1\right), \quad r_b = \frac{\beta e^2}{4\pi\varepsilon\varepsilon_0}.$$

Распределение электрического потенциала и заряда в твердом электролите в решеточном приближении

Рассмотрим случай слабого внешнего электрического поля, напряженность E которого направлена вдоль оси x, действующего на кристаллический однородный образец твердого электролита. В связи с этим при варьировании свободной энергии (14) по полю с концентрацией c_i изменением параметров J_{ij} и h_{ij} будем пренебрегать. В итоге выражение для химического потенциала $\mu_i = \dfrac{\delta F}{\delta c_i}$ подвижных катионов принимает следующий вид:

$$\beta\mu_i = \ln\left(\frac{c_i}{1-c_i}\right) + r_b\sum_{j\neq i}^{M}\left(\frac{c_j}{r_{ij}}\right) + \beta\sum_{j\neq i}J_{ij}c_j + \sum_{j\neq i}h_{ij}c_j + \beta e\Psi^e.$$

В случае отсутствия внешнего поля концентрация $c_i = c = \text{const}$, тогда для соответствующего химического потенциала μ_i запишем, что

$$\beta\mu = \ln\left(\frac{c}{1-c}\right) + r_b\sum_{j\neq i}^{M}\left(\frac{c}{r_{ij}}\right) + \beta\sum_{j\neq i}J_{ij}c + \sum_{j\neq i}h_{ij}c. \tag{15}$$

Далее, учтем, что под действием электрического поля конденсатора в объеме твердого электролита формируется антисимметричное одномерное распределение электрического потенциала $\Psi(x)$ и плотности заряда относительно срединной плоскости, параллельной плоским обкладкам конденсатора. Когда расстояние между обкладками существенно превосходит линейный размер областей неоднородности концентраций вблизи электродов, то в окрестности срединной плоскости будет наблюдаться область однородности с концентрацией, равной c, где химический потенциал определяется соотношением (15). В состоянии термодинамического равновесия химический потенциал μ_i одинаков во всех узлах системы и равен химическому потенциалу μ. Приравняв μ_i и μ, получим систему нелинейных уравнений, которая является дискретным аналогом интегрального уравнения для равновесного поля с концентрацией c_i ($\delta c_i = c_i - c$):

$$\ln\left(\frac{c_i}{1-c_i}\right) - \ln\left(\frac{c}{1-c}\right) + r_b\sum_{j(i)}\left(\frac{\delta c_j}{r_{ij}}\right) + \beta\sum_{j\neq i}J_{ij}\delta c_j + \sum_{j\neq i}h_{ij}\delta c_j + \beta e\Psi^e = 0,\ i = 1, 2, \ldots. \tag{16}$$

Поскольку J_{ij} и h_{ij} короткодействующие, то ограничимся учетом взаимодействия только с ближайшими соседями, положив $\beta J_{ij} = J$, $h_{ij} = h$.

Для некоррелированной части кулоновского взаимодействия введем потенциал

$$\hat{\Psi} = \beta e\Psi = r_b\sum\frac{\delta c_j}{r_{ij}},$$

для которого справедливо уравнение Пуассона с равновесным искомым полем с вариацией концентрации δc_i

$$\Delta\hat{\Psi} = -\frac{\beta e^2}{\varepsilon\varepsilon_0 H^3}\delta c, \tag{17}$$

где Δ – оператор Лапласа; H – параметр кристаллической решетки.

Переходя далее к линейным размерам в единицах параметра H решетки, перепишем уравнение (17):

$$\Delta\hat{\Psi} = -u\delta c,\ u = \frac{\beta e^2}{\varepsilon\varepsilon_0 H}. \tag{18}$$

Разложив первое логарифмическое слагаемое уравнения (16) по вариации концентрации δc_i, перепишем уравнение (16) в линейном приближении:

$$\frac{\delta c_i}{c(1-c)} + \hat{\Psi} + J_\Sigma\sum_{j\neq i}\delta c_j + \hat{\Psi}^e = 0,\ J_\Sigma = J + h.$$

Из суммы, содержащейся в последнем уравнении, выделим вторую численную разность $\Delta\delta c_i = \delta c_{i+1} - 2\delta c_i + \delta c_{i+1}$ и преобразуем его в дифференциальное уравнение (z – число ближайших соседей для узлов используемой кристаллической решетки):

$$\gamma_T \delta c + \hat{\Psi} + J_\Sigma \Delta\delta c + \hat{\Psi}^e = 0, \;\; \gamma_T = \frac{1}{c(1-c)} + zJ_\Sigma. \tag{19}$$

С учетом уравнения Пуассона (18) уравнение (19) превращается в неоднородное дифференциальное уравнение четвертого порядка для потенциала $\hat{\Psi}$:

$$\Delta^2\hat{\Psi} + a\Delta\hat{\Psi} - b\hat{\Psi} = -bEx, \; a = \frac{\gamma_T}{J_\Sigma}, \; b = \frac{u}{J_\Sigma}. \tag{20}$$

В связи с отмеченной выше антисимметрией для искомых полей решение уравнения (20) для потенциала $\hat{\Psi}$ в системе координат с началом в срединной плоскости межэлектродного пространства имеет вид

$$\hat{\Psi} = C_1\left(e^{k_1 x} - e^{-k_1 x}\right) + C_2 \sin\left(k_2 x\right) + Ex. \tag{21}$$

Входящие в уравнение (21) корни k_1, k_2 характеристического уравнения соответственно равны

$$k_1 = \sqrt{\frac{a}{2}\left(-1 + \sqrt{1 + \frac{4b}{a^2}}\right)}, \; k_2 = \sqrt{\frac{a}{2}\left(1 + \sqrt{1 + \frac{4b}{a^2}}\right)}. \tag{22}$$

Если ограничиваться только вкладом от кулоновского взаимодействия без учета корреляций между ионами, т. е. положить в развиваемом подходе J_Σ равным нулю, то выражение для первого корня приобретает вид

$$k_1 = \sqrt{c(1-c)u} = k_D.$$

Значение k_D в решеточном приближении совпадает с полученным ранее выражением [11; 12] для обратного радиуса Дебая, входящего в экранированный кулоновский потенциал, определяющий согласно (8) корреляционную функцию h. Ее значение для ближайших соседей записывается в форме

$$h = -u\exp\left(-uk_D\right).$$

Для удобства выполнения дальнейших численных расчетов введем параметр S_h, определяющий отношение параметров короткодействия (J) и дальнодействия (u) для катионов в ближайших узлах решетки, т. е. $S_h = \dfrac{J}{u}$.

С учетом введенных обозначений запишем выражения для параметров γ_T и J_Σ:

$$\gamma_T = \frac{1}{c(1-c)} + zu\left(S_h - \exp\left(-uk_D\right)\right), \; J_\Sigma = u\left(S_h - \exp\left(-uk_D\right)\right).$$

Значение постоянной C_2 в уравнении (21) определяем из условия равенства нулю суммарной напряженности поля в начале координат, определяемой по формуле

$$E_\Sigma = -\frac{d\left(\hat{\Psi} + \hat{\Psi}^e\right)}{dx}.$$

В результате найдем C_2 и получим

$$\hat{\Psi} = C_1\left(\left(e^{k_1 x} - e^{-k_1 x}\right) - \frac{2k_1}{k_2}\sin\left(k_2 x\right)\right) + Ex. \tag{23}$$

Значение постоянной C_1 определяем из условия равенства в точке с координатой $x = L$ (L – расстояние между обкладками конденсатора) заряда, распределенного в диффузионной области, и заряда на обкладке конденсатора.

В результате получим, что

$$\hat{\Psi}'(L) - \hat{\Psi}'(0) = E. \tag{24}$$

Определив постоянную интегрирования C_1 из уравнения (24), получаем окончательное выражение для суммарного потенциала $\hat{\Psi}_\Sigma$ в объеме твердого электролита:

$$\hat{\Psi}_{\Sigma} = \frac{E\left(\left(e^{k_1 x} - e^{-k_1 x}\right) - \dfrac{2k_1}{k_2}\sin\left(k_2 x\right)\right)}{k_1\left(\left(e^{k_1 L} + e^{-k_1 L}\right) - 2\cos\left(k_2 L\right)\right)}. \tag{25}$$

С помощью уравнения (25) находим электроемкость C конденсатора с твердым электролитом в межэлектродном пространстве:

$$C = \frac{k_1\left(\left(e^{k_1 L} + {}^{-k_1 L}\right) - 2\cos\left(k_2 L\right)\right)}{\left(e^{k_1 L} - e^{-k_1 L}\right) - \dfrac{2k_1}{k_2}\sin\left(k_2 L\right)},$$

а также распределение отклонения концентрации заряда от равновесного значения

$$\delta c\left(x\right) = -\frac{\Psi''}{u}. \tag{26}$$

Все расчеты выполнены при фиксированных значениях параметра S_h ($S_h = 2$) и концентрации c ($c = 0{,}5$). В этом случае все характеристики твердого электролита в приэлектродной области зависят от переменной u, которая для конкретного образца с диэлектрической проницаемостью ε обратно пропорциональна температуре $(\beta = \dfrac{1}{kT})$. Результаты численных расчетов корней k_1, k_2 характеристического уравнения по формулам (22) представлены на рис. 1.

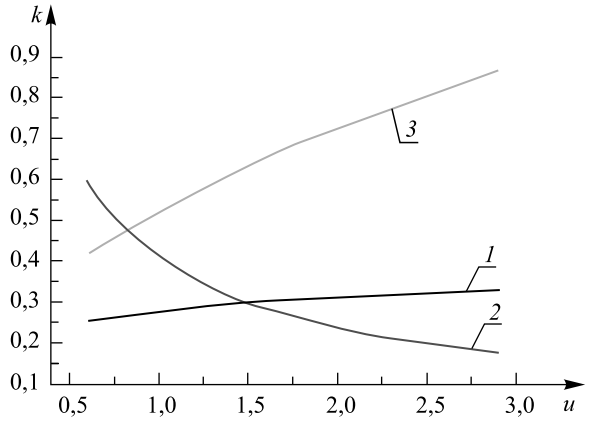


Рис. 1. Зависимости волновых чисел от энергии кулоновского взаимодействия ближайших соседей в единицах абсолютной температуры:
1 – k_1; *2* – $k^* = k_2 - 2{,}5$; *3* – k_D

Fig. 1. Wave numbers versus the Coulomb energy of the nearest neighbors in units of absolute temperature:
1 – k_1; *2* – $k^* = k_2 - 2.5$; *3* – k_D

Значения корня k_1 (см. рис. 1, кривая *1*) очень медленно увеличиваются при возрастании переменной u, т. е. при уменьшении температуры, тогда как аналогичный параметр k_D в теории Дебая (см. рис. 1, кривая *3*) возрастает намного быстрее и имеет значения, в 2–3 раза превышающие значения параметра k_1. Уменьшение параметра k_1, по сравнению с параметром k_D, является следствием учета корреляции в распределении заряда в приэлектродной области. Второй корень k_2 (см. рис. 1, кривая *2*), описывающий волновой характер изменения потенциала $\hat{\Psi}$, имеет смысл волнового числа для соответствующего частного решения с постоянной интегрирования C_2 в уравнении (21). Завышенные значения k_2 при малых значениях u (высоких температурах) являются следствием учета только линейного члена в разложении логарифма, которое выполнено при переходе от нелинейного уравнения (16) к линейному.

Действительно, из выражения (23) видно, что гармоническая составляющая, вызывающая колебания потенциала, показанного на рис. 2 (кривая *1*), содержит множитель, обратно пропорциональный k_2, что приводит к уменьшению вклада соответствующей составляющей потенциала при возрастании частоты колебаний. Но, как видно из (26), вариация концентрации (см. рис. 2, кривая *2*) оказывается прямо пропорциональной k_2 и соответственно имеет гораздо более выраженную амплитуду колебаний.

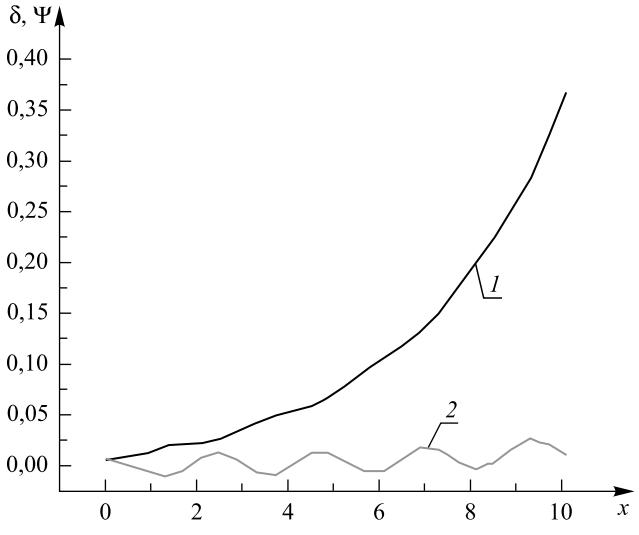


Рис. 2. Зависимость изменения электрического потенциала (*1*)
и концентрации носителей заряда (*2*) от расстояния до поверхности электрода

Fig. 2. Variations in the (*2*) concentration of charge carriers
and electric potential (*1*) versus the distance to the electrode surface

В целом в области конденсированного состояния при значениях u, превышающих единицу, вклад гармонической составляющей приводит к возникновению периодических колебаний концентрации, показанных на рис. 2 (кривая *2*). Эти закономерности, касающиеся структуризации распределения заряда и потенциала в пространстве ионного твердотельного проводника с преимущественной подвижностью зарядов одного знака, качественно соответствуют результатам, полученным для случая мезоскопических систем в работе [13].

Заключение

На основании разложения большой статистической суммы по корреляциям, с использованием в качестве базисного распределения, характерного для идеального кристалла, получена свободная энергия в виде функционала плотности и ячеечных потенциалов средних сил. Для описания эффектов экранирования в твердом теле применен метод коллективных переменных. В рамках решеточного приближения получено выражение для химического потенциала неоднородной твердотельной электрохимической системы.

В результате установлено распределение заряда и электрического потенциала в твердоэлектролитной системе с преимущественной подвижностью одноименных ионов. Показано, что в таких системах на известное экспоненциальное затухание потенциала накладывается гармоническая составляющая, отражающая возникновение волнообразного распределения плотности заряда в приэлектродном пространстве. Установлена зависимость параметров, характеризующих затухание и периодичность, от различных условий. Изучена их зависимость от температуры и от отношения энергий близко- и дальнодействия для ближайших соседей.

Библиографические ссылки

1. Solid oxide fuel cells: materials properties and performance / ed. by J. Fergus [et al.]. London : CRC Press, 2009.

2. *Gür T. M.* Comprehensive review of methane conversion in solid oxide fuel cells: prospects for efficient electricity generation from natural gas // Progr. Energy Comb. Sci. 2016. Vol. 54. P. 1–64. DOI: 10.1016/j.pecs.2015.10.004.

3. *Yao X., Huang B., Yin J., et al.* All-solid-state lithium batteries with inorganic solid electrolytes: Review of fundamental science // Chin. Phys. B. 2016. Vol. 25, issue 1. P. 018802. DOI: 10.1088/1674-1056/25/1/018802.

4. *Yao X., Liu D., Wang C., et al.* All-solid-state lithium batteries with ultralong cycle life // Nano Lett. 2016. Vol. 16, issue 11. P. 7148–7154.

5. *Юхновский И. Р., Головко М. Ф.* Статистическая теория классических равновесных систем. Киев : Наукова думка, 1980.

6. *Вихренко В. С., Грода Я. Г., Бокун Г. С.* Равновесные и диффузионные характеристики интеркаляционных систем на основе решеточных моделей. Минск : БГТУ, 2008.

7. *Narkevich I. I.* Statistical theory of nonuniform systems and reduced description in the density fluctuation theory // Physica. 1982. Vol. 112A. P. 167–192.

8. *Наркевич И. И.* Метод множителей Лагранжа в проблеме нормировки коррелятивных функций многокомпонентного кристалла с вакансиями // Высокочистые вещества. 1990. № 1. С. 67–75.

9. *Ромм Л. А.* Статистическая теория молекулярных систем. М. : Наука, 1979.
10. *Rott L. A., Vikhrenko V. S.* Statistical Method of Conditional Distributions // Fortschr. Phys. 1975. Vol. 23. P. 133–164.
11. *Бокун Г. С., Головко М. Ф., Вихренко В. С.* Экранирование кулоновского взаимодействия в кристаллических материалах // Тр. БГТУ. Сер. 3, Физ.-матем. науки и информатика. 2017. № 2. С. 50–53.
12. *Bokun G., Vikhrenko V., Di Caprio D., et al.* Chemical Potential Distribution of Nonhomogeneous Solid Electrolyte // Nanomaterials: Applications and Properties : proc. Int. conf. (Zatoka, 10–15 Sept., 2017). Zatoka, 2017. Ukraine, article 03NE16. DOI: 10.1109/NAP.2017.8190247.
13. *Ciach A.* Simple theory for oscillatory charge profile in ionic liquids // arXiv:1705.10551[cond-mat.soft]. 2017. DOI: 10.1016/j.molliq.2017.10.002.

References

1. Fergus J., Hui R., Li X., et al. (eds). Solid oxide fuel cells: materials properties and performance. London : CRC Press, 2009.
2. Gür T. M. Comprehensive review of methane conversion in solid oxide fuel cells: prospects for efficient electricity generation from natural gas. *Progr. Energy Comb. Sci.* 2016. Vol. 54. P. 1–64. DOI: 10.1016/j.pecs.2015.10.004.
3. Yao X., Huang B., Yin J., et al. All-solid-state lithium batteries with inorganic solid electrolytes: Review of fundamental science. *Chin. Phys. B.* 2016. Vol. 25, issue 1. P. 018802. DOI: 10.1088/1674-1056/25/1/018802.
4. Yao X., Liu D., Wang C., et al. All-solid-state lithium batteries with ultralong cycle life. *Nano Lett.* 2016. Vol. 16, issue 11. P. 7148–7154.
5. Yukhnovskiy I. R., Holovko M. F. [Statistical theory of classical equilibrium systems]. Kiev : Naukova dumka, 1980 (in Russ.).
6. Vikhrenko V. S., Groda Ya. G., Bokun G. S. [Equilibrium and diffusion characteristics of intercalation systems on the basis of lattice models]. Minsk : BSTU, 2008 (in Russ.).
7. Narkevich I. I. Statistical theory of nonuniform systems and reduced description in the density fluctuation theory. *Physica.* 1982. Vol. 112A. P. 167–192.
8. Narkevich I. I. [The method of Lagrange multipliers in the problem of normalizing the correlation functions of a multicomponent crystal with vacancies]. Vysokochistye veshchestva. 1990. No. 1. P. 67–75 (in Russ.).
9. Rott L. A. Statisticheskaya teoriya molekulyarnykh sistem [Statistical theory of molecular systems]. Moscow : Nauka, 1979 (in Russ.).
10. Rott L. A., Vikhrenko V. S. Statistical Method of Conditional Distributions. *Fortschr. Phys.* 1975. Vol. 23. P. 133–164.
11. Bokun G. S., Holovko M. F., Vikhrenko V. S. Screening of the coulomb interaction in crystalline materials. *Proc. BSTU. Ser. 3, Phys.-mat. Sci. Inf.* 2017. No. 2. P. 50–53 (in Russ.).
12. Bokun G., Vikhrenko V., Di Caprio D., et al. Chemical Potential Distribution of Nonhomogeneous Solid Electrolyte. *Nanomaterials: Applications and Properties* : proc. Int. conf. (Zatoka, 10–15 Sept., 2017). Zatoka, 2017. Ukraine, article 03NE16. DOI: 10.1109/NAP.2017.8190247.
13. Ciach A. Simple theory for oscillatory charge profile in ionic liquids. *arXiv:1705.10551*[*cond-mat.soft*]. 2017. DOI: 10.1016/j.molliq.2017.10.002.

Статья поступила в редколлегию 13.02.2018.
Received by editorial board 13.02.2018.

УДК 620.191:621.373.820

ВЛИЯНИЕ БЫСТРОЙ ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ ИСХОДНЫХ КРЕМНИЕВЫХ ПЛАСТИН НА ПРОЦЕСС ИХ ПИРОГЕННОГО ОКИСЛЕНИЯ

***В. М. АНИЩИК*[1)], *В. А. ГОРУШКО*[2)],**
***В. А. ПИЛИПЕНКО*[1)], *В. В. ПОНАРЯДОВ*[1)], *В. А. СОЛОДУХА*[3)]**

[1)]*Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Беларусь*
[2)]*Государственный центр «Белмикроанализ» филиала НТЦ «Белмикросистемы» ОАО «Интеграл», ул. Казинца, 121А, 220108, г. Минск, Беларусь*
[3)]*ОАО «Интеграл», ул. Казинца, 121А, 220108, г. Минск, Беларусь*

Представлены результаты исследования влияния быстрой термической обработки исходных кремниевых пластин на процесс их пирогенного окисления. Показано, что данная обработка приводит к повышению качества двуокиси кремния, сформированной на их поверхности за счет уменьшения толщины нарушенного слоя, оказывающего существенное влияние на начальный этап окисления.

Ключевые слова: быстрая термическая обработка; нарушенный слой; пирогенное окисление; коэффициент преломления.

INFLUENCE OF THE RAPID THERMAL TREATMENT OF THE INITIAL SILICON WAFERS ON THE PROCESS OF THEIR PYROGENIC OXIDATION

***V. M. ANISHCHIK*[a], *V. A. HARUSHKA*[b],**
***U. A. PILIPENKA*[a], *V. V. PONARIADOV*[a], *V. A. SALADUKHA*[c]**

[a]*Belarusian State University, 4 Niezaliežnasci Avenue, Minsk 220030, Belarus*
[b]*«Belmikroanaliz» of the branch «Belmikrosistemy», JSC «Integral», 121A Kazinca Street, Minsk 220108, Belarus*
[c]*Integral, 121A Kazinca Street, Minsk 220108, Belarus*
Corresponding author: V. A. Harushka (office@bms.by)

The work represents the investigation results of influence of rapid thermal treatment of the initial silicon wafers on the process of their pyrogenic oxidation. It is shown that the given treatment results in the quality enhancement of silicon dioxide, formed on their surface owing to thickness reduction of the disrupted layer, substantially influencing the initial stage of the oxidation process.

Key words: rapid thermal treatment; disrupted layer; pyrogenic oxidation; refraction ratio.

Образец цитирования:
Анищик В. М., Горушко В. А., Пилипенко В. А., Понарядов В. В., Солодуха В. А. Влияние быстрой термической обработки исходных кремниевых пластин на процесс их пирогенного окисления // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2018. № 2. С. 81–85.

For citation:
Anishchik V. M., Harushka V. A., Pilipenka U. A., Ponariadov V. V., Saladukha V. A. Influence of the rapid thermal treatment of the initial silicon wafers on the process of their pyrogenic oxidation. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2018. No. 2. P. 81–85 (in Russ.).

Авторы:
Виктор Михайлович Анищик – доктор физико-математических наук, профессор; декан физического факультета.
Валентина Алексеевна Горушко – ведущий инженер.
Владимир Александрович Пилипенко – член-корреспондент НАН Беларуси, доктор технических наук; профессор кафедры физики полупроводников и наноэлектроники физического факультета.
Владимир Васильевич Понарядов – кандидат физико-математических наук, доцент; заместитель декана физического факультета.
Виталий Александрович Солодуха – кандидат технических наук; генеральный директор.

Authors:
Victor M. Anishchik, doctor of science (physics and mathematics), full professor; dean of the faculty of physics.
dean@bsu.by
Valiantsina A. Harushka, leading engineer.
office@bms.by
Uladzimir A. Pilipenka, corresponding member of the National Academy of Sciences of Belarus, doctor of science (engineering); professor at the department of semiconductor physics and nanoelectronics, faculty of physics.
office@bms.by
Vladimir V. Ponariadov, PhD (physics and mathematics), docent; deputy dean of the faculty of physics.
ponariadov@bsu.by
Vitali A. Saladukha, PhD (engineering); general director.

Введение

В настоящее время основной тенденцией увеличения быстродействия интегральных микросхем (ИМС) является непрерывное уменьшение топологических размеров. Повышение функциональной сложности и степени интеграции ИМС выдвигает новые, более жесткие требования к их качеству и надежности, в значительной степени обусловленные свойствами подзатворного диэлектрика, который является ключевым элементом, определяющим стабильность их характеристик. С переходом к субмикронным проектным нормам толщина подзатворного диэлектрика уменьшается от сотен до единиц нанометров. Поскольку тонкий слой диэлектрика формируется за счет поверхности кремния, то его качество во многом зависит от ее состояния перед процессом окисления. Известно, что после химико-механической полировки на поверхности кремния имеется нарушенный слой. А по причине того, что на начальном этапе процесс окисления идет за счет поверхностного слоя кремния с нарушенной кристаллической решеткой, то его дефекты оказывают существенное влияние на структуру диэлектрика, приводя к отсутствию воспроизводимости его структурных и электрических параметров. Кроме того, качество подзатворного диэлектрика зависит от температуры и среды его формирования, которые во многом обусловливают свойства переходного слоя границы раздела $Si – SiO_2$. Именно он определяет такие характеристики подзатворного диэлектрика, как величина фиксированного заряда и плотность быстрых поверхностных состояний [1].

Цель настоящей работы – исследование возможности использования быстрой термической обработки исходных кремниевых пластин для улучшения структурных параметров подзатворного диэлектрика, полученного путем пирогенного окисления кремния.

Объекты и методика эксперимента

Исследования проводились на пластинах кремния КЭФ-4,5 (кремний электронный, легированный фосфором) и КДБ-12 (кремний дырочный, легированный бором) с ориентацией <100> диаметром 100 мм. Часть исходных кремниевых пластин подвергались быстрой термообработке, которая выполнялась в естественных атмосферных условиях с нерабочей стороны пластины некогерентным оптическим излучением в течение 7 с, обеспечивая нагрев пластин до температуры 1100 °С. Затем путем пирогенного окисления при температуре 850 °С в течение 40 мин формировался подзатворный диэлектрик толщиной 42,5 нм.

На подготовленных таким способом образцах методом спектральной эллипсометрии и фурье-спектрометрии проводились исследования влияния быстрой термической обработки исходных кремниевых пластин на процесс пирогенного окисления кремния.

Результаты исследований и их обсуждение

С помощью метода спектральной эллипсометрии было установлено, что характер распределения толщины двуокиси кремния по площади пластины не зависит от типа проводимости кремния и имеет периодичность, определяемую газовым потоком окислителя в диффузионной трубе. При этом толщина окисла для пластин, прошедших быструю термообработку, имеет несколько меньшее значение, чем без обработки (рис. 1). Если для кремния КЭФ-4,5 с обработкой она составляет 48,05 нм, то без обработки – 48,13 нм, а для кремния КДБ-12 – 48,42 и 48,48 нм соответственно. Уменьшение толщины окисла на пластинах с предварительной термообработкой связано с тем, что те из них, которые не проходили быструю термообработку, имеют большую глубину нарушенного слоя, а значит, и меньшую, чем в объеме, плотность атомов кремния. Это приводит к увеличению скорости окисления нарушенного слоя, так как в нем коэффициент диффузии кислорода будет выше, чем в объемном кремнии, следовательно, и толщина окисла будет больше. Как видно из приведенных данных, разность по толщине окисла составляет от 0,8 нм и менее. Это говорит о том, что нарушенный слой влияет на скорость окисления только на начальном этапе процесса окисления. Исходя из приведенных результатов, можно утверждать, что наличие нарушенного слоя незначительно воздействует на процесс пирогенного окисления кремния. Характер распределения толщины двуокиси кремния по площади пластины для кремния КДБ-12 имеет аналогичный характер, поэтому в статье приводятся иллюстрации только для кремния КЭФ-4,5.

Распределение коэффициента преломления двуокиси кремния по площади пластины носит такой же характер, как и для ее толщины, и не зависит от типа проводимости кремния (рис. 2). Однако само распределение в случае пластин с предварительной быстрой термообработкой значительно ближе к гауссовому, чем в случае пластин без обработки, что указывает на более совершенную структуру пленок в первом случае. Об этом свидетельствует и величина коэффициента преломления пленок, которая имеет более низкое значение на пластинах с предварительной обработкой. Если без обработки для кремния

КЭФ-4,5 она составляет в среднем 1,493, то с обработкой – 1,487. Для кремния КДБ-12 эти величины имели значения в среднем 1,488 и 1,486 соответственно. Учитывая, что коэффициент преломления двуокиси кремния, полученной термическим окислением в среде сухого кислорода, составляет 1,46, то становится понятным, что предварительная быстрая термообработка позволяет получать окисные пленки, по структуре более близкие к пленкам, формируемым при высокотемпературном окислении кремния в сухом кислороде.

Анализ спектров пропускания пленок двуокиси кремния, проведенный с применением фурье-спектрометрии, показал существенное их изменение в случае проведения предварительной быстрой термообработки пластин кремния перед формированием подзатворного диэлектрика (рис. 3). Как показали исследования, данные изменения не зависят от типа проводимости кремния. Кроме того, имеет место существенное увеличение поглощения в области полосы, характеризующей связь Si—O в двуокиси кремния. Небольшой ее сдвиг (на 0,9–2,5 $см^{-1}$) в коротковолновую область и увеличение интенсивности и уменьшение полуширины свидетельствуют об изменении концентрации связей Si—O, их силы и углов между ними, которые, в свою очередь, говорят об изменении микроструктуры, уплотнении и снижении пористости пленки двуокиси кремния, а также об уменьшении напряжений связи Si—O [2]. Это подтверждают ранее проведенные исследования коэффициента преломления данных пленок. Общий сдвиг кривых пропускания во всей области спектра для пластин, прошедших быструю термообработку, по-видимому, связан с увеличением коэффициента поглощения поверхностного слоя кремния за счет его улучшения в процессе твердофазной рекристаллизации нарушенного слоя при быстрой термической обработке.

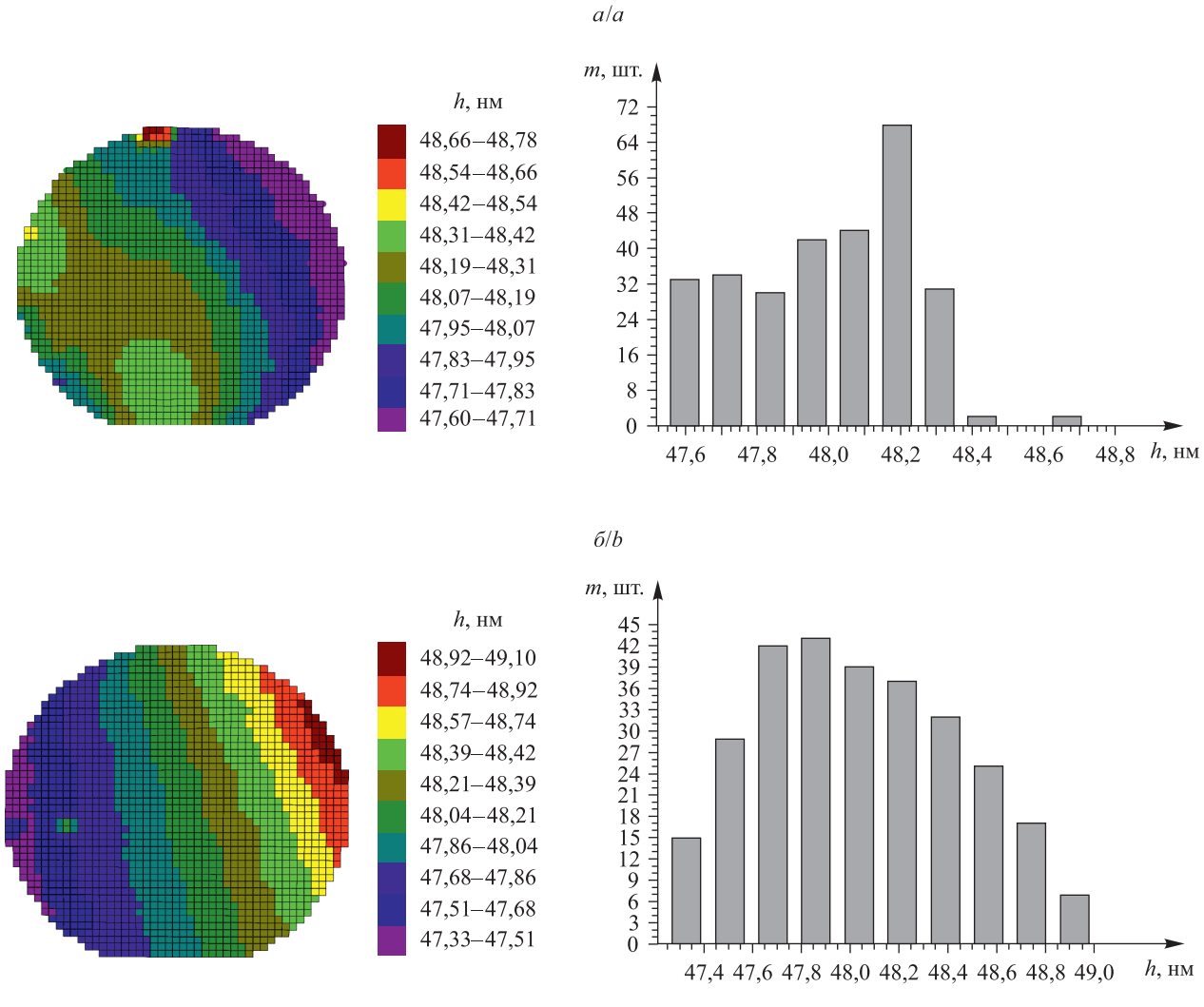


Рис. 1. Карта и гистограмма распределения толщины двуокиси кремния по площади пластины КЭФ-4,5:
а – без предварительной быстрой термообработки; *б* – с предварительной быстрой термообработкой

Fig. 1. Map and histogram for thickness distribution of silicon dioxide as per the KEF-4.5 wafer area:
a – without preliminary rapid thermal treatment; *b* – with preliminary rapid thermal treatment

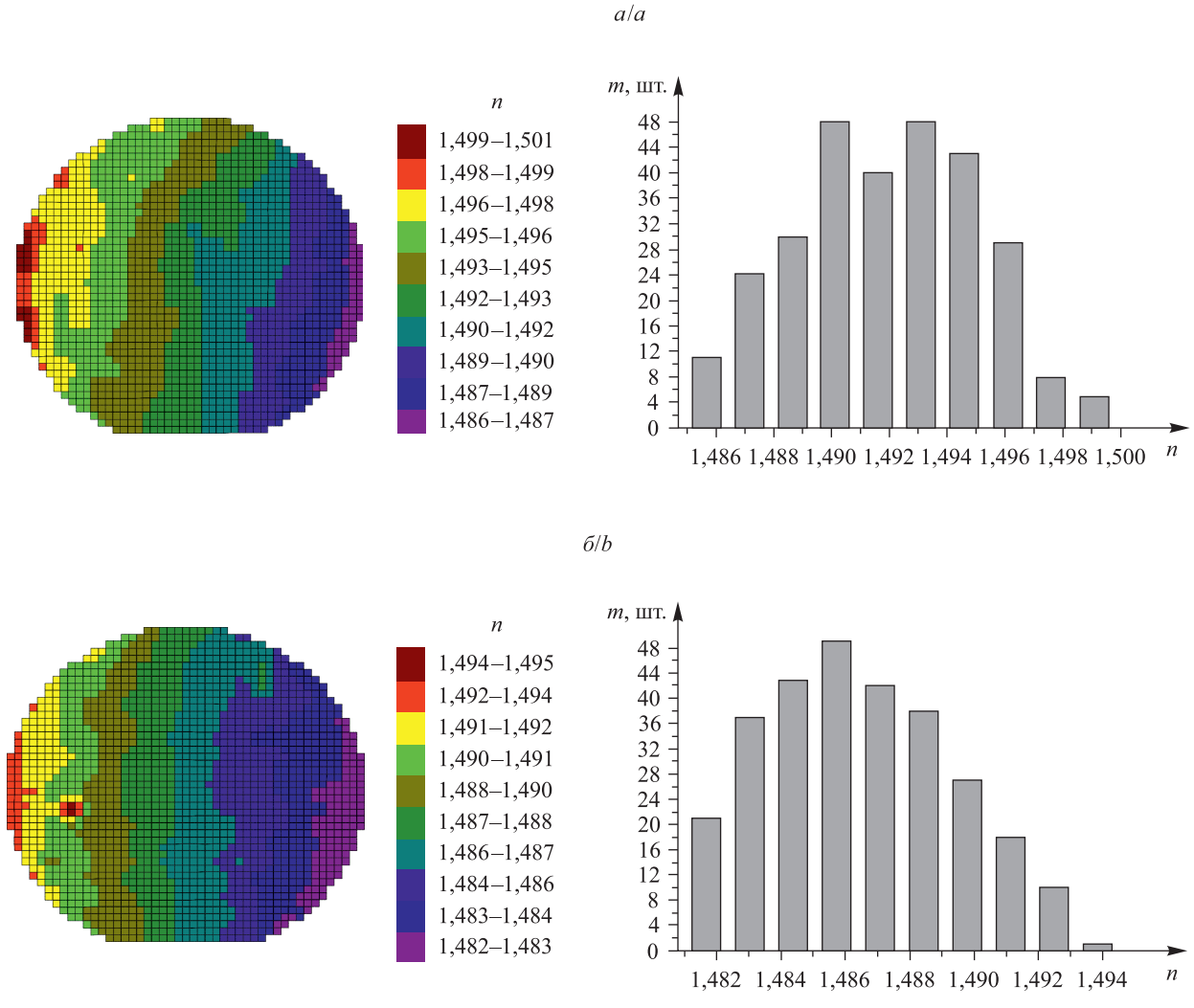


Рис. 2. Карта и гистограмма распределения
коэффициента преломления двуокиси кремния по площади пластины КЭФ-4,5:
а – без предварительной быстрой термообработки; *б* – с предварительной быстрой термообработкой

Fig. 2. Map and histogram for refraction ratio distribution of silicon dioxide as per the KEF-4.5 wafer area:
a – without preliminary rapid thermal treatment; *b* – with preliminary rapid thermal treatment

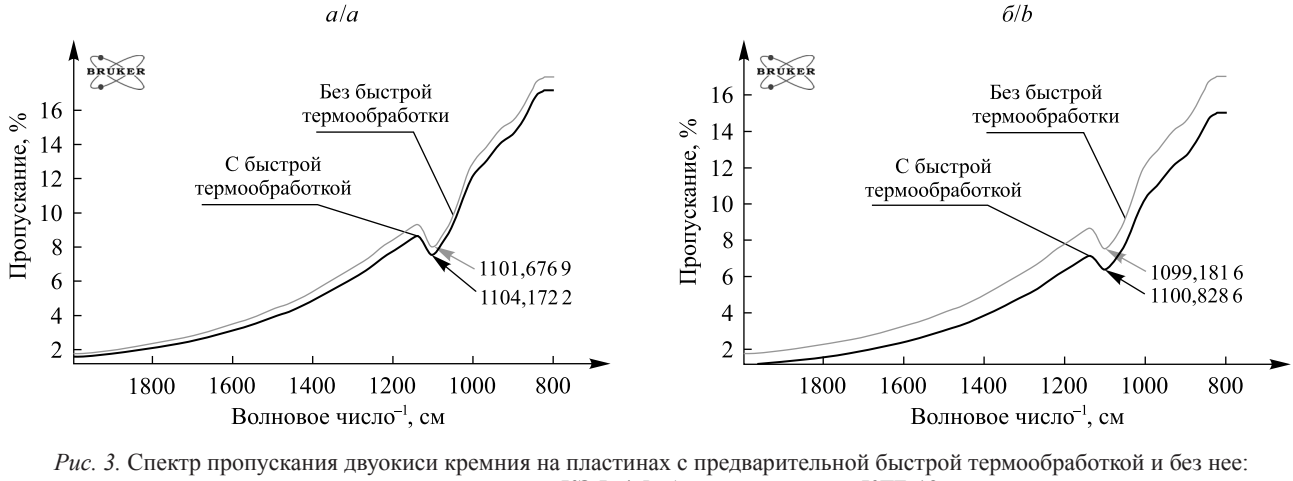


Рис. 3. Спектр пропускания двуокиси кремния на пластинах с предварительной быстрой термообработкой и без нее:
а – кремний марки КЭФ-4,5; *б* – кремний марки КДБ-12

Fig. 3. Transmission specter of silicon dioxide on the wafers with preliminary rapid thermal treatment and without it:
a – silicon of the KEF-4.5 grade; *b* – silicon of the KDB-12 grade

На основании результатов исследования влияния быстрой термообработки исходных кремниевых пластин на структуру формируемых слоев двуокиси кремния методом пирогенного окисления можно предложить следующий механизм такого процесса.

При окислении кремниевых пластин рост окисла на 44 % идет за счет подложки кремния. Поскольку на ее поверхности после химико-механической полировки находится слой с деформированной кристаллической решеткой, толщина которого составляет около 5 нм, то при толщине подзатворного диэлектрика 47–49 нм верхний его слой толщиной 12,5 нм формируется за счет данного слоя. Это означает, что микроструктура этой части окисла будет нарушенной, и в ней будут иметь место в большей степени напряженные связи Si—O, оборванные связи Si, не заполненные кислородом, уменьшенная сила связей Si—O, измененные углы связей Si—O. Следовательно, весь окисел можно рассматривать как двухслойную систему с различной микроструктурой по толщине. В связи с тем что быстрая термообработка приводит к уменьшению толщины нарушенного слоя до 1 нм и менее, в процессе термического окисления будут участвовать поверхностные слои кремния, практически не испытывающие деформации кристаллической решетки, а следовательно, формируемая пленка будет иметь более однородную микроструктуру по всей своей толщине.

Заключение

Таким образом, уменьшение толщины нарушенного слоя кремния после быстрой термической обработки снижает его влияние на начальный этап пирогенного окисления, повышая качество подзатворного диэлектрика за счет образования дополнительных связей Si—O, увеличения их силы и уменьшения напряжений, обеспечивая снижение его коэффициента преломления и формирования однородной микроструктуры по всей толщине.

Библиографические ссылки

1. *Красников Г. Я.* Конструктивно-технологические особенности субмикронных МОП-транзисторов : в 2 ч. М. : Техносфера, 2002. Ч. 1.

2. *Пилипенко В. А.* Быстрые термообработки в технологии СБИС. Минск : Изд. центр БГУ, 2004.

References

1. Krasnikov G. Ya. Konstruktivno-tekhnologicheskie osobennosti submikronnykh MOP-tranzistorov [Design-Technological Peculiarities of the Submicron MOS-Transistors] : in 2 parts. Moscow : Tekhnosfera, 2002. Part 1 (in Russ.).

2. Pilipenko V. A. Bystrye termoobrabotki v tekhnologii SBIS [Rapid Thermal Treatments in the VLSI Technology]. Minsk : Publ. Centre of BSU, 2004 (in Russ.).

Статья поступила в редколлегию 04.04.2018.
Received by editorial board 04.04.2018.

Оптика и спектроскопия

Optics and spectroscopy

УДК 53.082.53

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ОБРАБОТКА СПЕКТРОВ ДЛЯ АНАЛИЗА ПО МЕТОДУ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ ОПТИЧЕСКОЙ АБСОРБЦИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

И. И. БРУЧКОВСКИЙ [1)], ***А. Г. СВЕТАШЕВ*** [1)], ***В. С. ДЕМИН*** [1)], ***С. К. БОРОДКО*** [1)], ***П. П. АНИКИН*** [2)], ***А. Н. КРАСОВСКИЙ*** [1)]

[1)]*Учреждение БГУ «Национальный научно-исследовательский центр мониторинга озоносферы», ул. Курчатова, 7, 220045, г. Минск, Беларусь*
[2)]*Институт физики атмосферы им. А. М. Обухова РАН, пер. Пыжевский, 3, 119017, г. Москва, Россия*

Исследованы возможности повышения точности метода DOAS (Differential Optical Absorption Spectroscopy) путем использования методики сравнительной калибровки по эталонному прибору применительно к созданному в БГУ многоосевому регистратору спектров MARS-B (Multi Axis Recorder of Spectra). Проведен сравнительный анализ измерений, полученных при помощи MARS-B в ходе международной кампании сравнений CINDI-2 (Second Cabauw Intercomparison of Nitrogen Dioxide Measuring Instruments), проходившей в 2016 г. в г. Кабау (Нидерланды). Результатами измерений являлись дифференциальные наклонные содержания малых газовых составляющих атмосферы: двуокиси азота, озона, молекул воды, азотистой кислоты, формальдегида и димера кислорода. Для исследования возможностей повышения точности методики DOAS проведен анализ рядов измерений

Образец цитирования:
Бручковский И. И., Светашев А. Г., Демин В. С., Бородко С. К., Аникин П. П., Красовский А. Н. Предварительная обработка спектров для анализа по методу дифференциальной оптической абсорбционной спектроскопии // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2018. № 2. С. 86–96.

For citation:
Bruchkouski I. I., Svetashev A. G., Demin V. S., Barodka S. K., Anikin P. P., Krasouski A. N. Preliminary processing of spectra for analysis by method of differential optical absorption spectroscopy. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2018. No. 2. P. 86–96 (in Russ.).

Авторы:
Илья Игоревич Бручковский – научный сотрудник.
Александр Георгиевич Светашев – научный сотрудник.
Виктор Сергеевич Демин – научный сотрудник.
Сергей Константинович Бородко – научный сотрудник.
Петр Павлович Аникин – кандидат физико-математических наук; старший научный сотрудник.
Александр Николаевич Красовский – кандидат физико-математических наук, доцент; ведущий научный сотрудник.

Authors:
Ilya I. Bruchkouski, researcher.
bruchkovsky2010@yandex.ru
Alexander G. Svetashev, researcher.
asvetashev@tut.by
Victar S. Demin, researcher.
victordm@tut.by
Siarhei K. Barodka, researcher.
skbarodka@gmail.com
Petr P. Anikin, PhD (physics and mathematics); senior researcher.
petr.anikin@gmail.com
Alexander N. Krasouski, PhD (physics and mathematics), docent; leading researcher.
a.n.krasouski@gmail.com

спектров яркости участков небесной сферы в диапазоне длин волн 335–373 нм, зарегистрированных прибором MARS-B и параллельно приборами других участников процедуры сравнения. Предложен способ снижения ошибки восстановления дифференциальных наклонных содержаний малых газовых примесей путем применения цифрового фильтра низких частот на этапе предварительной обработки спектров.

Ключевые слова: дифференциальная оптическая абсорбционная спектроскопия; азотистая кислота; предварительная обработка спектров.

Благодарность. Авторы выражают благодарность профессору Томасу Вагнеру (Институт химии общества Макса Планка) за приглашение для участия в кампании сравнений CINDI-2 и финансовую поддержку, Каролин Файт и Мишелю ван Розендалю (Бельгийский королевский институт космической аэрономии) за разработку и распространение программного продукта *Q-DOAS*, а также Денису Поелеру (Институт физики окружающей среды университета Хейдельберга) за его ценные замечания по поводу оптической части прибора.

PRELIMINARY PROCESSING OF SPECTRA FOR ANALYSIS BY METHOD OF DIFFERENTIAL OPTICAL ABSORPTION SPECTROSCOPY

I. I. BRUCHKOUSKI [a], ***A. G. SVETASHEV*** [a], ***V. S. DEMIN*** [a], ***S. K. BARODKA*** [a], ***P. P. ANIKIN*** [b], ***A. N. KRASOUSKI*** [a]

[a] *National Ozone Monitoring Research and Education Centre, Belarusian State University, 7 Kurčatava Street, Minsk 220045, Belarus*

[b] *A. M. Obukhov Institute of Atmospheric Physics, Russian Academy of Sciences, 3 Pyžeŭski Alley, Moscow 119017, Russia*

Corresponding author: I. I. Bruchkouski (bruchkovsky2010@yandex.ru)

That work is dedicated to investigation of the possibilities for the DOAS (Differential Optical Absorption Spectroscopy) method accuracy improvement by the comparative calibration procedure using a reference instrument that has been applied to the Multi Axis Recorder of Spectra (MARS-B) instrument. The instrument has been developed at the Belarusian State University. A comparative analysis of the measurements obtained by MARS-B during the international inter-comparison campaign CINDI-2 (Second Cabauw Intercomparison of Nitrogen Dioxide Measuring Instruments, Cabauw, Netherlands, 2016) has been carried out. As a result of MARS-B measurements, the differential slant column densities of trace gases have been obtained for nitrogen dioxide, ozone, water, HONO, HCHO, and oxygen dimer. To investigate the possibilities for the DOAS method accuracy improvement, analysis of the sky radiance spectra series over the wavelength range 335–373 nm has been carried out. The analyzed spectra have been recorded simultaneously by the MARS-B instrument and by the instruments of other CINDI-2 participants. A method to reduce the error of the differential slant column densities retrieval by applying a digital low-pass filter in the preliminary processing of the spectra has been presented.

Key words: DOAS; HONO; preliminary processing of spectra.

Acknowledgements. The authors are grateful to professor Thomas Wagner (Max Planck Institute for Chemistry) for invitation to CINDI-2 and financial support, Caroline Fayt and Michel van Roozendael (Royal Belgian Institute for Space Aeronomy) for developing and distributing *Q-DOAS* software. Also the authors are grateful to Dr. Denis Pöhler (Institute of Environmental Physics University of Heidelberg) for his valuable suggestions about instrument's optical design.

Введение

Для мониторинга малых газовых составляющих атмосферы по методу DOAS (Differential Optical Absorption Spectroscopy) в БГУ был разработан зеркально-линзовый прибор MARS-B, представляющий собой многоосевой регистратор спектров (Multi Axis Recorder of Spectra) рассеянного солнечного света [1], собранный на базе спектрографа изображения ORIEL MS257*, отличающийся тем, что в качестве второго элемента телескопа используется первое зеркало спектрографа [2].

Метод DOAS является пассивным методом дистанционного зондирования [3, с. 102], который использует спектры рассеянного солнечного излучения различных участков небесной сферы в видимом и ультрафиолетовом диапазонах длин волн. В настоящее время различные варианты методики DOAS широко применяются для наземного мониторинга малых газовых составляющих атмосферы.

*Oriel MS257™ 1/4 m Monochromator and Imaging Spectrograph [Electronic resource] // Newport Corporation 1996–2015. URL: https://www.newport.com/f/ms257-1_4-m-imaging-spectrograph (date of access: 19.04.2018).

Методы DOAS отличаются высокой чувствительностью, однако на практике требуют высокой долговременной стабильности оптических характеристик спектрального прибора и высококачественного детектирования спектров. Это обусловлено тем, что малые газовые составляющие, например формальдегид и азотистая кислота, содержатся в атмосфере в количествах порядка единиц ppb и имеют слабые сечения поглощения, что в совокупности ставит их на порог обнаружения, недоступный для большинства дистанционных методов.

Несмотря на относительное совершенство измерительной аппаратуры, уровень шума современных DOAS-систем не позволяет уверенно, с необходимой точностью восстанавливать ряд малых газовых составляющих, таких как BrO, HONO, HCHO. При этом для регистрации быстрых изменений их концентрации важную роль играет способность регистрировать качественный спектр за короткое время, что иногда является проблемой.

Математическое преобразование, связанное с предварительной подготовкой спектров и методом решения обратной задачи восстановления наклонных содержаний, является одним из важнейших этапов обработки экспериментальных данных, поэтому некорректное проведение математического преобразования может существенно влиять на окончательный результат. При этом важно иметь в виду, что никакими методами обработки нельзя увеличить объем получаемой информации.

С 25 августа по 7 октября 2016 г. в г. Кабау (Cabauw, Нидерланды) прошла международная кампания сравнений и калибровки CINDI-2[**] (Second Cabauw Intercomparison of Nitrogen Dioxide Measuring Instruments), организованная под эгидой Метеорологического института Королевства Нидерландов (Koninklijk Nederlands Meteorologisch Instituut, KNMI) при участии Института химии общества Макса Планка (Max Planck Institute for Chemistry – Otto Hahn Institut, MPIC), Бельгийского королевского института космической аэрономии (BIRA-IASB) и ряда других исследовательских центров.

В ходе кампании CINDI-2 были проведены сравнения измерительных DOAS-систем, разработанных различными научными группами, для восстановления таких малых газовых составляющих, как двуокись азота, димер кислорода, озон и формальдегид. Данные, полученные в результате сравнений, обрабатывались по «полуслепой» методике. Белорусский прибор MARS-B успешно принимал участие в этой кампании сравнений.

В настоящее время некоторые научные центры, включая Национальный научно-исследовательский центр мониторинга озоносферы (ННИЦ МО) БГУ, начали свои собственные исследования на основании доступного массива данных. Так, например, группа из MPIC под руководством Янг Ванга организовала исследование, посвященное особенностям восстановления азотистой кислоты методом DOAS: участникам было предложено использовать уточненные сечения поглощения для ринг-эффекта и двуокиси азота в целях уменьшения спектрального шума.

В работе предлагается уменьшить спектральный шум путем применения цифрового фильтра нижних частот к натурным спектрам, полученным прибором MARS-B в ходе международной кампании сравнений CINDI-2. Также были использованы данные, любезно предоставленные другими участниками кампании сравнения, что позволило сопоставить полученный результат с результатами обработки данных аналогичных приборов.

Материалы и методы исследований

Результаты исследований 10 институтов – участников проекта – были обработаны и обобщены в виде графического материала для различных углов возвышения. На рис. 1 представлен ряд данных, который используется для дальнейшего анализа в настоящей работе. Выбор именно такого ряда обусловлен наличием дневной изменчивости HONO, что позволит наиболее полно проанализировать корректность предлагаемой методики обработки.

Данные прибора MARS-B, полученные в настоящей работе, используются параллельно с данными, предоставленными группой Янг Ванга, для поиска способов уменьшения высокочастотного шума без ущерба для информативности конечного результата. С этой целью предложено использовать цифровой фильтр низких частот для предварительной обработки исходных экспериментальных спектров.

Основная идея состоит в том, что уменьшение высокочастотного шума в исходных спектрах приведет к снижению ошибки при выполнении процедуры DOAS-анализа.

В качестве критерия удовлетворительного подбора параметров фильтра предложено использовать сумму квадратов отклонений значений дифференциальных наклонных толщ HONO от соответствующих средних значений, полученных независимо 9 научными группами с использованием 10 аналогичных приборов.

[**]CINDI-2 (Second Cabauw Intercomparison of Nitrogen Dioxide Measuring Instruments) [Electronic resource] / A. Apituley. 2016. URL: http://www.tropomi.eu/data-products/cindi-2 (date of access: 19.04.2018).

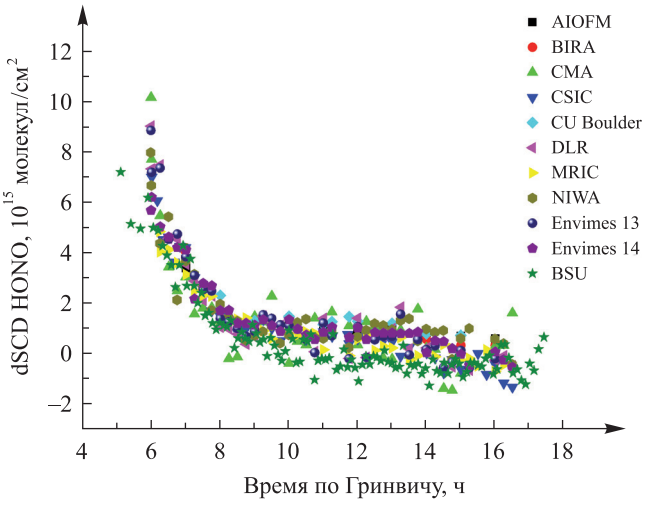


Рис. 1. Пример результата восстановления дифференциальных наклонных толщ азотистой кислоты: угол возвышения 2°; BSU – ряд данных белорусского прибора

Fig. 1. Example of dSCD HONO: retrieval at elevation 2°; BSU is the data series of the Belarusian instrument

Таким образом, предполагается реализовать существующую теоретическую возможность выбора оптимальных параметров цифрового фильтра для прибора MARS-B в его рабочем спектральном интервале. При этом в данном частном случае предпринимается попытка решить важную общую проблему – оптимизации методики интеркалибровки приборов с различающимися оптическими характеристиками по единому эталону.

Применяемый в настоящей работе цифровой фильтр Кайзера [4] представляет собой полосовой фильтр с нелинейной характеристикой частотного подавления. Характеристики фильтра определяются тремя параметрами: частотой среза, полосой пропускания, характеристикой ослабления. В настоящей работе крутизна характеристики ослабления фильтра была зафиксирована на уровне 70 дБ и не изменялась.

Зарегистрированные прибором MARS-B экспериментальные спектры подвергались предварительной фильтрации с различными комбинациями параметров (частота среза и полоса пропускания), после чего происходила стандартная процедура обработки по методу DOAS.

В результате были получены значения наклонных толщ малых газовых составляющих, которые затем преобразовывались в дифференциальные наклонные толщи по формуле

$$dSCD_{2^\circ} = DSCD_{2^\circ} - 0{,}5 \cdot (\text{last } DSCD_{90^\circ} + DSCD_{90^\circ}),$$

где $dSCD_{2^\circ}$ – дифференциальная наклонная толща для угла визирования 2°; $DSCD_{2^\circ}$ – наклонная толща для угла визирования 2°; last $DSCD_{90^\circ}$ – наклонная толща для зенитного направления, полученная в предыдущей серии измерений; $DSCD_{90^\circ}$ – наклонная толща для зенитного направления, установленная в той же серии измерений, где была определена $DSCD_{2^\circ}$.

Рассчитанные по приведенной выше формуле значения dSCD обычно используются для восстановления вертикального распределения исследуемой малой газовой составляющей [5].

Направление визирования 2° выбрано для анализа по той причине, что dSCD, полученные с направления 2°, имеют наиболее сильное влияние на параметры получаемого в итоге профиля измеряемой малой газовой составляющей, так как усредняющие ядра при решении обратной задачи для направлений визирования 1–5° имеют характерную особенность [6, с. 20]. При этом на измерения в направлении визирования 1° в гораздо большей степени, чем для направления визирования 2°, влияют неточности механического происхождения, связанные с позиционированием входных телескопов ввиду все той же особенности [6, с. 20].

Расчет значений dSCD азотистой кислоты без применения фильтра назван первоначальным расчетом, и его результаты использовались как отправная точка проведенного анализа.

Далее, были рассчитаны соответствующие значения dSCD с применением фильтра Кайзера при использовании различных комбинаций параметров (частота среза и полоса пропускания). Всего таким образом было проведено 336 вариантов обработки 998 спектров, зарегистрированных в течение одного выбранного дня.

Каждый из полученных вариантов интерполировался на одинаковую временную сетку при помощи кубического сплайна, после чего для каждого момента времени из этой сетки рассчитывался квадрат отклонения от первоначального расчета. Сумма квадратов отклонений за выбранный день являлась критерием результативности варианта обработки, а также показателем идентичности вариантов обработки с различными комбинациями параметров (рис. 2).

Для применения фильтра Кайзера характерно, что область обрабатываемого частотного спектра от начальной (нулевой) частоты до частоты среза остается неизменной, а далее в области полосы фильтра происходит подавление спектра в соответствии с характеристикой ослабления фильтра.

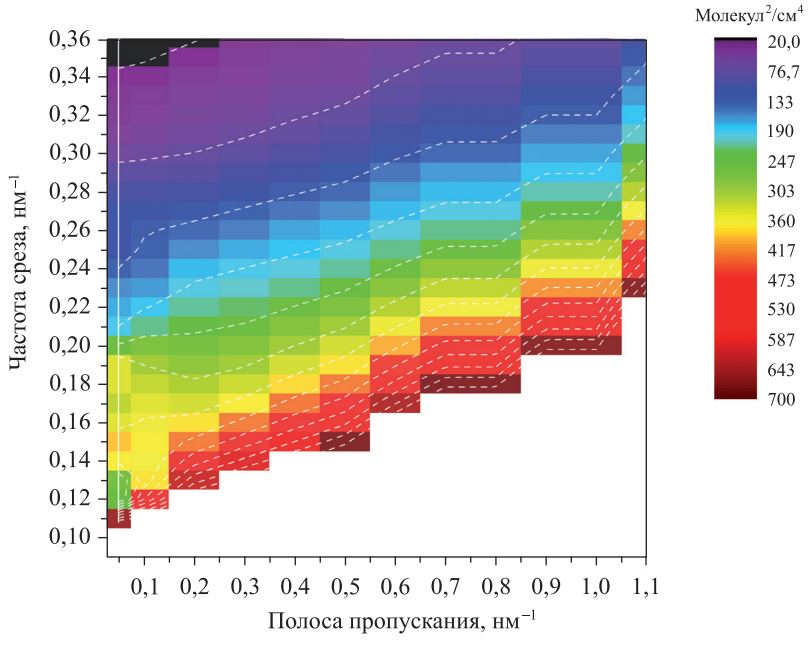


Рис. 2. Сумма квадратов отклонений дифференциальных наклонных толщ азотистой кислоты от первоначального расчета (молекул^2/см^4) за день измерений, полученная в ходе применения различных параметров фильтра (частота среза и полоса пропускания) к обрабатываемым спектрам. Штрихами обозначены линии одинаковой суммы квадратов отклонений

Fig. 2. Sum of squares of deviations relative to the initial retrieval (mol^2/cm^4) during the day of the measurements for different filter parameters (cut-off frequency and pass band (nm^{-1})), which have been applied to spectra before DOAS fit. Dashed lines illustrate lines of the equal sum of deviations squares from the initial measurements

Процедура фильтрации представляет собой применение быстрого фурье-преобразования к спектральному распределению, удаление высоких частот и обратное преобразование. При этом под частотой в настоящей работе следует понимать аналог частоты, которая используется для описания фурье-разложения временного ряда, в том случае, когда по оси ординат откладывается длина волны. Тогда в качестве единиц измерения частоты среза и полосы пропускания выступают нм$^{-1}$.

Результаты исследований и их обсуждение

Данные рис. 2 можно интерпретировать следующим образом: при увеличении частоты среза в спектре остается большее количество особенностей, которые содержат в том числе информацию об исследуемой малой газовой составляющей. В связи с этим при увеличении частоты среза dSCD отфильтрованных спектров очень похожи на соответствующие dSCD первоначального расчета. Полоса пропускания при этом перестает играть существенную роль.

Общую ошибку восстановления наклонных толщ методом DOAS в настоящее время принято характеризовать среднеквадратичным отклонением остаточного спектра (RMS), который определяется как разница между экспериментальным и модельным спектрами.

Усредненные значения RMS за весь день измерений при направлении визирования 2° для 336 вариантов предварительной обработки спектров представлены на рис. 3.

Интересно отметить, что среднее дневное значение RMS без применения фильтров составляет $1{,}67 \cdot 10^{-3}$ о. т.

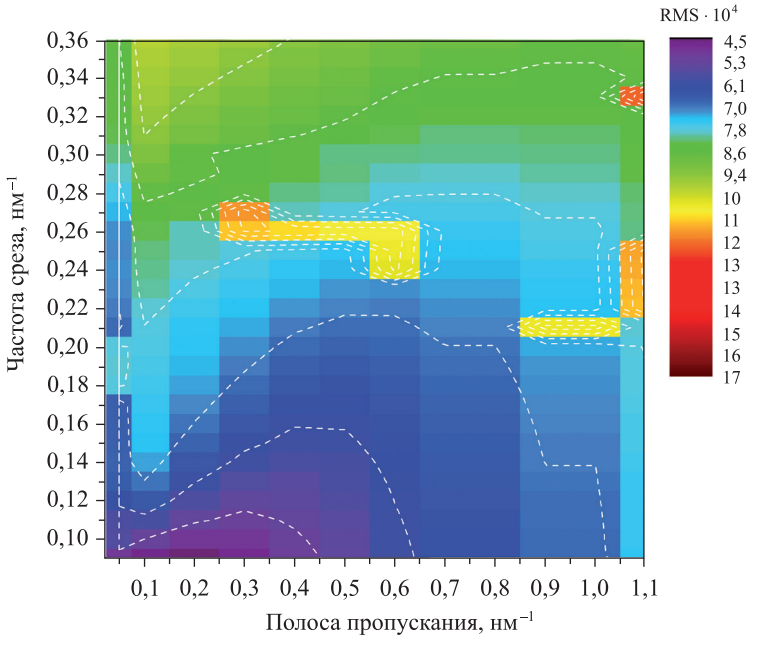


Рис. 3. Зависимость RMS при различных параметрах фильтра.
Штрихами обозначены линии одинакового RMS.
Единица измерения RMS – оптическая толщина (о. т.)

Fig. 3. RMS dependence for different filter parameters.
Dashed lines are associated with equal RMS. The RMS unit is optical depth (O. D.)

Данные, приведенные на рис. 3, свидетельствуют о том, что значение RMS уменьшается относительно соответствующего значения для первоначального расчета при применении любой комбинации параметров фильтра из числа исследованных.

Это можно объяснить наличием в измеренных спектрах высокочастотной компоненты, которая вносит значимый вклад в формирование остаточного спектра. Любой фильтр низких частот будет уменьшать эту компоненту, что автоматически приведет к снижению RMS.

При этом можно заметить наличие минимальных значений RMS, которые при определенной комбинации параметров фильтра (например, частота среза составляет 0,1 и полоса пропускания – 0,4) оказываются в 3,4 раза меньше, чем для первоначального расчета. Здесь возможны и другие комбинации параметров фильтра (штриховые линии на рис. 3).

Однако важно отметить, что наименьшее значение RMS не обязательно является наилучшим, так как на данном этапе исследования остается неизвестным то количество полезной информации, которое, возможно, было исключено из рассмотрения при использовании такого фильтра. Ниже будет показано, что, применяя те параметры фильтра, которые минимизируют RMS, можно получить значительное расхождение получаемых данных с эталонным измерением.

Данные о значениях dSCD азотистой кислоты, полученные при помощи 10 независимых приборов (их названия приведены на легенде рис. 1), были интерполированы на одинаковую временную сетку и усреднены с одинаковыми весами. Получившееся таким образом усредненное измерение в настоящей работе названо эталонным и используется как измерение абстрактного эталонного прибора. Для каждого момента времени временной сетки определялся квадрат отклонения одного из предварительно рассчитанных 336 вариантов обработки от эталонного измерения.

Сумма квадратов отклонений получаемого результата от эталонного измерения за выбранный день являлась критерием степени идентичности вариантов обработки и близости их результата к эталонному измерению (рис. 4).

Как видно из рис. 4, сумма квадратов отклонений первоначального расчета от эталона составила 623 ед. Участки, обозначенные на рис. 4 белым цветом, соответствуют большим отклонениям dSCD от эталона, чем это наблюдается для первоначального расчета.

Таким образом, на примере измерений наклонных содержаний конкретной малой газовой составляющей азотистой кислоты показана возможность корректировки получаемых результирующих значений dSCD путем подбора оптимальных параметров фильтра низких частот для предварительной обработки экспериментальных спектров.

Конечный результат процедуры такой корректировки представлен на рис. 5.

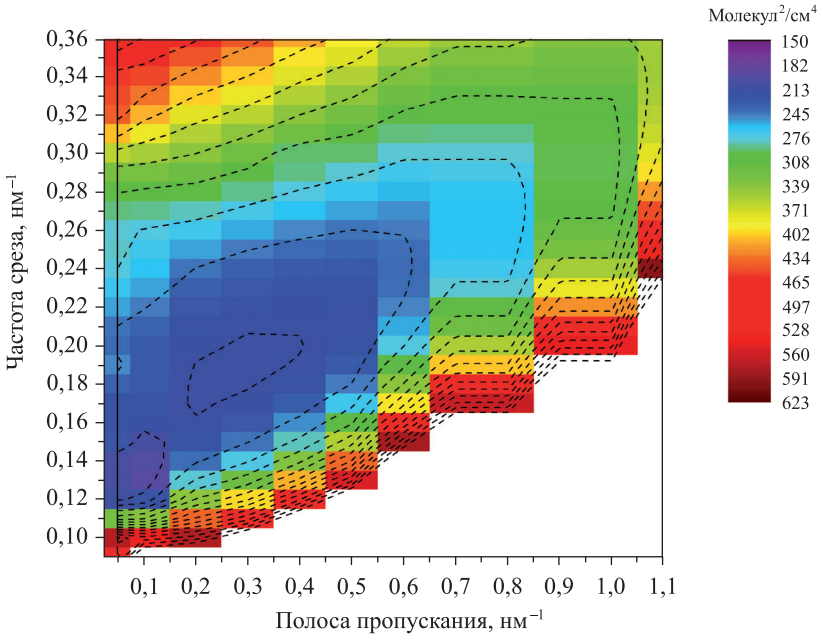


Рис. 4. Сумма квадратов отклонений дифференциальных наклонных толщ азотистой кислоты от эталонного измерения (молекул^2/см^4) за весь день измерений, полученная в ходе применения различных параметров фильтра (частота среза и полоса пропускания) к обрабатываемым спектрам. Штриховыми линиями обозначены уровни одинаковой суммы квадратов отклонений

Fig. 4. Sum of squares of deviations relative to the reference instrument during the day of measurements for different filter parameters (cut-off frequency (nm^{-1}) and pass band (nm^{-1})), which have been applied to spectra before DOAS fit. Dashed lines give equal sum of squared deviations from the reference instrument measurements

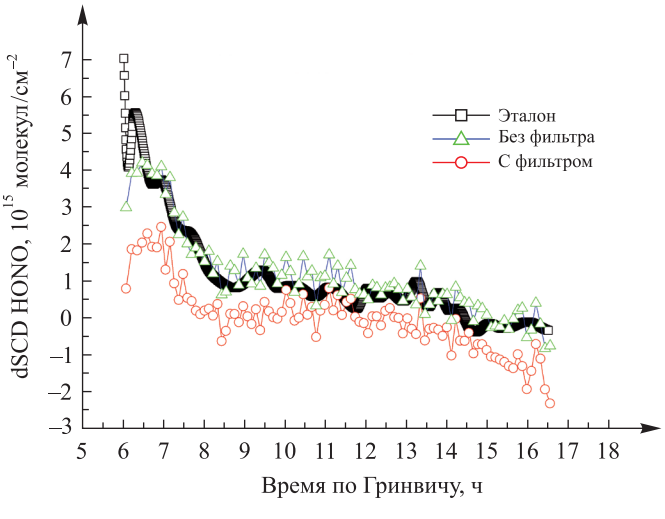


Рис. 5. Сравнение значений dSCD азотистой кислоты, полученных с использованием фильтра и без его применения, с интерполированными эталонными значениями. Угол возвышения составляет 2°

Fig. 5. Comparison of dSCD HONO obtained after employing the filter, without filter, and from the reference instrument for elevation angle 2°

В рассмотренном случае с азотистой кислотой для прибора MARS-B в диапазоне длин волн 335–373 нм оптимальные параметры фильтра Кайзера при фиксированной крутизне ослабления 70 дБ составили: частота среза – 0,13 и полоса пропускания – 0,1.

При использовании таких параметров среднее значение квадрата амплитуды остаточного спектра после проведения процедуры DOAS-анализа уменьшилось с $1{,}67 \cdot 10^{-3}$ до $6{,}94 \cdot 10^{-4}$ о. т. (почти в 2,4 раза).

Усредненное измерение искусственно определенного нами эталонного прибора представляет собой суперпозицию измерений разных приборов, при помощи каждого из которых с большей или меньшей степенью достоверности происходит восстановление величины наклонной толщи исследуемой малой газовой составляющей. При этом заранее неизвестно, какое из измерений наилучшим образом соответствует реальной физической величине. Такой вид усреднения неизбежно включает в общую ошибку усредненные систематические погрешности отдельных приборов.

Наклонная толща малой газовой составляющей получена расчетным способом из измеренных экспериментальных спектров при помощи DOAS-методики со стандартными настройками (список сечений поглощения, степень полинома, количество исследуемых примесей, рабочий спектральный интервал, выбор опорного спектра), причем их использование было одним из обязательных условий кампании сравнений.

Таким образом, можно сделать вывод о том, что (без учета человеческого фактора) при проведении подобных измерений по описанному выше принципу ключевую роль при вычислении наклонных толщ играют качество регистрируемых спектров и их предварительная обработка.

На качество регистрируемых спектров влияет совокупность факторов:

- оптическая схема прибора (определяет уровень рассеянного излучения, спектральную разрешающую способность, освещенность детектора). Оперативно изменять оптическую схему прибора в процессе проведения измерений не представляется возможным;
- характеристики детектора: разрядность, чувствительность, режимы накопления сигнала, время считывания, область линейности, отношение сигнал/шум и др. Некоторые характеристики детектора могут быть оперативно изменены во время проведения измерений, остальные нет.

Так, например, использованный в приборе MARS-B детектор DV420-OE (Andor Technology) позволяет менять скорость считывания, устанавливать температуру фоточувствительного кристалла и выбирать режим регистрации.

Общепринятый подход, рекомендованный производителем данного типа детекторов для регистрации спектров наилучшего качества, при прочих равных условиях состоит в одновременном выполнении следующих требований: наименьшей скорости считывания, нахождения уровня сигнала в области линейности, наименьшей температуры фоточувствительного кристалла (–40 °C и ниже).

Такие настройки детектора применялись в ходе кампании сравнений, так как их изменение заведомо ухудшает отношение сигнал/шум (например, увеличение скорости считывания приведет к увеличению шума считывания и т. д.).

Предварительная обработка спектров может включать в себя такие процедуры, как вычитание темнового сигнала, усреднение нескольких спектров во времени, поиск и исключение горячих пикселей, фильтрование и т. п.

Применение того или иного подхода к обработке спектров перед проведением процедуры DOAS-анализа обусловлено электрическими и оптическими особенностями каждого конкретного прибора.

При обработке спектров по методу DOAS и проведении фурье-анализа остаточных спектров нами было замечено, что спектр мощности не зависит от времени дня и геометрии наблюдений, следовательно, остаточный спектр в большей степени определяется особенностями преобразования оптического сигнала в электрический внутри спектрального прибора.

В настоящей работе для выяснения конкретных причин возникновения шумовых компонент в остаточном спектре проводился дополнительный эксперимент, в ходе которого изменялись оптимальные параметры работы детектора – скорость считывания (4 градации) и температура детектора (от –40 до –10 °C с шагом 10 °C).

Для каждого набора параметров регистрировался спектр с одинаковым временем экспозиции, составившим 3 с, так как за это время накапливается необходимый уровень сигнала, находящийся в области линейности детектора.

Для иллюстрации наличия информационной компоненты, которая присутствует в остаточном спектре, на график (рис. 6) нанесены результаты быстрого фурье-преобразования всех 16 комбинаций полученных остаточных спектров.

Наличие компоненты, которая приходится на область частот от 0 до 2,5 отн. ед., причем она повторяется для разных остаточных спектров, иллюстрирует рис. 6. Другими словами, эта часть остаточного спектра не обусловлена шумовыми процессами внутри прибора, за исключением первого пика. При внимательном рассмотрении первого пика оказывается, что его амплитуда увеличивается с ростом температуры кристалла детектора. Таким образом, из этого эксперимента следует, что спектр теплового шума детектора лежит в области самых низких частот. Частота измеряется в единицах, пропорциональных нанометрам в минус первой степени, так как быстрое фурье-преобразование применяется не к временному ряду, а к спектральному распределению.

Спектральная структурность в области частот от 0 до 2,5 отн. ед. может свидетельствовать о наличии некой малой газовой составляющей в остаточном спектре, тогда как амплитуда спектрального шума в области частот от 2,5 до 6,0 отн. ед. незначительно увеличивается с возрастанием скорости считывания.

Работу фильтра Кайзера с оптимальными для восстановления азотистой кислоты параметрами иллюстрирует рис. 7. Спектры регистрировались при скорости считывания 31,5 кГц и температуре –40 °С.

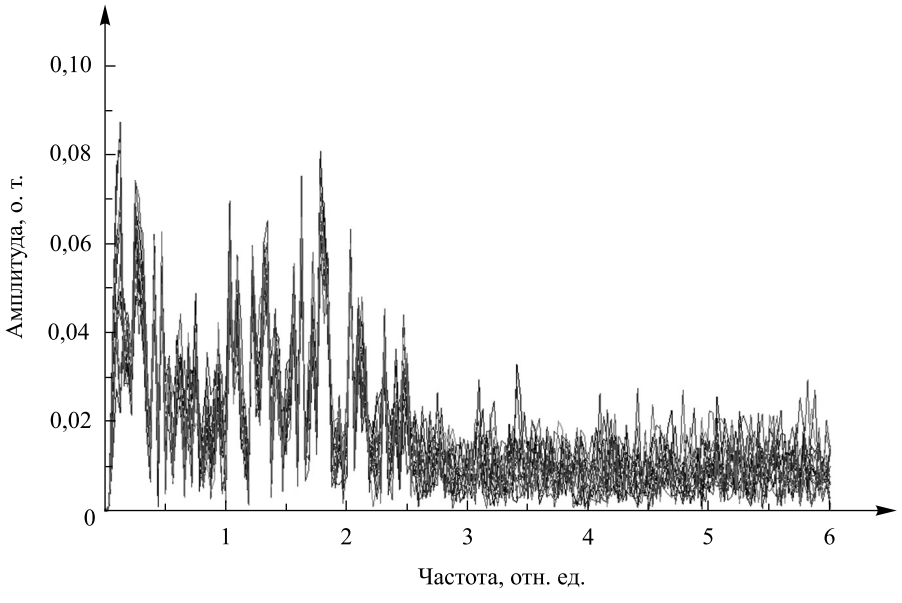


Рис. 6. Быстрое фурье-преобразование 16 остаточных спектров, зарегистрированных при разных температурах детектора и скоростях считывания

Fig. 6. Fast Fourier transform of 16 residual spectra registered at different temperatures and reading rates

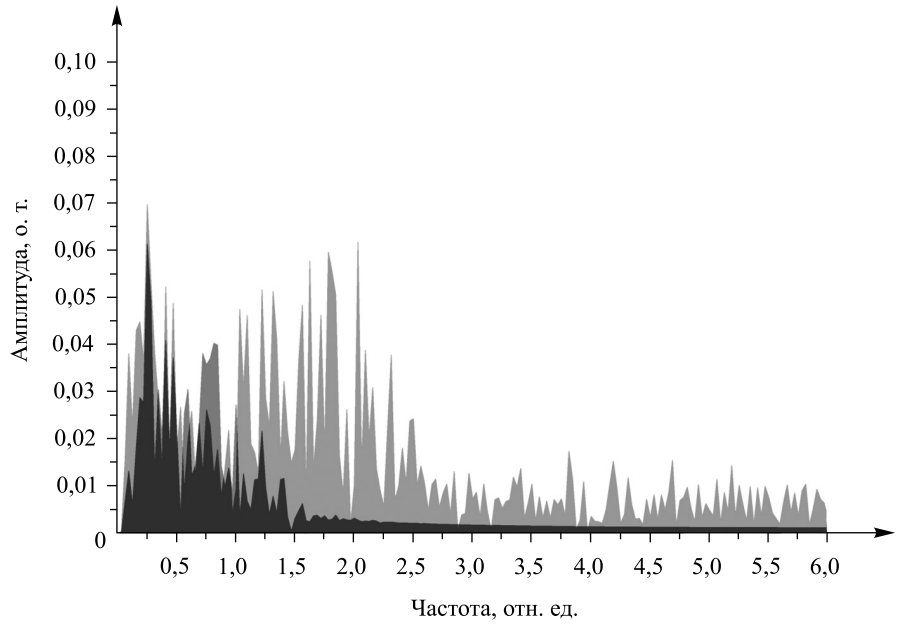


Рис. 7. Быстрое фурье-преобразование остаточного спектра: без применения фильтра – серый цвет; после применения фильтра к экспериментальному спектру – черный цвет

Fig. 7. Fast Fourier transform of a residual spectrum: without filter (grey) and with the filter (black)

Из рис. 7 видно, что фильтр частично убирает структурную область, однако, как показали исследования, это не влияет на получаемый дневной ход наклонных содержаний азотистой кислоты, следовательно, исключенная спектральная область отвечает либо за другие малые газовые составляющие, либо несет в себе иную информацию.

Заключение

В настоящей работе на примере азотистой кислоты впервые показана возможность калибровки получаемых в результате DOAS-анализа значений dSCD малых газовых составляющих с использованием предварительной обработки экспериментальных спектров фильтром низких частот. Предложен алгоритм калибровки.

В процессе реализации алгоритма калибровки применительно к прибору MARS-B (Национальный научно-исследовательский центр мониторинга озоносферы БГУ) были выявлены следующие особенности.

1. При применении цифрового фильтра Кайзера низких частот для определенной частоты среза dSCD малой газовой составляющей, полученные из отфильтрованных спектров, минимально отличаются от dSCD, полученных без применения фильтра (см. рис. 2).

Указанный факт дает теоретическую возможность поставить в соответствие каждой малой газовой составляющей свою частоту среза (или величину частотного окна), что может обеспечить проведение избирательного DOAS-анализа как нового подхода к восстановлению малых газовых составляющих. Возможная сложность состоит в том, что частотные окна в фурье-пространстве некоторых малых газовых составляющих могут перекрываться.

2. Для данного типа детектора (Andor Technology DV420-OE) при его использовании в составе DOAS-прибора в измеренных спектрах характерно наличие высокочастотной компоненты, которая вносит значимый вклад в формирование остаточного спектра.

Любой фильтр низких частот способен уменьшать эту шумовую компоненту, что приведет к уменьшению RMS. Это, однако, не будет автоматически означать уменьшение ошибки измерений dSCD конкретной малой газовой составляющей, поскольку такая фильтрация может уничтожить полезную информацию в спектре. Другими словами, критерием правильности выбора параметров фильтра должна быть минимизация отклонений между восстанавливаемыми наклонными толщами и эталонным измерением, но не минимизация RMS. Следует отметить, что RMS для отфильтрованных спектров всегда меньше, чем для спектров без коррекции (см. рис. 3).

3. Высокочастотная компонента в остаточном спектре обусловлена шумами детектора, ее амплитуда незначительно возрастает при увеличении скорости считывания.

Тепловой шум имеет максимум в области низких частот, как раз там, где располагаются спектры сечений поглощений большинства малых газовых составляющих, поэтому увеличение температуры детектора значительно ухудшает качество расчета по методу DOAS.

4. Применение оптимальных параметров фильтра не нарушает структурность измеренной временной изменчивости dSCD азотистой кислоты в течение дня, а действует как фактор масштаба сдвига и растяжения, что позволяет максимально приблизить результат измерений к эталону.

По нашему мнению, полученные результаты можно без ограничения общности применять к измерению любой другой малой газовой составляющей, восстанавливаемой по методу DOAS.

Библиографические ссылки

1. *Бручковский И. И., Боровский А. Н., Демин В. С. и др.* Прибор для дистанционной регистрации двуокиси азота в атмосфере // Вестн. БГУ. Сер. 1, Физика. Математика. Информатика. 2013. № 1. С. 41–45.

2. *Бручковский И. И., Красовский А. Н., Демин В. С.* Зеркально-линзовый прибор MAX-DOAS: результаты международных сравнений MAD-CAT 2013 // Вестн. БГУ. Сер. 1, Физика. Математика. Информатика. 2015. № 3. С. 44–49.

3. *Platt U., Stutz J.* Differential Optical Absorption Spectroscopy Principles and Applications. Berlin ; Heidelberg : Springer, 2008.

4. *Kaiser J., Reed W.* Data smoothing using low-pass digital filters // Rev. Sci. Instrum. 1977. Vol. 48, issue 11. P. 1447–1457. DOI: 10.1063/1.1134918.

5. *Irie H., Kanaya Y., Akimoto H., et al.* First retrieval of tropospheric aerosol profiles using MAX-DOAS and comparison with lidar and sky radiometer measurements // Atm. Chem. Phys. 2008. Vol. 8, issue 2. P. 341–350. DOI: 10.5194/acp-8-341-2008.

6. *Rodgers Clive D.* Inverse Methods for Atmospheric Sounding: theory and practice // Series on atmospheric, oceanic and planetary physics. Vol. 2. Oxford : Univ. of Oxford, 2000.

References

1. Bruchkouski I. I., Borovsky A. N., Demin V. S., et al. The instrument for remote nitrogen dioxide registration. *Vestnik BGU. Ser. 1, Fiz. Mat. Inform.* 2013. No. 1. P. 41–45 (in Russ.).

2. Bruchkouski I. I., Krasouski A. N., Demin V. S. Catadioptrical MAX-DOAS instrument: results of international inter-comparison campaign MAD-CAT 2013. *Vestnik BGU. Ser. 1, Fiz. Mat. Inform.* 2015. No. 3. P. 44–49 (in Russ.).

3. Platt U., Stutz J. Differential Optical Absorption Spectroscopy Principles and Applications. Berlin ; Heidelberg : Springer, 2008.

4. Kaiser J., Reed W. Data smoothing using low-pass digital filters. *Rev. Sci. Instrum.* 1977. Vol. 48, issue 11. P. 1447–1457. DOI: 10.1063/1.1134918.

5. Irie H., Kanaya Y., Akimoto H., et al. First retrieval of tropospheric aerosol profiles using MAX-DOAS and comparison with lidar and sky radiometer measurements. *Atm. Chem. Phys.* 2008. Vol. 8, issue 2. P. 341–350. DOI: 10.5194/acp-8-341-2008.

6. Rodgers Clive D. Inverse Methods for Atmospheric Sounding: theory and practice. *Series on atmospheric, oceanic and planetary physics. Vol. 2.* Oxford : Univ. of Oxford, 2000.

Статья поступила в редколлегию 27.11.2017.
Received by editorial board 27.11.2017.

Физика электромагнитных явлений

Physics of electromagnetic phenomena

УДК 537.87

ВОЗДЕЙСТВИЕ ОПТИЧЕСКИХ СИЛ НА НЕОДНОРОДНЫЕ АНИЗОТРОПНЫЕ ЧАСТИЦЫ

А. В. НОВИЦКИЙ [1), 2)], ***Р. Х. АЛЬВАРЕС РОДРИГЕС*** [1)], ***В. М. ГАЛЫНСКИЙ*** [1)]

[1)] *Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Беларусь*
[2)] *Институт фотоники Технического университета Дании, ул. Эрстеда, 343, 2800, г. Конгенс Люнгбю, Дания*

Рассчитаны оптические силы и моменты сил, действующие на неоднородные анизотропные сферические и цилиндрические частицы в поле пары плоских электромагнитных волн. Вычисление оптических сил реализовано в дипольном приближении с использованием аналитических выражений для поляризуемостей частиц, а также численно с учетом высших мультипольных моментов. Проведено сравнение этих двух способов расчета и показано их согласование в области применимости дипольного приближения. Найдены условия притяжения неоднородных частиц световым пучком без градиента интенсивности. Выполнено сравнение результатов для однородных и неоднородных сферических частиц. Установлено, что неоднородность рассеивателя сдвигает мультипольные резонансы, предоставляя еще одно средство управления величиной и направлением оптической силы. Рассчитан

Образец цитирования:
Новицкий А. В., Альварес Родригес Р. Х., Галынский В. М. Воздействие оптических сил на неоднородные анизотропные частицы // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2018. № 2. С. 97–106.

For citation:
Novitsky A. V., Alvarez Rodriguez R. J., Galynsky V. M. Action of optical forces on inhomogeneous anisotropic particles. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2018. No. 2. P. 97–106 (in Russ.).

Авторы:
Андрей Викторович Новицкий – доктор физико-математических наук, доцент; профессор кафедры теоретической физики и астрофизики физического факультета[1)]; старший научный сотрудник лаборатории метаматериалов[2)].
Ричард Хосе Альварес Родригес – аспирант кафедры теоретической физики и астрофизики физического факультета. Научный руководитель – А. В. Новицкий.
Владимир Михайлович Галынский – кандидат физико-математических наук; доцент кафедры теоретической физики и астрофизики физического факультета.

Authors:
Andrey V. Novitsky, doctor of science (physics and mathematics), docent; professor at the department of theoretical physics and astrophysics, faculty of physics[a]; senior researcher at the metamaterials group[b].
novitsky@bsu.by
Richard J. Alvarez Rodriguez, postgraduate student at the department of theoretical physics and astrophysics, faculty of physics.
richardfby@gmail.com
Vladimir M. Galynsky, PhD (physics and mathematics); associate professor at the department of theoretical physics and astrophysics, faculty of physics.
galynsky@bsu.by

спиновый момент сил в дипольном приближении. Показано, что как в случае сферической, так и цилиндрической неоднородной частицы он отличен от нуля для нелинейно-поляризованной падающей волны. Результаты данной работы могут найти применение при создании новых типов динамических метаматериалов, а также при описании движения сложных объектов в оптических пинцетах.

Ключевые слова: электромагнитные волны; оптические силы; рассеяние света; коэффициенты Ми; поляризуемости; мультиполи.

Благодарность. Авторы благодарят Белорусский республиканский фонд фундаментальных исследований (грант № Ф16Р-049) за финансовую поддержку.

ACTION OF OPTICAL FORCES ON INHOMOGENEOUS ANISOTROPIC PARTICLES

A. V. NOVITSKY[a, b]***, R. J. ALVAREZ RODRIGUEZ***[a]***, V. M. GALYNSKY***[a]

[a]*Belarusian State University, 4 Niezaliežnasci Avenue, Minsk 220030, Belarus*
[b]*DTU Fotonik, Technical University of Denmark, 343 Ørsteds Plads, Kgs. Lyngby DK-2800, Denmark*
Corresponding author: V. M. Galynsky (galynsky@bsu.by)

Optical forces and torques exerted on inhomogeneous anisotropic spherical and cylindrical particles by a couple of plane electromagnetic waves are calculated. The optical forces are computed in dipole approximation using the closed-form expressions for particle polarizabilities and numerically taking into consideration the higher-order multipole moments. We compare these calculation techniques and demonstrate their agreement in the region of dipole approximation. Conditions for pulling inhomogeneous particles by means of the light beam without intensity gradient are revealed. The comparison between homogeneous and inhomogeneous spherical particles is carried out. It is found that the scatterer inhomogeneity shifts the multipole resonances providing one more way for controlling value and direction of the optical force. Spin torque is calculated in the dipole approximation. We show that it does not vanish for non-linear polarization of the incident wave both in the case of spherical and cylindrical inhomogeneous particle. The results obtained in this work can be applied for designing new types of dynamical metamaterials, as well as for describing of movement of complex objects in optical tweezers.

Key words: electromagnetic waves; optical forces; light scattering; Mie coefficients; polarizabilities; multipoles.

Acknowledgements. The authors acknowledge financial support from the Belarusian Republican Foundation for Fundamental Research (grant No. Ф16Р-049).

Введение

В классической электродинамике механическое воздействие оптического излучения было предсказано Дж. К. Максвеллом [1] и позднее обнаружено П. Н. Лебедевым экспериментально [2]. В современной физике оптомеханика стала надежным инструментом для изучения как классических, так и квантовых явлений [3–7]. В настоящей работе теоретически рассмотрено механическое воздействие световых пучков на неоднородные анизотропные объекты сферической и цилиндрической формы. Полученные результаты могут быть использованы, например, для описания движения микрочастиц в оптических пинцетах [8–13].

Можно выделить два типа оптических сил – градиентные и неконсервативные. Силы первого типа обусловлены градиентом интенсивности электромагнитного поля. Обычно они превалируют для частиц, размеры которых намного меньше длины волны. Неконсервативные силы возникают благодаря рассеянию электромагнитных полей. Они играют особенно важную роль в отсутствие градиента поля и могут приводить к эффекту притяжения частиц силами светового давления [14–16]. Оптические силы могут быть рассчитаны различными способами. Метод интегрирования тензора натяжений Максвелла [17] эквивалентен учету всех мультипольных моментов объекта, а потому обычно не подходит для быстрых и аналитических расчетов. Если ограничить размер частиц, то можно получить простые аналитические выражения. Примерами являются рэлеевское приближение ($\frac{2\pi R}{\lambda} \ll 1$, где R – радиус частицы; λ – длина волны излучения), когда частицы можно считать электрическими диполями, и дипольное приближение ($\frac{2\pi R}{\lambda} \sim 1$) в случае возбуждения лишь электрического и магнитного дипольных моментов в частице [18].

Оптические силы, действующие на неоднородные анизотропные частицы, мало изучены, так как чрезвычайно трудно найти аналитические решения уравнений Максвелла в таких частицах. Известные исследования основаны на применении численных методов расчета и различных приближений [19–21]. Неоднородным объектом часто выступает многослойная частица. В настоящей работе исследуются силы, действующие на непрерывно неоднородные анизотропные частицы, не рассматривавшиеся ранее в литературе. Цель работы – изучить оптические силы, влияющие на неоднородные сферические и цилиндрические частицы. Для достижения цели ставятся следующие задачи: 1) вывести аналитические выражения для коэффициентов рассеяния Ми и электрической и магнитной поляризуемостей сферических и цилиндрических частиц; 2) рассчитать оптические силы с помощью тензора максвелловских натяжений и в дипольном приближении; 3) сравнить точное значение силы с дипольным приближением для определения рамок применимости последнего; 4) проанализировать притягивающие силы в полях без градиента интенсивности; 5) рассчитать спиновый момент сил в дипольном приближении.

Оптические силы и моменты сил

Падающее монохроматическое электромагнитное излучение с круговой частотой ω и напряженностями электрического $\mathbf{E}^{\text{inc}}$ и магнитного $\mathbf{H}^{\text{inc}}$ полей при взаимодействии с материальным объектом создает рассеянные поля $\mathbf{E}^{\text{sc}}$ и $\mathbf{H}^{\text{sc}}$. Усредняя закон сохранения импульса для поля и объекта по периоду колебаний стационарной волны $\frac{2\pi}{\omega}$, получаем усредненную по времени силу, действующую со стороны электромагнитного излучения на рассматриваемую частицу [17]:

$$\mathbf{F} = \oint_S \hat{T} d\mathbf{s}, \tag{1}$$

где производится интегрирование усредненного по времени тензора натяжений Максвелла

$$\hat{T} = \frac{1}{8\pi}\mathrm{Re}\left(\mathbf{E}\otimes\mathbf{E}^* + \mathbf{H}\otimes\mathbf{H}^* - \frac{1}{2}\left(|\mathbf{E}|^2 + |\mathbf{H}|^2\right)\right) \tag{2}$$

по произвольной замкнутой поверхности S, охватывающей частицу. Электрическое и магнитное поля в формуле (2) – это полное поле в окружающем пространстве, т. е. суперпозиция падающего и рассеянного полей согласно $\mathbf{E} = \mathbf{E}^{\text{inc}} + \mathbf{E}^{\text{sc}}$ и $\mathbf{H} = \mathbf{H}^{\text{inc}} + \mathbf{H}^{\text{sc}}$, а знак $\otimes$ подразумевает тензорное произведение векторов $\left(\mathbf{a}\otimes\mathbf{b}\right)_{ij} = a_i b_j$. При расчете сферических и произвольных рассеивателей в дальней волновой зоне представляется удобным выбор сферической поверхности интегрирования S. Например, для сферической частицы радиусом R можно интегрировать по ее поверхности

$$\mathbf{F} = \int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\left(\hat{T}\mathbf{n}\right)R^2\sin\theta d\theta d\varphi, \tag{3}$$

где $\mathbf{n}$ – внешняя нормаль к поверхности сферы; r, θ и φ – сферические координаты. В случае длинной цилиндрической частицы и падающей волны в плоскости ее поперечного сечения интегрирование удобно проводить по поверхности цилиндра радиусом R. Тогда сила в расчете на единицу длины цилиндра примет вид

$$\mathbf{f} = \int_0^{2\pi}\left(\hat{T}\mathbf{n}\right)Rd\varphi. \tag{4}$$

Общее выражение для силы (1) может быть записано в виде ряда по мультипольным моментам. Для этого поверхность интегрирования S выбирают в виде сферы или цилиндра с бесконечным радиусом и используют свойства рассеянных полей в дальней зоне. При учете лишь электрического $\mathbf{p}$ и магнитного $\mathbf{m}$ дипольных моментов сила, действующая на сферическую частицу, становится равной [18]

$$\mathbf{F} = \frac{1}{2}\mathrm{Re}\left[\nabla\left(\mathbf{p}\overset{\downarrow}{\mathbf{E}}^*_{\text{inc}}\right) + \nabla\left(\mathbf{m}\overset{\downarrow}{\mathbf{H}}^*_{\text{inc}}\right)\right] - \frac{k_0^4}{3}\mathrm{Re}\left(\mathbf{p}\times\mathbf{m}^*\right), \tag{5}$$

где дифференциальные операторы действуют только на электрическое и магнитное поля (отмечено стрелкой над буквой); k_0 – волновое число в вакууме. Дипольные моменты выражаются через поляризуемости сферической частицы согласно $\mathbf{p} = \alpha_e \mathbf{E}_{\text{inc}}$ и $\mathbf{m} = \alpha_m \mathbf{H}_{\text{inc}}$.

Для цилиндрической частицы [22] последнее слагаемое в формуле (5) станет равным $\frac{\pi k_0^3}{2}\mathrm{Re}\left(\mathbf{p}\times\mathbf{m}^*\right)$, а дипольные моменты будут зависеть от поляризации падающего излучения (вдоль или поперек оси цилиндра) как $\mathbf{p}=\left[\alpha_e^{\parallel}\mathbf{e}_z\otimes\mathbf{e}_z+\alpha_e^{\perp}\left(1-\mathbf{e}_z\otimes\mathbf{e}_z\right)\right]\mathbf{E}_{\mathrm{inc}}$ и $\mathbf{m}=\left[\alpha_m^{\parallel}\mathbf{e}_z\otimes\mathbf{e}_z+\alpha_m^{\perp}\left(1-\mathbf{e}_z\otimes\mathbf{e}_z\right)\right]\mathbf{H}_{\mathrm{inc}}$.

Усредненный по времени момент сил – сумма орбитального и спинового моментов. Первый, $\mathbf{r}\times\mathbf{F}$, зависит от положения частицы и является вкладом орбитального момента волны, а второй в дипольном приближении равен [23]

$$\mathbf{K}=\frac{1}{2}\mathrm{Re}\left[\mathbf{p}\times\mathbf{E}_{\mathrm{inc}}^*+\mathbf{m}\times\mathbf{H}_{\mathrm{inc}}^*\right]. \tag{6}$$

В настоящей работе будет рассматриваться только спиновый момент сил.

Электрическая и магнитная поляризуемости неоднородных частиц

Как для однородных, так и неоднородных объектов электрическая и магнитная поляризуемости выражаются через коэффициенты рассеяния. Для сферических частиц поляризуемости равны [18]

$$\alpha_e=\frac{3ia_1}{2k_0^3},\ \alpha_m=\frac{3ib_1}{2k_0^3}, \tag{7}$$

а коэффициенты Ми принимают вид [24]

$$\begin{aligned}
a_l&=\frac{j_l\left(n_0\rho\right)}{h_l^{(1)}\left(n_0\rho\right)}\mathbf{e}_\theta\left(\tilde{\Gamma}_l-\Gamma_l\right)^{-1}\left[\Gamma_l\left(\mathbf{e}_\theta+i\mu_0\left(\mathbf{e}_\theta\Gamma_l^{(0)}\mathbf{e}_\varphi\right)^{-1}\mathbf{e}_\varphi\right)-i\mu_0\mathbf{e}_\theta-\left(\mathbf{e}_\varphi\Gamma_l^{(0)}\mathbf{e}_\theta\right)\mathbf{e}_\varphi\right],\\
b_l&=\frac{j_l\left(n_0\rho\right)}{i\mu_0 h_l^{(1)}\left(n_0\rho\right)}\mathbf{e}_\theta\left(\tilde{\Gamma}_l-\Gamma_l\right)^{-1}\left[\Gamma_l\left(\mathbf{e}_\theta+i\mu_0\left(\mathbf{e}_\theta\Gamma_l^{(0)}\mathbf{e}_\varphi\right)^{-1}\mathbf{e}_\varphi\right)-i\mu_0\mathbf{e}_\theta-\left(\mathbf{e}_\varphi\Gamma_l^{(0)}\mathbf{e}_\theta\right)\mathbf{e}_\varphi\right],
\end{aligned} \tag{8}$$

где $\rho=k_0R$ – параметр размера частицы; $\mathbf{e}_r$, $\mathbf{e}_\theta$ и $\mathbf{e}_\varphi$ – базисные векторы сферической системы координат; ε_0, μ_0 и n_0 – диэлектрическая проницаемость, магнитная проницаемость и показатель преломления окружающей частицу среды соответственно; $\Gamma_l^{(0)}$ и $\tilde{\Gamma}_l$ – тензоры поверхностного импеданса для парциальных сферических волн, по которым раскладываются падающие (описываются сферическими функциями Бесселя $j_l\left(n_0k_0r\right)$ и рассеянные (описываются сферическими функциями Ханкеля $h_l^{(1)}\left(n_0k_0r\right)$) поля соответственно; Γ_l – тензор поверхностного импеданса волн в сферической частице.

Рассмотрим анизотропную радиально-неоднородную частицу с проницаемостями $\hat{\varepsilon}=\varepsilon_1\left(h_0+h_2k_0^2r^2\right)^{-1}\mathbf{e}_r\otimes\mathbf{e}_r+\varepsilon_1\left(1-\mathbf{e}_r\otimes\mathbf{e}_r\right)$ и $\hat{\mu}=\mu_1\left(h_0+h_2k_0^2r^2\right)^{-1}\mathbf{e}_r\otimes\mathbf{e}_r+\mu_1\left(1-\mathbf{e}_r\otimes\mathbf{e}_r\right)$, где ε_1, μ_1, h_0 и h_2 – постоянные. В этом случае поля в частице выражаются через сферические функции Бесселя дробного порядка [25], а коэффициенты Ми (8) равны

$$a_l=\frac{j_l\left(n_0\rho\right)}{h_l^{(1)}\left(n_0\rho\right)}\frac{\gamma_0D_l^{(0)}\left(n_0\rho\right)-\gamma_{1,l}D_{m_l}\left(\lambda_l\rho\right)}{\gamma_0\tilde{D}_l\left(n_0\rho\right)-\gamma_{1,l}D_{m_l}\left(\lambda_l\rho\right)},\quad b_l=\frac{j_l\left(n_0\rho\right)}{h_l^{(1)}\left(n_0\rho\right)}\frac{\gamma_0D_{m_l}\left(\lambda_l\rho\right)-\gamma_{-1,l}D_l^{(0)}\left(n_0\rho\right)}{\gamma_0D_{m_l}\left(\lambda_l\rho\right)-\gamma_{-1,l}\tilde{D}_l\left(n_0\rho\right)}, \tag{9}$$

где $\lambda_l=\sqrt{\varepsilon_1\mu_1-l\left(l+1\right)h_2}$; $\gamma_{-1,l}=\frac{\mu_1}{\lambda_l}$; $\gamma_{1,l}=\frac{\lambda_l}{\varepsilon_1}$; $m_l=\sqrt{l\left(l+1\right)h_0+\frac{1}{4}}-\frac{1}{2}$; $\gamma_0=\sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0}}$. Отношение производной функции Риккати – Бесселя к самой функции определено следующим образом: $D_l^{(0)}\left(x\right)=\frac{\left[xj_l\left(x\right)\right]'}{\left[xj_l\left(x\right)\right]}$, $D_{ml}\left(x\right)=\frac{\left[xj_{m_l}\left(x\right)\right]'}{\left[xj_{m_l}\left(x\right)\right]}$ и $\tilde{D}_l\left(x\right)=\frac{\left[xh_l^{(1)}\left(x\right)\right]'}{\left[xh_l^{(1)}\left(x\right)\right]}$. Отметим, что выбор $h_0=1$ и $h_2=0$ приводит к изотропному и однородному материалу частицы.

Для цилиндрических частиц коэффициенты Ми могут быть записаны в аналогичном виде:

$$a_l = -\frac{J_l(n_0\rho)}{H_l^{(1)}(n_0\rho)}\mathbf{e}_z\left(\tilde{\Gamma}_l - \Gamma_l\right)^{-1}\left[\Gamma_l\mathbf{e}_z - \left(\mathbf{e}_\varphi\Gamma_l^{(0)}\mathbf{e}_z\right)\mathbf{e}_\varphi\right],$$

$$b_l = -\frac{J_l(n_0\rho)}{H_l^{(1)}(n_0\rho)}\mathbf{e}_z\tilde{\Gamma}_l\left(\tilde{\Gamma}_l - \Gamma_l\right)^{-1}\left[\Gamma_l\left(\mathbf{e}_z\Gamma_l^{(0)}\mathbf{e}_\varphi\right)^{-1}\mathbf{e}_\varphi - \mathbf{e}_z\right], \quad (10)$$

где (r, φ, z) – цилиндрические координаты; $J_l(n_0\rho)$ и $H_l^{(1)}(n_0\rho)$ – цилиндрические функции Бесселя и Ханкеля первого рода; параметр размера $\rho = k_0 R$ теперь выражается через радиус цилиндрической частицы, а импедансы волн соответствуют цилиндрическим волнам.

Рассмотрим радиально-неоднородную частицу с тензорами проницаемости $\hat{\varepsilon} = \frac{r_0\varepsilon_1}{r}\mathbf{e}_r\otimes\mathbf{e}_r + \frac{\varepsilon_2}{2+\frac{r}{r_0}}\mathbf{e}_\varphi\otimes\mathbf{e}_\varphi + \frac{r_0\varepsilon_3}{r}\mathbf{e}_z\otimes\mathbf{e}_z$ и $\hat{\mu} = \frac{r_0\mu_1}{r}\mathbf{e}_r\otimes\mathbf{e}_r + \frac{\mu_2}{2+\frac{r}{r_0}}\mathbf{e}_\varphi\otimes\mathbf{e}_\varphi + \frac{r_0\mu_3}{r}\mathbf{e}_z\otimes\mathbf{e}_z$ [26], в которой могут распространяться цилиндрические электромагнитные волны, описывающиеся функциями Лежандра $F_l^{(1,2)}(x)$ первого и второго рода порядка l, где r_0, ε_1, ε_2, ε_3, μ_1, μ_2, μ_3 – постоянные. Подставляя тензоры импеданса однородной внешней среды и частицы в формулы (10), находим следующие выражения для коэффициентов Ми неоднородной цилиндрической частицы:

$$a_l = \frac{J_l(n_0\rho)}{H_l^{(1)}(n_0\rho)}\frac{\gamma_0 D_l^{(0)}(n_0\rho) - \gamma_1 D_{p_{1l}}\left(1+\frac{\rho}{k_0 r_0}\right)}{\gamma_0\tilde{D}_l(n_0\rho) - \gamma_1 D_{p_{1l}}\left(1+\frac{\rho}{k_0 r_0}\right)},$$

$$b_l = \frac{J_l(n_0\rho)}{H_l^{(1)}(n_0\rho)}\frac{\gamma_0 D_{p_{2l}}\left(1+\frac{\rho}{k_0 r_0}\right) - \gamma_2 D_l^{(0)}(n_0\rho)}{\gamma_0 D_{p_{2l}}\left(1+\frac{\rho}{k_0 r_0}\right) - \gamma_2\tilde{D}_l(n_0\rho)}, \quad (11)$$

где $p_{1l} = \sqrt{-k_0^2 r_0^2\varepsilon_2\mu_3 + \frac{l^2\varepsilon_2}{\varepsilon_1} + \frac{1}{4}} - \frac{1}{2}$; $p_{2l} = \sqrt{-k_0^2 r_0^2\varepsilon_3\mu_2 - \frac{l^2\mu_2}{\mu_1} + \frac{1}{4}} - \frac{1}{2}$; $\gamma_1 = \left(2+\frac{\rho}{k_0 r_0}\right)/(k_0 r_0\varepsilon_2)$; $\gamma_2 = \left(2+\frac{\rho}{k_0 r_0}\right)/(k_0 r_0\mu_2)$; $D_l^{(0)}(x) = \frac{\left[J_l(x)\right]'}{\left[J_l(x)\right]}$; $D_p(x) = \frac{\left[F_p^{(1)}(x)\right]'}{\left[F_p^{(1)}(x)\right]}$; $\tilde{D}_l(x) = \frac{\left[H_l^{(1)}(x)\right]'}{\left[H_l^{(1)}(x)\right]}$. Для того чтобы решения были регулярными внутри частицы, они выбираются в виде функций Лежандра первого рода.

В отличие от поляризуемостей сферических частиц (7) поляризуемости цилиндрических частиц анизотропны. Они выражаются через коэффициенты Ми (11) и равны следующим значениям [22]:

$$\alpha_e^{\parallel} = \frac{ib_0}{\pi k_0^2},\ \alpha_e^{\perp} = \frac{2ia_1}{\pi k_0^2},\ \alpha_m^{\parallel} = \frac{ia_0}{\pi k_0^2},\ \alpha_e^{\perp} = \frac{2ib_1}{\pi k_0^2}. \quad (12)$$

Оптические притягивающие силы в полях без градиента интенсивности

Рассмотрим оптические силы в поле пары плоских волн в плоскости (x, y), распространяющихся под углами $+\psi$ и $-\psi$ по отношению к оси z. Электрические поля этих волн будем считать линейно-поляризованными вдоль оси y: $\mathbf{E}_{\text{inc}} = Ae^{ik_z z}\cos(k_x x)\mathbf{e}_y$, $\mathbf{H}_{\text{inc}} = \mu_0^{-1}k_0^{-1}Ae^{ik_z z}\left(-k_z\cos(k_x x)\mathbf{e}_x + ik_x\sin(k_x x)\mathbf{e}_z\right)$, где A – амплитуда волны; $k_x = k_0 n_0\sin\psi$; $k_z = k_0 n_0\cos\psi$ – проекции волнового вектора. Для данного поля существует градиент интенсивности лишь вдоль оси x, поэтому градиентная сила выстраивает частицы

в устойчивых положениях равновесия, соответствующих максимумам интенсивности $k_x x = \pi m$, где m – целое число. Далее, нас будут интересовать неконсервативные, неградиентные силы вдоль оси z. Для дипольной сферической частицы получаем из (5)

$$F_z = \frac{k_z}{2}\left(\operatorname{Im}\alpha_e \left|\mathbf{E}_{\text{inc}}\right|^2 + \operatorname{Im}\alpha_m \left|\mathbf{H}_{\text{inc}}\right|^2\right) - \frac{k_0^4}{3}\operatorname{Re}\left(\alpha_e \alpha_m^* \mathbf{E}_{\text{inc}} \times \mathbf{H}_{\text{inc}}^*\right)\mathbf{e}_z. \tag{13}$$

Поляризуемости частиц (7) выражаются через первые коэффициенты рассеяния Ми (9). Данное выражение применимо только для достаточно маленьких частиц, когда квадрупольными моментами можно пренебречь. На рис. 1 показано, что дипольное приближение можно использовать для описания поведения микрочастиц вплоть до $k_0 R = 1{,}3$. Далее, поведение кривых не только количественно, но и качественно отличается от точного расчета. При этом такая оценка справедлива для однородных и неоднородных частиц. Воздействие сил на очень маленькие неоднородные частицы сильнее, чем на однородные, так как первые более оптически плотные. Однако для больших размеров неоднородных частиц начинают сказываться потери материала, которые описываются мнимой частью диэлектрической проницаемости (параметр $h_0 = -0{,}1i$), и сила уменьшается (см. рис. 1, кривые *2* и *4*). Точный расчет силы выполнен с помощью формулы (3), причем рассеянные поля найдены в рамках операторной теории рассеяния [27].

Для пары плоских волн возможна ситуация, когда сила становится отрицательной, т. е. микрочастица будет притягиваться к источнику излучения. Для этого первое положительное слагаемое в (13) должно быть меньше второго, что возможно за счет уменьшения волнового числа k_z. Как было показано ранее, в случае сферических объектов сила может стать притягивающей, когда угол ψ превышает 60° [28]. На рис. 2 приведены значения силы в дипольном приближении для однородной и неоднородных частиц. Для частицы с потерями оптическая сила не может стать отрицательной, поскольку поглощение материала соответствует неупругому столкновению фотонов падающей волны и рассеяние вперед подавлено (см. рис. 2, кривая *2*). На рис. 2 кривые *3* и *4* показывают влияние проницаемости в центре частицы. В случае кривой *3* радиальная компонента тензора проницаемости меняет знак при $k_0 r \approx 0{,}32$, а оптическая сила становится отрицательной уже при малых параметрах размером 0,6–0,8. Вторая область притягивающих сил вблизи $k_0 R = 1{,}5$ находится вне области применимости дипольного приближения, а потому должна исследоваться с учетом квадрупольных слагаемых. Притягивающие оптические силы, описываемые кривыми *3* и *4*, имеют бóльшие абсолютные значения, чем силы, действующие на однородные частицы. Будучи более оптически плотными, неоднородные сферы притягиваются при меньших $k_0 R$.

Спиновый момент сил в дипольном приближении (6) для данной волны задается слагаемым с магнитным полем

$$\mathbf{K} = \frac{1}{2}\operatorname{Re}\left(\alpha_m \mathbf{H}_{\text{inc}} \times \mathbf{H}_{\text{inc}}^*\right) = -\frac{k_x k_z}{2\mu_0^2 k_0^2} A^2 \operatorname{Im}\alpha_m \sin\left(2k_x x\right)\mathbf{e}_y. \tag{14}$$

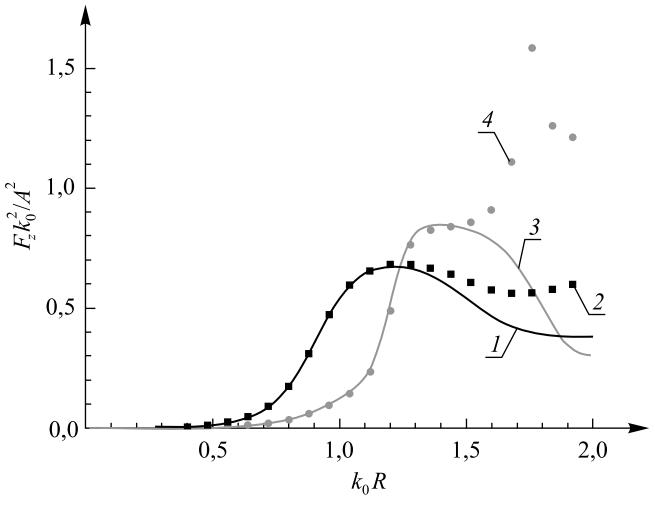


Рис. 1. Оптические силы, действующие на неоднородную (кривые *1* и *2*) и однородную (кривые *3* и *4*) сферические частицы в поле плоской волны, в зависимости от параметра размера $k_0 R$: *1*, *3* – расчет в дипольном приближении согласно (5); *2*, *4* – точный расчет согласно (3). Параметры: $\varepsilon_0 = \mu_0 = 1$, $\varepsilon_1 = 2{,}4^2$, $\mu_1 = 1$, $h_0 = -0{,}1i$, $h_2 = 1$

Fig. 1. Optical forces exerting on an inhomogeneous (curves *1* and *2*) and homogeneous (curves *3* and *4*) spherical particle in the field of plane wave depending on the size parameter $k_0 R$: *1*, *3* – calculation in dipole approximation according to equation (5); *2*, *4* – exact calculation using equation (3). Parameters: $\varepsilon_0 = \mu_0 = 1$, $\varepsilon_1 = 2.4^2$, $\mu_1 = 1$, $h_0 = -0.1i$, $h_2 = 1$

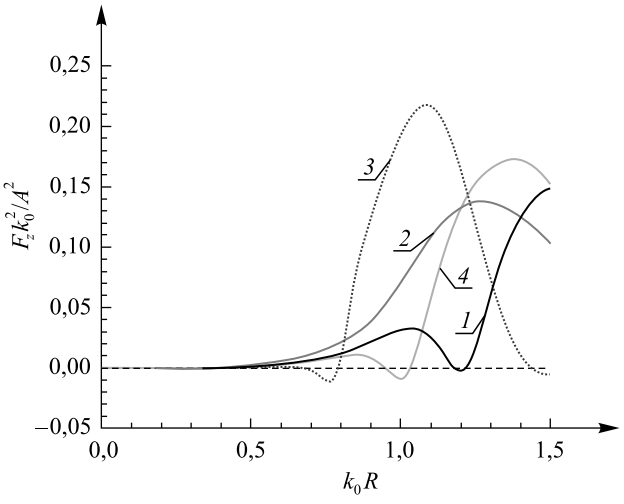


Рис. 2. Оптические силы в дипольном приближении, действующие на сферические частицы в поле пары плоских волн с углами 70° и –70° между волновыми векторами и осью *z*: *1* – $h_0 = 1$ и $h_2 = 0$ (однородная изотропная частица); *2* – $h_0 = -0{,}1i$ и $h_2 = 1$; *3* – $h_0 = -0{,}1$ и $h_2 = 1$; *4* – $h_0 = 0{,}1$ и $h_2 = 1$. Параметры: $\varepsilon_0 = \mu_0 = 1$, $\varepsilon_1 = 2{,}4^2$, $\mu_1 = 1$

Fig. 2. Optical forces in dipolar approximation exerting on spherical particles in the field of a couple of plane waves having angles 70° and –70° between the wavevectors and *z* axis: *1* – $h_0 = 1$ and $h_2 = 0$ (homogeneous isotropic particle); *2* – $h_0 = -0.1i$ and $h_2 = 1$; *3* – $h_0 = -0.1$ and $h_2 = 1$; *4* – $h_0 = 0.1$ and $h_2 = 1$. Parameters: $\varepsilon_0 = \mu_0 = 1$, $\varepsilon_1 = 2.4^2$, $\mu_1 = 1$

Момент сил (14) отличен от нуля только для нелинейно-поляризованных волн, что может быть реализовано для пары волн ($\psi \neq 0$) при положении частицы $k_x x \neq \dfrac{\pi m}{2}$, где m – целое число. Таким образом, во всех устойчивых положениях частица не будет вращаться.

Цилиндрические частицы, ориентированные в направлении оси *y*, подвергнутся воздействию силы

$$f_z = \frac{k_z}{2}\left(\operatorname{Im}\alpha_e \left|\mathbf{E}_{\text{inc}}\right|^2 + \operatorname{Im}\alpha_m \left|\mathbf{H}_{\text{inc}}\right|^2\right) - \frac{\pi k_0^3}{2}\operatorname{Re}\left(\alpha_e \alpha_m^* \mathbf{E}_{\text{inc}} \times \mathbf{H}_{\text{inc}}^*\right)\mathbf{e}_z \qquad (15)$$

в поле пары плоских волн, следующей из формулы (4). Поляризуемости частиц (12) выражаются через нулевые и первые коэффициенты рассеяния Ми (11). На рис. 3 показана оптическая сила, действующая на цилиндры-диполи, для разных углов падения волн ψ. Притягивающая оптическая сила

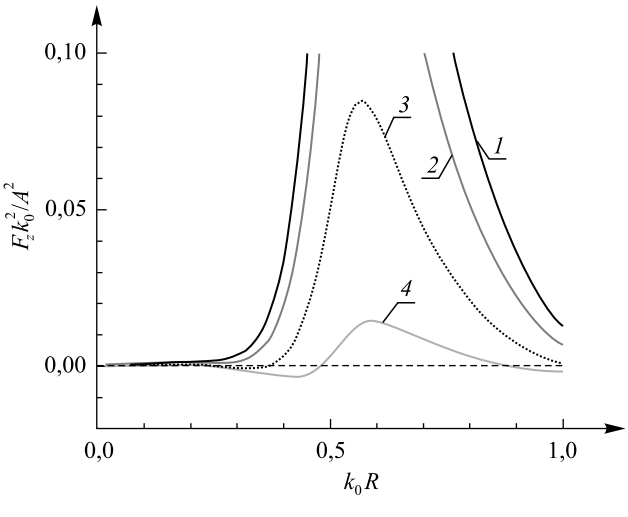


Рис. 3. Оптические силы в дипольном приближении, действующие на цилиндрические радиально-неоднородные частицы со стороны пары плоских волн: *1* – $\psi = 0°$; *2* – $\psi = 30°$; *3* – $\psi = 50°$; *4* – $\psi = 70°$. Параметры: $\varepsilon_0 = \mu_0 = 1$, $k_0 r_0 = 1$, $\varepsilon_1 = 2{,}3$, $\varepsilon_2 = 4{,}5$, $\varepsilon_3 = 2{,}1$, $\mu_1 = \mu_2 = \mu_3 = 1$

Fig. 3. Optical forces in dipolar approximation exerting on cylindrical radially inhomogeneous particles from a couple of plane waves. *1* – $\psi = 0°$; *2* – $\psi = 30°$; *3* – $\psi = 50°$; *4* – $\psi = 70°$. Parameters: $\varepsilon_0 = \mu_0 = 1$, $k_0 r_0 = 1$, $\varepsilon_1 = 2.3$, $\varepsilon_2 = 4.5$, $\varepsilon_3 = 2.1$, $\mu_1 = \mu_2 = \mu_3 = 1$

появляется при углах, превышающих 45°, как было предсказано в [22]. При увеличении ψ сила отталкивания уменьшается, поскольку снижается *z*-проекция импульса поля. В то же время притягивающая сила увеличивается, так как она соответствует перенаправлению *x*-проекции импульса поля в направлении оси *z* [29]. Обсуждение спинового момента сил для цилиндров повторяет описание для сферических частиц.

Заключение

В работе осуществлен анализ оптических сил, действующих на радиально-неоднородные сферические и цилиндрические частицы. Силы рассчитаны двумя способами: с помощью интегрирования тензора максвелловских натяжений и в дипольном приближении. В первом способе используются рассеянные электромагнитные поля, полученные операторным методом, и сила вычисляется точно. Дипольное приближение справедливо лишь для малых частиц, когда высшие мультипольные порядки не возбуждаются. Проведено сравнение двух способов расчета сил и показано их согласование в области применимости дипольного приближения. Исследованы силы притяжения оптическим пучком без градиента интенсивности (парой плоских волн) для неоднородных сферических и цилиндрических частиц. Выполнено сравнение сил, действующих на неоднородные и однородные частицы. Рассчитан спиновый момент сил в дипольном приближении.

Неоднородность частицы изменяет ее оптическую плотность, сдвигая мультипольные резонансы в область более высоких или низких параметров размера. Неоднородность предоставляет возможность манипулировать оптической силой, например делая более выраженным притяжение частиц (см. рис. 2). Отметим, что отклонение от однородности изменяет силы, возмущая рассеянные поля или дипольные моменты в дипольном приближении (в этом случае анализ может быть проведен аналитически). Введение порога изменения силы, ниже которого ее можно считать неизменной, позволяет оценить допустимое отклонение от параметров однородной среды, т. е. судить о допустимых дефектах однородных частиц. В дипольном приближении однородные (и неоднородные) сферические и цилиндрические частицы дают качественно схожие результаты (ср. рис. 2 и 3), так как в каждом из случаев силы определяются лишь дипольными моментами (ср. формулы (13) и (15)). При больших размерах частиц сходство нарушается присутствием мультиполей высшего порядка.

Библиографические ссылки

1. *Maxwell J. K.* A Treatise on Electricity and Magnetism. New York : Dover Publications Inc., 1954.

2. *Lebedew P. N.* Untersuchungen über die Druckkräfte des Lichtes // Annalen der Physik. 1901. Vol. 6. P. 433–460. DOI: 10.1002/andp.19013111102.

3. *Panah M. E. A., Semenova E., Lavrinenko A.* Enhancing Optical Forces in InP-Based Waveguides // Sci. Rep. 2017. Vol. 7. Article ID: 3106. DOI: 10.1038/s41598-017-03409-1.

4. *Armata F., Latmiral L., Pikovski I., et al.* Quantum and classical phases in optomechanics // Phys. Rev. A. 2016. Vol. 93. Article ID: 063862. DOI: 10.1103/PhysRevA.93.063862.

5. *Groblacher S., Hammerer K., Vanner M. R., et al.* Observation of strong coupling between a micromechanical resonator and an optical cavity field // Nature. 2009. Vol. 460. P. 724–727. DOI: 10.1038/nature08171.

6. *Usami K., Naesby A., Bagci T., et al.* Optical cavity cooling of mechanical modes of a semiconductor nanomembrane // Nat. Phys. 2012. Vol. 8. P. 168–172. DOI: 10.1038/NPHYS2196.

7. *Kippenberg T. J., Vahala K. J.* Cavity optomechanics: Back-action at the mesoscale. *Science.* 2008. Vol. 321. P. 1172–1176. DOI: 10.1126/science.1156032.

8. *Ashkin A., Dziedzic M. J., Bjorkholm E. J., et al.* Observation of a single-beam gradient force optical trap for dielectric particles // Opt. Lett. 1986. Vol. 11. P. 288–290. DOI: 10.1364/OL.11.000288.

9. *Grier D. G.* A revolution in optical manipulation // Nat. Photonics. 2003. Vol. 424. P. 810–816. DOI: 10.1038/nature01935.

10. *Dholakia K., Zemánek P.* Colloquium: Gripped by light: Optical binding // Rev. Mod. Phys. 2010. Vol. 82. P. 1767–1791. DOI: 10.1103/RevModPhys.82.1767.

11. *Diekmann R., Wolfson D. L., Spahn C., et al.* Nanoscopy of bacterial cells immobilized by holographic optical tweezers // Nat. Commun. 2016. Vol. 7. Article ID: 13711. DOI: 10.1038/ncomms13711.

12. *Bui A. A. M., Stilgoe A. B., Lenton I. C. D., et al.* Theory and practice of simulation of optical tweezers // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. 2017. Vol. 195. P. 66–75. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2016.12.026.

13. *Drobczyński S., Katarzyna Prorok, Konstantin Tamarov, et al.* Toward Controlled Photothermal Treatment of Single Cell: Optically Induced Heating and Remote Temperature Monitoring *In Vitro* through Double Wavelength Optical Tweezers // ACS Photonics. 2017. Vol. 4. P. 1993–2002. DOI: 10.1021/acsphotonics.7b00375.

14. *Chen J., Ng J., Lin Z., et al.* Optical pulling force // Nat. Photonics. 2011. Vol. 5. P. 531–534. DOI: 10.1038/nphoton.2011.153.

15. *Novitsky A., Qiu C.-W., Wang H., et al.* Single Gradientless Light Beam Drags Particles as Tractor Beams // Phys. Rev. Lett. 2011. Vol. 107. Article ID: 203601. DOI: 10.1103/PhysRevLett.107.203601.

16. *Sukhov S., Dogariu A.* Negative nonconservative forces: Optical «tractor beams» for arbitrary objects // Phys. Rev. Lett. 2011. Vol. 107. Article ID: 203602. DOI: 10.1103/PhysRevLett.107.203602.

17. *Jackson J. D.* Classical electrodynamics. New York : John Wiley and Sons, 1998.

18. *Nieto-Vesperinas M., Sáenz J. J., Gómez-Medina R., et al.* Optical forces on small magnetodielectric particles // Opt. Express. 2010. Vol. 18. P. 11428–11443. DOI: 10.1364/OE.18.011428.

19. *Goldstein M., Michalik E. R.* Theory of Scattering by an Inhomogeneous Solid Possessing Fluctuations in Density and Anisotropy // J. Appl. Phys. 1955. Vol. 26. P. 1450–1457. DOI: 10.1063/1.1721930.

20. *Simpson S. H., Hanna S.* Application of the discrete dipole approximation to optical trapping calculations of inhomogeneous and anisotropic particles // Opt. Express. 2011. Vol. 19. P. 16526–16541. DOI: 10.1364/OE.19.016526.

21. *Hellesø O. G.* Optical pressure and numerical simulation of optical forces // Appl. Opt. 2017. Vol. 56. P. 3354–3358. DOI: 10.1364/AO.56.003354.

22. *Novitsky A., Ding W., Wang M., et al.* Pulling cylindrical particles using a soft-nonparaxial tractor beam // Sci. Rep. 2017. Vol. 7. Article ID: 652. DOI: 10.1038/s41598-017-00735-2.

23. *Chaumet P. C., Rahmani A.* Electromagnetic force and torque on magnetic and negative-index scatterers // Opt. Express. 2009. Vol. 17. P. 2224–2234. DOI: 10.1364/OE.17.002224.

24. *Новицкий А. В., Альварес Родригес Р. Х., Галынский В. М.* Метод расчета коэффициентов рассеяния Ми на неоднородной бианизотропной сферической частице в рамках операторной теории рассеяния // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2018. № 1. С. 25–32.

25. *Новицкий А. В., Альварес Родригес Р. Х., Галынский В. М.* Сферические бесселевы решения уравнений Максвелла в неоднородных вращательно-симметричных средах // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2017. № 1. С. 52–60.

26. *Новицкий А. В., Альварес Родригес Р. Х., Галынский В. М.* Рассеяние электромагнитных волн неоднородными цилиндрически-симметричными бианизотропными объектами // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2017. № 3. С. 41–49.

27. *Novitsky A., Shalin A. S., Lavrinenko A. V.* Spherically symmetric inhomogeneous bianisotropic media: Wave propagation and light scattering // Phys. Rev. A. 2017. Vol. 95. Article ID: 053818. DOI: 10.1103/PhysRevA.95.053818.

28. *Novitsky A., Qiu C.-W.* Pulling extremely anisotropic lossy particles using light without intensity gradient // Phys. Rev. A. 2014. Vol. 90. Article ID: 053815. DOI: 10.1103/PhysRevA.90.053815.

29. *Gao D., Novitsky A., Zhang T., et al.* Unveiling the correlation between non-diffracting tractor beam and its singularity in Poynting vector // Laser & Photonics Rev. 2015. Vol. 9. P. 75–82. DOI: 10.1002/lpor.201400071.

References

1. Maxwell J. K. A Treatise on Electricity and Magnetism. New York : Dover Publications Inc., 1954.

2. Lebedew P. N. Untersuchungen über die Druckkräfte des Lichtes. *Annalen der Physik.* 1901. Vol. 6. P. 433–460. DOI: 10.1002/andp.19013111102.

3. Panah M. E. A., Semenova E., Lavrinenko A. Enhancing Optical Forces in InP-Based Waveguides. *Sci. Rep.* 2017. Vol. 7. Article ID: 3106. DOI: 10.1038/s41598-017-03409-1.

4. Armata F., Latmiral L., Pikovski I., et al. Quantum and classical phases in optomechanics. *Phys. Rev. A.* 2016. Vol. 93. Article ID: 063862. DOI: 10.1103/PhysRevA.93.063862.

5. Groblacher S., Hammerer K., Vanner M. R., et al. Observation of strong coupling between a micromechanical resonator and an optical cavity field. *Nature.* 2009. Vol. 460. P. 724–727. DOI: 10.1038/nature08171.

6. Usami K., Naesby A., Bagci T., et al. Optical cavity cooling of mechanical modes of a semiconductor nanomembrane. *Nat. Phys.* 2012. Vol. 8. P. 168–172. DOI: 10.1038/NPHYS2196.

7. Kippenberg T. J., Vahala K. J. Cavity optomechanics: Back-action at the mesoscale. *Science.* 2008. Vol. 321. P. 1172–1176. DOI: 10.1126/science.1156032.

8. Ashkin A., Dziedzic M. J., Bjorkholm E. J., et al. Observation of a single-beam gradient force optical trap for dielectric particles. *Opt. Lett.* 1986. Vol. 11. P. 288–290. DOI: 10.1364/OL.11.000288.

9. Grier D. G. A revolution in optical manipulation. *Nat. Photonics.* 2003. Vol. 424. P. 810–816. DOI: 10.1038/nature01935.

10. Dholakia K., Zemánek P. Colloquium: Gripped by light: Optical binding. *Rev. Mod. Phys.* 2010. Vol. 82. P. 1767–1791. DOI: 10.1103/RevModPhys.82.1767.

11. Diekmann R., Wolfson D. L., Spahn C., et al. Nanoscopy of bacterial cells immobilized by holographic optical tweezers. *Nat. Commun.* 2016. Vol. 7. Article ID: 13711. DOI: 10.1038/ncomms13711.

12. Bui A. A. M., Stilgoe A. B., Lenton I. C. D., et al. Theory and practice of simulation of optical tweezers. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* 2017. Vol. 195. P. 66–75. DOI: 10.1016/j.jqsrt.2016.12.026.

13. Drobczyński S., Katarzyna Prorok, Konstantin Tamarov, et al. Toward Controlled Photothermal Treatment of Single Cell: Optically Induced Heating and Remote Temperature Monitoring *In Vitro* through Double Wavelength Optical Tweezers. *ACS Photonics.* 2017. Vol. 4. P. 1993–2002. DOI: 10.1021/acsphotonics.7b00375.

14. Chen J., Ng J., Lin Z., et al. Optical pulling force. *Nat. Photonics.* 2011. Vol. 5. P. 531–534. DOI: 10.1038/nphoton.2011.153.

15. Novitsky A., Qiu C.-W., Wang H., et al. Single Gradientless Light Beam Drags Particles as Tractor Beams. *Phys. Rev. Lett.* 2011. Vol. 107. Article ID: 203601. DOI: 10.1103/PhysRevLett.107.203601.

16. Sukhov S., Dogariu A. Negative nonconservative forces: Optical «tractor beams» for arbitrary objects. *Phys. Rev. Lett.* 2011. Vol. 107. Article ID: 203602. DOI: 10.1103/PhysRevLett.107.203602.

17. Jackson J. D. Classical electrodynamics. New York : John Wiley and Sons, 1998.

18. Nieto-Vesperinas M., Sáenz J. J., Gómez-Medina R., et al. Optical forces on small magnetodielectric particles. *Opt. Express.* 2010. Vol. 18. P. 11428–11443. DOI: 10.1364/OE.18.011428.

19. Goldstein M., Michalik E. R. Theory of Scattering by an Inhomogeneous Solid Possessing Fluctuations in Density and Anisotropy. *J. Appl. Phys.* 1955. Vol. 26. P. 1450–1457. DOI: 10.1063/1.1721930.

20. Simpson S. H., Hanna S. Application of the discrete dipole approximation to optical trapping calculations of inhomogeneous and anisotropic particles. *Opt. Express.* 2011. Vol. 19. P. 16526–16541. DOI: 10.1364/OE.19.016526.

21. Hellesø O. G. Optical pressure and numerical simulation of optical forces. *Appl. Opt.* 2017. Vol. 56. P. 3354–3358. DOI: 10.1364/AO.56.003354.

22. Novitsky A., Ding W., Wang M., et al. Pulling cylindrical particles using a soft-nonparaxial tractor beam. *Sci. Rep.* 2017. Vol. 7. Article ID: 652. DOI: 10.1038/s41598-017-00735-2.

23. Chaumet P. C., Rahmani A. Electromagnetic force and torque on magnetic and negative-index scatterers. *Opt. Express.* 2009. Vol. 17. P. 2224–2234. DOI: 10.1364/OE.17.002224.

24. Novitsky A. V., Alvarez Rodriguez R. J., Galynsky V. M. Calculation method for Mie scattering coefficients by inhomogeneous bianisotropic spherical particle within the operator scattering theory. *J. Belarus. State Univ. Phys*. 2018. No. 1. P. 25–32 (in Russ.).

25. Novitsky A. V., Alvarez Rodriguez R. J., Galynsky V. M. Spherical Bessel solutions of Maxwell's equations in inhomogeneous rotationally symmetric media. *J. Belarus. State Univ. Phys*. 2017. No. 1. P. 52–60 (in Russ.).

26. Novitsky A. V., Alvarez Rodriguez R. J., Galynsky V. M. Electromagnetic wave scattering by inhomogeneous cylindrically symmetric bianisotropic objects. *J. Belarus. State Univ. Phys*. 2017. No. 3. P. 41–49 (in Russ.).

27. Novitsky A., Shalin A. S., Lavrinenko A. V. Spherically symmetric inhomogeneous bianisotropic media: Wave propagation and light scattering. *Phys. Rev. A.* 2017. Vol. 95. Article ID: 053818. DOI: 10.1103/PhysRevA.95.053818.

28. Novitsky A., Qiu C.-W. Pulling extremely anisotropic lossy particles using light without intensity gradient. *Phys. Rev. A*. 2014. Vol. 90. Article ID: 053815. DOI: 10.1103/PhysRevA.90.053815.

29. Gao D., Novitsky A., Zhang T., et al. Unveiling the correlation between non-diffracting tractor beam and its singularity in Poynting vector. *Laser & Photonics Rev.* 2015. Vol. 9. P. 75–82. DOI: 10.1002/lpor.201400071.

Статья поступила в редколлегию 24.12.2017.
Received by editorial board 24.12.2017.

УДК 621.396.218:614.89.086.5

ЭМПИРИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ РАСПРОСТРАНЕНИЯ РАДИОВОЛН ДЛЯ АНАЛИЗА ВНУТРИСИСТЕМНОЙ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ СОВМЕСТИМОСТИ И БЕЗОПАСНОСТИ СЕТЕЙ СОТОВОЙ СВЯЗИ С МИКРОСОТОВОЙ СТРУКТУРОЙ

А. С. СВИСТУНОВ[1)]

[1)]*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, ул. П. Бровки, 6, 220013, г. Минск, Беларусь*

Выполнен анализ возможности применения эмпирических моделей распространения радиоволн для диагностики внутрисистемной электромагнитной совместимости и электромагнитной безопасности сетей сотовой связи с микросотовой структурой в городской застройке. Приведены сравнительные результаты оценок уровней сигнала, принимаемого абонентским устройством на расстояниях от базовой станции менее 1 км, с использованием трехмерной многолучевой модели (X3D-модель) распространения радиоволн и трехмерной модели рассматриваемого участка типовой городской застройки с высотой зданий 6–20 м и применением известных эмпирических моделей распространения радиоволн. Сравнение осуществлялось с использованием критерия средней ошибки и стандартного отклонения этого параметра. Результаты анализа позволили сделать вывод о том, что при высоком качестве связи в сотовых радиосетях в случае решения задач оценки внутрисистемной электромагнитной совместимости и электромагнитной безопасности сетей сотовой связи могут быть рекомендованы модели COST231 – Хата и Ибрагима – Парсонса, поскольку результаты оценок уровней сигнала с их использованием в наибольшей степени совпадают с данными, полученными с помощью модели X3D. Модели Окамура – Хата, COST231 – Хата и Ибрагима – Парсонса могут быть применены для расстояний между базовыми станциями и абонентскими устройствами 0,4–1,0 км.

Ключевые слова: внутрисистемная электромагнитная совместимость; сотовая радиосвязь; базовые станции; электромагнитная безопасность; модели распространения радиоволн.

EMPIRICAL RADIO WAVE PROPAGATION MODELS FOR ANALYSIS OF INTRASYSTEM ELECTROMAGNETIC COMPATIBILITY AND SAFETY OF MICROCELLULAR COMMUNICATION NETWORKS

A. S. SVISTUNOV[a]

[a]*Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, 6 P. Broŭki Street, Minsk 220013, Belarus*

The possibility to use the empirical radio-wave propagation models for diagnostics of intrasystem electromagnetic compatibility and electromagnetic safety of microcellular radio networks in the urban area is analyzed. The paper presents comparative results of signal levels received by mobile stations at distances from base station of less than 1 km

Образец цитирования:
Свистунов А. С. Эмпирические модели распространения радиоволн для анализа внутрисистемной электромагнитной совместимости и безопасности сетей сотовой связи с микросотовой структурой // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2018. № 2. С. 107–116.

For citation:
Svistunov A. S. Empirical radio wave propagation models for analysis of intrasystem electromagnetic compatibility and safety of microcellular communication networks. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2018. No. 2. P. 107–116 (in Russ.).

Автор:
Александр Сергеевич Свистунов – младший научный сотрудник научно-исследовательской лаборатории «Электромагнитная совместимость локальных группировок радиоэлектронных средств».

Author:
Alexander S. Svistunov, junior researcher at the research and development laboratory of electromagnetic compatibility of local groups of radioelectronic facilities.
emc@bsuir.by

estimated using the three-dimensional multibeam radio wave propagation model (X3D model), with regard to a three-dimensional model for the fragment of a typical urban area with buildings 6–20 m high, and using the well known radio wave propagation empirical models. Comparison was made with the use of the «Mean error» and «Standard deviation» criteria. Based on the results obtained, it is concluded that the COST231 – Hata model or the Ibrahim – Parsons model may be recommended for diagnostics of intrasystem electromagnetic compatibility and for analysis of electromagnetic safety of microcellular radio networks due to high quality of service in cellular communications because the estimates of signal levels with their use correlate closely with the results obtained using X3D model for the considered urban area. The Okumura – Hata, COST231 – Hata, Ibrahim – Parsons models can be applied for the base – mobile station distances of 0.4–1.0 km.

Key words: intrasystem electromagnetic compatibility; cellular radio network; base stations; electromagnetic safety; radio wave propagation models.

Введение

В настоящее время в связи с массовым охватом населения услугами беспроводной связи наблюдается тенденция к увеличению пространственной плотности абонентских устройств (АУ) на городской территории и базовых станций (БС) для их обслуживания и уменьшению размеров сайтов сетей сотовой связи до нескольких сотен метров. С учетом этого факта большой интерес представляет вопрос электромагнитной безопасности сетей сотовой связи для населения и их внутрисистемной электромагнитной совместимости (ЭМС) (уровня внутрисетевых помех при оценке качества связи).

Проведение исследований электромагнитной безопасности и внутрисистемной ЭМС сетей сотовой связи связано с применением моделей условий распространения радиоволн (РРВ) между БС и АУ для определения уровня полезного сигнала и внутрисетевых помех. Однако широко используемые эмпирические модели условий РРВ, как правило, определены для расстояний между БС и АУ не менее чем 1 км и не охватывают все полосы радиочастот сотовой связи. В связи с этим для малых размеров сайтов, характерных для городских сотовых сетей с микросотовой структурой, возможность использования эмпирических моделей для диагностики внутрисистемной ЭМС и анализа электромагнитной безопасности сотовых радиосетей должна быть оценена дополнительно.

Ранее в работах [1–6] были сделаны попытки расширить область определения ряда наиболее применимых эмпирических моделей условий РРВ путем добавления в них поправочных коэффициентов для более объективной оценки затухания сигнала при РРВ на расстоянии менее 1 км между БС и АУ для различных типов местности и стандартов связи. Однако данные результаты могут быть признаны адекватными только для тех типов территорий, на которых производились измерения.

Цель настоящей работы – оценка возможности применения известных эмпирических моделей условий РРВ для диагностики внутрисистемной ЭМС и анализа электромагнитной безопасности сотовых сетей с микросотовой структурой на территории типовой средневысотной городской застройки.

Для этого реализована трехмерная модель участка типовой городской застройки с высотой зданий 6–20 м с размещением АУ вне зданий на земной поверхности. С использованием этой трехмерной модели выполнено моделирование условий РРВ от БС к АУ в сайтах радиусом менее 1 км с помощью модели РРВ X3D [7], затем для этих же условий осуществлено моделирование условий РРВ с применением известных эмпирических моделей, и далее проведено сравнение результатов оценок уровней сигнала, полученных с помощью эмпирических моделей и модели X3D.

Объекты и методы исследований

Модели и исходные данные, используемые при имитационном моделировании условий РРВ, представлены ниже.

Модель РРВ в городской застройке. В качестве модели условий РРВ для городской территории применена многолучевая трехмерная модель X3D [7]. Она основана на использовании трехмерного алгоритма SBR (shooting and bouncing ray), применяемого для определения траекторий лучей РРВ от БС к АУ в трехмерном пространстве. Модель не имеет принципиальных ограничений на ее использование в принятых условиях. Параметры трехмерной модели условий РРВ: количество отражений луча не превышает 6; количество точек дифракций составляет не более 1; угол между двумя соседними лучами, исходящими из одного источника, равен 0,25º; количество лучей, исходящих из одного источника, – до 10.

Модель городской застройки. Использована топографическая компьютерная модель фрагмента центральной части г. Минска (рис. 1).

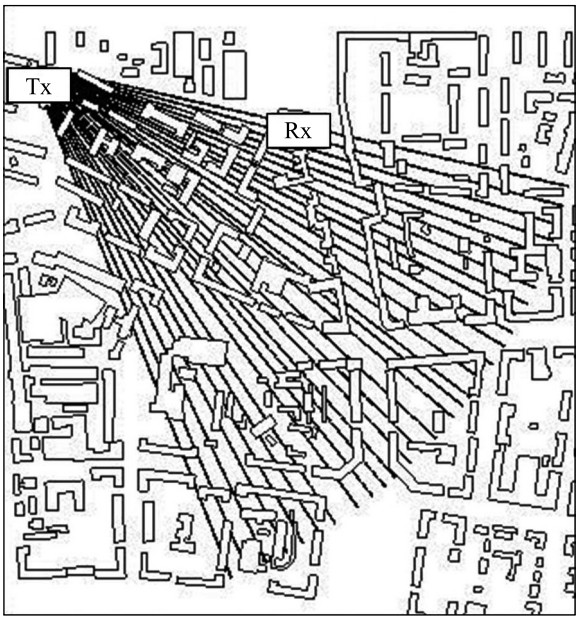


Рис. 1. Модель фрагмента городской застройки центральной части г. Минска с одной БС (Tx) и множеством АУ (Rx1 – Rx*N*)

Fig. 1. Model for a fragment of city housing at the central part of Minsk with one base station (Tx) and multitude of mobile stations (Rx1 – Rx*N*)

Приняты следующие характеристики компьютерной модели участка городской застройки:

• рассматриваемая территория городской застройки соответствует территории типа *urban high-rise* (городская зона многоэтажной застройки) [8];

• высота зданий составляет преимущественно 6–20 м;

• земная поверхность рассматриваемого участка городской застройки в основном равнинная, поэтому в компьютерной модели она выполнена в виде плоскости;

• тип покрытия земной поверхности – асфальт;

• использован сценарий моделирования условий РРВ с применением модели X3D с размещенными на исследуемом участке городской территории одной БС (Tx) с различной высотой подвеса ее антенн и координатами установки и множеством АУ Rx*N* (*N* = 1, …, 200) с шагом 5 м вдоль прямолинейных трасс при различных азимутах относительно БС с началом в точке, координаты которой совпадают с координатами точки установки БС Tx (см. рис. 1);

• моделирование условий РРВ выполнено для расстояний между БС и АУ 0,1–1,0 км. Такое расстояние соответствует радиусу сайтов типа *micro-cell* (микросота) [8].

Эмпирические модели условий РРВ. Анализ выполнен для следующих известных эмпирических моделей условий РРВ:

• модель Окамура – Хата [9] определена для полосы частот 500–1500 МГц и расстояний между БС и АУ 1–20 км для высот подвеса антенн БС 30–200 м и АУ 1–10 м;

• модель COST231 – Хата [10] предназначена для полосы частот 1500–2000 МГц и расстояний между БС и АУ 1–20 км для высот подвеса антенн БС 30–200 м и АУ 1–10 м;

• модель COST231 – Уолфиша – Икегами [10] определена для полосы частот 800–2000 МГц и расстояний между БС и АУ 0,2–5,0 км для высот подвеса антенн БС 4–50 м и АУ 1–3 м. Она также учитывает параметры городской застройки (высота здания, ширина улиц и т. д.). При использовании данной модели высота зданий принята максимальной (равной 20 м);

• модель Ли [11] применяется для частоты 900 МГц и расстояний между БС и АУ от 1 км. Модель содержит коэффициент регулировки частоты, который позволяет аналитически увеличить частотный диапазон для ее применения;

• модель Ибрагима – Парсонса [12] определена для полосы частот 150–1000 МГц и расстояний между БС и АУ менее 10 км для высот подвеса антенн БС 30–300 м и АУ менее 3 м;

• модель Эриксона [13] предназначена для полосы частот 150–1500 МГц и расстояний между БС и АУ от 1 км.

Системные параметры моделирования. Приняты следующие системные параметры моделирования:

• анализ проведен для БС с частотой сигнала 1800 МГц;

• эквивалентная изотропно излучаемая мощность БС составляет 43 дБмВт;

- тип антенны БС и АУ – всенаправленная;
- высота антенны АУ $H_{ms} = 2{,}0$ м;
- высота подвеса антенн БС $H_{bs} = 30…50$ м.

Результаты исследований и их обсуждение

Примеры распределения значений затухания сигнала, полученных с использованием многолучевой модели при различной высоте подвеса антенн БС (множества этих значений представлены в виде множества точек серого цвета), показаны на рис. 2, *а*, *б*, *в*. На этих же рисунках приведены соответствующие расчетные кривые зависимостей затухания между БС и АУ с применением перечисленных выше эмпирических моделей.

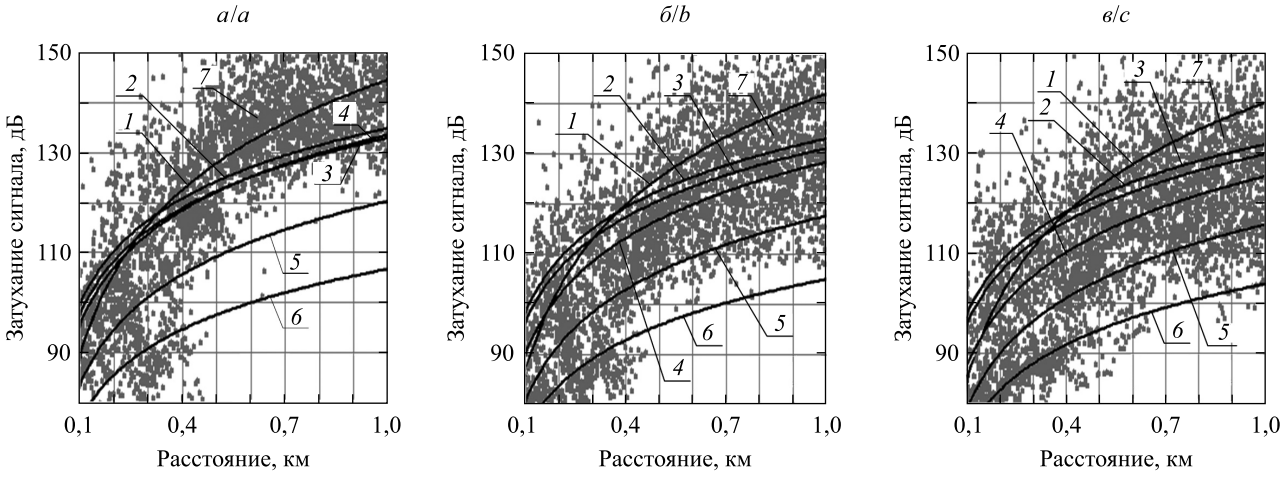


Рис. 2. Примеры распределения значений затуханий сигнала, полученных с использованием модели X3D при различной высоте подвеса антенн БС: *а* – $H_{bs} = 30$ м, *б* – $H_{bs} = 40$ м, *в* – $H_{bs} = 50$ м; *1* – модель Ибрагима – Парсонса, *2* – модель COST231 – Хата, *3* – модель Окамура – Хата, *4* – модель COST231 – Уолфиша – Икегами, *5* – модель Ли, *6* – модель Эриксона, *7* – модель X3D

Fig. 2. Examples of distribution of the signal attenuation values obtained with the use of X3D model for different heights of the base station antenna: *a* – $H_{bs} = 30$ m, *b* – $H_{bs} = 40$ m, *c* – $H_{bs} = 50$ m; *1* – Ibrahim – Parsons model, *2* – COST231 – Hata model, *3* – Okumura – Hata model, *4* – COST231 – Walfish – Ikegami model, *5* – Lee model, *6* – Ericsson model, *7* – X3D model

Результаты расчета статистических параметров распределения значений затухания сигнала при РРВ для различных расстояний между БС и АУ при разной высоте подвеса антенн БС представлены в табл. 1.

Таблица 1

Результаты расчета статистических параметров распределения значений затухания сигнала при РРВ для различных расстояний *d* между БС и АУ при разной высоте подвеса антенн БС H_{bs}

Table 1

Calculation results for statistical parameters of the signal attenuation distribution values on radio wave propagation for different distances *d* between base and mobile station and different heights H_{bs} of the base station antenna

d, км	Среднее значение, дБ			Медианное значение, дБ			Стандартное отклонение, дБ		
	H_{bs}, м			H_{bs}, м			H_{bs}, м		
	30	40	50	30	40	50	30	40	50
0,4	113,0	105,6	103,6	113,4	105,2	102,0	13,3	13,0	11,7
0,5	120,0	115,3	111,0	120,8	115,1	111,7	13,6	11,4	11,5
0,6	131,7	123,0	119,0	132,4	122,0	117,8	12,5	13,7	12,7
0,7	138,9	128,3	122,3	137,4	127,4	122,1	16,2	13,7	12,2
0,8	145,0	133,1	126,4	141,3	131,6	125,2	16,9	13,5	13,0
0,9	147,5	136,1	129,1	143,3	134,7	128,6	17,9	14,3	13,0
1,0	149,0	139,5	131,1	144,6	139,8	131,7	17,0	15,9	13,9

Примеры гистограмм распределения затухания сигнала при РРВ от БС к АУ, располагаемым на различных расстояниях от БС при высоте подвеса антенн БС 30 м, представлены на рис. 3.

Зависимость затухания сигнала от расстояния между БС и АУ при использовании эмпирических моделей и модели X3D для разной высоты подвеса антенн БС показана на рис. 4. Точки *7* соответствуют медианному значению затухания сигнала, полученному с помощью модели X3D, для различных расстояний между БС и АУ (100; 150–1000 м). Точки *8* и *9* представляют значения первого и третьего квартилей распределения значений затуханий сигнала, полученного с помощью этой же модели для таких же расстояний между БС и АУ. Эмпирические модели Окамура – Хата, COST231 – Хата, Ли, Эриксона, Ибрагима – Парсонса использованы при значениях параметров, не входящих в область применения данных моделей (частота сигнала, расстояние между БС и АУ).



Рис. 3. Примеры гистограмм распределения затухания сигнала при РРВ от БС к АУ для различных расстояний *d* между БС и АУ при высоте подвеса антенн БС 30 м: *а* – *d* = 0,5 км; *б* – *d* = 0,7 км; *в* – *d* = 0,9 км

Fig. 3. Histograms of the signal attenuation distribution on radio wave propagation for different distances *d* between base and mobile station at the base station antenna height 30 m: *a* – *d* = 0.5 km; *b* – *d* = 0.7 km; *c* – *d* = 0.9 km

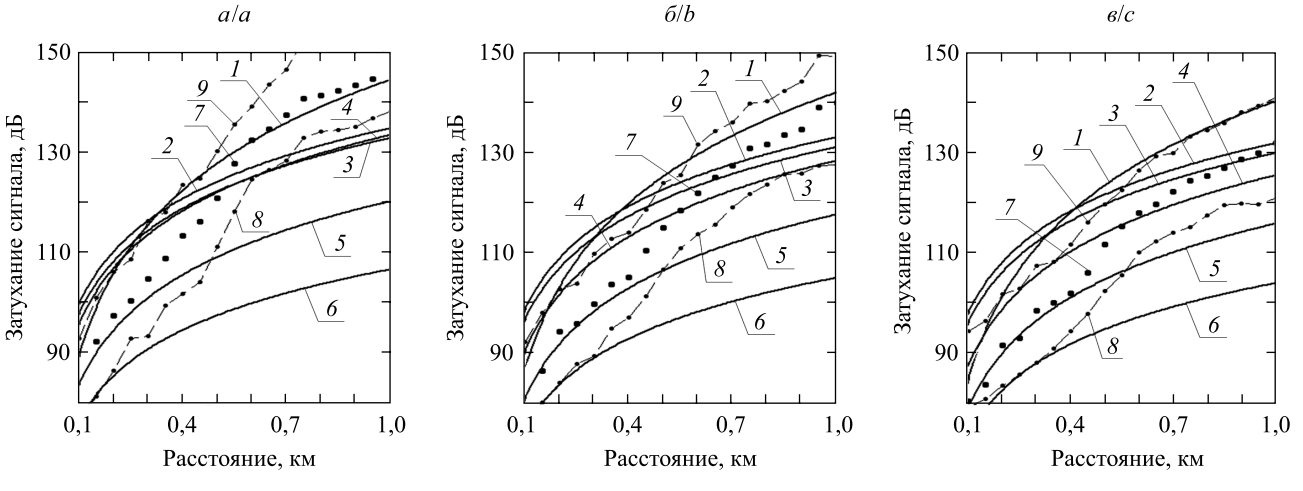


Рис. 4. Зависимость затухания сигнала от расстояния между БС и АУ при использовании эмпирических моделей и модели X3D для разной высоты подвеса антенн БС: *а* – H_{bs} = 30 м, *б* – H_{bs} = 40 м, *в* – H_{bs} = 50 м; *1* – модель Ибрагима – Парсонса, *2* – модель COST231 – Хата, *3* – модель Окамура – Хата, *4* – модель COST231 – Уолфиша – Икегами, *5* – модель Ли, *6* – модель Эриксона, *7* – модель X3D (медианное значение), *8* – модель X3D (значение первого квартиля), *9* – модель X3D (значение третьего квартиля)

Fig. 4. Signal attenuation as a function of the distance between the base and mobile station with the use of empirical models and X3D model at the base station antenna height H_{bs}: *a* – H_{bs} = 30 m, *b* – H_{bs} = 40 m, *c* – H_{bs} = 50 m; *1* – Ibrahim – Parsons model, *2* – COST231 – Hata model, *3* – Okumura – Hata model, *4* – COST231 – Walfish – Ikegami model, *5* – Lee model, *6* – Ericsson model, *7* – X3D model (median), *8* – X3D model (first quartile), *9* – X3D model (third quartile)

Результаты расчета средней ошибки ME (mean error) и стандартного отклонения ESD (error standard deviation) этой ошибки для некоторых расстояний *d* между БС и АУ, которые являются критериями при сравнении результатов оценок уровня сигнала, полученных с помощью эмпирических моделей условий РРВ и трехмерной многолучевой модели X3D при разной высоте подвеса антенн БС, приведены в табл. 2–4.

Таблица 2

Результаты расчета ME и ESD при сравнении уровней сигналов, полученных с использованием эмпирических моделей и модели X3D при высоте подвеса антенн БС 30 м, дБмВт

Table 2

Calculation results for ME and ESD with comparison of the signal levels obtained using empirical models and X3D model at the base station antenna height 30 m, dBmW

Наименование модели	ME	ESD	ME	ESD	ME	ESD	ME	ESD
	d, км							
	0,1		0,4		0,7		1,0	
Модель Окамура – Хата	–39,6	–38,2	–57,7	–52,9	–79,2	–72,4	–90,3	–96,8
Модель COST231 – Хата	–39,6	–38,2	–57,7	–52,9	–79,6	–72,4	–92,4	–98,0
Модель COST231 – Уолфиша – Икегами	–39,6	–38,2	–57,7	–52,9	–72,8	–72,4	–91,0	–94,4
Модель Ли	–39,2	–40,0	–57,2	–53,1	–71,4	–73,6	–77,2	–96,8
Модель Ибрагима – Парсонса	–40,0	–38,5	–57,7	–52,9	–79,2	–71,4	–99,2	–97,7
Модель Эриксона	–34,3	–38,8	–51,7	–55,4	–58,9	–72,3	–63,7	–96,8

Таблица 3

Результаты расчета ME и ESD при сравнении уровней сигналов, полученных с использованием эмпирических моделей и модели X3D при высоте подвеса антенн БС 40 м, дБмВт

Table 3

Calculation results for ME and ESD with comparison of the signal levels obtained using empirical models and X3D model at the base station antenna height 40 m, dBmW

Наименование модели	ME	ESD	ME	ESD	ME	ESD	ME	ESD
	d, км							
	0,1		0,4		0,7		1,0	
Модель Окамура – Хата	–39,2	–39,2	–54,0	–50,0	–70,1	–64,2	–82,8	–77,2
Модель COST231 – Хата	–39,2	–39,2	–54,0	–50,0	–70,1	–64,1	–83,3	–77,2
Модель COST231 – Уолфиша – Икегами	–39,2	–39,6	–54,0	–50,0	–70,0	–64,1	–82,1	–77,2
Модель Ли	–39,6	–42,4	–53,7	–50,0	–67,2	–64,7	–74,7	–80,0
Модель Ибрагима – Парсонса	–39,2	–40,5	–54,0	–50,0	–66,8	–64,1	–83,8	–77,0
Модель Эриксона	–32,7	–39,2	–49,6	–52,6	–57,7	–66,2	–62,2	–77,0

Таблица 4

Результаты расчета ME и ESD при сравнении уровней сигналов, полученных с использованием эмпирических моделей и модели X3D при высоте подвеса антенн БС 50 м, дБмВт

Table 4

Calculation results for ME and ESD with comparison of the signal levels obtained using empirical models and X3D model at the base station antenna height 50 m, dBmW

Наименование модели	ME	ESD	ME	ESD	ME	ESD	ME	ESD
	d, км							
	0,1		0,4		0,7		1,0	
Модель Окамура – Хата	–39,6	–40,4	–56,6	–52,8	–65,2	–57,7	–80,9	–74,8
Модель COST231 – Хата	–39,6	–40,3	–56,6	–52,8	–65,2	–57,7	–81,1	–74,3
Модель COST231 – Уолфиша – Икегами	–40,0	–41,8	–56,6	–52,9	–65,2	–57,7	–79,6	–74,9
Модель Ли	–38,5	–40,3	–55,7	–53,5	–63,9	–57,7	–72,9	–76,2
Модель Ибрагима – Парсонса	–40,2	–43,7	–56,6	–52,8	–65,2	–57,7	–81,4	–74,7
Модель Эриксона	–31,2	–40,3	–49,2	–55,5	–56,2	–59,2	–61,0	–74,7

Расчетные формулы параметров ME и ESD имеют вид [1]

$$\mathrm{ME} = \frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M}\left| y_i - \hat{y}_i \right|,$$

$$\mathrm{ESD} = \sqrt{\frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M}\left(\left| y_i - \hat{y}_i \right| - \mathrm{ME}\right)^2},$$

где y_i – уровень сигнала, полученный с использованием эмпирических моделей, Вт; $\hat{y}_i$ – уровень сигнала, полученный с использованием модели X3D, Вт; M – количество положений АУ.

Анализ полученных оценок (в целом для расстояний 0,1–1,0 км между БС и АУ и при высотах подвеса антенн БС 30–50 м) свидетельствует о следующем:

- при использовании модели Эриксона наблюдается наибольшая разница (значение средней ошибки ME) между результатами оценок уровня сигнала, полученными с помощью данной модели и модели X3D. Эта разница составляет –63,7…–31,2 дБмВт. Применение этой эмпирической модели будет приводить, как правило, к завышенной оценке полезного сигнала и пессимистической оценке уровня внутрисетевой помехи на рассматриваемой городской территории;
- в случае применения моделей Окамура – Хата, COST231 – Хата, COST231 – Уолфиша – Икегами, Ибрагима – Парсонса наблюдается наименьшая разница между результатами оценок уровня сигнала, полученными с помощью этих моделей и модели X3D (разница составляет –99,2…–39,2 дБмВт);
- при сравнении результатов оценок уровней сигнала, полученных в случае использования модели Ли и модели X3D, разница составляет –77,2…–38,5 дБмВт. Когда применяется эта модель, то для рассматриваемой городской территории оценка уровней полезного сигнала, как правило, будет оптимистической, а при оценке уровней внутрисетевых помех – пессимистической.

Детальный анализ различий оценок уровней сигнала для диапазонов расстояний между БС и АУ 0,1–0,4; 0,4–0,7 и 0,7–1,0 км свидетельствует о следующем:

- в диапазоне расстояний 0,1–0,4 км при высоте подвеса антенн БС 30 м наблюдается существенная разница между результатами оценок уровней сигнала при использовании всех рассматриваемых эмпирических моделей и модели X3D. Эта разница составляет –57,7…–34,3 дБмВт. Увеличение высоты подвеса антенн БС до 40–50 м несущественно влияет на эту разницу (–56,6…–31,2 дБмВт);
- в диапазоне расстояний 0,4–0,7 км при высоте подвеса антенн БС 30 м наблюдается наименьшая разница между результатами оценок уровней сигнала при использовании моделей Окамура – Хата,

COST231 – Хата, COST231 – Уолфиша – Икегами, Ибрагима – Парсонса. Результаты оценок, полученные с помощью модели COST231 – Хата, в наибольшей степени совпадают с теми, которые обусловило применение модели X3D. Разница между результатами оценок находится в пределах –79,6…–57,7 дБмВт. В данном случае при использовании этих эмпирических моделей уровни полезного сигнала будут близкими к медианному значению уровней сигнала, полученных с помощью модели X3D. При увеличении высоты подвеса антенн БС разница между результатами оценок уровней сигнала увеличивается до –70,1…–54,0 дБмВт. В данном случае оценка уровней полезного сигнала с использованием этих эмпирических моделей будет пессимистической, а оценка уровней внутрисетевых помех – оптимистической;

• в диапазоне расстояний 0,7–1,0 км при высоте подвеса антенн БС 30 м наблюдается наименьшая разница между результатами оценок уровней сигнала также при применении моделей Окамура – Хата, COST231 – Хата, COST231 – Уолфиша – Икегами, Ибрагима – Парсонса. Результаты оценок, полученные с помощью модели Ибрагима – Парсонса, в наибольшей степени совпадают с результатами при использовании модели X3D. С помощью этих эмпирических моделей будут определены оптимистическая оценка уровней полезного сигнала и пессимистическая оценка уровней внутрисетевых помех в данном случае. Разница между результатами оценок уровней сигнала составляет –99,2…–72,8 дБмВт. При увеличении высоты подвеса антенн БС до 40–50 м данная разница существенно возрастает до –83,8…–65,2 дБмВт. В данном случае использование этих эмпирических моделей обусловливает уровни полезного сигнала, близкие к медианному значению уровней сигнала, полученных с помощью модели X3D.

Проведенный выше сравнительный анализ свидетельствует о том, что результаты оценок уровней сигнала, полученные с использованием эмпирических моделей РРВ COST231 – Хата и Ибрагима – Парсонса, в наименьшей степени отличаются от результатов, которые обеспечивает применение модели X3D на рассматриваемом участке городской застройки для расстояний между БС и АУ 0,4–1,0 км при высотах подвеса антенн БС 30–40 м. Следует отметить, что эти эмпирические модели разработаны на основе результатов измерений уровня сигнала от БС при РРВ к АУ на расстояния более 1 км в различных городах (Токио, Лондон), характеристики застройки которых отличаются от характеристик рассматриваемого участка городской застройки г. Минска. Результаты оценок уровней сигнала с использованием многолучевой модели РРВ X3D для расстояний между БС и АУ менее 1 км получены для территорий городской застройки с высотой зданий 6–20 м при высотах подвеса антенн БС, в основном превышающих высоту зданий. Вследствие малых различий между оценками уровней сигнала, обусловленных применением эмпирических моделей РРВ COST231 – Хата и Ибрагима – Парсонса и многолучевой модели РРВ X3D, модели COST231 – Хата и Ибрагима – Парсонса могут быть рекомендованы для диагностики внутрисистемной ЭМС и оценки электромагнитной безопасности сетей сотовой связи с микросотовой структурой в малоэтажной городской застройке рассмотренного типа для расстояний между БС и АУ 0,4–1,0 км.

Полученные в настоящей работе результаты хорошо согласуются с [14], в которой проведено сравнение оценок уровней сигнала при РРВ для расстояний между БС и АУ менее 1 км, определенных с помощью эмпирических моделей РРВ (Окамура – Хата, COST231 – Хата, Ибрагима – Парсонса) и моделей РРВ для микросот. В качестве моделей РРВ для микросот были использованы оптимизированная модель COST231 – Хата [15] и модель [16]. Среднее значение разницы между результатами оценки уровней сигнала, полученных с помощью эмпирических моделей и моделей для микросот, составляет примерно 2–10 дБ, что дополнительно подтверждает возможность применения моделей Окамура – Хата, COST231 – Хата, Ибрагима – Парсонса для расстояний между БС и АУ менее 1 км.

Заключение

Отмечается наибольшее совпадение результатов оценок уровней сигнала с использованием модели X3D на рассматриваемой территории городской застройки и моделей РРВ Окамура – Хата, COST231 – Хата, COST231 – Уолфиша – Икегами, Ибрагима – Парсонса. Модели Окамура – Хата, COST231 – Хата, Ибрагима – Парсонса могут быть применены для расстояний между БС и АУ 0,4–1,0 км.

Моделирование показало, что для рассматриваемой территории городской застройки возможно использование моделей Окамура – Хата, Ибрагима – Парсонса при частоте 1800 МГц для оценки уровня полезного сигнала и уровня внутрисетевых помех.

Результаты оценок уровней сигнала с применением эмпирических моделей условий РРВ Окамура – Хата, COST231 – Хата, COST231 – Уолфиша – Икегами, Ибрагима – Парсонса, наиболее близкие к результатам оценок с использованием модели X3D, могут быть получены при высотах подвеса антенн БС 30–40 м для рассматриваемой территории городской застройки при микросотовой структуре сети.

Для оценки электромагнитного фона [17], электромагнитной безопасности сетей сотовой связи, и диагностики внутрисистемной ЭМС (оценки уровней внутрисетевых помех) при обеспечении высокого качества связи в сотовых радиосетях могут быть рекомендованы модели COST231 – Хата и Ибрагима – Парсонса, поскольку результаты оценок уровня сигнала с их использованием в наибольшей степени совпадают с результатами, полученными с помощью модели X3D.

Библиографические ссылки

1. *Dalela C., Prasad M. V. S. N., Dalela P. K*. Tuning of COST-231 Hata model for radio wave propagation predictions // Comput. Sci. & Inf. Technol. (CS & IT). 2012. Vol. 10. P. 255–267.

2. *Jadhav A. N., Kale S. S*. Suburban area path loss propagation prediction and optimisation using Hata model at 2375 MHz // Int. J. Adv. Res. in Comput. and Commun. Eng. 2014. Vol. 3, issue 1. P. 5004–5008.

3. *Mohammed S. H. Al Salameh, Muneer M. Al-Zu'bi*. Prediction of radiowave propagation for wireless cellular networks in Jordan // Knowledge and Smart Technology (KST) : VII Int. conf. (Chonburi, 28–31 January, 2015). Chonburi, 2015. P. 149–154. DOI: 10.1109/KST.2015.7051452.

4. *Acar T., Çalişkan F., Aydin E*. Comparison of computer-based propagation models with experimental data collected in an urban area at 1800 MHz // Wireless and Microwave Technology Conference (WAMICON) : IEEE XVI Annu. (Cocoa Beach, 13–15 April, 2015). Cocoa Beach, 2015. P. 1–6. DOI: 10.1109/WAMICON.2015.7120381.

5. *Chebil J., Ali K. Lwas, Md. Rafiqul Islam, et al*. Comparison of empirical propagation path loss models for mobile communications in suburban area of Kuala Lumpur // Mechatronics (ICOM) : IV Int. conf. (Kuala Lumpur, 17–19 May, 2011). Kuala Lumpur, 2011. P. 1–5. DOI: 10.1109/ICOM.2011.5937144.

6. *Domingues A., Ciaiado D., Gonçalves C., et al*. Testing the COST231-WI propagation model in the city of Lisbon. Tech. Rep. COST231 TD(96). European Cooperation in Field of Science and Technical Research. 1996.

7. Wireless InSite: Site-specific Radio Propagation Prediction Software : Ref. Man. Version 3.0.0, REMCOM. November, 2016.

8. Recommendation ITU-R P. 1411-9. Propagation data and prediction methods for the planning of short-range outdoor radiocommunication systems and radio local area networks in the frequency range 300 MHz to 100 GHz. Geneva, 2017.

9. *Hata M*. Empirical formula for propagation loss in land mobile radio service // IEEE Trans. on vehicular technol. 1980. Vol. 29, issue 3. P. 317–325. DOI: 10.1109/T-VT.1980.23859.

10. COST Action 231. Digital mobile radio towards future generation systems. Final report. 1999.

11. *John S. Seybold*. Introduction to RF propagation. Hoboken : Wiley, 2005.

12. *Siwiak K*. Radiowave propagation and antennas for personal Communications. Norwood : Artech House, 1998.

13. *Jimoh A. A., Surajudeen-Bakinde N. T., Faruk N., et al*. Clutter height variation effects on frequency dependent path loss models at UHF bands in build-up areas // Sci., Technol. and arts res. j. 2015. Vol. 4. P. 138–147.

14. *Svistunov A*. Validation of Empirical Radiowave Propagation Models for Diagnostics of Intrasystem EMC and Electromagnetic Safety of Microcellular Radio Networks // EMC Europe 2017 : proc. 2017 Int. Symp. Electromagn. Compat. (Angers, 4–8 Sept., 2017). Angers, 2017. P. 1–6. DOI: 10.1109/EMCEurope.2017.8094673.

15. *Banimelhem O., Muneer M. Al-Zu'bi, Mohammad S. Al Salameh*. Hata Path Loss Model Tuning for Cellular Networks in Irbid City // Computer and Information Technology : IEEE Int. conf. (Liverpool, 26–28 Oct., 2015). Liverpool, 2015. P. 1646–1650. DOI: 10.1109/CIT/IUCC/DASC/PICOM.2015.248.

16. *Kitao K., Ichitsubo S*. Path loss prediction formula for microcell in 400 MHz to 8 GHz band // Electron. lett. 2004. Vol. 40. P. 685–687. DOI: 10.1049/el:20040475.

17. *Mordachev V*. Electromagnetic Background Created by Base and Mobile Radio Equipment of Cellular Communications // EMC Europe 2016 : proc. 2016 Int. Symp. Electromagn. Compat. (Wroclaw, 5–9 Sept., 2016). Wroclaw, 2016. P. 590–595. DOI: 10.1109/EMCEurope.2016.7739157.

References

1. Dalela C., Prasad M. V. S. N., Dalela P. K. Tuning of COST-231 Hata model for radio wave propagation predictions. *Comput. Sci. & Inf. Technol. (CS & IT)*. 2012. Vol. 10. P. 255–267.

2. Jadhav A. N., Kale S. S. Suburban area path loss propagation prediction and optimisation using Hata model at 2375 MHz. *Int. J. Adv. Res. in Comput. and Commun. Eng.* 2014. Vol. 3, issue 1. P. 5004–5008.

3. Mohammed S. H. Al Salameh, Muneer M. Al-Zu'bi. Prediction of radiowave propagation for wireless cellular networks in Jordan. *Knowledge and Smart Technology (KST)* : VII Int. conf. (Chonburi, 28–31 January, 2015). Chonburi, 2015. P. 149–154. DOI: 10.1109/KST.2015.7051452.

4. Acar T., Çalişkan F., Aydin E. Comparison of computer-based propagation models with experimental data collected in an urban area at 1800 MHz. *Wireless and Microwave Technology Conference (WAMICON)* : IEEE XVI Annu. (Cocoa Beach, 13–15 April, 2015). Cocoa Beach, 2015. P. 1–6. DOI: 10.1109/WAMICON.2015.7120381.

5. Chebil J., Ali K. Lwas, Md. Rafiqul Islam, et al. Comparison of empirical propagation path loss models for mobile communications in suburban area of Kuala Lumpur. *Mechatronics (ICOM)* : IV Int. conf. (Kuala Lumpur, 17–19 May, 2011). Kuala Lumpur, 2011. P. 1–5. DOI: 10.1109/ICOM.2011.5937144.

6. Domingues A., Ciaiado D., Gonçalves C., et al. Testing the COST231-WI propagation model in the city of Lisbon. Tech. Rep. COST231 TD(96). European Cooperation in Field of Science and Technical Research. 1996.

7. Wireless InSite: Site-specific Radio Propagation Prediction Software : Ref. Man. Version 3.0.0, REMCOM. November, 2016.

8. Recommendation ITU-R P. 1411-9. Propagation data and prediction methods for the planning of short-range outdoor radiocommunication systems and radio local area networks in the frequency range 300 MHz to 100 GHz. Geneva, 2017.

9. Hata M. Empirical formula for propagation loss in land mobile radio service. *IEEE Trans. on vehicular technol.* 1980. Vol. 29, issue 3. P. 317–325. DOI: 10.1109/T-VT.1980.23859.

10. COST Action 231. Digital mobile radio towards future generation systems. Final report. 1999.

11. John S. Seybold. Introduction to RF propagation. Hoboken : Wiley, 2005.

12. Siwiak K. Radiowave propagation and antennas for personal Communications. Norwood : Artech House, 1998.

13. Jimoh A. A., Surajudeen-Bakinde N. T., Faruk N., et al. Clutter height variation effects on frequency dependent path loss models at UHF bands in build-up areas. *Sci., Technol. and arts res. j.* 2015. Vol. 4. P. 138–147.

14. Svistunov A. Validation of Empirical Radiowave Propagation Models for Diagnostics of Intrasystem EMC and Electromagnetic Safety of Microcellular Radio Networks. *EMC Europe 2017* : proc. 2017 Int. Symp. Electromagn. Compat. (Angers, 4–8 Sept., 2017). Angers, 2017. P. 1–6. DOI: 10.1109/EMCEurope.2017.8094673.

15. Banimelhem O., Muneer M. Al-Zu'bi, Mohammad S. Al Salameh. Hata Path Loss Model Tuning for Cellular Networks in Irbid City. *Computer and Information Technology* : IEEE Int. conf. (Liverpool, 26–28 Oct., 2015). Liverpool, 2015. P. 1646–1650. DOI: 10.1109/CIT/IUCC/DASC/PICOM.2015.248.

16. Kitao K., Ichitsubo S. Path loss prediction formula for microcell in 400 MHz to 8 GHz band. *Electron. lett.* 2004. Vol. 40. P. 685–687. DOI: 10.1049/el:20040475.

17. Mordachev V. Electromagnetic Background Created by Base and Mobile Radio Equipment of Cellular Communications. *EMC Europe 2016* : proc. 2016 Int. Symp. Electromagn. Compat. (Wroclaw, 5–9 Sept., 2016). Wroclaw, 2016. P. 590–595. DOI: 10.1109/EMCEurope.2016.7739157.

Статья поступила в редколлегию 27.11.2017.
Received by editorial board 27.11.2017.

УДК 537.311.33

УТОЧНЕНИЕ КРИТЕРИЯ СИЛЬНОЙ ЛОКАЛИЗАЦИИ ЭЛЕКТРОНОВ НА ПОВЕРХНОСТИ ПОЛУПРОВОДНИКА

Т. Т. МУРАТОВ[1)]

[1)]*Ташкентский государственный педагогический университет им. Низами, ул. Бунёдкор, 27, 100185, г. Ташкент, Узбекистан*

Анализируется возможность значительной локализации двумерного электронного газа на поверхности сильнолегированного полупроводника. Получена аналитическая формула для среднего сечения низкоэнергетического рассеяния приповерхностных электронов с учетом функции распределения Ферми – Дирака. Отмечается существенная особенность точки $E_F = 0$ в квазидвумерных электронных системах, в отличие от их трехмерных аналогов. На основе правила Иоффе – Регеля и полученной формулы для среднего сечения рассеяния найден более точный, реалистичный критерий сильной локализации, чем тот, который был определен в других цитируемых работах.

Ключевые слова: приповерхностный слой; естественный размерный эффект; правило Иоффе – Регеля; сечение двумерного рассеяния; приближение Томаса – Ферми; функция распределения Ферми – Дирака; критерий сильной локализации.

REFINEMENT OF THE CRITERION FOR STRONG LOCALIZATION OF ELECTRONS ON A SEMICONDUCTOR SURFACE

T. T. MURATOV[a]

[a]*Tashkent State Pedagogical University named after Nizami, 27 Bunedkor Street, Tashkent 100185, Uzbekistan*

Possibility of strong localization of the two-dimensional electron gas on the surface of the highly doped semiconductor is analyzed. Analytical formula for cross-section of low-energy scattering of surface electrons with take into account Fermi – Dirac's distribution was obtained. Is noted about substantial feature of the point $E_F = 0$ in quasi two-dimensional electrons systems than in its three-dimensional analogs. On the basis of Ioffe – Regel's rule and formula obtained for average cross-section of scattering more precise realistic criterion of strong localization was obtained than it which has been obtained in other quoted articles.

Key words: near-surface layer; natural size effect; Ioffe – Regel's rule; cross-section of two-dimensional scattering; Thomas – Fermi's approximation; Fermi – Dirac's distribution function; criterion of strong localization.

Введение

Реальная поверхность полупроводникового кристалла всегда имеет различного рода микроскопические и макроскопические дефекты структуры. Это могут быть ионы примеси, атомы в междоузлиях, вакансии, точечные дефекты, дислокации, границы зерен и т. п. В состоянии термодинамического равновесия полупроводника поверхностный заряд (ПЗ), индуцированный вышеуказанными дефектами,

Образец цитирования:
Муратов Т. Т. Уточнение критерия сильной локализации электронов на поверхности полупроводника // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2018. № 2. С. 117–124.

For citation:
Muratov T. T. Refinement of the criterion for strong localization of electrons on a semiconductor surface. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2018. No. 2. P. 117–124 (in Russ.).

Автор:
Темур Ташкабаевич Муратов – соискатель кафедры методики преподавания физики и астрономии физико-математического факультета.

Author:
Temur T. Muratov, competitor at the department of teaching methods in physics and astronomy, faculty of physics and mathematics.
temur-muratov@yandex.ru

скомпенсирован равным по величине, но противоположным по знаку зарядом в приповерхностном слое полупроводника. Компенсирующий заряд может быть образован в полупроводнике ионизированными донорами и акцепторами, электронами и дырками. Приповерхностный слой полупроводника, где локализован ПЗ, называется областью пространственного заряда (ОПЗ). При определенных условиях ширина ОПЗ оказывается сравнимой со средним расстоянием между атомами и ионами примеси [1] и, как правило, существует естественный размерный эффект. Следовательно, плотность заряда вблизи поверхности не является непрерывно распределенной, а формируется ансамблем дискретных $D^-\left(A^+\right)$-центров. Сосредоточенное распределение ПЗ индуцирует на поверхности полупроводника хаотический (случайный) потенциал, который рассеивает электроны в двумерной поверхностной зоне. Природа хаотического потенциала связывается с флуктуациями в расположении примесных ионов [2].

Рассеяние электронов хаотическим потенциалом приводит к уменьшению длины свободного пробега ℓ, и в том случае, когда ее величина становится меньше длины волны электрона ($\ell \le \lambda$), она теряет физический смысл. Электроны могут двигаться лишь в ограниченной области кристалла, не имея возможности удалиться от центра на расстояние, сравнимое с ℓ. Тогда электронные состояния локализуются [2]. Согласно правилу Иоффе – Регеля локализованы те состояния, для которых выполняется условие

$$k\ell \le 1, \tag{1}$$

где k – модуль двумерного квазиволнового вектора.

Теоретический анализ формулы сечения рассеяния σ медленных электронов в двумерном случае, в отличие от трехмерного, приводит к тому, что с уменьшением энергии сечение рассеяния возрастает [3]. Следовательно, в двумерных электронных системах при $T \to 0$ длина свободного пробега электрона должна сильно сокращаться ($\ell \infty \frac{1}{\sigma}$), и, как следствие, вероятность возникновения состояния сильной локализации электронной плотности δ в двумерном случае более высокая, чем в трехмерном.

Возможность возникновения состояния сильной локализации электронной плотности требует выполнения условия сильного вырождения двумерного электронного газа в приближении Томаса – Ферми, что и было сделано в работе [4], в которой на основе правила (1) был получен критерий сильной локализации двумерного электронного газа. В качестве объекта теоретического анализа был выбран модельный полупроводник *n*-типа при $T = 0$ К. При данной ситуации возможно образование обедненного слоя с неэкранированными зарядами примеси (рис. 1). Таким образом, в самом полупроводнике энергия (уровень) Ферми расположена в зоне проводимости, а вблизи поверхности образуется область объемного заряда (область обеднения полупроводника электронами) в результате перехода электронов из зоны проводимости (с-зоны) на поверхностные состояния (обусловленные ловушками для электронов). Однако в процессе вывода критерия авторы работы [4] заменили в формуле для сечения рассеяния медленных электронов в двумерном случае на некотором случайном потенциале квазиволновой вектор электрона k на его волновой вектор на уровне Ферми, т. е. $k \to k_F$, что некорректно, если учесть зависимость квазиволнового вектора от энергии: $k = k\left(E\right)$. Кроме того, сечение рассеяния медленных электронов в двумерном случае имеет логарифмическую особенность при $k = 0$ [3]. Следовательно, состояние $k_F = 0$ в двумерных системах в принципе недостижимо*.

Результат, представленный в [4], не учитывает функцию распределения по квантовым состояниям, а именно: следовало бы усреднить сечение рассеяния электронов по их энергиям на основе функции распределения Ферми – Дирака.

Цель настоящей работы – уточнение критерия сильной локализации на основе энергетического усреднения сечения двумерного рассеяния электронов на случайном потенциале, индуцированном ионами примеси.

Для достижения этой цели нами предлагается вспомогательная модель, в которой исходным положением уровня Ферми является не дно поверхностной зоны проводимости $E_F\left(0\right) = E_{cs}$, как в работе [4], а ее окрестность $E_F\left(T\right) = E_{cs} \pm k_B T$ (см. рис. 1).

---

*Именно этот случай в асимптотическом пределе $k \to 0$ представляет наибольший интерес с точки зрения теории поверхностных электронных свойств полупроводников. Дело в том, что вблизи дна поверхностной зоны кинетическая энергия электронов равна нулю ($k = 0$, $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = 0$). В сильновырожденном квазидвумерном электронном газе средняя энергия электронов примерно равна энергии Ферми, а это означает, что при $T = 0$ К уровень Ферми закрепляется у дна поверхностной зоны, что равносильно случаю $E_F = 0$ (см. рис. 1). Электроны оказываются сильнолокализованными в самосогласованном потенциале V_i заряженных доноров. Ясно, что при этом классическая длина свободного пробега электронов ℓ равна нулю. Соответственно, классическая электропроводность отсутствует.

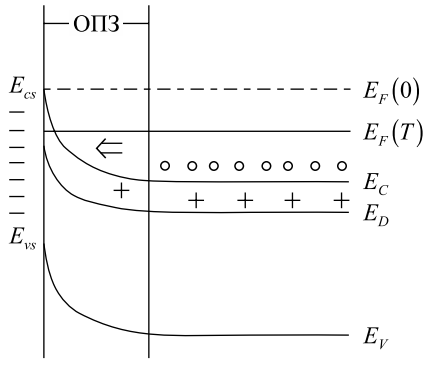


Рис. 1. Изгиб энергетических зон «вверх» при наличии ОПЗ. Представленная модель предполагает пиннинг уровня Ферми в середине зоны поверхностных состояний (условие выполнения приближения Томаса – Ферми [1]). При $T \to 0$ уровень Ферми поднимается и достигает предельного положения (закрепляется) у дна поверхностной зоны проводимости E_{cs}, что соответствует состоянию сильной локализации электронов (пунктирная линия)

Fig. 1. Bending of energy bands in the presence of surface charge. In our model is suggested the pinning of Fermi level in the middle of surface states band (condition of implementation of Thomas – Fermi's approximation [1]). At $T \to 0$ the Fermi level climbs and achieved extremely position (attached) to the bottom of surface conductivity band E_{cs}, that conformed to strong localization electron states (the puncture line)

Предлагаемая модель предполагает усреднение сечения двумерного рассеяния и квазиволнового вектора электронов на основе функции распределения Ферми – Дирака с последующим переходом к пределу $T \to 0$, при этом энергетический спектр предполагается квадратичным.

Методика расчета

Сечение рассеяния медленных электронов в двумерном случае на некотором локальном потенциале можно записать в виде [3]

$$\sigma_i(k) = \frac{\pi^2}{k}\left(\ln^2\frac{2}{\gamma k r_i} + \frac{\pi^2}{4}\right)^{-1}, \tag{2}$$

где $\gamma = \exp(C)$, $C \approx 0{,}577\ldots$ – постоянная Эйлера; r_i – величина с размерностью длины. При параболическом законе дисперсии $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$, где m – эффективная масса электрона в поверхностной зоне; E – энергия поверхностных электронов. С учетом этого формулу (2) можно преобразовать к виду

$$\sigma_i(E) = \frac{4\pi^2\hbar}{\sqrt{2mE}}\left(\ln^2\frac{E}{|U_i|} + \pi^2\right)^{-1}, \quad \ln^2\frac{E}{|U_i|} = \ln^2\frac{|U_i|}{E}, \tag{3}$$

где $|U_i| = \frac{2\hbar^2}{\gamma^2 m r_i^2}$ – модельный потенциал, обусловленный индивидуальной примесью, в форме двумерной прямоугольной ямы глубиной U_i и радиусом r_i.

Поскольку плотность электронных состояний в двумерной зоне не зависит от энергии, справедливо соотношение

$$\langle\sigma_i(E)\rangle_E = \frac{\int_0^\infty E\sigma_i(E) f_F(E,T)\,dE}{\int_0^\infty E f_F(E,T)\,dE}, \tag{4}$$

где $f_F(E,T)$ – функция распределения Ферми – Дирака.

Переходя к безразмерным переменным $x = \frac{E}{k_B T}$, $\eta = \frac{E_F}{k_B T}$ (где k_B – постоянная Больцмана; E_F – энергия Ферми) и сокращая на одинаковые величины числитель и знаменатель, можно (4) привести к виду

$$\langle\sigma_i(E)\rangle_E = \frac{4\pi^2}{k_T}\frac{\int_0^\infty\left(\frac{1}{\ln^2\left(\frac{x}{x_\circ}\right)+\pi^2}\right)\frac{\sqrt{x}\,dx}{\exp(x-\eta)+1}}{\int_0^\infty\frac{x\,dx}{\exp(x-\eta)+1}}, \tag{5}$$

где k_T – характерный тепловой импульс электронов; $x_\circ = \dfrac{|U_i|}{k_B T}$.

Логарифм, стоящий в знаменателе подынтегрального выражения в (5), изменяется довольно медленно вблизи точки $x = \eta$ (или $E = E_F$) (рис. 2).

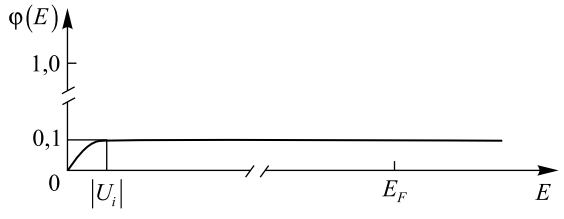


Рис. 2. Горизонтальная линия примерно воспроизводит ход функции $\varphi(E) = \left[\ln^2\left(\dfrac{E}{|U_i|}\right) + \pi^2\right]^{-1}$

Fig. 2. Horizontal line loosely sketches of behavior of the function $\varphi(E) = \left[\ln^2\left(\dfrac{E}{|U_i|}\right) + \pi^2\right]^{-1}$

По этой причине функцию $\varphi(x) = \left[\ln^2\left(\dfrac{x}{x_\circ}\right) + \pi^2\right]^{-1}$ можно вынести из-под знака интеграла при $x = \eta$, так что имеем

$$\left\langle \sigma_i(E) \right\rangle_E = \frac{4\pi^2}{k_T}\left(\frac{1}{\ln^2\left(\dfrac{\eta}{x_\circ}\right) + \pi^2}\right)\frac{\sqrt{\pi}}{2}\frac{F_{1/2}(\eta)}{F_1(\eta)}, \tag{6}$$

где $F_r(\eta) = \dfrac{1}{\Gamma(r+1)}\displaystyle\int_0^\infty \frac{x^r dx}{\exp(x-\eta)+1}$ – интеграл Ферми – Дирака порядка r**.

Формула (6) справедлива при частичном вырождении квазидвумерного электронного газа. При сильном вырождении ($\eta \gg 1$) [5]

$$F_r(\eta) = \frac{\eta^{r+1}}{\Gamma(r+2)}\left[1 + r(r+1)\frac{\pi^2}{6}\frac{1}{\eta^2} + \ldots\right]. \tag{7}$$

Подставляя разложение (7) в выражение (6), получим

$$\left\langle \sigma_i(E) \right\rangle_E = \frac{4\pi^2}{k_T}\left(\frac{1}{\ln^2\left(\dfrac{\eta}{x_\circ}\right) + \pi^2}\right)\frac{4}{3\sqrt{\eta}}\frac{1 + \dfrac{1}{2}\cdot\dfrac{3}{2}\cdot\dfrac{\pi^2}{6}\cdot\dfrac{1}{\eta^2} + \ldots}{1 + 2\cdot\dfrac{\pi^2}{6}\cdot\dfrac{1}{\eta^2} + \ldots} =$$

**Аппроксимация (6) справедлива при условии $E_F \gg |U_i|$. В предлагаемой модели подразумевается, что $|U_i|$ характеризует энергию связи «мелкого» донора (хаотического потенциала) порядка 10 мэВ. При сильном вырождении энергия Ферми поверхностного электрона во много раз превышает энергию связи $D^-(A^+)$-центра и уровень Ферми проходит гораздо выше над потенциальной ямой. В том случае если уровень Ферми пересекает потенциальную яму ($E_F < |U_i|$), то возможны резонансное рассеяние электронов на поверхности полупроводника (включая образование связанных состояний) и другие механизмы рассеяния. В подобных ситуациях аппроксимация (6) может оказаться недостаточно точной или вообще неприемлемой. В связи с этим большое значение приобретают приближенные методы расчета. Одним из таких методов является метод квадратурных формул, который позволяет вычислить (4) с любой степенью точности для произвольной статистики [7]. Однако каждому положению уровня Ферми при этом будет соответствовать свой особый набор узловых точек и весовых множителей.

$$= \frac{4\pi^2\hbar}{\sqrt{2mE_F}}\left(\frac{1}{\ln^2\left(\frac{\eta}{x_\circ}\right)+\pi^2}\right)\frac{4}{3}\frac{1+\frac{1}{2}\cdot\frac{3}{2}\cdot\frac{\pi^2}{6}\cdot\frac{1}{\eta^2}+\ldots}{1+2\cdot\frac{\pi^2}{6}\cdot\frac{1}{\eta^2}+\ldots} =$$

$$= \frac{4\pi^2\hbar}{\sqrt{2mE_F}}\left(\frac{1}{\ln^2\left(\frac{\eta}{x_\circ}\right)+\pi^2}\right)\frac{4}{3}\frac{1+\frac{\pi^2}{8}\cdot\left(\frac{k_BT}{E_F}\right)^2+\ldots}{1+\frac{\pi^2}{3}\cdot\left(\frac{k_BT}{E_F}\right)^2+\ldots} \approx$$

$$\approx \frac{4}{3}\sigma_i\left(E_F\right)\left[1-\frac{5\pi^2}{24}\left(\frac{k_BT}{E_F}\right)^2\right]. \tag{8}$$

Первое слагаемое в (8), умноженное на число $\frac{3}{4}$, совпадает с формулой $\sigma_i\left(k_F\right)=\frac{\pi^2}{k_F}\left(\ln^2\frac{2}{\gamma k_F r_i}+\frac{\pi^2}{4}\right)^{-1}$ из работы [4].

Аналогичные расчеты приводят к формуле для среднего значения квазиволнового вектора электрона

$$\lim_{T\to 0}\left\langle k\left(E\right)\right\rangle = \lim_{T\to 0}\frac{4}{5}k_F\left[1+\frac{7\pi^2}{24}\left(\frac{k_BT}{E_F}\right)^2\right]=\frac{4}{5}k_F. \tag{9}$$

При температуре, стремящейся к нулю, электронная плотность локализуется, в связи с этим в дальнейших расчетах можно не учитывать температурные поправки в формулах (8) и (9).

Таким образом, имеем

$$\left\langle\sigma_i\left(E\right)\right\rangle_E=\frac{4}{3}\sigma_i\left(E_F\right)=\frac{4\pi^2}{3k_F}\left(\ln^2\frac{2}{\gamma k_F r_i}+\frac{\pi^2}{4}\right)^{-1},\quad\left(k_F=\frac{\sqrt{2mE_F}}{\hbar}\right). \tag{10}$$

Определение параметра r_i производится в процессе сшивки волновой функции электрона ψ_i в областях $\rho<\rho_i$ и $\rho_i<\rho<\frac{1}{k_F}$. Во внутренней области можно пренебречь кинетической энергией электрона $E_k=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$ по сравнению с его потенциальной энергией $V_i\left(\rho\right)$ в поверхностной зоне.

Во внутренней области уравнение Шрёдингера имеет вид

$$\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\left(\rho\frac{d\psi_i}{d\rho}\right)-\frac{2m}{\hbar^2}V_i\left(\rho\right)\psi_i=0. \tag{11}$$

Потенциальная энергия $V_i\left(\rho\right)$ (конкретная форма которой приведена в работе [4]) соответствует поверхностной плотности заряда (в рамках полуклассической модели электронного облака) $\delta_i=-e\left|\psi_i\right|^2=-\frac{ed_i}{4\pi\left(\rho^2+\frac{d_i^2}{4}\right)^{3/2}}$, где ρ – радиальная координата в плоскости поверхности; ed_i – электрический момент фиктивного диполя (d_i – удвоенное расстояние от донора в ОПЗ до плоскости поверхности полупроводника, т. е. расстояние до его изображения). Вдали от рассеивающего центра (отметим, что внутри области локализации $\rho<\rho_i$ электроны тем не менее рассеиваются, хотя длина свободного пробега ℓ и равна нулю) потенциальная энергия электрона становится малой. При этом асимптотическое решение уравнения (11) имеет вид [3]

$$\psi_{1i}\approx C_1+C_2\ln\rho. \tag{12}$$

Во внешней области волновая функция должна соответствовать асимптотике электронной плотности $\delta_i = -\dfrac{ed_i}{4\pi\left(\rho^2 + \dfrac{d_i^2}{4}\right)^{3/2}}$ при $\rho \gg d_i$, т. е. должна иметь вид

$$\psi_{2i} \approx \sqrt{\frac{d_i}{4\pi}}\,\rho^{-3/2}. \tag{13}$$

Сшивая логарифмическую производную волновых функций (12) и (13) на границе двух областей $\rho = \rho_i$

$$\left.\frac{1}{\psi_{1i}}\frac{d\psi_{1i}}{d\rho}\right|_{\rho=\rho_i} = \left.\frac{1}{\psi_{2i}}\frac{d\psi_{2i}}{d\rho}\right|_{\rho=\rho_i}, \tag{14}$$

приходим к соотношению[***]

$$\frac{C_1}{C_2} = -\ln\left[\rho_i \exp\left(\frac{2}{3}\right)\right]. \tag{15}$$

Выражение с размерностью длины, стоящее в (15) под знаком логарифма, и есть r_i. Значение ρ_i определяется из условия $V_i(\rho) = 0$ [4]. Таким образом,

$$r_i = \frac{d_i}{\sqrt{3}}\exp\left(\frac{2}{3}\right), \text{ откуда } r_i \approx d_i. \tag{16}$$

Из (16) следует физический смысл величины r_i как характеризующей эффективный «размер» диполя (потенциальной ямы с шириной порядка 10–100 Å). Отсюда становится ясным, что модельный потенциал индивидуальной примеси в (3) есть на самом деле порядок величины кинетической энергии, которой обладал бы электрон, локализованный внутри области размером r_i в поле индивидуального диполя.

Сечение рассеяния ограничивает длину свободного пробега:

$$\ell = \frac{1}{\sigma n_s}, \tag{17}$$

где σ – среднее сечение рассеяния на флуктуациях потенциала; n_s – поверхностная концентрация заряда. Для вычисления σ необходимо усреднить (сгладить) выражение (10) по всем размерам диполей d_i, равномерно распределенных в диапазоне 0–2 $L_\circ$ ($L_\circ$ – ширина области обеднения):

$$\sigma = \frac{1}{2L_\circ}\int_0^{2L_\circ}\left\langle\sigma_i\left(k_F d_i\right)\right\rangle d\left(d_i\right) = \frac{1}{2k_F L_\circ}\int_0^{2k_F L_\circ}\left\langle\sigma_i\left(k_F d_i\right)\right\rangle d\left(k_F d_i\right) =$$

$$= \frac{4}{3}\frac{\pi^2}{2k_F^2 L_\circ}\int_0^{2k_F L_\circ}\left[\ln^2\frac{2\sqrt{3}}{\mu\xi} + \frac{\pi^2}{4}\right]^{-1} d\xi. \tag{18}$$

Здесь введено обозначение $\mu = \exp\left(\dfrac{3C+2}{3}\right)$. Интеграл в выражении (18) подстановкой $t = \ln\left(\dfrac{2\sqrt{3}}{\mu\xi}\right)$ приводится к виду

$$I(y) = \frac{2\sqrt{3}}{\mu}\int_y^\infty \frac{\exp(-t)}{t^2 + \dfrac{\pi^2}{4}}dt, \tag{19}$$

где $y = \ln\left(\dfrac{\sqrt{3}}{\mu k_F L_\circ}\right)$.

[***] На общий интеграл (12) свободного уравнения Шрёдингера еще не наложено граничное условие. Чтобы придать определенный смысл функции (12), надо наложить граничное условие (14). Соотношение (15) позволяет представить волновую функцию (12) в виде: $\psi_{1i} \approx C_2 \ln\left(\dfrac{\rho}{r_i}\right)$. Следовательно, размерность исходной волновой функции определяется константой C_2: $[\psi_i] = [C_2]$.

Для идентификации состояния системы вблизи значения $E_F = 0$ (или $k_F = 0$) требуется рассмотреть асимптотику интеграла (19) при $y \gg 1$. С этой целью проинтегрируем исходный интеграл (19) несколько раз по частям:

$$I(y) = \frac{2k_F L_\circ}{y^2 + \frac{\pi^2}{4}} \left(1 - \frac{2y}{y^2 + \frac{\pi^2}{4}} + \ldots \right)_{y \gg 1} \approx \frac{2k_F L_\circ}{y^2}. \tag{20}$$

С учетом поведения (20) в области больших аргументов для среднего сечения рассеяния имеем

$$\sigma \approx \frac{4}{3} \frac{\pi^2}{k_F} \ln^{-2} \left(\frac{\sqrt{3}}{\mu k_F L_\circ} \right). \tag{21}$$

Теперь возможна оценка состояния сильной локализации электронной плотности на поверхности полупроводника в условиях естественного размерного эффекта. Следуя (9) и (17), (21) и учитывая выражение для ширины ОПЗ $L_\circ = \frac{n_s}{n_\circ}$ ($n_\circ$ – уровень легирования полупроводника), на основе правила (1) получаем критерий

$$\frac{3}{5} \frac{k_F^2}{\pi^2 n_s} \ln^2 \left(\frac{\sqrt{3} n_\circ}{\mu k_F n_s} \right) \le 1. \tag{22}$$

Проведем анализ полученного результата. Прежде всего следует отметить, что сечение рассеяния медленных электронов на флуктуациях хаотического потенциала является вероятностной величиной, а сам процесс низкоэнергетического рассеяния – случайным событием. В условиях естественного размерного эффекта при очень низких температурах вероятность возникновения сильной локализации электронной плотности возрастает. Учет квантовой статистики Ферми – Дирака приводит к тому, что в данном случае критерий сильной локализации соблюдается в среднем только на 60 %. В этом смысле результат авторов работы [4] соответствует идеальному случаю сильной локализации (100 %), практически не достижимому в реальных условиях. Кроме того, в отмеченной выше работе не учитывается то обстоятельство, что в пределе $T \to 0$ электронная плотность локализуется, а для перехода к этому пределу требуется предварительно усреднить сечение рассеяния и волновой вектор электрона (формулы (8) и (9)). Согласно критерию (22) можно лишь говорить о более или менее сильной локализации электронной плотности в зависимости от уровня легирования полупроводника, концентрации поверхностных дефектов и т. п. При этом, как было отмечено в работе [4], на критическом уровне легирования $n_0 \le 3{,}66 \cdot 10^{18}$ см$^{-3}$ порог протекания равен нулю, а значение поверхностной плотности $n_s = 10^{12}$ см$^{-2}$, отвечающее критерию сильной локализации, близко к типичным величинам, характерным для поверхности легированных полупроводниковых кристаллов с диэлектрической проницаемостью порядка 10. Ситуация, довольно близкая к условиям проявления сильной локализации, наблюдалась на поверхности полупроводника *n*-InGaN (0001) [6]. Было выявлено существование естественного зарядового слоя, ширина которого может быть вполне соизмерима с расстоянием между дефектами. Экспериментальные исследования дают основание полагать, что формирование зарядового слоя может быть вызвано различными причинами, в частности высокой поверхностной плотностью дефектов.

Интерес к исследованиям формирования естественного зарядового слоя на поверхности полупроводниковых кристаллов связан с возможностью получения новой фундаментальной информации о свойствах поверхностных электронных состояний.

Заключение

Основное содержание настоящей статьи можно констатировать формулами (8), (10) и (22). Учет статистики Ферми – Дирака при выводе критерия сильной локализации 2D электронного газа на поверхности сильнолегированного полупроводника является необходимой процедурой для корректного перехода ($T \to 0$) к состоянию сильной локализации. С этой целью в работе были получены низкотемпературные поправки к сечению двумерного рассеяния и квазиволновому вектору электрона (формулы (8) и (9)).

Библиографические ссылки

1. *Бондаренко В. Б., Кузьмин М. В., Кораблев В. В.* Анализ естественных неоднородностей потенциала у поверхности примесного полупроводника // ФТП. 2001. Т. 35, вып. 8. С. 964–968.

2. *Гантмахер В. Ф.* Электроны в неупорядоченных средах. М. : Физматлит, 2013.

3. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Теоретическая физика : в 10 т. М. : Наука, 1989. Т. 3 : Квантовая механика (нерелятивистская теория).

4. *Бондаренко В. Б., Филимонов А. В.* Критерий сильной локализации на поверхности полупроводника в приближении Томаса – Ферми // ФТП. 2017. Т. 51, вып. 10. С. 1372–1375. DOI: 10.21883/FTP.2017.10.45015.8507.

5. *Аскеров Б. М.* Кинетические эффекты в полупроводниках. Л. : Наука, 1970.

6. *Бенеманская Г. В., Жмерик В. Н., Лапушкин М. Н. и др.* Аккумуляционный нанослой – 2D-электронный канал ультратонких интерфейсов Cs/*n*-InGaN // Физика твердого тела. 2009. Т. 51, вып. 2. С. 372–376. PACS: 73.20-r, 73.21.Fg, 79.60.Dp.

7. *Никифоров А. Ф., Уваров В. Б.* Специальные функции математической физики. М. : Наука, 1978.

References

1. Bondarenko V. B., Kuzmin M. V., Korablev V. V. [An analysis of as-grown inhomogeneities peculiar to the surface potential of the impurity semiconductor]. *Fiz. Tekh. Poluprovodn.* [Semiconductors]. 2001. Vol. 35, issue 8. P. 964–968 (in Russ.).

2. Gantmakher V. F. Elektrony v neuporyadochennykh sredakh [Electrons in disordered mediums]. Moscow : Fizmatlit, 2013 (in Russ.).

3. Landau L. D., Lifshits E. M. Teoreticheskaya fizika [Theoretical physics] : in 10 vols. Moscow : Nauka, 1989. Vol. 3 : Kvantovaya mekhanika (nerelyativistskaya teoriya) [Quantum mechanics (nonrelativistic theory)] (in Russ.).

4. Bondarenko V. B., Filimonov A. V. [A criterion for strong localization on a semiconductor surface in the Thomas – Fermi approximation]. *Fiz. Tekh. Poluprovodn.* [Semiconductors]. 2017. Vol. 51, issue 10. P. 1372–1375 (in Russ.). DOI: 10.21883/FTP.2017.10.45015.8507.

5. Askerov B. M. Kineticheskie effekty v poluprovodnikakh [Kinetic effects in semiconductors]. Leningrad : Nauka, 1970 (in Russ.).

6. Benemanskaya G. V., Jmeric V. N., Lapushkin M. N., et al. Accumulation nano-layer – 2D-electron channel of ultrathin interfaces Cs/*n*-InGaN. *Fiz. Tverd. Tela.* 2009. Vol. 51, issue 2. P. 372–376. PACS: 73.20-r, 73.21.Fg, 79.60.Dp (in Russ.).

7. Nikiforov A. F., Uvarov V. B. Spetsial'nye funktsii matematicheskoi fiziki [Special functions of mathematical physics]. Moscow : Nauka, 1978 (in Russ.).

Статья поступила в редколлегию 02.03.2018.
Received by editorial board 02.03.2018.

Физика ядра и элементарных частиц. Радиофизика

Atomic nucleus and elementary particle physics. Radio physics

УДК 539.12.01

РОЖДЕНИЕ ОДИНОЧНЫХ КАЛИБРОВОЧНЫХ БОЗОНОВ В ПРОЦЕССАХ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЛЕПТОН-ФОТОННЫХ СТОЛКНОВЕНИЙ

И. А. ШЕРШЕНЬ[1)]***, Т. В. ШИШКИНА***[1)]

[1)]*Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Беларусь*

Рассматривается использование лептон-фотонных пучков для поиска отклонений от Стандартной модели. В частности, обсуждаются лептон-фотонные взаимодействия как инструмент исследований нейтринных осцилляций и нарушения закона сохранения лептонного числа. Получены и проанализированы аналитические лоренц-инвариантные выражения для дифференциальных сечений процессов рождения одиночных калибровочных бозонов в результате лептон-фотонных столкновений. Выполнен численный анализ полных сечений процессов. Определены и обсуждены пределы кинематики для возникновения отклонений от Стандартной модели, различия процессов в зависимости от взаимодействующих лептонов. Показано, что поиски «новой физики» в лептонном секторе Стандартной модели лучше всего производить, изучая дифференциальные сечения процессов рождения нейтральных калибровочных бозонов при максимальных значениях углов рассеяния. Дифференциальные сечения процессов рождения заряженных калибровочных бозонов в случаях взаимодействия фотонов с различными типами лептонов можно применять для поиска отклонений от Стандартной модели во всей области кинематики.

Ключевые слова: сечение; рассеяние; Стандартная модель; линейные коллайдеры.

Образец цитирования:
Шершень И. А., Шишкина Т. В. Рождение одиночных калибровочных бозонов в процессах высокоэнергетических лептон-фотонных столкновений // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2018. № 2. С. 125–132.

For citation:
Shershan I. A., Shishkina T. V. Single gauge bosons production in the high-energy lepton-photon collisions processes. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2018. No. 2. P. 125–132 (in Russ.).

Авторы:
Иван Андреевич Шершень – аспирант кафедры теоретической физики и астрофизики физического факультета. Научный руководитель – Т. В. Шишкина.
Татьяна Викентьевна Шишкина – доктор физико-математических наук, профессор; профессор кафедры теоретической физики и астрофизики физического факультета.

Authors:
Ivan A. Shershan, postgraduate student at the department of theoretical physics and astrophysics, faculty of physics.
undershroud@gmail.com
Tatiana V. Shishkina, doctor of science (physics and mathematics), full professor; professor at the department of theoretical physics and astrophysics, faculty of physics.

Журнал Белорусского государственного университета. Физика. 2018. № 2. С. 125–132
Journal of the Belarusian State University. Physics. 2018. No. 2. P. 125–132

SINGLE GAUGE BOSONS PRODUCTION IN THE HIGH-ENERGY LEPTON-PHOTON COLLISIONS PROCESSES

***I. A. SHERSHAN*[a], *T. V. SHISHKINA*[a]**

[a]*Belarusian State University, 4 Niezaliežnasci Avenue, Minsk 220030, Belarus*
Corresponding author: I. A. Shershan (undershroud@gmail.com)

The different lepton-photon interactions was considered to search for deviations from the Standard Model. In particular, lepton-photon interactions are discussed as a tool for studying neutrino oscillations and lepton flavor violation. Analytic Lorentz invariant expressions for the differential cross sections of the single gauge bosons production as a result of lepton-photon collisions were obtained and analyzed. The total cross sections numerical analysis of the processes was performed. The kinematics limits for obtaining of deviations from the Standard Model were determined and discussed to get of differences depending on interacting leptons. It is shown that the search for «new physics» in the lepton sector of the Standard Model is best done by studying the differential cross sections for the neutral gauge bosons production at maximum of scattering angles. The differential cross sections for the charged gauge bosons production in the case of the different types of leptons interactions with photons can be used to search for deviations from the Standard Model in the entire kinematics region.

Key words: scattering; cross section; Standard Model; ILC.

Введение

Современная ситуация в физике элементарных частиц такова, что подавляющее большинство наблюдаемых в экспериментах эффектов полностью описываются Стандартной моделью. Те немногие эффекты, которые существуют за ее рамками, как правило, объясняются недостаточным совершенством математического аппарата или точности экспериментальных исследований.

В связи с этим физика высоких энергий на данный момент испытывает необходимость в более совершенных инструментах и методиках проведения экспериментов, которые позволили бы расширить спектр явлений, не поддающихся описанию Стандартной моделью и методами квантовой хромодинамики. Это касается в первую очередь простейших расширений группы $SU(2) \times U(1)$, включающих в себя трех- и четырехбозонные аномальные взаимодействия [1–4], а также дополнительные массивные калибровочные бозоны (Z'-модели) [5].

Исследование нейтринных осцилляций имеет свои особенности. Детектирование нейтрино до сих пор является очень сложной задачей экспериментальной физики высоких энергий. В связи с этим вполне логично, что исследования в этой области должны вестись с точки зрения поиска взаимодействий, нарушающих закон сохранения лептонного числа, а объектом исследования должны быть не нейтрино, а заряженные лептоны различных поколений и продукты их распада.

Процессы рождения калибровочных бозонов [6–10], рассмотренные в настоящей работе, планируется экспериментально изучать на линейных коллайдерах новых поколений. Опыты, проводимые на коллайдерах такого типа, имеют ряд существенных преимуществ. Поскольку процессы по рассеянию фотонов высокой энергии обладают бóльшим поперечным сечением по сравнению с лептон-лептонными взаимодействиями, фотонные пучки предоставляют уникальную возможность для исследования физики электрослабого взаимодействия и квантовой хромодинамики [11]. Вопросы использования фотонных пучков (в том числе и циркулярно-поляризованных) подробно обсуждаются при планировании экспериментальных программ Международного линейного коллайдера (англ. International Linear Collider, ILC) [12].

Использование мюонных пучков в экспериментах столкновения элементарных частиц обсуждается с 1970-х гг. На данный момент имеются схемы мюонных $\mu^+\mu^-$-коллайдеров с энергией взаимодействия в системе центра масс 1,5; 3,0 и 4,0 ТэВ [13]. В будущем планируется расширение возможностей Международного линейного коллайдера для проведения экспериментов в $\mu\gamma$-режиме.

Теоретические основы

В настоящей работе рассмотрены процессы лептон-фотонного взаимодействия:

$$l(p, m) + \gamma(k, 0) \to f(p', m') + B(k', M'),$$

где $l(f)$ и $\gamma(B)$ – конечные (начальные) лептон и бозон соответственно; $p(p')$ и $k(k')$ – 4-импульсы начальных (конечных) частиц, $m(m')$ и $0(M)$ – их массы. В рассмотренном нами случае $l = (e^-, \mu^-)$, $f = (l, \nu_l)$ и $B = (\gamma, Z, W^-)$.

Выражение для дифференциального сечения этих процессов может быть записано в виде

$$d\sigma = \frac{dQ^2}{16\pi\lambda_s}\left|\mathfrak{M}\right|^2, \tag{1}$$

где $\left|\mathfrak{M}\right|^2$ – квадрат модуля матричного элемента, а инварианты Мандельштама определяются как

$$s = \left(p + k\right)^2,$$

$$t \equiv -Q^2 = \left(p - p'\right)^2.$$

Функция λ_s представляет собой частный случай функции Калена [14]

$$\lambda\left(x, y, z\right) = \left(x - y - z\right)^2 - 4yz$$

и имеет следующие параметры: $\lambda_s = \lambda\left(s, m^2, 0\right)$.

Полное сечение определяется следующей формулой:

$$\sigma = \int\limits_{Q^2_{\min}}^{Q^2_{\max}} d\sigma. \tag{2}$$

Вычисления были выполнены методом Монте-Карло (2), при этом использовались следующие пределы интегрирования:

$$Q^2_{\max(\min)} = \frac{\left(s - m^2\right)\left(s - m'^2\right) - M^2\left(s + m^2\right) \pm \left(s - m^2\right)\sqrt{\lambda_M}}{2s},$$

где $\lambda_M = \lambda\left(s, m'^2, M^2\right)$.

Результаты исследований и их обсуждение

На рис. 1 приведены диаграммы Фейнмана, описывающие рассматриваемые процессы в борновском приближении.

Следует отметить, что их связывает друг с другом кроссинг-симметрия, т. е. каждый из процессов может протекать через каналы *s* и *u*.

Квадрат модуля матричного элемента $\left|\mathfrak{M}_{l\gamma}\right|^2$ упругого лептон-фотонного рассеяния может быть записан следующим образом:

$$\left|\mathfrak{M}_{l\gamma}\right|^2 = 128\pi^2\alpha^2\left(\frac{t^2 + 4m^2t - 8m^4}{\left(s - m^2\right)\left(s + t - m^2\right)} + \frac{4m^4}{\left(s + t - m^2\right)^2} + \frac{4m^4}{\left(s - m^2\right)^2} + 2\right). \tag{3}$$

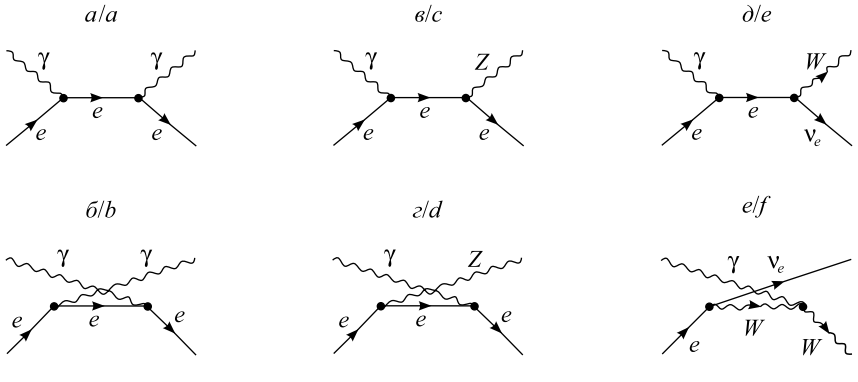


Рис. 1. Диаграммы процессов:
$l^-\gamma \to l^-\gamma$ через *s* (*а*) и *u* (*б*) каналы; $l^-\gamma \to l^-Z$ через *s* (*в*) и *u* (*г*) каналы;
$l^-\gamma \to \nu_l W^-$ через каналы *s* (*д*) и *u* (*е*) в борновском приближении

Fig. 1. Diagrams of the processes:
$l^-\gamma \to l^-\gamma$ for the *s* (*a*) and *u* (*b*) channels; $l^-\gamma \to l^-Z$ for the *s* (*c*) and *u* (*d*) channels;
$l^-\gamma \to \nu_l W^-$ for the *s* (*e*) and *u* (*f*) channels in the Born approximation

Соответствующие дифференциальное сечение $\frac{d\sigma_{l\gamma}}{dQ^2}$ (1) и относительная разность дифференциальных сечений для различных типов лептонов

$$\Delta d\sigma_{l\gamma} = \frac{d\sigma_{c\gamma} - d\sigma_{\mu\gamma}}{d\sigma_{e\gamma}}$$

в зависимости от угла рассеяния θ в системе центра масс (СЦМ) приведены на рис. 2.

Отметим некоторые особенности полученных графиков. С уменьшением угла рассеяния дифференциальное сечение увеличивается по абсолютной величине. С другой стороны, при росте энергии взаимодействия $\sqrt{s}$ в СЦМ дифференциальное сечение также увеличивается. При условии рассеяния на достаточно большие углы (θ > arccos 0,4 ≈ 1,15 рад) дифференциальное сечение фотон-электронного рассеяния превышает дифференциальное сечение фотон-мюонного. На малых углах рассеяния (θ < 1,15 рад) мюонный процесс начинает, хоть и незначительно, но преобладать над электронным. Следует отметить, что все графики $\Delta d\sigma_{l\gamma}$ пересекаются в одной точке. Очевидно, что участок кинематики вблизи этой области было бы удобно использовать в процессе калибровки коллайдеров, а также для поиска отклонений в лептонном секторе Стандартной модели.

Квадрат модуля матричного элемента $\left|\mathfrak{M}_{lZ}\right|^2$ процесса рождения одиночного нейтрального калибровочного *Z*-бозона может быть представлен в следующем виде:

$$\left|\mathfrak{M}_{lZ}\right|^2 = \frac{16\pi\alpha^2}{c_W^2 s_W^2}\Bigg[2\left(1-4s_w^2+8s_w^4\right)+$$

$$+2m^2\left(M_Z^2\left(1-4s_w^2+8s_w^4\right)+m^2\left(-1-8s_w^2+16s_w^4\right)\right)\left\{\frac{1}{\left(m^2-s\right)^2}+\frac{1}{\left(m^2-s-t+M_Z^2\right)^2}\right\}+$$

$$+\left\{m^2\left(-t^2+4tM_Z^2\left(1+4s_w^2-8s_w^4\right)+M_Z^4\left(3-16s_w^2+32s_w^4\right)\right)-M_Z^2\left(t^2+M_Z^4\right)\times\right.$$

$$\left.\times\left(1-4s_w^2+8s_w^4\right)+4m^4M_Z^2\left(16s_w^4-8s_w^2-1\right)\right\}\frac{1}{M_Z^2\left(m^2-s\right)\left(s+t-m^2-M_Z^2\right)}\Bigg], \quad (4)$$

где c_W и s_W – косинус и синус угла Вайнберга соответственно, определяемые как

$$s_W = \frac{m_W}{m_Z},\ c_W = \sqrt{1-s_W^2};$$

m_Z и m_W – массы *Z*- и *W*-бозонов соответственно. Графики $\frac{d\sigma_{lZ}}{dQ^2}$ и $\Delta d\sigma_{lZ}$ представлены на рис. 3.

Отметим, что абсолютное значение дифференциального сечения примерно в два раза меньше соответствующего сечения упругого рассеяния. Также стоит выделить тот факт, что дифференциальное сечение мюонного процесса превышает дифференциальное сечение электронного процесса на всей кинематике области. При малых углах рассеяния отличия незначительны, однако на углах, близких π, вклад мюонного процесса значительно возрастает. Также эта разность увеличивается с ростом энергии взаимодействия.

Квадрат модуля матричного элемента $\left|\mathfrak{M}_{\nu_l W}\right|^2$ процесса рождения одиночного заряженного калибровочного *W*-бозона может быть представлен в следующем виде:

$$\left|\mathfrak{M}_{\nu_l W}\right|^2 = \frac{8\pi^2\alpha^2}{s_W^2}\Bigg[\frac{4m_W^2\left(3m^2-s\right)}{\left(s-m^2\right)^2}+\frac{2\left(7m^4+m^2\left(2t-15s\right)+2s\left(3s-t\right)\right)}{\left(s-m^2\right)^2}+$$

$$+\frac{8\left(s^2+t^2\right)-3m^4-m^2\left(6s+7t\right)}{\left(m_W^2-t\right)^2}-\frac{m^2\left(s^2-19st+14t^2\right)+8t\left(2s^2-st+t^2\right)-3m^4\left(s+3t\right)}{t\left(s-m^2\right)^2\left(m_W^2-t\right)}+$$

$$+\frac{m^2\left(m^4\left(3s+2t\right)-2m^2\left(2s^2+4st+t^2\right)+s\left(s^2+2st+2t^2\right)\right)}{m_W^2 t\left(s-m^2\right)^2}\Bigg]. \quad (5)$$

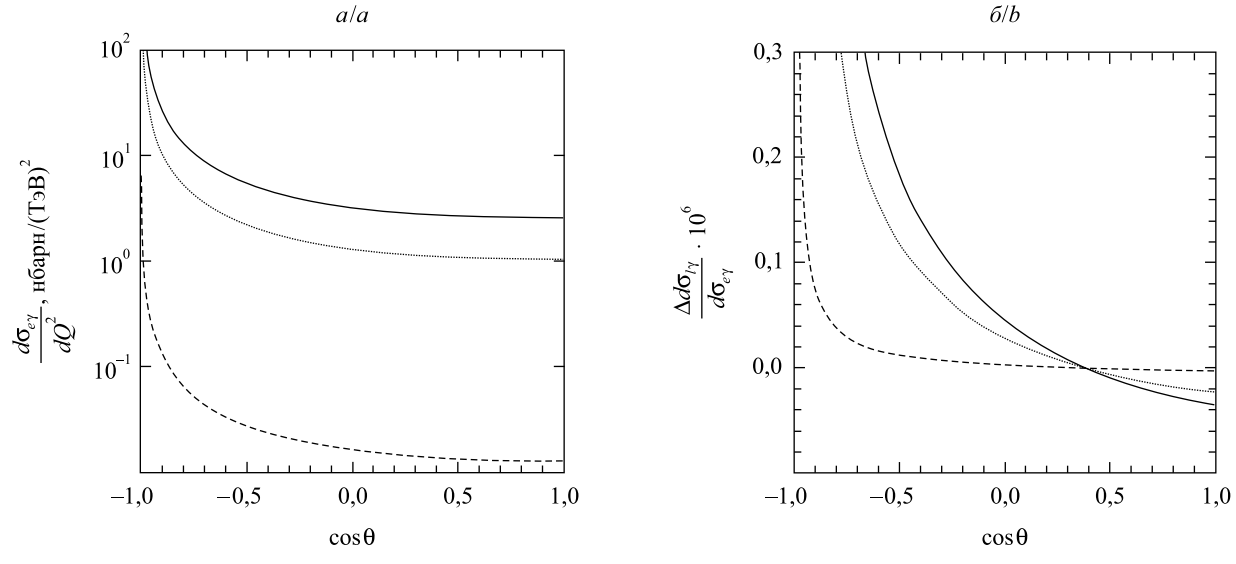


Рис. 2. Дифференциальное сечение $\frac{d\sigma_{e\gamma}}{dQ^2}$ (*а*) и относительная разность дифференциальных сечений для различных типов лептонов $\Delta d\sigma_{l\gamma}$ (*б*) в зависимости от угла рассеяния θ при разных значениях энергии взаимодействия $\sqrt{s}$: 0,8 ТэВ (сплошная линия), 1,0 ТэВ (пунктирная линия), 3,0 ТэВ (штриховая линия)

Fig. 2. The differential cross section $\frac{d\sigma_{e\gamma}}{dQ^2}$ (*a*) and the differential cross sections relative difference for various types of leptons $\Delta d\sigma_{l\gamma}$ (*b*) as a function of the scattering angle for different values of the interaction energy $\sqrt{s}$: 0.8 TeV (solid line), 1.0 TeV (dotted line), 3.0 TeV (dashed line)

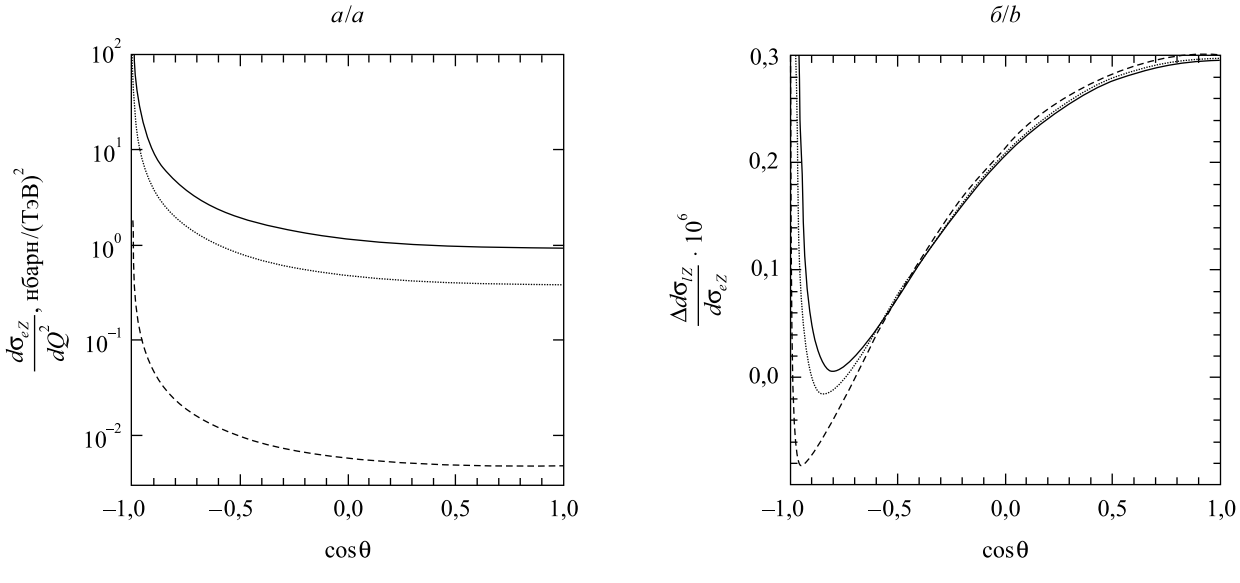


Рис. 3. Дифференциальное сечение $\frac{d\sigma_{eZ}}{dQ^2}$ (*а*) и относительная разность дифференциальных сечений для различных типов лептонов $\Delta d\sigma_{lZ}$ (*б*) в зависимости от угла рассеяния θ при разных значениях энергии взаимодействия $\sqrt{s}$: 0,8 ТэВ (сплошная линия), 1,0 ТэВ (пунктирная линия), 3,0 ТэВ (штриховая линия)

Fig. 3. The differential cross section $\frac{d\sigma_{eZ}}{dQ^2}$ (*a*) and the differential cross sections relative difference for various types of leptons $\Delta d\sigma_{lZ}$ (*b*) as a function of the scattering angle for different values of the interaction energy $\sqrt{s}$: 0.8 TeV (solid line), 1.0 TeV (dotted line), 3.0 TeV (dashed line)

Соответствующие графики $\frac{d\sigma_{\nu_e W}}{dQ^2}$ и $\Delta d\sigma_{\nu_l W}$ приведены на рис. 4.

Обратим внимание на качественное отличие графиков, соответствующих рождению заряженного калибровочного бозона в лептон-лептонных взаимодействиях. Дифференциальное сечение значительно возрастает с увеличением угла рассеяния. Помимо этого, сечение не стремится к конечной величине на порогах кинематики. Сечение мюонного процесса превышает сечение электронного только вблизи малых углов рассеяния.

Ранее было отмечено, что соответствующие выражениям (3)–(5) полные сечения процессов могут быть получены методом Монте-Карло. Графики полных сечений σ и разности $\Delta\sigma = \sigma(e) - \sigma(\mu)$ представлены на рис. 5.

Можно видеть, что полное сечение в случае рождения нейтральных калибровочных бозонов убывает с увеличением энергии взаимодействия. Сечение рождения заряженного бозона ведет себя совершенно иначе: начиная с порога рождения *W*-бозона, сечение резко возрастает, а затем медленно стремится к конечному пределу. При этом по достижении максимально возможной энергии ILC значение полного сечения составляет 180 нбарн, которое превышает значение сечения упругого рассеяния почти на два порядка. С другой стороны, полное сечение эффекта Комптона превышает сечение рождения нейтрального *Z*-бозона примерно в два раза [14].

Кардинальные различия между электронными и мюонными процессами заметны только вблизи границ кинематических областей и связаны в основном с различием кинематики соответствующих пар процессов. С увеличением энергии взаимодействия различия нивелируются, причем процессы рождения нейтральных калибровочных бозонов демонстрируют тот факт, что сечения электронных процессов больше соответствующих мюонных процессов во всей области кинематики, в то время как процессы рождения заряженных бозонов вовсе неразличимы. Точка пересечения графиков на рис. 5, *б*, в районе энергии 126 ГэВ может служить в качестве реперной для проверки Стандартной модели.

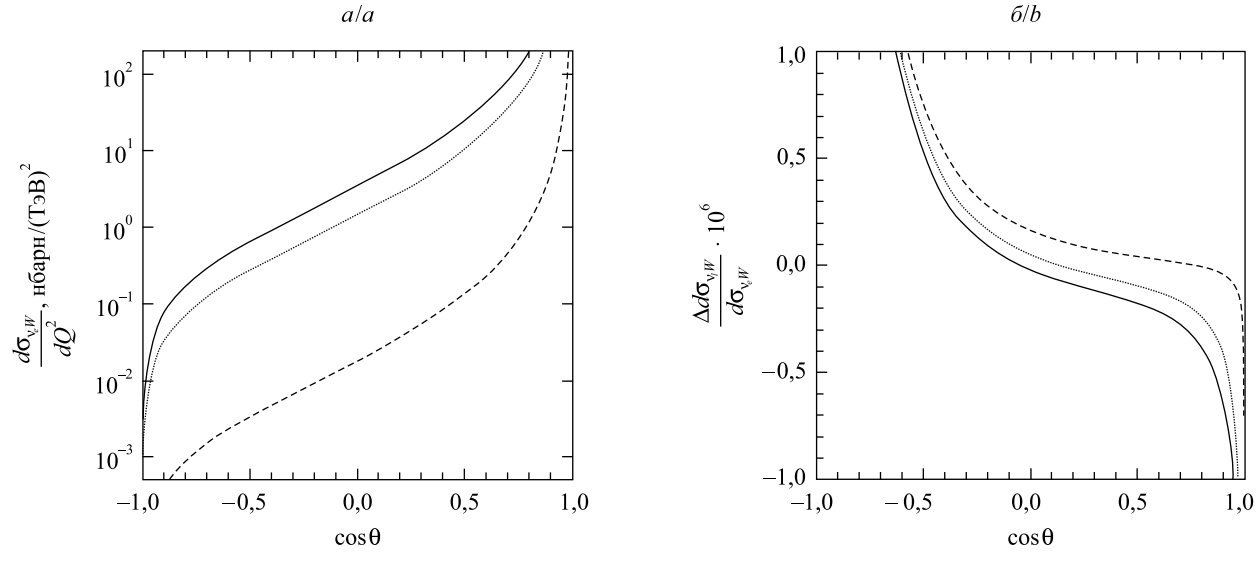


Рис. 4. Дифференциальное сечение $\frac{d\sigma_{\nu_e W}}{dQ^2}$ (*а*) и относительная разность дифференциальных сечений для различных типов лептонов $\Delta d\sigma_{\nu_l W}$ (*б*) в зависимости от угла рассеяния θ при разных значениях энергии взаимодействия $\sqrt{s}$: 0,8 ТэВ (сплошная линия), 1,0 ТэВ (пунктирная линия), 3,0 ТэВ (штриховая линия)

Fig. 4. The differential cross section $\frac{d\sigma_{\nu_e W}}{dQ^2}$ (*a*) and the differential cross sections relative difference for various types of leptons $\Delta d\sigma_{\nu_l W}$ (*b*) as a function of the scattering angle for different values of the interaction energy $\sqrt{s}$: 0.8 TeV (solid line), 1.0 TeV (dotted line), 3.0 TeV (dashed line)

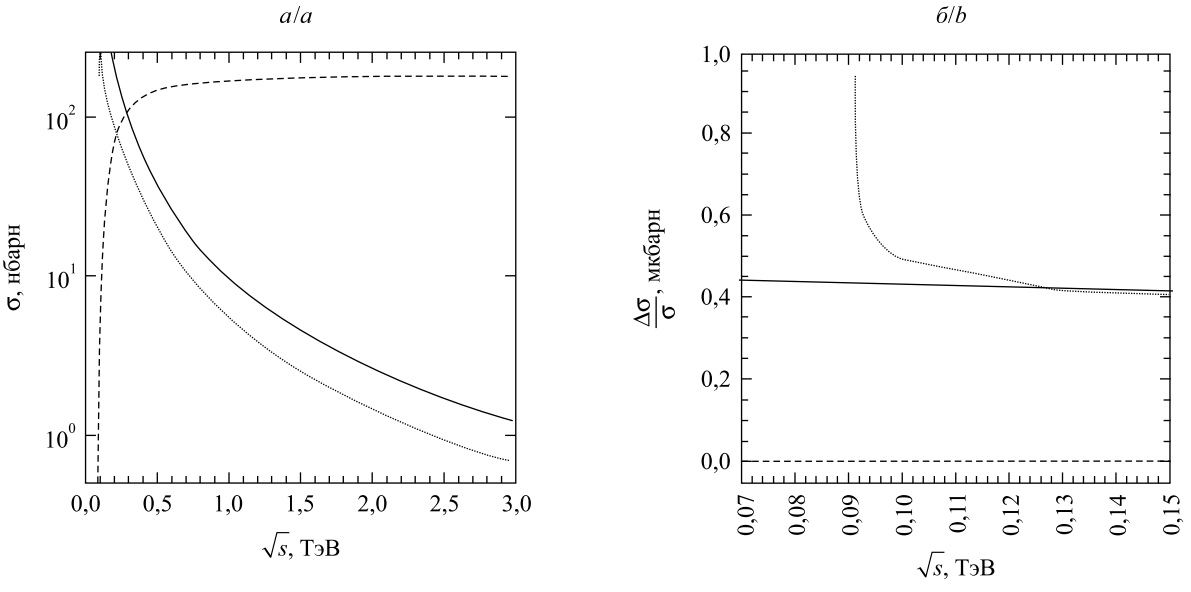


Рис. 5. Полное сечение σ (*а*) и разность полных сечений для различных типов лептонов $\frac{\Delta\sigma}{\sigma}$ (*б*) в зависимости от энергии взаимодействия $\sqrt{s}$ для разных процессов: $l\gamma \to l\gamma$ (сплошная линия), $l\gamma \to lZ$ (пунктирная линия), $l\gamma \to \nu_l W$ (штриховая линия)

Fig. 5. The total cross section σ (*a*) and the total cross sections difference for various types of leptons $\frac{\Delta\sigma}{\sigma}$ (*b*) as a function of the interaction energy $\sqrt{s}$ for various processes: $l\gamma \to l\gamma$ (solid line), $l\gamma \to lZ$ (dotted line), $l\gamma \to \nu_l W$ (dashed line)

Заключение

Таким образом, изучение фотон-мюонных процессов является хорошим инструментом поиска проявлений «новой физики» наравне с фотон-электронными процессами, причем в случае рождения заряженных калибровочных бозонов может даже превосходить их. Оба этих подхода в совокупности позволяют также исследовать физику лептонов. Как было показано в настоящей работе, подобные поиски лучше всего производить, изучая дифференциальные сечения при максимальных значениях углов рассеяния.

Библиографические ссылки

1. *Eboli O. J. P., Gonzalez-Garcia M. C., Novaes S. F.* Quartic anomalous couplings in $e\gamma$ colliders // Nucl. Phys. B. 1994. Vol. 411, issues 2–3. P. 381–396. DOI: 10.1016/0550-3213(94)90455-3.

2. *Brodsky S. J., Rizzo T. G., Schmidt I. W* anomalous moments and the polarization asymmetry zero in $\gamma e \to W\nu$ // Phys. Rev. D. 1995. Vol. 52, issue 9. P. 4929. DOI: 10.1103/PhysRevD.52.4929.

3. *Aihara H., Barklow T., Baur U., et al.* Anomalous gauge boson interactions // Electroweak symmetry breaking and new physics at the TeV scale / eds: T. L. Barklow [et al.]. 1996. P. 488–547.

4. *Denner A., Dittmaier S., Roth M., et al.* Predictions for all processes $e^+e^- \to \text{fermions} + \gamma$ // Nucl. Phys. B. 1999. Vol. 560, issues 1–3. P. 33–65. DOI: 10.1016/S0550-3213(99)00437-X.

5. *Soa D. V., Long H. N., Binh D. T., et al.* Single Z' production at compact linear collider based on *e*-γ collisions // J. Exp. Theor. Phys. 2004. Vol. 98, issue 4. P. 661–666. DOI: 10.1134/1.1757665.

6. *Denner A., Dittmaier S.* Complete $O(\alpha)$ QED corrections to polarized Compton scattering // Nucl. Phys. B. 1999. Vol. 540, issues 1–2. P. 58–86. DOI: 10.1016/S0550-3213(98)00767-6.

7. *Denner A., Dittmaier S.* Electroweak corrections to $e^-\gamma \to e^-Z$ // Nucl. Phys. B. 1993. Vol. 398, issue 2. P. 265–284. DOI: 10.1016/0550-3213(93)90109-3.

8. *Böhm M., Dittmaier S.* The hard bremsstrahlung process $e^-\gamma \to W^-\nu e\gamma$ // Nucl. Phys. B. 1993. Vol. 409, issue 1. P. 3–21. DOI: 10.1016/0550-3213(93)90444-T.

9. *Шершень И. А., Шишкина Т. В.* Исследование фермионов различных поколений с использованием пучков фотонов высокой энергии // Сборник работ 72-й научной конференции студентов и аспирантов БГУ. 2015. Т. 1. С. 223–228.

10. *Шершень И. А., Шишкина Т. В.* Исследование фермионов различных поколений в процессах столкновения с фотонами высокой энергии // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2017. № 1. С. 67–72.

11. *Ginzburg I. F., Kotkin G. L., Panfil S. L., et al.* Colliding γe and $\gamma\gamma$ beams based on single-pass e^+e^- accelerators. II. Polarization effects, monochromatization improvement // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. 1984. Vol. 219, issue 1. P. 5–24. DOI: 10.1016/0167-5087(84)90128-5.

12. *Baer H., Barklow T., Fujii K., et al.* The International Linear Collider Technical Design Report, 2013.

13. *Padamsee H.* SRF for muon colliders. SIS-2000-381, 2000. № SRF-2000-02-04.

14. *Akhundov A., Bardin D., Kalinovskaya L., et al.* Model independent QED corrections to the process $ep \to eX$ // Fortschr. der Phys. 1996. Vol. 44, issue 5. P. 373–482. DOI: 10.1002/prop.2190440502.

References

1. Eboli O. J. P., Gonzalez-Garcia M. C., Novaes S. F. Quartic anomalous couplings in $e\gamma$ colliders. *Nucl. Phys. B.* 1994. Vol. 411, issues 2–3. P. 381–396. DOI: 10.1016/0550-3213(94)90455-3.

2. Brodsky S. J., Rizzo T. G., Schmidt I. *W* anomalous moments and the polarization asymmetry zero in $\gamma e \to W\nu$. *Phys. Rev. D.* 1995. Vol. 52, issue 9. P. 4929. DOI: 10.1103/PhysRevD.52.4929.

3. Aihara H., Barklow T., Baur U., et al. Anomalous gauge boson interactions. In: T. L. Barklow, S. Dawson, H. E. Haber, et al. (eds). *Electroweak symmetry breaking and new physics at the TeV scale.* 1996. P. 488–547.

4. Denner A., Dittmaier S., Roth M., et al. Predictions for all processes $e^+e^- \to \text{fermions} + \gamma$. *Nucl. Phys. B.* 1999. Vol. 560, issues 1–3. P. 33–65. DOI: 10.1016/S0550-3213(99)00437-X.

5. Soa D. V., Long H. N., Binh D. T., et al. Single Z' production at compact linear collider based on e-γ collisions. *J. Exp. Theor. Phys.* 2004. Vol. 98, issue 4. P. 661–666. DOI: 10.1134/1.1757665.

6. Denner A., Dittmaier S. Complete $O(\alpha)$ QED corrections to polarized Compton scattering. *Nucl. Phys. B.* 1999. Vol. 540, issues 1–2. P. 58–86. DOI: 10.1016/S0550-3213(98)00767-6.

7. Denner A., Dittmaier S. Electroweak corrections to $e^-\gamma \to e^-Z$. *Nucl. Phys. B.* 1993. Vol. 398, issue 2. P. 265–284. DOI: 10.1016/0550-3213(93)90109-3.

8. Böhm M., Dittmaier S. The hard bremsstrahlung process $e^-\gamma \to W^-\nu e\gamma$. *Nucl. Phys. B.* 1993. Vol. 409, issue 1. P. 3–21. DOI: 10.1016/0550-3213(93)90444-T.

9. Shershan I. A., Shishkina T. V. Issledovanie fermionov razlichnykh pokolenii s ispol'zovaniem puchkov fotonov vysokoi energii [Investigation of fermions of different generations using high-energy photons beams]. In: *Sbornik rabot 72-i nauchnoi konferentsii studentov i aspirantov BGU*. 2015. Vol. 1. P. 223–228 (in Russ.).

10. Shershan I. A., Shishkina T. V. The different generations fermions investigation in it scattering by high energy photon beams. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2017. No. 1. P. 67–72 (in Russ.).

11. Ginzburg I. F., Kotkin G. L., Panfil S. L., et al. Colliding γe and $\gamma\gamma$ beams based on single-pass e^+e^- accelerators. II. Polarization effects, monochromatization improvement. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res.* 1984. Vol. 219, issue 1. P. 5–24. DOI: 10.1016/0167-5087(84)90128-5.

12. Baer H., Barklow T., Fujii K., et al. The International Linear Collider Technical Design Report, 2013.

13. Padamsee H. SRF for muon colliders. SIS-2000-381, 2000. No. SRF-2000-02-04.

14. Akhundov A., Bardin D., Kalinovskaya L., et al. Model independent QED corrections to the process $ep \to eX$. *Fortschr. der Phys.* 1996. Vol. 44, issue 5. P. 373–482. DOI: 10.1002/prop.2190440502.

Статья поступила в редколлегию 05.03.2018.
Received by editorial board 05.03.2018.

Оптическая обработка информации

Optical data processing

УДК 621.375.826

ОПТИМИЗАЦИЯ РАЗМЕРА ОКНА СКАНИРОВАНИЯ ДЛЯ ИЗМЕРЕНИЙ ДАЛЬНОСТИ ПО ЦИФРОВЫМ ИЗОБРАЖЕНИЯМ

В. Л. КОЗЛОВ[1)]

[1)]*Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Беларусь*

Приводятся результаты исследований, связанных с использованием фильтров выделения контрастных переходов и анализом влияния размера окна сканирования на точность построения карты глубины по стереоизображениям. Описаны эффекты применения различных методик субпиксельной интерполяции для повышения точности измерения расстояний. Разработана методика автоматического задания размеров окна сканирования при измерении дальности по цифровым изображениям, заключающаяся в вычислении дискретных градиентов изображения объекта с использованием фильтров выделения контрастных границ и в последующем формировании размера окна сканирования на основании анализа контрастных переходов и обеспечивающая повышение достоверности измерений и ускорение обработки контрастных участков изображения. Проведен анализ точности определения положения экстремума корреляционной функции в субпиксельном диапазоне для методик на основе алгоритмов центра масс, параболического и гауссова. Предложена методика повышения точности определения положения экстремума, обеспечивающая неопределенность измерений в сотые доли пикселя.

Ключевые слова: цифровое изображение; стереоизображение; окно сканирования; измерение расстояний; карта глубины.

Образец цитирования:
Козлов В. Л. Оптимизация размера окна сканирования для измерений дальности по цифровым изображениям // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2018. № 2. С. 133–140.

For citation:
Kozlov V. L. Optimizing the scanning window size for the distance measuring from digital images. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2018. No. 2. P. 133–140 (in Russ.).

Автор:
Владимир Леонидович Козлов – доктор технических наук, доцент; профессор кафедры квантовой радиофизики и оптоэлектроники факультета радиофизики и компьютерных технологий.

Author:
Vladimir L. Kozlov, doctor of science (engineering), docent; professor at the department of quantum radiophysics and optoelectronics, faculty of radiophysics and computer technologies. *kozlovvl@bsu.by*

Журнал Белорусского государственного университета. Физика. 2018. № 2. С. 133–140
Journal of the Belarusian State University. Physics. 2018. No. 2. P. 133–140

OPTIMIZING THE SCANNING WINDOW SIZE FOR THE DISTANCE MEASURING FROM DIGITAL IMAGES

V. L. KOZLOV [a]

[a]*Belarusian State University, 4 Niezaliežnasci Avenue, Minsk 220030, Belarus*

The solution of the increasing accuracy task of restoring a three-dimensional space picture based on two-dimensional digital images requires the use of new effective techniques and algorithms for processing and analyzing digital images. The technique for automatically setting the scanning window sizes for digital range measurement is developed, which consists in calculating the discrete image gradients of an object using contrast boundary detection filters and then forming the scanning window size based on the analysis of contrast transitions. This increases the measurement reliability and accelerates the processing of the image contrast areas. An analysis of the determining accuracy of the correlation function extremum position in the subpixel range for techniques based on the center-of-mass, parabolic, and Gaussian algorithms is carried out. The technique for accuracy increasing of the extremum position determining is developed. The technique ensures measurement uncertainty in hundredths of a pixel.

Key words: digital image; stereo image; scanning window; measurement of distances; depth map.

Задача повышения точности восстановления трехмерной картины пространства по двумерным цифровым изображениям является актуальной, ее решение требует использования новых, эффективных методик и алгоритмов обработки анализа цифровых изображений. Значительный прогресс в этой области обусловлен, во-первых, развитием методов проективной геометрии применительно к области компьютерного зрения [1] и, во-вторых, перспективными достижениями в области детектирования характеристических точек на изображениях и их сопоставлением между изображениями [2].

Для снижения временных затрат на обработку стереоизображений и повышения качества построения карт глубины активно разрабатываются инструменты, автоматизирующие этот процесс. Задача точного восстановления карты глубины по видео без дополнительной информации является в общем случае неразрешимой, поэтому для автоматического построения применяются подходы, основанные на минимизации локальных критериев. К ним относятся методы обработки карт глубины, использующие данные о цвете и движении из исходной видеопоследовательности для повышения стабильности карт глубины по времени и исправления ошибок построения. Фильтрация производится с учетом сходства пикселей исходного видео по яркости (цвету) и их пространственной близости [3]. В работе [4] предложен скоростной метод вычисления карты глубины (изображения, каждый пиксель которого содержит информацию о расстоянии до стереокамеры) для реализации на графическом процессоре. Данное решение базируется на использовании нескольких скользящих окон адаптивной структуры с пред- и постобработкой входных и выходных изображений. Высокая производительность достигается за счет архитектуры современных графических процессоров, наиболее подходящих для решения задачи вычисления карты глубины локальными методами [4].

Принцип измерения расстояний по стереоизображению основан на определении разности координат одного и того же объекта на двух цифровых изображениях. Это выполняется по следующему алгоритму. На первом изображении формируется окно сканирования с изображением объекта. Оно автоматически с такими же координатами формируется и на втором снимке. Затем осуществляется сканирование одного окна относительно другого по горизонтали и вертикали, при этом вычисляется значение двумерной нормированной корреляционной функции (англ. normalized cross correlation, NCC) [5] между выделенными изображениями в соответствии с выражениями:

$$R(\Delta u,\, \Delta v) = \frac{\sum\limits_{x,\,y}^{x+\Delta x,\; y+\Delta y} \left(I_1(x,\, y) - \overline{I}_1\right)\left(I_2(x+\Delta u,\; y+\Delta v) - \overline{I}_2\right)}{\sqrt{\sum\limits_{x,\,y}^{x+\Delta x,\; y+\Delta y} \left(I_1(x,\, y) - \overline{I}_1\right)^2 \sum\limits_{x,\,y}^{x+\Delta x,\; y+\Delta y} \left(I_2(x+\Delta u,\; y+\Delta v) - \overline{I}_2\right)^2}}, \quad \overline{I}_n = \frac{\sum\limits_{x,\,y}^{x+\Delta x,\; y+\Delta y} I_n(x,\, y)}{\Delta x \cdot \Delta y},$$

где I_1 – сигнал окна сканирования первого изображения; I_2 – сигнал окна сканирования второго изображения; Δx, Δy – размер сканирующего окна по горизонтали и вертикали соответственно; $n = 1, 2$; Δu, Δv – смещение одного окна сканирования относительно другого по горизонтали и вертикали соответственно.

Однако в литературных источниках отсутствуют сведения об исследованиях, связанных с анализом влияния размера окна сканирования на точность измерения расстояний и достоверность построения карты глубины по стереоизображениям, и об использовании фильтров выделения контрастных переходов для оптимизации размера окна сканирования.

Для нахождения разности координат объекта в плоскостях изображений стереопары на первом изображении задается окно сканирования, содержащее участок исследуемого объекта. Время работы алгоритма измерений и его точность будут различны для разных размеров окон сканирования. В целях повышения достоверности измерений и выбора оптимального размера окна был проведен анализ ошибочных измерений дальности при построении карт глубины, полученных с помощью обработки изображений стереопары функцией NCC с различными размерами окон сканирования. Эталонная карта глубины и карты глубины, полученные в результате обработки изображений алгоритмом NCC с окнами сканирования разных размеров, представлены на рис. 1.

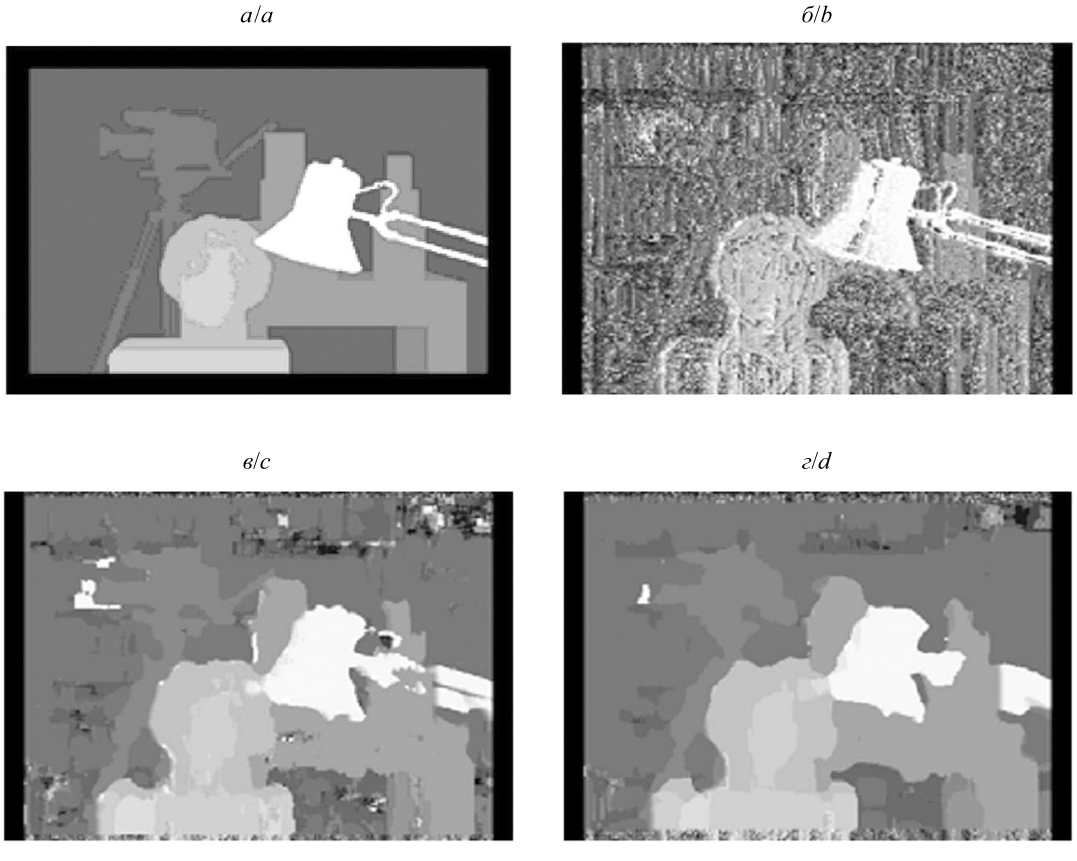


Рис. 1. Карты глубины: эталонная (*а*) и полученные в результате обработки алгоритмом NCC с окнами сканирования 3 × 3 пк (*б*), 9 × 9 пк (*в*), 17 × 17 пк (*г*)

Fig. 1. Depth maps: the reference (*a*) and the resulting NCC algorithm with scanning windows 3 × 3 pixels (*b*), 9 × 9 pixels (*c*), 17 × 17 pixels (*d*)

При малом размере окна сканирования, как видно из рис. 1, карта глубины содержит множество мелких артефактов, а при увеличении размера окна появляются искажения в окрестности границ объектов. Для количественной оценки влияния искажения границ при больших размерах окон сканирования на эффективность построения карты глубины были определены точки ошибочного восстановления дальности, расположенные вблизи границ объектов. Результаты анализа представлены на рис. 2. Графики зависимости общего количества несоответствий между экспериментально полученной картой глубины и эталонной и количества несоответствий вблизи границ объектов в зависимости от размера окна сканирования представлены на рис. 3.

Как видно из графика (рис. 3), увеличение размера окна приводит к снижению общего числа ошибок, но одновременно и к увеличению ошибочных измерений вблизи границ объектов. Для увеличения числа корректных обнаружений, а следовательно, повышения достоверности измерений разработана методика автоматического определения размеров окна сканирования, использующая вычисление градиентов на изображении для выделения контрастных переходов [6].



Рис. 2. Ошибочные точки возле границ объектов при размере окна сканирования 3 × 3 пк (*а*), 17 × 17 пк (*б*)
Fig. 2. Erroneous points near the boundaries of objects with scanning window size of 3 × 3 pixels (*a*), 17 × 17 pixels (*b*)

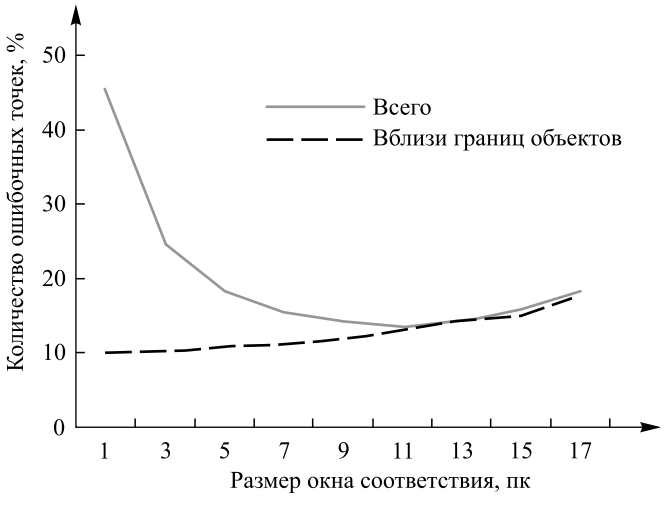


Рис. 3. Зависимость числа ошибок от размера окна сканирования
Fig. 3. Dependence of the number of errors on the scanning window size

Для вычисления дискретных градиентов целесообразно использование операторов Робертса, Превитта и Собела, основанных на свертке изображения с целочисленными фильтрами. Величина отклика операторов вычисляется по формуле

$$|G| = \sqrt{G_x^2 + G_y^2},$$

где G_x, G_y – результаты свертки изображения с соответствующими фильтрами операторов. Маски фильтров и результаты их экспериментального использования представлены на рис. 4.

Оператор Робертса имеет маску фильтра размером 2 × 2 пк, что позволяет рассчитывать его быстрее, чем с помощью операторов Превитта и Собела. У оператора Собела влияние шума угловых элементов меньше, чем у оператора Превитта. У каждой из масок сумма коэффициентов равна нулю, т. е. эти операторы будут давать нулевой отклик на областях постоянной яркости [7]. В результате экспериментального исследования работы фильтров (примеры представлены на рис. 4) показано, что для использования в процедуре автоматического определения размеров окна сканирования целесообразно применять фильтр Собела, поскольку он обладает наибольшей чувствительностью.

Разработанная методика автоматического задания размеров окна сканирования с использованием фильтров выделения контрастных границ объектов для измерения дальности по цифровым изображениям состоит в следующем. В точках, близких к измеряемому объекту, вычисляется градиент яркости изображения, и размер окна сканирования итеративно наращивается до тех пор, пока окно не будет включать в себя достаточно контрастных переходов. Для калибровки параметров методики, определения максимального и минимального размеров окна сканирования, а также порогового значения S были проведены экспериментальные исследования. При получении карт глубины для серии из 18 стереопар

Оператор Превитта

G_x

–1	–1	–1
0	0	0
1	1	1

G_y

–1	0	1
–1	0	1
–1	0	1



Оператор Робертса

G_x

–1	0
0	1

G_y

0	–1
1	0



Оператор Собела

G_x

–1	–2	–1
0	0	0
1	2	1

G_y

–1	0	1
–2	0	2
–1	0	1



Рис. 4. Маски операторов выделения границ и примеры их работы
Fig. 4. Masks of border allocation operators and an examples of their operation

с известной эталонной картой глубины [8] размер окна, определяющего область поиска соответствий, варьировался в диапазоне от 1 до 17 пк. Критерием в экспериментальных данных выступает доля значений рассчитанной карты глубины, которые отличаются от эталона.

В качестве минимального и максимального размеров окон сканирования для дальнейшего использования в измерителе расстояний были выбраны величины 5×5 и 15×15 пк соответственно. При условии некорректного выбора пороговой величины для фильтра Собела такие ограничения позволяют сократить число ошибок в случаях как слишком большого порога, так и слишком малого. В качестве порогового значения для фильтра Собела была принята величина $S = 3{,}3$ (яркость изображения равна нулю для черного цвета и единице – для белого).

Экспериментальные результаты показали, что данная методика выбора размера окна сканирования позволяет снизить время обработки контрастных участков, а для менее контрастных областей, не содержащих резких перепадов яркости, не снижает точности работы корреляционной методики.

Для определения расстояния до объекта необходимо измерить разность координат объекта (диспаритет) в плоскостях первого и второго изображений стереопары. Это осуществляется с помощью автоматического сканирования одного изображения относительно другого по экстремальному значению корреляционной функции, которое обеспечивает измерение сдвига между изображениями с разрешением 1 пк [9]. Для повышения точности измерений необходимо определять положения экстремума корреляционной функции в пределах 1 пк с использованием субпиксельной обработки цифрового изображения. В [10] предлагаются три алгоритма субпиксельной интерполяции: центра масс, параболический и гауссов. Для их реализации необходимо определить три измеренных значения корреляционной функции R_0, R_{-1} и R_{+1}, где R_0 – экстремальное значение функции; R_{-1}, R_{+1} – значения функции в точках, ближайших к экстремальному. Выражения, которые реализуют алгоритмы нахождения положения экстремума функций, используемых для корреляционной обработки изображений в субпиксельном диапазоне, имеют следующий вид:

$$\Delta x_{\text{Center of mass}} = \frac{R_{+1} - R_{-1}}{R_{-1} + R_0 + R_{+1}},$$

$$\Delta x_{\text{Parabolic}} = \frac{R_{-1} - R_{+1}}{2\left(R_{-1} - 2R_0 + R_{+1}\right)},$$

$$\Delta x_{\text{Gaussian}} = \frac{\ln R_{-1} - \ln R_{+1}}{2\left(\ln R_{-1} - 2\ln R_0 + \ln R_{+1}\right)}.$$

Для анализа точности субпиксельной обработки представленных алгоритмов определения экстремума для функций NCC и NSSD (нормированная сумма квадратов разностей; англ. normalized sum of squared differencies [5]) разработана следующая методика. Были взяты тестовые стереоизображения одних и тех же объектов, различающиеся по размерам снимков. По каждому объекту на стереоизображении был получен набор NCC- и NSSD-функций высокого разрешения, основное отличие которых состоит в том, что в точке максимального соответствия фрагментов изображений значение функции NCC будет иметь максимум, а значение функции NSSD – минимум. Очевидно, что в зависимости от размера окна сканирования и типа объекта на изображении кривизна рассматриваемых функций будет различаться.

Из полученных функций методом прореживания были сформированы наборы тестовых данных. Для функции NCC выбирались 3 точки – x_m, $x_{m+\Delta}$ и $x_{m-\Delta}$ – со значениями функции $R\left(x_m\right)$, $R\left(x_{m+\Delta}\right)$ и $R\left(x_{m-\Delta}\right)$ соответственно. При этом точка x_m не обязательно попадает в абсолютный максимум функции, но выполняется $R\left(x_m\right) > R\left(x_{m+\Delta}\right)$ и $R\left(x_m\right) > R\left(x_{m-\Delta}\right)$. Все тройки точек, относящиеся к одному графику функции, представляют собой одну выборку. Для функции NSSD производились аналогичные операции вблизи минимума с условиями $R\left(x_m\right) < R\left(x_{m+\Delta}\right)$ и $R\left(x_m\right) < R\left(x_{m-\Delta}\right)$. Тестовые данные для всех объектов на изображениях обрабатывались в соответствии с алгоритмами центра масс, параболическим и гауссовым. Полученные результаты анализа для функции NCC представлены в табл. 1, для функции NSSD – в табл. 2. Вычисленные величины отклонений субпиксельной интерполяции даны в пикселях.

Таблица 1

Результаты анализа неопределенности субпиксельной интерполяции для функции NCC

Table 1

Results of uncertainty analysis of subpixel interpolation for the NCC function

Позиция теста	Алгоритм интерполяции, пк		
	Центр масс	Параболический	Гауссов
Среднее отклонение по модулю	0,224 533	0,056 691	0,056 772
Дисперсия	0,011 721	0,000 257	0,000 186
Максимальное отклонение по модулю по всему полю данных	0,561 597	0,215 587	0,215 837

Таблица 2

Результаты анализа неопределенности субпиксельной интерполяции для функции NSSD

Table 2

Results of uncertainty analysis of subpixel interpolation for the NSSD function

Позиция теста	Алгоритм интерполяции, пк		
	Центр масс	Параболический	Гауссов
Среднее отклонение по модулю	0,615 477	0,054 405	0,113 914
Дисперсия	0,120 106	0,000 257	0,005 232
Максимальное отклонение по модулю по всему полю данных	1,233 278	0,215 587	0,275 442

Полученные результаты свидетельствуют о том, что наибольшую неопределенность оценки положения экстремума как для функции NCC, так и для NSSD имеет алгоритм центра масс. Параболический метод и метод Гаусса дают приблизительно одинаковые результаты для функции NCC. При определении положения минимума функции NSSD наименьшую неопределенность оценки положения экстремума показал параболический метод. Также необходимо отметить, что вычислительные затраты на реализацию параболического метода меньше, чем метода Гаусса.

В результате проведенного анализа получено, что параболический метод оценки положения экстремума корреляционной функции обладает минимальной неопределенностью и является наиболее универсальным, так как позволяет одинаково хорошо определять положения как максимума, так и минимума функций, реализующих корреляционную обработку. Установлено, что средняя относительная неопределенность оценки положения экстремума для параболического метода не превышает 6 %.

Для повышения точности измерений с использованием субпиксельной обработки была разработана следующая методика. В окрестности точки экстремума корреляционной функции, полученного на этапе грубой оценки с точностью до 1 пк, с помощью билинейной интерполяции строится сетка ячеек, соответствующих узлам интерполяции интенсивности с шагом $h = \frac{1}{k}$ пк, где k – целое число, определяющее количество узлов сетки интерполяции ($k = 5\ldots20$). Интенсивность $I\left(x + ih,\ y + jh\right)$ узла сетки вычисляется из выражения [11]

$$I\left(x + ih,\ y + jh\right) = \left(1 - ih\right)\left(1 - jh\right) \cdot I\left(x, y\right) + \left(1 - jh\right)ih \cdot I\left(x + 1, y\right) + \\ + \left(1 - ih\right)jh \cdot I\left(x, y + 1\right) + ijh^2 \cdot I\left(x + 1,\ y + 1\right),$$

где i, j – горизонтальный и вертикальный индексы узла соответственно; $I\left(x, y\right)$ – интенсивность пикселей изображения. Затем осуществляется повторное сканирование и в результате вычисляются значения корреляционной функции для k^2 узлов сетки. После этого для уточнения положения максимума корреляционной функции в субпиксельном диапазоне целесообразно использовать параболическую интерполяцию корреляционной функции вблизи найденного экстремума. Билинейная интерполяция интенсивности дает разрешение в пределах 1 пк, равное $\frac{1}{k}$, а параболическая интерполяция имеет среднюю относительную неопределенность 6 %. Использование такой последовательности действий позволяет при определении сдвига достичь разрешения в сотые доли пикселя при $k = 5\ldots10$.

В отличие от известных [10; 11] в предлагаемой методике субпиксельной обработки в области максимума корреляционной функции осуществляется билинейная интерполяция интенсивности (а не значения корреляционной функции), и после этого выполняется повторное сканирование и вычисление значений корреляционной функции для всех узлов области интерполяции. Затем проводится параболическая интерполяция корреляционной функции вблизи найденного максимума. Это позволяет повысить точность субпиксельной обработки по сравнению с [10; 11]. Кроме того, в разработанной методике выполняется двумерная субпиксельная интерполяция, что обеспечивает дополнительное повышение точности измерения расстояний.

Библиографические ссылки

1. *Hartley R., Zisserman A.* Multiple view geometry in computer vision. Cambridge : Cambridge Univ. Press, 2004.

2. *Tuytelaars T., Mikolajczyk K.* Local invariant feature detectors: a survey // Found. and trends in comput. graph. and vision. 2008. Vol. 3, issue 3. P. 177–280. DOI: 10.1561/0600000017.

3. *Simonyan K., Grishin S., Vatolin D.* Confidence measure for block-based motion vector field // Computer Graphics and Vision (GraphiCon'2008) : proc. of XVIII Int. conf. (Moscow, 23–27 June, 2008). Moscow, 2008. P. 110–113.

4. *Котюжанский Л. А.* Вычисление карты глубины стереоизображения на графическом процессоре в реальном времени // Фундам. исслед. : в 2 ч. 2012. № 6, ч. 2. С. 444–449.

5. *Brown M. Z., Burschka D., Hager G. D.* Advances in computational stereo // IEEE Trans. on Pattern Anal. and Mach. Intell. 2003. Vol. 25, issue 8. P. 993–1008. DOI: 10.1109/TPAMI.2003.1217603.

6. *Козлов В. Л., Васильчук А. С.* Оптимизация размера окна сканирования с помощью фильтра Собела в дальномере на цифровой фотокамере // Квантовая электроника : материалы X Междунар. науч.-техн. конф. (Минск, 9–13 нояб. 2015 г.). Минск, 2015. С. 213.

7. *Гонсалес Р., Вудс Р.* Цифровая обработка изображений. М. : Техносфера, 2005.

8. Middlebury stereo datasets. URL: http://vision.middlebury.edu/stereo/data (date of access: 14.09.2013).

9. Способ измерения расстояний на цифровой фотокамере : пат. 2485443 Рос. Федерации, МКИ G 01 C 3/00 / В. Л. Козлов ; заявитель Белорус. гос. ун-т. № 2011151194/28 ; заявл. 14.12.11 ; опубл. 20.06.13 // Бюллетень. 2013. № 17.

10. *Tropea C., Yarin A. L., Foss J. F.* Springer handbook of experimental fluid mechanics. Springer, 2007.

11. *Козлов В. Л., Васильчук А. С.* Субпиксельная обработка изображений для измерения дальности на основе цифровой фотокамеры // Приборы и методы измерений. 2012. № 1 (4). С. 115–120.

References

1. Hartley R., Zisserman A. Multiple view geometry in computer vision. Cambridge : Cambridge Univ. Press, 2004.

2. Tuytelaars T., Mikolajczyk K. Local invariant feature detectors: a survey. *Found. and trends in comput. graph. and vision.* 2008. Vol. 3, issue 3. P. 177–280. DOI: 10.1561/0600000017.

3. Simonyan K., Grishin S., Vatolin D. Confidence measure for block-based motion vector field. *Computer Graphics and Vision (GraphiCon'2008)* : proc. of XVIII Int. conf. (Moscow, 23–27 June, 2008). Moscow, 2008. P. 110–113.

4. Kotyuzhansky L. A. Calculation of the stereoimage depth card on the graphic processor in real time. *Fundam. res.* : in 2 parts. 2012. No. 6, part 2. P. 444–449 (in Russ.).

5. Brown M. Z., Burschka D., Hager G. D. Advances in computational stereo. *IEEE Trans. on Pattern Anal. and Mach. Intell.* 2003. Vol. 25, issue 8. P. 993–1008. DOI: 10.1109/TPAMI.2003.1217603.

6. Kozlov V. L., Vasilchuk A. S. [Optimizing the size of the scanning window using the Sobel filter in the range finder on a digital camera]. *Kvantovaya elektronika* : mater. X Int. sci.-tech. conf. (Minsk, 9–13 Novemb., 2015). Minsk, 2015. P. 213 (in Russ.).

7. Gonzalez R., Woods R. Digital image processing. Moscow : Tekhnosfera, 2005 (in Russ.).

8. Middlebury stereo datasets. URL: http://vision.middlebury.edu/stereo/data (date of access: 14.09.2013).

9. Sposob izmereniya rasstoyanii na tsifrovoi fotokamere [Method for measuring distances on a digital camera] : pat. 2485443 Russ. Fed., MKI G 01 C 3/00 / V. L. Kozlov ; declarer Belarus. State Univ. No. 2011151194/28 ; declar. 14.12.11 ; publ. 20.06.13. *Bul.* 2013. No. 17 (in Russ.).

10. Tropea C., Yarin A. L., Foss J. F. Springer handbook of experimental fluid mechanics. Springer, 2007.

11. Kozlov V. L., Vasilchuk A. S. [Subpixel image processing for distance measurement based on a digital camera]. *Prib. i metody izmer.* 2012. No. 1 (4). P. 115–120 (in Russ.).

Статья поступила в редколлегию 23.03.2018.
Received by editorial board 23.03.2018.

Астрофизика

Astrophysics

УДК 530.12

ВРЕМЯ ВИДИМОСТИ ПУЛЬСАРА, ДВИЖУЩЕГОСЯ ВО ВНЕШНЕМ СИЛЬНОМ ГРАВИТАЦИОННОМ ПОЛЕ

С. О. КОМАРОВ[1)]

[1)]*Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Беларусь*

Рассмотрена задача о распространении излучения пульсара, движущегося во внешнем гравитационном поле. Получены соотношения, позволяющие вычислить интервалы времени, в которые пульсар не может быть зарегистрирован наземным наблюдателем. При этом проанализированы общерелятивистские эффекты, связанные как с искривлением траектории луча света, распространяющегося от пульсара к наблюдателю во внешнем гравитационном поле, так и с прецессией оси вращения пульсара, обусловленной взаимодействием его собственного момента импульса с внешним гравитационным полем. Показано, что в общем случае излучение пульсара, движущегося вблизи сверхмассивной черной дыры, может быть зарегистрировано наземным наблюдателем лишь в конечные интервалы времени, при этом их продолжительность может иметь порядок периода обращения пульсара вокруг черной дыры. Обсуждается возможность применения полученных результатов при поиске и исследовании пульсаров в окрестности центра Галактики. Построена численная модель, позволяющая определять время видимости пульсара для различных параметров его движения. Вследствие общерелятивистского рассмотрения данной задачи результаты оказываются справедливыми и для случая, когда пульсар движется в непосредственной близости от горизонта событий сверхмассивной черной дыры.

Ключевые слова: внешнее гравитационное поле; гравитационное линзирование; пульсар; центр Галактики.

Благодарность. Автор благодарит научного руководителя профессора А. К. Горбацевича и коллегу А. Н. Тарасенко за полезные замечания и обсуждение материала в процессе подготовки работы.

Образец цитирования:
Комаров С. О. Время видимости пульсара, движущегося во внешнем сильном гравитационном поле // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2018. № 2. С. 141–150.

For citation:
Komarov S. O. Observability time for the pulsar that moves in external strong gravitational field. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2018. No. 2. P. 141–150 (in Russ.).

Автор:
Станислав Олегович Комаров – аспирант кафедры теоретической физики и астрофизики физического факультета. Научный руководитель – доктор физико-математических наук, профессор А. К. Горбацевич.

Author:
Stanislav O. Komarov, postgraduate student at the department of theoretical physics and astrophysics, faculty of physics.
staskomarov@tut.by

Журнал Белорусского государственного университета. Физика. 2018. № 2. С. 141–150
Journal of the Belarusian State University. Physics. 2018. No. 2. P. 141–150

OBSERVABILITY TIME FOR THE PULSAR THAT MOVES IN EXTERNAL STRONG GRAVITATIONAL FIELD

S. O. KOMAROV [a]

[a]*Belarusian State University, 4 Niezaliežnasci Avenue, Minsk 220030, Belarus*

The problem of propogation of radiation of pulsar that moves in external gravitational field is considered in the article. The relations for the calculation of the intervals of time when the pulsar can not be observed are obtained. The general relativistic effects caused by two different mechanisms are analysed. The first one is determined by the twisted trajectories of light that propogates to the observer, and the second one by the precession of the rotation axis of pulsar due to interaction of the spin angular momentum of the pulsar with external gravitational field. It is shown that the radiation from pulsar that moves in the vicinity of supermassive black hole can be detected by Earth observer only in certain intervals of time. These intervals can have length of order of the period of pulsar motion aroud the black hole. The possibilities of application of these results to the investigation of the pulsars in the vicinity of the Galactic Center are discussed. The numerical model that gives possibilities for calculating of the time of observability of pulsar for distinct parameters of motion of pulsar is presented. Due to the general relativistic consideration of the problem in this paper it is possible to use our results for the pulsar that is close to a supermassive black hole event horison.

Key words: extarrnal gravitational field; gravitational lensing; pulsar; Galactic Center.

Acknowledgements. The author acknowledge scientific adviser professor A. K. Gorbatsievich and colleague A. N. Tarasenko for helpful discussions and comments in the time of the preparation of the paper.

Введение

Многолетние астрофизические исследования движения объектов в окрестности центра Галактики позволяют отождествить находящийся в галактическом центре компактный радиоисточник Sagittarius A* со сверхмассивной черной дырой массой $M \approx 4 \cdot 10^6 M_\odot$, где $M_\odot$ – масса Солнца (масса Солнца в геометрических единицах $M_\odot \approx 1{,}477$ км) [1–3]. Это позволило предложить множество тестов для различных теорий гравитации как в случае слабого поля, так и при учете эффектов сильного гравитационного поля [3–6]. В настоящее время основные наблюдательные данные, представляющие интерес с данной точки зрения, получают из исследований движения S-звезд, образующих наиболее близкое к центру Галактики звездное скопление [2]. Однако есть множество наблюдательных и теоретических данных, позволяющих сделать вывод о существовании также и большого числа пульсаров в этой области [7; 8].

В отличие от S-звезд нейтронные звезды, в силу малости их размера, могут находиться на существенно более близком расстоянии от горизонта событий черной дыры, не будучи разрушенными приливными силами [3; 7]. При этом наибольший интерес представляет исследование нейтронных звезд, являющихся пульсарами. Промежутки времени между регистрируемыми импульсами электромагнитного излучения пульсаров одинаковы в собственной системе отсчета пульсара с очень высокой степенью точности [9]. Это позволяет с большой точностью измерять различные релятивистские эффекты, определяющие их движение, путем вычисления промежутков времени между импульсами, зарегистрированными наблюдателем, находящимся на Земле [3; 5; 7].

Особенности наблюдения пульсаров, как и других анизотропных источников, движущихся в сильных гравитационных полях, выражаются и в том, что время их видимости состоит из отдельных интервалов. Этот эффект может быть следствием как прецессии оси вращения пульсара, обусловленной взаимодействием с внешними объектами, например со своим же спутником, так и общерелятивистских эффектов. Последние наиболее значимы в случае, когда пульсар находится в сильном гравитационном поле (например, достаточно близок к сверхмассивной черной дыре). Наличие же спутника может быть установлено при исследовании теоретических моделей, описывающих свойства принимаемого от пульсара излучения. В данной работе мы рассматриваем только одиночные пульсары, не имеющие достаточно массивных спутников.

Влияние общерелятивистских эффектов, определяющих интервалы времени видимости пульсара земным наблюдателем, можно условно представить в виде действия двух факторов: прецессии оси вращения пульсара, вызванной взаимодействием его собственного момента импульса с внешним гравитационным полем, и искривления траектории луча света внешним гравитационным полем. Оба эффекта были описаны и проанализированы в ряде работ [10; 11], однако авторы их, как правило, ограничиваются приближением слабого поля, учитывая в уравнениях слагаемые, определяющие релятивистскую аберрацию света

и отклонение его траектории гравитационным полем (порядок $\frac{v}{c}$ и $\frac{M}{r}$ соответственно, где c – скорость света в вакууме; v – скорость движения пульсара по орбите; r – расстояние от пульсара до сверхмассивной черной дыры). Поэтому в указанных работах авторы либо считают направление оси вращения пульсара постоянным в некоторой фиксированной системе координат [11], либо используют преобразования Лоренца для вычисления угла, под которым распространяется излучение от пульсара, по отношению к плоскости орбиты самого пульсара при его релятивистском движении [10]. Мы учли также и геодезическую прецессию спина, имеющую порядок $\frac{M^2}{r^2}$.

Постановка задачи

Цель работы – построение метода вычисления интервалов времени, в течение которых наземным наблюдателем может быть виден пульсар, движущийся во внешнем гравитационном поле.

Для исследования приходящего излучения необходимо рассмотреть сам пульсар, особенности его движения и излучения. Пульсар представляет собой нейтронную звезду, излучение которой сосредоточено в направлении, заданном между двумя коническими поверхностями, с вершиной, примерно совпадающей с геометрическим центром нейтронной звезды [10; 11]. Пусть указанные конические поверхности имеют углы полураствора α_1 и α_2 соответственно (рис. 1).

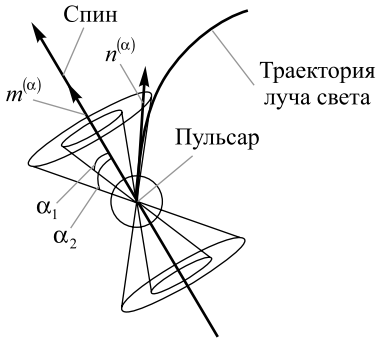


Рис. 1. Относительное положение собственного момента импульса, траектории луча света и конуса излучения пульсара: $n^{(\alpha)}$ – единичный вектор луча света, излучаемого пульсаром; $m^{(\alpha)}$ – единичный вектор, направленный вдоль спина пульсара (см. (9))

Fig. 1. Relative position of intrinsic angular momentum, trajectory of the light ray and the cone of radiation of pulsar: $n^{(\alpha)}$ is the unit vector of the ray of light that is emitted by pulsar; $m^{(\alpha)}$ is the unit spin vector (see (9))

Так как результаты нашего исследования наиболее интересны с точки зрения использования их при изучении излучения пульсаров, движущихся во внешнем поле сверхмассивной черной дыры, находящейся в центре нашей Галактики, то мы подробно рассмотрим именно этот случай. Гравитационное поле астрофизических черных дыр может быть описано метрикой Керра (в случае вращающейся черной дыры) или метрикой Шварцшильда (в случае не вращающейся черной дыры). В данной работе ограничимся более простым случаем внешнего гравитационного поля Шварцшильда. Однако заметим, что предложенный нами метод может быть применен и в случае метрики Керра.

Наблюдения пульсаров обычно производятся на длинах волн $\lambda \lesssim 10^2$ м. Так как масштаб размеров всех объектов, используемых в нашей задаче, можно считать гораздо большим, то мы будем применять приближение геометрической оптики [12]. При этом мировая линия луча света будет соответствовать изотропным геодезическим в рассматриваемом внешнем гравитационном поле (гравитационным полем самого пульсара пренебрегаем).

Уравнения движения пульсара

В рамках данной задачи пульсар рассматривается как материальная точка со спином, движение которой, как известно, описывается уравнениями Матиссона – Папапетру [13]. Если пренебречь членами, квадратичными по спину, эти уравнения можно представить в виде

$$\begin{cases} \dfrac{Du^i}{D\tau} = -\dfrac{1}{2c} R^i_{mnk} \varepsilon^{nkls} u^m u_s S_l, \\ \dfrac{DS^i}{D\tau} = -\dfrac{1}{c^2} u^i S_n \dfrac{Du_n}{D\tau}, \\ S^i u_i = 0, \end{cases} \tag{1}$$

где u^i – вектор 4-скорости пульсара; τ – собственное время пульсара; R^i_{mnk} – тензор кривизны; ε^{nkls} – псевдотензор Леви – Чивита; S^i – вектор спина пульсара. В случае реалистичных значений параметров,

например таких, как приведенные ниже, из уравнений (1) следует, что в хорошем приближении мировая линия пульсара будет геодезической $\left(\frac{Du^i}{D\tau}=0\right)$. При этом вектор спина пульсара переносится параллельно $\left(\frac{DS^i}{D\tau}=0\right)$.

Для наших дальнейших целей в каждой из точек мировой линии пульсара удобно ввести сопутствующий ортонормированный базис, образуемый четырьмя векторами $h^i_{(m)}$ (тетрадой). Один из векторов тетрады выберем таким образом, чтобы он был параллелен 4-скорости пульсара:

$$h^i_{(4)}=\frac{u^i}{c}.$$

Тогда по построению имеем соотношения:

$$h^i_{(m)}h_{i(n)}=\eta_{(m)(n)},$$

где $\eta_{(m)(n)}$ – компоненты тензора Минковского.

В общем случае векторы тетрады, построенной в различных точках этой геодезической, будут отличаться от параллельно перенесенных векторов преобразованием поворота. Оно характеризуется угловой скоростью $\omega^{(\alpha)}$:

$$\omega^{(\alpha)}=\frac{1}{2}e^{(\alpha)(\beta)(\gamma)}h_{(\gamma)i}\frac{Dh^i_{(\beta)}}{D\tau},$$

где $e^{(\alpha)(\beta)(\gamma)}$ – символ Леви – Чивита в 3-мерном пространстве. Тогда в сопутствующем базисе получим

$$\frac{DS^{(\alpha)}}{D\tau}=-e^{(\alpha)(\beta)(\gamma)}\omega_{(\beta)}S_{(\gamma)}, \tag{2}$$

где $S^{(\alpha)}=h^{(\alpha)}_i S^i$.

Из (2) следует, что эволюция вектора $S^{(\alpha)}$ во времени представляет собой его вращение с угловой скоростью $-\omega_{(\beta)}$, т. е. прецессию.

Вычисление интервалов видимости пульсара

Метрика Шварцшильда имеет следующий вид:

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

где (r, θ, φ, t) – координаты Шварцшильда; M – масса центрального тела, создающего поле, в геометрических единицах $(M=\frac{Gm}{c^2}$, где G – гравитационная постоянная; m – масса тела).

Как отмечено выше, мировую линию пульсара в хорошем приближении можно считать геодезической. В случае рассматриваемой здесь метрики Шварцшильда движение пульсара в данном приближении будет плоским. В дальнейшем через K будем обозначать систему координат, в которой траектория пульсара лежит в экваториальной плоскости $\theta=\frac{\pi}{2}$. В системе координат K компоненты 4-скорости принимают вид [12]

$$\frac{d\theta}{d\tau}=u^2=0,\ \frac{d\varphi}{d\tau}=u^3=\frac{L}{r^2},$$

$$\frac{cdt}{d\tau}=u^4=\frac{E}{c\left(1-\frac{2M}{r}\right)}, \tag{3}$$

$$\frac{dr}{d\tau}=u^1=\pm\sqrt{\frac{E^2}{c^2}-\left(1-\frac{2M}{r}\right)\left(c^2+\frac{L^2}{r^2}\right)},$$

где L и E – удельные (т. е. отнесенные к массе) орбитальный момент импульса и энергия пульсара. Уравнения (3) могут быть решены численно.

Рассмотрим теперь задачу о распространении излучения от пульсара к наблюдателю. Касательный вектор к изотропной геодезической, вдоль которой оно распространяется, обозначим k^i. Он удовлетворяет уравнениям:

$$k^i{}_{;j}k^j = 0 \text{ и } k^i k_i = 0.$$

Тогда волновым вектором регистрируемого излучения будет касательный вектор к такой изотропной геодезической, которая пересекает как мировую линию источника в момент излучения, так и мировую линию наблюдателя в момент приема излучения (рис. 2).

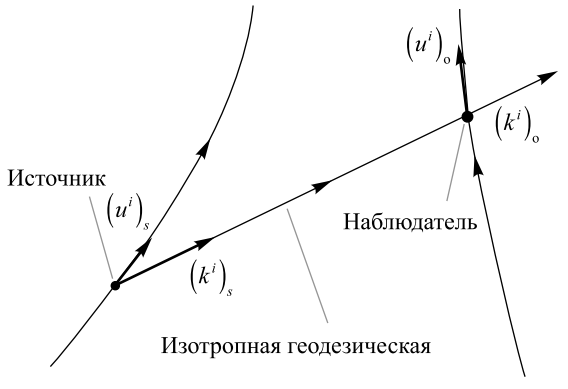


Рис. 2. Изотропная геодезическая, изображающая мировую линию луча света, регистрируемого наблюдателем

Fig. 2. The izotropic geodesic that describes the world line of light propogating to the observer

Для нахождения волнового вектора, касательного к изотропной геодезической, перейдем в другую систему координат $\tilde{K}$, в которой траектория луча света лежит в экваториальной плоскости $\tilde{\theta} = \frac{\pi}{2}$:

$$\frac{d\tilde{\theta}}{d\lambda} = k^2 = 0,\ \frac{d\tilde{\varphi}}{d\lambda} = k^3 = \frac{D\omega_0}{c\tilde{r}^2},$$

$$c\frac{d\tilde{t}}{d\lambda} = k^4 = \frac{\omega_0}{c\left(1 - \frac{2M}{\tilde{r}}\right)}, \tag{4}$$

$$\frac{d\tilde{r}}{d\lambda} = k^1 = \pm\frac{\omega_0}{c}\sqrt{1 - \left(1 - \frac{2M}{\tilde{r}}\right)\frac{D^2}{\tilde{r}^2}},$$

где λ – аффинный параметр вдоль изотропной геодезической; D – интеграл движения, имеющий смысл прицельного параметра луча; ω_0 – интеграл движения, имеющий смысл частоты света, принимаемого земным наблюдателем, т. е. наблюдателем, находящимся на бесконечности.

Воспользуемся аналитическим решением системы уравнений (4) [14]:

$$\frac{1}{\tilde{r}(\tilde{\varphi})} = \frac{Qk^2}{2PM}cn^2\left(\left[\frac{\tilde{\varphi}}{2}\sqrt{\frac{Q}{P}} + F\left(\arccos\left(\sqrt{\frac{2M}{Qk^2}}\right), k\right)\right], k\right), \tag{5}$$

где

$$Q = \sqrt{P^2 + 4MP - 12M^2},\ k = \sqrt{\frac{Q - P + 6M}{2Q}}. \tag{6}$$

Здесь функция $\tilde{r}(\tilde{\varphi})$ выражает зависимость радиальной шварцшильдовской координаты $\tilde{r}$ от полярного угла $\tilde{\varphi}$; $cn(\varphi, k)$ – эллиптический косинус Якоби; $F[\varphi, k]$ – эллиптический интеграл первого рода,

определенный в [15]; P – перицентр траектории луча, который связан с прицельным параметром соотношением

$$D^2 = \frac{P^3}{P - 2M}. \tag{7}$$

Заметим, что для некоторых траекторий перицентра может и не существовать. В этих случаях решение снова можно описать с помощью формул (5), (6), где P – произвольный комплексный корень уравнения (7).

Полярный угол φ в системе отсчета K связан с полярным углом $\tilde{\varphi}$ в системе отсчета $\tilde{K}$ (рис. 3) соотношением

$$\tilde{\varphi} = \arccos\left(\cos(\varphi)\sin(i)\right), \tag{8}$$

где i – наклонение орбиты.

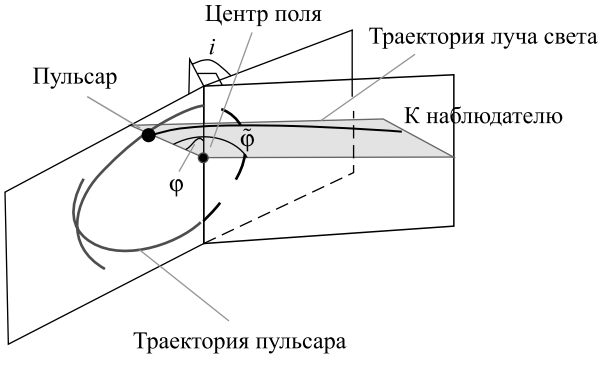


Рис. 3. К выводу формулы (8)
Fig. 3. To the derivation of formula (8)

Тогда решение граничной задачи, позволяющее определить значение волнового вектора в момент испускания излучения, сводится к решению следующего нелинейного алгебраического уравнения для каждой из рассматриваемых точек пространства-времени, определяемых в фиксированной плоскости полярным углом $\tilde{\varphi}$ и радиальной координатой $\tilde{r}$:

$$\tilde{r}\left(\tilde{\varphi},\, P\right) = r.$$

Решая его численно, находим параметр P для каждой из точек пространства, в которых находится источник, а с помощью соотношений (4) – компоненты волнового вектора.

Определим волновой вектор $k^{(\alpha)}$, касательный к траектории луча, единичный волновой вектор $n^{(\alpha)}$, а также единичный вектор $m^{(\alpha)}$, направленный вдоль вектора момента импульса пульсара, с помощью соотношений:

$$k^{(\alpha)} = \left(h_i^{(\alpha)} k^i\right)_{\text{source}},\ n^{(\alpha)} = \frac{k^{(\alpha)}}{\sqrt{k^{(\beta)} k_{(\beta)}}},\ m^{(\alpha)} = \frac{S^{(\alpha)}}{\sqrt{S^{(\beta)} S_{(\beta)}}}. \tag{9}$$

Здесь индекс «source» означает, что выражение необходимо вычислять в точке излучения; $S^{(\beta)} = h_i^{(\beta)} S^i$.

Из (2) следует, что вектор $m^{(\alpha)}$ будет вращаться с угловой скоростью $\omega_{(\alpha)}$. Мы выбрали векторы тетрады следующим образом:

$$h^i_{(1)} = \frac{r}{c^2\sqrt{r^2 + L^2}}\left\{\frac{L\gamma}{r};\, 0;\, \frac{c^2 r^2 + L^2}{r^3};\, \frac{LE}{(r - 2M)c}\right\},\ h^i_{(2)} = \frac{r}{\sqrt{r^2 + L^2}}\left\{-\frac{E}{c^2};\, 0;\, 0;\, \frac{-\gamma r^2}{Mc(r - 2M)}\right\},$$

$$h^i_{(3)} = \left\{0;\, -\frac{1}{r};\, 0;\, 0\right\};\ h^i_{(4)} = \left\{\frac{\gamma}{c};\, 0;\, \frac{L}{cr^2};\, \frac{Er}{(r - 2M)c}\right\},$$

где

$$\gamma = \sqrt{\frac{E^2}{c^2} - \left(1 - \frac{2M}{r}\right)\left(c^2 + \frac{L^2}{r^2}\right)}\,\text{sign}\left(\frac{dr}{d\tau}\right).$$

В выбранном базисе вектор угловой скорости имеет вид

$$\omega^{(\alpha)} = \left\{0;\ 0;\ \frac{LE}{\left(r^2 + L^2\right)c^2}\right\}.$$

Очевидно, что пульсар может быть виден наблюдателем только тогда (см. рис. 1), когда выполняется условие

$$\cos\left(\alpha_1\right) < \left|n^{(\beta)} m_{(\beta)}\right| < \cos\left(\alpha_2\right). \tag{10}$$

Так как вектор $m^{(\alpha)}$ является единичным, для его нахождения требуется задание двух параметров – φ_P и θ_P, определяющих ориентацию вектора собственного момента импульса. Эти параметры можно выбрать так, чтобы выполнялись соотношения:

$$m^{(1)} = \cos\left(\varphi_P - \varphi_\omega(\tau)\right)\sin\left(\theta_P\right),\ \ m^{(2)} = \sin\left(\varphi_P - \varphi_\omega(\tau)\right)\sin\left(\theta_P\right)\sin\left(\theta_P\right),$$

$$m^{(3)} = \cos\left(\theta_P\right),$$

где функция $\varphi_\omega(\tau) = \int_0^\tau \omega^{(3)} d\tau$ – угол поворота собственного момента импульса пульсара за собственное время τ в сопутствующем базисе.

Таким образом, значения интегралов движения E, L, углов полураствора конусов излучения α_1, α_2, а также двух независимых параметров φ_P и θ_P образуют полную систему параметров, задающую интервалы времени, в течение которых пульсар может быть зарегистрирован наблюдателем.

Результаты и их обсуждение

Нами выполнены вычисления по представленному выше алгоритму для случая движения пульсара во внешнем гравитационном поле Шварцшильда. Результаты моделирования представлены на рис. 4–7.

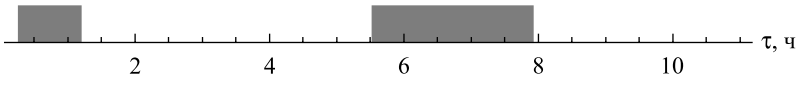


Рис. 4. Интервалы видимости пульсара. Закрашенные области на оси времени соответствуют интервалам времени, когда пульсар может быть виден наблюдателю на Земле. Параметры орбитального движения пульсара: $E = 0{,}98$ с^2; $L = 5{,}24$ Мс. Принято: масса сверхмассивной черной дыры $M = 4 \cdot 10^6 M_\odot$. При этих данных период радиального движения пульсара $T = 6{,}85$ ч. Параметры, характеризующие ориентацию оси вращения пульсара и его конус излучения (в радианах): $i = 0$; $\varphi_P = 0$; $\theta_P = 0$; $\alpha_1 = 0{,}05$; $\alpha_2 = 0{,}2$

Fig. 4. Time intervals of visibility of pulsar. Painted regions are correspond to the intervals of time when the obseration of pulsar by the Earth observer is possible. Parameters of orbital motion of pulsar are following: $E = 0.98$ s^2; $L = 5.24$ Ms. We assume that the mass of supermassive black hole is $M = 4 \cdot 10^6 M_\odot$. Consequently the period of the radial motion of the pulsar is $T = 6.85$ h. Parameters of orientation of the pulsar rotation axis and the cone of pulsar radiation (are following): $i = 0$; $\varphi_P = 0$; $\theta_P = 0$; $\alpha_1 = 0.05$; $\alpha_2 = 0.2$

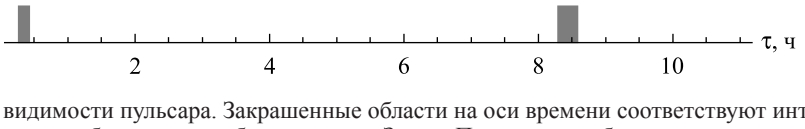


Рис. 5. Интервалы видимости пульсара. Закрашенные области на оси времени соответствуют интервалам времени, когда пульсар может быть виден наблюдателю на Земле. Параметры орбитального движения пульсара: $E = 0{,}98$ с^2; $L = 5{,}24$ Мс. Принято: масса сверхмассивной черной дыры $M = 4 \cdot 10^6 M_\odot$. При этих данных период радиального движения пульсара $T = 6{,}85$ ч. Параметры, характеризующие ориентацию оси вращения пульсара и его конус излучения (в радианах): $i = 0$; $\varphi_P = 0$; $\theta_P = 0{,}2$; $\alpha_1 = 0$; $\alpha_2 = 0{,}05$

Fig. 5. Time intervals of visibility of pulsar. Painted regions are correspond to the intervals of time when the obseration of pulsar by the Earth observer is possible. Parameters of orbital motion of pulsar are following: $E = 0.98$ s^2; $L = 5.24$ Ms. We assume that the mass of supermassive black hole is $M = 4 \cdot 10^6 M_\odot$. Consequently the period of the radial motion of the pulsar is $T = 6.85$ h. Parameters of orientation of the pulsar rotation axis and the cone of pulsar radiation (are following): $i = 0$; $\varphi_P = 0$; $\theta_P = 0.2$; $\alpha_1 = 0$; $\alpha_2 = 0.05$

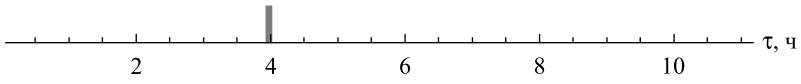


Рис. 6. Интервалы видимости пульсара. Закрашенные области на оси времени соответствуют интервалам времени, когда пульсар может быть виден наблюдателю на Земле. Параметры орбитального движения пульсара: $E = 0{,}98$ с^2; $L = 5{,}24$ Мс. Принято: масса сверхмассивной черной дыры $M = 4 \cdot 10^6 M_\odot$. При этих данных период радиального движения пульсара $T = 6{,}85$ ч. Параметры, характеризующие ориентацию оси вращения пульсара и его конус излучения (в радианах): $i = 0$; $\varphi_P = 0$; $\theta_P = 0{,}4$; $\alpha_1 = 0$; $\alpha_2 = 0{,}15$

Fig. 6. Time intervals of visibility of pulsar. Painted regions are correspond to the intervals of time when the obseration of pulsar by the Earth observer is possible. Parameters of orbital motion of pulsar are following: $E = 0.98$ s^2; $L = 5.24$ Ms. We assume that the mass of supermassive black hole is $M = 4 \cdot 10^6 M_\odot$. Consequently the period of the radial motion of the pulsar is $T = 6.85$ h. Parameters of orientation of the pulsar rotation axis and the cone of pulsar radiation (are following): $i = 0$; $\varphi_P = 0$; $\theta_P = 0.4$; $\alpha_1 = 0$; $\alpha_2 = 0.15$

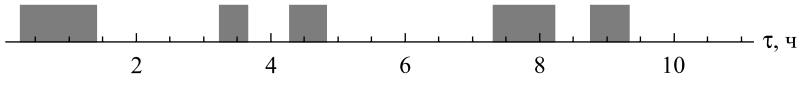


Рис. 7. Интервалы видимости пульсара. Закрашенные области на оси времени соответствуют интервалам времени, когда пульсар может быть виден наблюдателю на Земле. Параметры орбитального движения пульсара: $E = 0{,}98$ с^2; $L = 5{,}24$ Мс. Принято: масса сверхмассивной черной дыры $M = 4 \cdot 10^6 M_\odot$. При этих данных период радиального движения пульсара $T = 6{,}85$ ч. Параметры, характеризующие ориентацию оси вращения пульсара и его конус излучения (в радианах): $i = 0$; $\varphi_P = 0$; $\theta_P = 1{,}1$; $\alpha_1 = 0{,}9$; $\alpha_2 = 1{,}1$

Fig. 7. Time intervals of visibility of pulsar. Painted regions are correspond to the intervals of time when the obseration of pulsar by the Earth observer is possible. Parameters of orbital motion of pulsar are following: $E = 0.98$ s^2; $L = 5.24$ Ms. We assume that the mass of supermassive black hole is $M = 4 \cdot 10^6 M_\odot$. Consequently the period of the radial motion of the pulsar is $T = 6.85$ h. Parameters of orientation of the pulsar rotation axis and the cone of pulsar radiation (are following): $i = 0$; $\varphi_P = 0$; $\theta_P = 1.1$; $\alpha_1 = 0.9$; $\alpha_2 = 1.1$

При малых значениях орбитального наклонения результаты наиболее легко интерпретируются (см. рис. 4, 5). В этих случаях вследствие простой геометрии ориентации пульсара период появления областей его видимости примерно совпадает с периодом его орбитального движения T (при более общих значениях углов θ_P возможны случаи, когда пульсар виден на протяжении всего времени наблюдения или не виден вообще, но они не представляют интереса).

График времени видимости будет иметь простой вид и в случае, когда направление оси вращения пульсара достаточно близко к направлению одной из изотропных геодезических, соединяющих пульсар и наблюдателя (см. рис. 6). В общем случае области видимости могут быть распределены более сложным образом (см. рис. 7).

Решения уравнений для геодезических (3) и (4) позволяют найти все величины, входящие в условие видимости пульсара (10), как функции собственного времени пульсара τ. Для того чтобы найти время видимости пульсара как функцию времени наблюдения, необходимо найти красное смещение [12]:

$$z = \frac{\left(k_i u^i\right)_s}{\left(k_i u^i\right)_o} - 1.$$

Здесь индекс «о» означает, что соответствующие характеристики относятся к наблюдателю, которого мы считаем покоящимся относительно сверхмассивной черной дыры. Тогда для времени наблюдения получим

$$t = \int_0^\tau \left(z + 1\right) d\tau.$$

Заключение

Предложенный в работе метод позволяет найти интервалы времени, в течение которых излучение пульсара, движущегося во внешнем гравитационном поле, может быть зарегистрировано удаленным наблюдателем, в зависимости от шести параметров, характеризующих пульсар и его движение.

Проанализировано влияние различных параметров, характеризующих взаимную ориентацию в пространстве орбиты движения пульсара, направление вектора его собственного момента импульса и раствор конуса, внутри которого распространяется излучение, испускаемое пульсаром. Связь этих параметров с распределением времени видимости пульсара как функции времени наблюдения не всегда является простой. Однако в ряде случаев по известным интервалам видимости удается сделать некоторые выводы относительно параметров его орбитального движения. Полученные таким образом данные могут быть использованы для проверки астрофизических моделей исследуемого пульсара, а также для предсказания интервалов времени в будущем, когда излучение от пульсара может быть исследовано наземными обсерваториями.

Библиографические ссылки

1. *Morris Mark R.* The environment of the Galaxy's central black hole // The galactic black hole. Lectures on general relativity and astrophysics / ed. by H. F. Falcke, F. W. Hehl. London : IOP Publ., 2003. P. 95–121.

2. *Genzel R., Gillesen S.* The Galactic Center massive black hole and nuclear star claster // Rev. Mod. Phys. 2010. P. 3144–3195. DOI: 10.1103/RevModPhys.82.3121.

3. *Докучаев В. И., Ерошенко Ю. Н.* Физическая лаборатория в центре Галактики // УФН. 2015. Т. 185, вып. 8. С. 829–843. DOI: 10.3367/UFNr.0185.201508c.0829.

4. *Zhang F., Lu Y., Yu Q.* On testing the Kerr metric of the massive black hole in the Galactic Center via stellar orbital motion: full general relativistic treatment // The Astrophys. J. 2015. Vol. 809, № 1. P. 1–27. DOI: 10.1088/0004-637X/809/2/127.

5. *Zhang F., Saha P.* Probing the Spinning of the Massive Black Hole in the Galactic Center via Pulsar Timing: A Full Relativistic Treatment // The Astrophys. J. 2017. Vol. 849, № 1. P. 1–15. DOI: 10.3847/1538-4357/aa8f47.

6. *Tarasenko A.* Reconstruction of a compact object motion in the vicinity of a black hole by its electromagnetic radiation // Phys. Rev. D. 2010. Vol. 81, issue 12. Article ID: 123005. P. 1–10. DOI: 10.1103/PhysRevD.81.123005.

7. *Zhang F., Lu Y., Yu Q.* On the existence of pulsars in the vicinity of the massive black hole in the Galactic Center // The Astrophys. J. 2014. Vol. 784, № 1. P. 1–8. DOI: 10.1088/0004-637X/784/2/106.

8. *Hailey C. J., Mori K., Bauer F. E., et al.* A density cusp of quiescent X-ray binaries in the central parsec of the Galaxy // Nature. 2018. Vol. 556. P. 70–73. DOI: 10.1038/nature25029.

9. *Шапиро С. Л., Тьюколски С. А.* Черные дыры, белые карлики и нейтронные звезды : в 2 ч. : пер. с англ. М. : Мир, 1985.

10. *Wang Y., Creighton T., Price R., et al.* Strong fiel effects on pulsar arrival times: general orientations // The Astrophys. J. 2009. Vol. 705, № 2. P. 1252–1259. DOI: doi:10.1088/0004-637X/705/2/1252.

11. *Stovall K., Creighton T., Price R. H., et al.* Observability of pulsar beam bending by the Sgr A* black hole // The Astrophys. J. 2012. Vol. 744, № 2. P. 1–8. DOI: 10.1088/0004-637X/744/2/143.

12. *Stephani H.* Relativity. An introduction to special and general relativity. Cambridge : Camb. Univ. Press, 2004.

13. *Dixon W. G.* A covariant multipole formalism for extended test bodies in general relativity // Nuovo Cimento. 1964. Vol. 34, issue 2. P. 317–339. DOI: 10.1007/BF02734579.

14. *Чандрасекар С.* Математическая теория черных дыр : в 2 ч. : пер. с англ. М. : Мир, 1986. Ч. 1.

15. *Корн Г., Корн Т.* Справочник по математике (для научных работников и инженеров) : пер. с англ. М. : Наука, 1973.

References

1. Morris Mark R. The environment of the Galaxy's central black hole. In: Falcke H. F., Hehl F. W. (eds). *The galactic black hole. Lectures on general relativity and astrophysics*. London : IOP Publ., 2003. P. 95–121.

2. Genzel R., Gillesen S. The Galactic Center massive black hole and nuclear star claster. *Rev. Mod. Phys.* 2010. P. 3144–3195. DOI: 10.1103/RevModPhys.82.3121.

3. Dokuchaev V. I., Eroshenko Yu. N. [Physical laboratory at the center of the Galaxy]. *Usp. fiz. nauk.* [Phys. – Uspekhy]. 2015. Vol. 185, issue 8. P. 829–843. DOI: 10.3367/UFNr.0185.201508c.0829 (in Russ.).

4. Zhang F., Lu Y., Yu Q. On testing the Kerr metric of the massive black hole in the Galactic Center via stellar orbital motion: full general relativistic treatment. *The Astrophys. J.* 2015. Vol. 809, No. 1. P. 1–27. DOI: 10.1088/0004-637X/809/2/127.

5. Zhang F., Saha P. Probing the Spinning of the Massive Black Hole in the Galactic Center via Pulsar Timing: A Full Relativistic Treatment. *The Astrophys. J.* 2017. Vol. 849, No. 1. P. 1–15. DOI: 10.3847/1538-4357/aa8f47.

6. Tarasenko A. Reconstruction of a compact object motion in the vicinity of a black hole by its electromagnetic radiation. *Phys. Rev. D.* 2010. Vol. 81, issue 12. Article ID: 123005. P. 1–10. DOI: 10.1103/PhysRevD.81.123005.

7. Zhang F., Lu Y., Yu Q. On the existence of pulsars in the vicinity of the massive black hole in the Galactic Center. *The Astrophys. J.* 2014. Vol. 784, No. 1. P. 1–8. DOI: 10.1088/0004-637X/784/2/106.

8. Hailey C. J., Mori K., Bauer F. E., et al. A density cusp of quiescent X-ray binaries in the central parsec of the Galaxy. *Nature.* 2018. Vol. 556. P. 70–73. DOI: 10.1038/nature25029.

9. Shapiro S. L., Teukolsky S. A. Black holes, white dwarfs, and neutron stars. The physics of compact objects. New York : John Wiley & Sons, 1983. Russ. ed.: Shapiro S. L., Teukolsky S. A. Chernye dyry, belye karliki i neitronnye zvezdy : in 2 parts. Moscow : Mir, 1985.

10. Wang Y., Creighton T., Price R., et al. Strong fiel effects on pulsar arrival times: general orientations. *The Astrophys. J.* 2009. Vol. 705, No. 2. P. 1252–1259. DOI: doi:10.1088/0004-637X/705/2/1252.

11. Stovall K., Creighton T., Price R. H., et al. Observability of pulsar beam bending by the Sgr A* black hole. *The Astrophys. J.* 2012. Vol. 744, No. 2. P. 1–8. DOI: 10.1088/0004-637X/744/2/143.

12. Stephani H. Relativity. An introduction to special and general relativity. Cambridge : Camb. Univ. Press, 2004.

13. Dixon W. G. A covariant multipole formalism for extended test bodies in general relativity. *Nuovo Cimento.* 1964. Vol. 34, issue 2. P. 317–339. DOI: 10.1007/BF02734579.

14. Chandrasekhar S. The mathematical theory of black holes. New York : Oxford Univ. Press, 1983. Russ. ed.: Chandrasekhar S. Matematicheskaya teoriya chernykh dyr : in 2 parts. Moscow : Mir, 1986. Part 1.

15. Korn G. A., Korn T. M. Mathematical handbook for scientists and ingineers. Definitions, theorems and formulas for reference and review. New York : McGraw – Hill [Book Co.]. 1968. Russ. ed.: Korn G., Korn T. Spravochnik po matematike (dlya nauchnykh rabotnikov i inzhenerov). Moscow : Nauka, 1973.

Статья поступила в редколлегию 30.01.2018.
Received by editorial board 30.01.2018.

Исторические материалы

Historical materials

УДК 535.372;532.783

РАЗРАБОТКА НОВЫХ ЖК-МАТЕРИАЛОВ И УСТРОЙСТВ НА ИХ ОСНОВЕ

***А. А. МИНЬКО*[1)], *В. И. ЛАПАНИК*[2)], *М. Р. ПОСЛЕДОВИЧ*[1)]**

[1)]*Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Беларусь*
[2)]*НИУ «Институт прикладных физических проблем им. А. Н. Севченко» БГУ, ул. Курчатова, 7, 220108, г. Минск, Беларусь*

Приведен краткий очерк формирования и становления научной школы по физике и химии жидких кристаллов. Представлен ряд наиболее важных научных результатов, полученных на кафедрах оптического профиля и в научно-исследовательском учреждении «Институт прикладных физических проблем имени А. Н. Севченко» БГУ за последние годы, как в области фундаментальных, так и прикладных исследований, внедренных в производство и образовательный процесс.

Ключевые слова: жидкие кристаллы; ЖК; мезофаза; жидкокристаллические соединения; жидкокристаллические материалы; электрооптические системы отображения информации; жидкокристаллические модуляторы.

Образец цитирования:
Минько А. А., Лапаник В. И., Последович М. Р. Разработка новых ЖК-материалов и устройств на их основе // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2018. № 2. С. 151–159.

For citation:
Minko A. A., Lapanik V. I., Pasliadovich M. R. Development of new liquid crystal materials and devices. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2018. No. 2. P. 151–159 (in Russ.).

Авторы:
Анатолий Антонович Минько – доктор физико-математических наук, профессор; заведующий кафедрой физической оптики и прикладной информатики физического факультета.
Валерий Иванович Лапаник – заведующий лабораторией оптики конденсированных сред.
Михаил Романович Последович – кандидат физико-математических наук, доцент; ведущий инженер кафедры физической оптики и прикладной информатики физического факультета.

Authors:
Anatoli A. Minko, doctor of science (physics and mathematics), full professor; head of the department of physical optics and applied informatics, faculty of physics.
minko@bsu.by
Valeri I. Lapanik, head of the laboratory of condensed matter optics.
lapanik@bsu.by
Mikhail R. Pasliadovich, PhD (physics and mathematics), docent; leading engineer at the department of physical optics and applied informatics, faculty of physics.
posledov@bsu.by

Журнал Белорусского государственного университета. Физика. 2018. № 2. С. 151–159
Journal of the Belarusian State University. Physics. 2018. No. 2. P. 151–159

DEVELOPMENT OF NEW LIQUID CRYSTAL MATERIALS AND DEVICES

***A. A. MINKO*[a], *V. I. LAPANIK*[b], *M. R. PASLIADOVICH*[a]**

[a]*Belarusian State University, 4 Niezaliežnasci Avenue, Minsk 220030, Belarus*
[b]*A. N. Sevchenko Institute of Applied Physical Problems, Belarusian State University, 7 Kurčatай Street, Minsk 220108, Belarus*

Corresponding author: A. A. Minko (minko@bsu.by)

A short essay on the formation of a scientific school of physics and chemistry of liquid crystals is given. The essay presents a number of the most important scientific results obtained at the departments of the optical profile and in the A. N. Sevchenko Institute of Applied Physical Problems of the Belarusian State University in recent years, both in the field of fundamental and applied research, implemented in the production and in the educational process.

Key words: liquid crystals; LC; mesophase; LC-compounds; LC-materials; electro-optical information display systems; LC-modulators.



Рис. 1. Леонид Викентьевич Володько – инициатор и создатель первой группы исследований ЖК

Fig. 1. Leonid Vikentievich Volodko – initiator and creator of the first research group of studies of the LC

Исследования в области физики и химии жидких кристаллов (ЖК) в Белорусском государственном университете были начаты в первой половине 1960-х гг. под руководством Л. В. Володько (2 января 2018 г. отметили 90 лет со дня его рождения) на кафедрах физической оптики (ныне – кафедра физической оптики и прикладной информатики) и спектрального анализа (ныне – кафедра лазерной физики и спектроскопии) (рис. 1). С 1971 г. данное научное направление активно развивается в лаборатории оптики конденсированных сред (ЛОКС) научно-исследовательского учреждения «Институт прикладных физических проблем имени А. Н. Севченко» БГУ (НИИ ПФП). Первопроходцами в исследовании ЖК были А. И. Серафимович, А. З. Абдулин, Н. Р. Последович и О. Н. Бубель.

О. Н. Бубелем (химический факультет БГУ) синтезированы холестерические жидкие кристаллы (ХЖК). А. И. Серафимович и А. З. Абдулин совместно с А. И. Кубарко (Минский медицинский институт) с помощью полученных ХЖК проводили исследования по диагностике заболеваний по температуре участков тела человека. В основе их работ – температурная зависимость окраски холестерических ЖК (изменение шага спирали холестерика). А. И. Серафимович и А. С. Ключников (доцент факультета радиофизики и электроники) занимались проблемами визуализации ИК-излучения с помощью ХЖК.

В этот же период А. И. Серафимович по заданию Л. В. Володько неоднократно посещал Ленинград (Государственный оптический институт (ГОИ) имени С. И. Вавилова, Ленинградское оптико-механическое объединение (ЛОМО)) и Москву (иностранные представительства) для налаживания деловых связей. Благодаря этому в 1960–70-х гг. удалось в значительной мере укрепить материально-техническую базу кафедр физической оптики и спектрального анализа БГУ, что сыграло огромную роль при организации отдела электромагнитных явлений, в том числе ЛОКС НИИ ПФП.

В 1980–90-х гг. сформировалась научная школа в области физики и химии ЖК. В 1987 г. вышла в свет монография «Текстурообразование и структурная упорядоченность в жидких кристаллах» (авторы – А. З. Абдулин, В. С. Безбородов, А. А. Минько, В. С. Рачкевич).

Первые исследования были направлены на изучение природы жидкокристаллического состояния вещества, анализ электрооптических эффектов в ЖК, установление связи между строением молекул ЖК и их физико-химическими свойствами. В результате фундаментальных исследований были созданы новые жидкокристаллические материалы и электрооптические устройства на их основе [1].

Наиболее значимые результаты исследований, полученные в 1980–90-х гг., приведены ниже.

• Установлены количественные соотношения между *цис-* и *транс*-изомерами вещества в жидкокристаллическом и изотропном состояниях гомологических рядов различных ЖК-соединений. Определена ориентационная способность молекул исследуемых гомологических рядов, проанализирована ее зависимость от длины алкильной цепочки, температуры и числа циклических фрагментов.

• На основе анализа дихроизма отдельных колебательных полос исследованы изменения ИК-спектров ЖК-соединений при фазовых переходах, что позволило обнаружить жидкокристаллическую фазу у некоторых членов гомологического ряда *n*-алкоксибензойных кислот.

• Разработана методика измерения оптических постоянных ЖК при различных температурах в широком спектральном интервале с использованием методов отражения и пропускания света. Показано, что важную роль в повышении точности значений показателя преломления в ИК-области спектра играют погрешности выбора привязочных точек показателя преломления в области прозрачности.

• Определены поляризуемости молекул и параметры порядка некоторых одноосных ЖК. Температурная зависимость параметра порядка показала небольшое его возрастание по мере удлинения алкильной цепи. Следовательно, основную роль в установлении ориентационного порядка мезофазы играют межмолекулярные взаимодействия жестких стероидных фрагментов молекул.

• Изучены закономерности влияния строения циклических и мостиковых фрагментов, боковых и концевых заместителей молекул ЖК на их мезоморфные, оптические и диэлектрические свойства, что позволило выработать критерии для целенаправленного поиска новых ЖК-соединений. Показано, что перспективными для использования в качестве компонентов ЖК-материалов, предназначенных для электрооптических устройств отображения информации, являются соединения с числом атомов углерода в алкильной цепочке от 3 до 6, содержащие в различных сочетаниях, наряду с бензольным и циклогексановым, циклогексеновое и бороксановые кольца, соединенные непосредственно друг с другом или посредством $CH_2—CH_2$-, COO-мостиков. При этом сочетание в концевом фрагменте нитрильной группы и атома фтора в сопряжении с бензольным кольцом позволяет получать ЖК с высоким значением положительной диэлектрической анизотропии.

• Впервые изучены мезоморфные свойства ариловых эфиров алкилциклогексенкарбоновых кислот, и проанализировано влияние положения двойной связи в циклогексеновом кольце на температурные и электрооптические параметры смесей, содержащих эти соединения. Установлено, что оптимальными для практического использования являются эфиры 4-алкил-2-циклогексен-1-карбоновой кислоты, поскольку они имеют более широкий интервал существования мезофазы и низкую температуру ее образования. Это объясняется стерическими факторами, а смеси на их основе характеризуются меньшей вязкостью, малым температурным дрейфом порогового напряжения и более крутой вольт-контрастной характеристикой. На основе указанных соединений разработаны ЖК-смеси, которые запатентованы за рубежом и рекомендованы для использования в матричных электрооптических устройствах с мультиплексом до 1 : 32.

• Анализ мезоморфных, оптико-физических и электрооптических свойств ряда полярных цианопроизводных в различных ЖК-матрицах показал, что для создания высокомультиплексных, низковольтных и высокодинамичных ЖК-материалов наиболее перспективны в сочетании с неполярными ЖК-соединениями новые цианофторфенилпроизводные 1,2,3-диоксаборинана, характеризующиеся высокими значениями положительной диэлектрической анизотропии. Для высокомультиплексных электрооптических устройств разработаны, запатентованы и рекомендованы для использования новые ЖК-материалы, в состав которых входят производные 1,2,3-диоксаборинана.

• Проанализированы формы колебательных полос и их связи с колебательной и ориентационной функциями автокорреляции для одноосных ЖК. Показано, что в отличие от ИК-спектров исследование спектров комбинационного рассеяния (КР) позволяет определять по отдельности функции автокорреляции как для колебаний, так и для вращения молекул вокруг различных осей. Экспериментально установлено, что форма колебательных полос ЖК обусловлена в основном колебательной релаксацией, зависящей от дефазировки колебательного движения межмолекулярными силами. Показано, что в течение интервалов времени, много меньших времени переориентации, вращение молекул нематических ЖК носит либрационный характер, а затем переходит в сильно анизотропную ориентационную диффузию и в целом хорошо описывается в рамках формализма функций памяти.

• Теоретически и экспериментально исследованы оптические свойства хирально-нематических сред при больших углах закрутки. Показано, что в этом случае можно создать условия, при которых ЖК-вещество ведет себя как изотропная оптически активная среда. Обоснована возможность создания электрически управляемых фильтров кругового двулучепреломления типа фильтров Лио.

За этот период по данной проблематике опубликованы свыше 300 статей, получены более 30 авторских свидетельств на изобретения и 20 зарубежных патентов. Более 20 разработок внедрены в производство (НПО «Интеграл», МПО «Калибр», ряд российских предприятий, в том числе НПО «Платан», НПО «НИОПИК», ЦАО «Комета», ПО «Рефлектор»). Защищена докторская (А. А. Минько) и 7 кандидатских диссертаций (Н. Р. Последович, В. И. Науменко, В. С. Рачкевич, В. С. Безбородов, В. А. Коновалов,

Ю. Д. Пташников, С. Е. Яковенко). Большую помощь в подготовке кандидатов наук оказывал профессор А. И. Комяк, который в то время руководил кафедрой спектрального анализа. Много внимания уделялось укреплению материально-технической базы кафедр оптического профиля БГУ и ЛОКС: было приобретено современное оптоэлектронное оборудование, спектрометры, современная физико-химическая лаборатория (Чехия), собственными силами были разработаны и созданы уникальные приборы и комплексы. Следует отметить, что существенную помощь в этом оказывал заместитель директора НИИ ПФП по общим вопросам, ведущий инженер кафедры физической оптики (по совместительству) Ф. И. Севченко.

Признанием достижений в разработках ЖК-материалов и систем отображения информации на их основе является присуждение в 1990 г. премии Совета Министров БССР за работу «Синтез, физико-химические исследования новых жидкокристаллических материалов, разработка технологий создания жидкокристаллических устройств отображения информации и их практическое применение» (авторский коллектив: А. А. Минько (руководитель), А. З. Абдулин, В. С. Безбородов, В. А. Коновалов, В. И. Лапаник, А. А. Муравский, В. И. Науменко, М. Р. Последович, В. С. Рачкевич, В. В. Ржеусский, С. Е. Яковенко (ЛОКС НИИ ПФП имени А. Н. Севченко БГУ), В. А. Молочко (МПО «Калибр»), А. В. Михновец, В. И. Позняк, В. П. Царев, В. И. Силич (НПО «Интеграл»).

В 1992–1996 гг. выполнялась республиканская научно-техническая программа «Разработать и внедрить в промышленное производство материалы, технологические процессы, конструкции и оборудование для организации освоения и выпуска различных типов жидкокристаллических устройств» (руководитель программы – директор «СКБ Немига» НПО «Интеграл» В. И. Толкачев, научный руководитель – заместитель директора НИИ ПФП, заведующий ЛОКС А. А. Минько). В рамках этой программы ЛОКС совместно с кафедрой физической оптики БГУ выполнялось 7 заданий по разработке новых ЖК-материалов, модуляторов, устройств отображения информации. В выполнении заданий программы, кроме сотрудников ЛОКС В. И. Лапаника, В. С. Безбородова, С. Е. Яковенко, В. В. Ржеусского, В. А. Коновалова, Ан. Ал. Муравского и др., активное участие принимали сотрудники кафедры физической оптики БГУ – В. В. Могильный, М. Р. Последович, Ж. И. Булойчик, А. И. Станкевич, М. М. Сидоренко и кафедры лазерной физики и спектроскопии – И. В. Сташкевич, Е. А. Мельникова, А. И. Серафимович, а также студенты, магистранты и аспиранты профильных кафедр (рис. 2).

По итогам выполнения программ были получены результаты, имеющие как теоретическое, так и практическое значение.

• Разработаны основы перспективной технологии и способ создания различных высокоинформативных электрооптических ЖК-экранов (супертвистовый, двойной супертвистовый, сегнетоэлектрический, активно-матричный), требующих точного удержания зазора, включающего формирование монолитно с подложкой по всей площади экрана с определенной топологией одинаковых по высоте спейсеров. Для созданных супертвистовых экранов разработаны ЖК-материалы и показано, что с увеличением



Рис. 2. Проведение занятий на базе ЛОКС НИИ ПФП имени А. Н. Севченко БГУ

Fig. 2. Classes in the laboratory of condensed matter optics
at the A. N. Sevchenko Institute of Applied Physical Problems of the Belarusian State University

угла закрутки возрастает не только крутизна вольт-контрастной характеристики, но расширяется полоса пропускания экрана и повышается его яркость. По этой технологии на заводе «Электроника» НПО «Интеграл» (главный инженер завода – выпускник физического факультета В. П. Царев) выпускали персональный компьютер МК-90.

• Созданы установки для измерения основных электрооптических параметров ЖК.

• Разработана технология создания экранов с высокоточным заданием толщины ЖК-слоя, что позволило не только существенно улучшить свойства нематических ЖК-устройств, но и создать дисплеи на основе сегнетоэлектрических и антисегнетоэлектрических ЖК, имеющих аналоговую шкалу серости. Были существенно увеличены контраст и яркость отражательных дисплеев, поскольку толщина ЖК-слоя была сделана переменной и подогнана в соответствии с длиной волны пропускания каждого светофильтра.

• Разработаны новые методы синтеза ЖК производных циклогексана, циклогексена, дифенила, 1,3-диоксана, 1,2,3-диоксаборинана, и экспериментально подтверждена целесообразность использования таких соединений на примере 3,6-дизамещенных 2-циклогексенов.

• Совместно с «СКБ Немига» НПО «Интеграл» созданы образцы цветных телевизоров с диагональю 16 см.

• Изготовлена опытная партия ЖК-модуляторов для масок электросварщиков (назначение – защита глаз от УФ-излучения при проведении сварочных работ).

• Получены ЖК-материалы для дисплеев, работающих на супертвист-эффекте.

• Предложена технология получения материалов ориентирующих, диэлектрических и проводящих покрытий.

С начала 1990-х гг. расширяется география сотрудничества кафедры физической оптики и ЛОКС. Научными партнерами становятся Варшавская военно-техническая академия (Польша), Бохумский, Дортмундский, Дармштадтский и Йенский университеты (Германия), различные фирмы Южной Кореи, США, Индии, Норвегии, Китая и др. Основной вклад в налаживание зарубежных контактов с вышеуказанными странами внесли А. А. Минько, В. И. Лапаник, В. С. Безбородов, С. Е. Яковенко, а также В. В. Могильный и А. Л. Толстик.

В 1995 г. на базе ЛОКС была создана совместная с фирмой *Samsung* лаборатория (рис. 3) (ныне – филиал НИИ ПФП имени А. Н. Севченко БГУ (СЛС-И)), руководителем которой по настоящее время является А. А. Минько, а его заместителем – В. И. Лапаник. В исследованиях, проводимых в СЛС-И, а также внедрении полученных результатов активно участвуют как сотрудники ЛОКС института, так и преподаватели, научные сотрудники, аспиранты и студенты кафедр физической оптики и прикладной информатики и лазерной физики и спектроскопии физического факультета БГУ. В дальнейшем все исследования и внедрение их результатов проводились в сотрудничестве с ЛОКС, кафедрой физической оптики БГУ и филиалом СЛС-И.

За время деятельности СЛС-И сотрудничала со следующими зарубежными компаниями: *Samsung Display Devices* (Южная Корея), *Philips Electronics Nederland B. V.* (Нидерланды), *Smart Display Co. Ltd.* (Южная Корея), *KSI Co. Ltd.* (Южная Корея), *Philips Components LCOS* (США), *Samsung Advanced*



Рис. 3. Подписание контракта с фирмой «Самсунг»
Fig. 3. Signing a contract with the firm *Samsung*

Institute of Technology (Южная Корея), *MicroDisplay Co.* (США), *TechnoDisplay AS* (Норвегия), *LG Display* (Южная Корея), *Koenig-PA* (Германия).

Научные исследования жидких кристаллов были продолжены и в 2000-х гг. На пороге нового тысячелетия (в 1999 г.) защищены 2 докторские диссертации (С. Е. Яковенко и В. С. Безбородовым), проведены более углубленные исследования электрооптических эффектов для создания жидкокристаллических дисплеев [2].

В 2003 г. А. А. Минько, Е. С. Воропаю, В. И. Попечицу и А. П. Клищенко присуждена премия имени А. Н. Севченко за развитие теории анизотропии поглощения и испускания света сложными органическими соединениями, разработку и внедрение в практику новых лазерных сред, жидкокристаллических материалов, спектрофлуориметрических приборов и систем отображения информации (рис. 4).



Рис. 4. Лауреаты премии имени А. Н. Севченко 2003 г. (слева направо):
Е. С. Воропай, А. П. Клищенко, А. А. Минько и В. И. Попечиц

Fig. 4. Laureates of the Prize A. N. Sevchenko 2003 (from left to right):
E. S. Voropay, A. P. Klishchenko, A. A. Minko and V. I. Popechits

С 2010 г. в сотрудничестве с Хэйлунцзянским институтом нефтехимии (ХИНХ, Китай) ведутся работы по разработке широкотемпературной жидкокристаллической композиции для ЖК-дисплеев на модах TN и IPS с интервалом рабочих температур от –40 до +95 °С. В 2013–2016 гг. работали над созданием новых материалов для изготовления дисплеев на органических люминофорах (OLED), а также соединений, содержащих в структуре оксидифторметиленовый молекулярный мостик, что позволяет существенно улучшить время переключения активно-матричных дисплеев (рис. 5).



Рис. 5. Подписание контракта с Хэйлунцзянским институтом нефтехимии (Китай, 2011 г.)

Fig. 5. Signing a contract with the University of Heilongjiang (China, 2011)

Углубляется сотрудничество с рядом институтов и предприятий Республики Беларусь и Российской Федерации – Институтом физики имени Б. И. Степанова НАН Беларуси, Белорусским государственным университетом информатики и радиоэлектроники (БГУИР), Институтом химии новых материалов НАН Беларуси, НПО «Интеграл», ОАО «КБТЭМ-ОМО» и др.

За последние 25 лет получены новые результаты, имеющие как фундаментальное [3; 4], так и практическое значение [5; 6]. Они внедрены в производство и образовательный процесс БГУ [7–10]. Основные из них приведены ниже.

• Разработан ряд оптических методов с использованием молекулярного зонда для изучения анизотропии локального поля и влияния межмолекулярных взаимодействий на параметры спектральных полос ЖК. Определена анизотропия локального поля в нематической фазе ряда мезогенных производных бензонитрила.

• Доказана определяющая роль универсальных межмолекулярных взаимодействий в формировании спектра рассеяния в области крыла линии Рэлея мезогенов; обнаружено значительное изменение интенсивности комбинационного рассеяния под действием универсальных межмолекулярных взаимодействий; предложен и обоснован механизм влияния универсальных межмолекулярных взаимодействий на интенсивность рассеяния света в мезогенах и их растворах.

• Показана возможность исследования времени переориентации молекул в нематических ЖК на основании сравнительного анализа деполяризации спектров РКР и люминесценции.

• Обобщено соотношение Лоренц – Лоренца на случай нематической фазы и растворов мезогенов в немезогенных растворителях с учетом локальной упорядоченности молекул, что позволило описать экспериментально наблюдаемые явления как в нематической, так и в изотропной фазе и растворах мезогенов. Впервые экспериментально оценено влияние межмолекулярных взаимодействий на молекулярную рефракцию.

• Теоретически обоснован метод определения ориентационных функций автокорреляции, описывающих вращение молекул вокруг различных осей. Метод построен на анализе формы полос комбинационного рассеяния и не требует использования модельных представлений о виде потенциала межмолекулярного взаимодействия. Установлены основные закономерности вращательного движения молекул в мезофазе, в частности, впервые показан существенно недиффузионный характер такого движения в пикосекундном интервале времен. На основании сопоставления экспериментальных и расчетных данных дано объяснение этого явления и предложена модель, адекватно описывающая вращение мезогенных молекул.

• Был разработан ряд быстродействующих (субмиллисекундных) ЖК-затворов, в том числе и пространственно-временных модуляторов света, пригодных для использования в проекционных дисплеях видеоизображения, в которых цветовая гамма получена последовательным смещением цветов.

• На основании моделирования поведения нематических ЖК во внешних электрических полях были разработаны оригинальные методы создания многодоменных ЖК-дисплеев с улучшенным углом обзора и высокой яркостью.

• Предложен новый подход к разработке люминесцентных ЖК-материалов в целях увеличения времени жизни ЖК-дисплеев, созданных на основе этих материалов. В качестве рабочей среды использовались не люминесцентные добавки, а разработанные в ЛОКС ЖК-соединения, которые могли излучать свет на определенных длинах волн. Анализ физико-химических свойств люминесцентных ЖК-соединений, содержащих 3–4 фенольных фрагмента, показал, что на максимум полосы поглощения и излучения наибольшее влияние оказывают вид боковых заместителей и полярность базовых матриц. Для достижения максимального квантового выхода и необходимого максимума люминесценции в синей области спектра наиболее перспективными являются соединения, содержащие 2 боковых заместителя в 2, 3 или 4 кольцах (F, Cl, CH_3), а в качестве полярной группы выступают атомы F. В зеленой области спектра наиболее перспективным оказалось использование 1–2 % новых производных 3,4,9,10-*метра*-(*n*-алкоксикарбонил)перилена и 9,10-*бис*(4-замещенные фенилэтинил)антрацена, обладающих ЖК-свойствами. На основании разработанных люминесцентных ЖК-композиций были изготовлены экспериментальные образцы дисплеев, характеризующиеся стабильно высокой яркостью.

• Созданы и исследованы в качестве ориентантов ЖК фоточувствительные полимеры с боковыми бензальдегидными группами. Обнаружены и изучены два ориентирующих эффекта планарного типа: возникающая под действием линейно-поляризованного УФ-облучения фотоориентация и фотостимулированная неполяризованным УФ-облучением ориентация после натирания. На основе фотостимулированной ориентации созданы технологии формирования поверхностей для планарной многодоменной и градиентной ориентации ЖК. В первом случае достигаются дискретные изменения направления директора в плоскости слоя, что позволяет использовать ориентант, например, для изготовления многозонных

поляризаторов и фазовых пленок. Во втором случае может быть создано непрерывное распределение угла преднаклона и на его основе – адаптивные оптические элементы, например ЖК-линзы с переменным фокусным расстоянием.

• Теоретически и экспериментально исследованы оптические свойства сегнетоэлектрических ЖК-кристаллов, в результате чего была решена задача формирования бездефектных, стабильных к механическому и температурному воздействию слоев сегнетоэлектрических ЖК-материалов на основании определения граничных условий между вязкоупругими свойствами нехиральных и хиральных сред при установленных энергиях сцепления ориентирующих слоев. Анализ мезоморфных и вязкоупругих свойств 4-кольчатых хиральных соединений показал, что для создания ферроэлектрических ЖК-композиций, стабильных к механическому воздействию, наиболее перспективны компоненты, содержащие 6–8 атомов углерода в алкильной цепочке и в качестве боковых заместителей – атом хлора или метильную группу, а также 5–6 атомов углерода в алкильной цепочке после хирального центра.

• Разработаны основы перспективной технологии и способ производства цветных бесполяроидных селективно-рассеивающих ЖК-дисплеев, а также бистабильных ЖК-дисплеев с использованием сильно закрученных хирально-нематических сред. Показана возможность создания бистабильных устройств отображения информации, в которых существование двух стабильных состояний допускается в течение длительного времени при любых механических деформациях.

• Исследованы электрооптические свойства ЖК-материалов, допированных наночастицами. Обнаружено, что небольшое количество наночастиц в значительной степени изменяет их диэлектрические, электрооптические и магнитооптические свойства.

• Установлен критерий для целенаправленного поиска новых практически значимых ЖК-соединений и ЖК-материалов. Разработаны новые методы синтеза ЖК-соединений для электрооптических устройств отображения информации: синтетические схемы на 2–3 стадии короче и позволяют получать конечные ЖК-соединения с более высоким выходом.

• Предложен новый способ создания ЖК-дисплеев с большим углом обзора на основе мультидоменных, вертикально ориентированных структур на профилированных подложках.

• Разработан ряд ЖК-приборов и устройств: ахроматические фазовые пластинки, работающие в широком спектральном диапазоне; высококонтрастный бистабильный дисплей с малым (менее 3 В) управляющим напряжением; дисплеи на основе селективного рассеяния с малым (до 2 В) управляющим напряжением; высококонтрастный дисплей с гомеотропной ориентацией и быстрыми временами переключения (контрастное отношение составляет 1000 : 1, время отклика – менее 5 мс); сегнетоэлектрические ЖК-устройства отображения информации со стабильной ориентацией, не зависящей от механического воздействия (температурный рабочий интервал – от –20 до +120 °С, время отклика – <150 мкс).

• Разработаны технологии и созданы электрически контролируемые ЖК-элементы для управления пространственно-поляризационными параметрами лазерного излучения.

• По проблематике исследований в области жидких кристаллов опубликованы свыше 800 статей в престижных научных изданиях, изданы 5 учебных пособий, 3 монографии, сделаны свыше 500 докладов на международных конференциях и симпозиумах, получены авторские свидетельства на 160 изобретений и 40 зарубежных патентов, подготовлены 3 доктора и 15 кандидатов наук. Результаты исследований внедрены на ряде предприятий Республики Беларусь и Российской Федерации, а также в образовательный процесс БГУ.

Библиографические ссылки

1. *Абдулин А. З., Безбородов В. С., Минько А. А. и др.* Текстурообразование и структурная упорядоченность в жидких кристаллах. Минск : БГУ, 1987.

2. *Минько А. А., Безбородов В. С., Лапаник В. И. и др.* Электрооптические эффекты для жидкокристаллических дисплеев // Выбраныя навуковыя працы Беларускага дзяржаўнага ўніверсітэта : у 7 т. Мінск, 2001. Т. 4. С. 90–102.

3. *Минько А. А., Яковенко С. Е.* Индуцированное межмолекулярными взаимодействиями рассеяние света в растворах мезогенов // Спектроскопия и люминесценция молекулярных систем. Минск, 2002. С. 315–328.

4. *Могильный В. В., Станкевич А. И., Трофимова А. В.* Ориентация жидкокристаллического мономера полимерами с бензальдегидными группами // Вестн. БГУ. Сер. 1, Физика. Математика. Информатика. 2014. № 2. С. 17–22.

5. Применение молекулярной люминесценции и спектроскопии к исследованию структуры и свойств вещества / под ред. Д. С. Умрейко, А. А. Минько. Минск : БГУ, 2006.

6. *Безбородов В. С., Минько А. А., Лапаник В. И.* Люминесцентные жидкокристаллические материалы, излучающие в зеленой области спектра // Вестн. БГУ. Сер. 1, Физика. Математика. Информатика. 2011. № 1. С. 14–17.

7. *Курилкина С. Н., Минько А. А.* Оптика кристаллов и кристаллических структур. Минск : БГУ, 2012.

8. Физическая оптика в БГУ. Кафедре физической оптики 60 лет / редкол.: А. А. Минько [и др.] ; отв. ред.: А. А. Минько, Д. С. Умрейко. Минск : БГУ, 2013.

9. *Воропай Е. С., Гулис И. М., Комяк А. И.* Спектроскопия и лазерная физика в БГУ. Кафедре лазерной физики и спектроскопии 60 лет / под ред. Е. С. Воропая. Минск : БГУ, 2013.

10. *Минько А. А.* Физика жидких кристаллов. Минск : БГУ, 2017.

References

1. Abdulin A. Z., Bezborodov V. S., Min'ko A. A., et al. Teksturoobrazovanie i strukturnaya uporyadochennost' v zhidkikh kristallakh [The texture formation and structural ordering in liquid crystals]. Minsk : BSU, 1987 (in Russ.).

2. Minko A. A., Bezborodov V. S., Lapanik V. I., et al. Elektroopticheskie effekty dlya zhidkokristallicheskikh displeev [Electro-optical effects for liquid-crystal displays]. In: *Vybranyja navukovyja pracy Belaruskaga dzjarzhawnaga wniversitjeta* : in 7 vols. Minsk, 2001. Vol. 4. P. 90–102 (in Russ.).

3. Minko A. A., Yakovenko S. E. Indutsirovannoe mezhmolekulyarnymi vzaimodeistviyami rasseyanie sveta v rastvorakh mezogenov [The intermolecular-interaction induced light scattering in mesogene solutions]. In: *Spektroskopiya i lyuminestsentsiya molekulyarnykh sistem.* Minsk, 2002. P. 315–328 (in Russ.).

4. Mogilny V. V., Stankevich A. I., Trofimova A. V. Orientation of liquid crystal monomer by polymers with benzaldehyde groups. *Vestnik BGU. Ser. 1, Fiz. Mat. Inform.* 2014. No. 2. P. 17–22 (in Russ.).

5. Umreiko D. S., Minko A. A. (eds). Primenenie molekulyarnoi lyuminestsentsii i spektroskopii k issledovaniyu struktury i svoistv veshchestva [The application of molecular luminescence and spectroscopy to studies of the material structure and properties]. Minsk : BSU, 2006 (in Russ.).

6. Bezborodov V. S., Minko A. A., Lapanik V. I. Luminescent liquid-crystal materials emitting in the green spectral region. *Vestnik BGU. Ser. 1, Fiz. Mat. Inform.* 2011. No. 1. P. 14–17 (in Russ.).

7. Kurilkina S. N., Minko A. A. Optika kristallov i kristallicheskikh struktur [Optics of crystals and crystalline structures]. Minsk : BSU, 2012 (in Russ.).

8. Minko A. A., Umreiko D. S., Kurilkina S. N. (eds). Fizicheskaya optika v BGU. Kafedre fizicheskoi optiki 60 let [Physical optics at the Belarusian State University. The 60th Anniversary of the Physical Optics Department]. Minsk : BSU, 2013 (in Russ.).

9. Voropai E. S., Gulis I. M., Komyak A. I. Spektroskopiya i lazernaya fizika v BGU. Kafedre lazernoi fiziki i spektroskopii 60 let [Spectroscopy and laser physics in BSU. The 60th Anniversary of the Laser Physics and Spectroscopy Department]. Minsk : BSU, 2013 (in Russ.).

10. Minko A. A. Fizika zhidkikh kristallov [Physics of liquid crystals]. Minsk : BSU, 2017 (in Russ.).

Статья поступила в редколлегию 07.02.2018.
Received by editorial board 07.02.2018.

Юбилеи

Jubilees



Виктор Васильевич ТИХОМИРОВ

Viktor Vasil'evich TIKHOMIROV

Исполнилось 60 лет лауреату Государственной премии Республики Беларусь, доктору физико-математических наук, профессору, заслуженному работнику БГУ Виктору Васильевичу Тихомирову.

В. В. Тихомиров родился 28 апреля 1958 г. в г. Минске. В 1980 г. окончил физический факультет Белорусского государственного университета, в 1984 г. – аспирантуру кафедры ядерной физики БГУ. С 1984 г. работает на кафедре ядерной физики и в лаборатории ядерной оптики при этой кафедре. С 1986 г. – сотрудник Института ядерных проблем БГУ. С 1993 г. по настоящее время возглавляет лабораторию ядерной оптики и космомикрофизики научно-исследовательского учреждения «Институт ядерных проблем» БГУ.

За долгие годы научного творчества Виктор Васильевич внес фундаментальный вклад в развитие ядерной физики, физики высоких энергий, ядерной оптики и космологии, подготовил талантливых специалистов и заслужил глубокое уважение коллег.

Широкое международное признание получили работы В. В. Тихомирова по изучению поляризационных явлений при прохождении частиц высоких энергий через кристаллы, коллимации пучков частиц сверхвысоких энергий, проблем описания ранней Вселенной и поиска первичных черных дыр.

Основные научные интересы В. В. Тихомирова относятся к области исследований взаимодействия частиц высоких энергий с кристаллами и их применения в физике высоких энергий. Рост энергий ускорителей в последние десятилетия привел к увеличению масштаба влияния структуры кристаллов на протекающие в них процессы. Предсказанные В. В. Тихомировым закономерности были обнаружены и исследованы в экспериментах в Европейском центре ядерных исследований (ЦЕРН, Швейцария) и экспериментах на микротроне MAMI (г. Майнц, Германия) и получили широкое признание. Виктор Васильевич совместно с В. Г. Барышевским предсказал процесс магнитотормозного образования гамма-квантами электрон-позитронных пар в кристаллах, он также объяснил аномальные потери энергии электронов высоких энергий в кристаллах на основе эффекта радиационного

охлаждения; обнаружил эффект объемного отражения положительно и отрицательно заряженных частиц высоких энергий различными плоскостями одного изогнутого кристалла, эффект многократного увеличения интенсивности излучения гамма-квантов расходящимися пучками электронов высоких энергий в условиях многократного объемного отражения в одном кристалле, эффект увеличения длины деканалирования электронов, вызываемый их захватом в глубине кристалла.

В работах последних лет В. В. Тихомировым также был выявлен ряд таких новых фундаментальных черт движения частиц в кристаллах, как наличие пиков в угловых спектрах частиц, прошедших через изогнутые кристаллы, зависимость эффективной длины деканалирования от глубины, а также несколько новых особенностей некогерентных процессов рассеяния атомами кристалла. Понимание и корректный учет этих эффектов являются залогом построения количественных моделей движения частиц через кристаллы в реальных ситуациях, диктуемых практическими приложениями.

В последние годы В. В. Тихомировым был достигнут уровень теоретических и численных расчетов, позволяющий количественно описывать эксперименты в широкой области ориентации пучка частиц относительно кристаллической решетки, проведенные по его инициативе в ведущих мировых ускорительных центрах. Расчетные методы, развитые Виктором Васильевичем при описании процесса излучения в условиях многократного объемного отражения, применены к случаю образования гамма-квантами электрон-позитронных пар, что позволило впервые провести расчет характеристик этого процесса в условиях падения гамма-квантов под произвольными углами на кристалл и представить проект кристаллического гамма-телескопа с субмиллирадианным угловым разрешением.

С 1995 г. Виктор Васильевич Тихомиров преподает на кафедре ядерной физики. В последние годы он много сил вложил в подготовку кадров для Белорусской АЭС, разработал и читает курсы по физике атомных реакторов и ядерной астрофизике.

Под руководством В. В. Тихомирова защищены три кандидатские диссертации. В настоящее время он также является научным руководителем диссертационной работы на соискание степени кандидата физико-математических наук.

Научные заслуги Виктора Васильевича высоко оценены, он является лауреатом премии Ленинского комсомола БССР 1984 г. и Государственной премии Республики Беларусь 2002 г., в 2018 г. профессор был удостоен гранта Президента Республики Беларусь в области науки, он также награжден рядом грамот БГУ, Министерства образования Республики Беларусь и Высшей аттестационной комиссии Республики Беларусь.

Коллеги и друзья от души поздравляют Виктора Васильевича с юбилеем и желают долгих лет плодотворной работы, творческого вдохновения и новых талантливых учеников.

В. Г. Барышевский,
доктор физико-математических наук, профессор
С. А. Максименко,
доктор физико-математических наук, профессор
А. С. Лобко,
доктор физико-математических наук, доцент
В. М. Анищик,
доктор физико-математических наук, профессор
И. Д. Феранчук,
доктор физико-математических наук, профессор

СОДЕРЖАНИЕ

ОПТИЧЕСКИЕ ПРИБОРЫ

Гулис И. М., Купреев А. Г., Демидов И. Д. Многощелевой спектрометр с дифракционной решеткой и зеркальными объективами для спектроскопии с пространственным разрешением 4

ФИЗИКА ЛАЗЕРОВ

Герасименко В. И., Сташкевич И. В. Влияние матрицы на генерацию непрерывного квазитрехуровневого неодимового лазера при неоднородной накачке [на англ.] 11

Буров Л. И., Горбацевич А. С., Лобацевич П. М. Переходные процессы при поляризационных переключениях в поверхностно излучающих полупроводниковых лазерах 17

ФИЗИКА НАНОСТРУКТУР

Дынич Р. А., Замковец А. Д., Понявина А. Н. Оптические свойства гибридных плазмонных нанокомпозитов 25

Нгуен Фам Куинь Ань, Курилкина С. Н. Генерация бесселевых плазмон-поляритонов в метаматериалах 35

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

Шепелевич В. Г., Щербаченко Л. П. Микроструктура быстрозатвердевшей фольги сплавов системы висмут – олово 46

Смирнова О. Ю., Стельмах Г. Ф., Покотило Ю. М., Петух А. Н., Маркевич В. П., Королик О. В., Мазаник А. В. Оптические и электронные свойства твердых растворов германий – кремний 52

Черенда Н. Н., Углов В. В., Кашевский А. М., Асташинский В. М., Кузьмицкий А. М. Модификация фазового состава и микротвердости поверхностного слоя быстрорежущей стали при комбинированном плазменном и термическом воздействии 61

Бокун Г. С., Ди Каприо Д. Распределения потенциала и концентрации носителей заряда в твердотельном электролите между плоскими электродами 71

Анищик В. М., Горушко В. А., Пилипенко В. А., Понарядов В. В., Солодуха В. А. Влияние быстрой термической обработки исходных кремниевых пластин на процесс их пирогенного окисления 81

ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ

Бручковский И. И., Светашев А. Г., Демин В. С., Бородко С. К., Аникин П. П., Красовский А. Н. Предварительная обработка спектров для анализа по методу дифференциальной оптической абсорбционной спектроскопии 86

ФИЗИКА ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ЯВЛЕНИЙ

Новицкий А. В., Альварес Родригес Р. Х., Галынский В. М. Воздействие оптических сил на неоднородные анизотропные частицы 97

Свистунов А. С. Эмпирические модели распространения радиоволн для анализа внутрисистемной электромагнитной совместимости и безопасности сетей сотовой связи с микросотовой структурой 107

Муратов Т. Т. Уточнение критерия сильной локализации электронов на поверхности полупроводника 117

ФИЗИКА ЯДРА И ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ. РАДИОФИЗИКА

Шершень И. А., Шишкина Т. В. Рождение одиночных калибровочных бозонов в процессах высокоэнергетических лептон-фотонных столкновений 125

ОПТИЧЕСКАЯ ОБРАБОТКА ИНФОРМАЦИИ

Козлов В. Л. Оптимизация размера окна сканирования для измерений дальности по цифровым изображениям 133

АСТРОФИЗИКА

Комаров С. О. Время видимости пульсара, движущегося во внешнем сильном гравитационном поле 141

ИСТОРИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ

Минько А. А., Лапаник В. И., Последович М. Р. Разработка новых ЖК-материалов и устройств на их основе 151

ЮБИЛЕИ

Виктор Васильевич Тихомиров 160

CONTENTS

OPTICAL INSTRUMENTS

Gulis I. M., Kupreyeu A. G., Demidov I. D. Multislit diffraction grating spectrometer with mirror lens for imaging spectroscopy 4

LASER PHYSICS

Gerasimenko V. I., Stashkevitch I. V. The matrix effect on generation of quasi-three-level continuous wave neodymium laser under inhomogeneous pumping 11

Burov L. I., Gorbatsevich A. S., Lobatsevich P. M. Polarization switching transients in surface-emitting semiconductor lasers 17

PHYSICS OF NANOSTRUCTURES

Dynich R. A., Zamkovets A. D., Ponyavina A. N. Optical properties of hybrid plasmonic nanocomposits 25

Nguyen Pham Quynh Anh, Kurilkina S. N. Generation of Bessel plasmon-polaritons in metamaterials 35

CONDENSED STATE PHYSICS

Shepelevich V. G., Shcherbachenko L. P. Microstructure of rapidly solidified foils of alloys of the bismuth – tin system 46

Smirnova O. Yu., Stelmach G. F., Pokotilo Yu. M., Petukh A. N., Markevich V. P., Korolik O. V., Mazanik A. V. Optical and electronic properties of germanium – silicon solid solutions 52

Cherenda N. N., Uglov V. V., Kashevski A. M., Astashynski V. M., Kuzmitski A. M. Modification of high-speed steel phase composition and microhardness by combined plasma and thermal treatment 61

Bokun H. S., Di Caprio D. Potential and charge-carrier concentration distributions in solid electrolyte between flat electrodes 71

Anishchik V. M., Harushka V. A., Pilipenka U. A., Ponariadov V. V., Saladukha V. A. Influence of the rapid thermal treatment of the initial silicon wafers on the process of their pyrogenic oxidation 81

OPTICS AND SPECTROSCOPY

Bruchkouski I. I., Svetashev A. G., Demin V. S., Barodka S. K., Anikin P. P., Krasouski A. N. Preliminary processing of spectra for analysis by method of differential optical absorption spectroscopy 86

PHYSICS OF ELECTROMAGNETIC PHENOMENA

Novitsky A. V., Alvarez Rodriguez R. J., Galynsky V. M. Action of optical forces on inhomogeneous anisotropic particles 97

Svistunov A. S. Empirical radio wave propagation models for analysis of intrasystem electromagnetic compatibility and safety of microcellular communication networks 107

Muratov T. T. Refinement of the criterion for strong localization of electrons on a semiconductor surface 117

ATOMIC NUCLEUS AND ELEMENTARY PARTICLE PHYSICS. RADIO PHYSICS

Shershan I. A., Shishkina T. V. Single gauge bosons production in the high-energy lepton-photon collisions processes 125

OPTICAL DATA PROCESSING

Kozlov V. L. Optimizing the scanning window size for the distance measuring from digital images 133

ASTROPHYSICS

Komarov S. O. Observability time for the pulsar that moves in external strong gravitational field 141

HISTORICAL MATERIALS

Minko A. A., Lapanik V. I., Pasliadovich M. R. Development of new liquid crystal materials and devices 151

JUBILEES

Viktor Vasil'evich Tikhomirov 160

Журнал включен Высшей аттестационной комиссией Республики Беларусь в Перечень научных изданий для опубликования результатов диссертационных исследований по физико-математическим наукам (в области теоретической, экспериментальной и прикладной физики).

Журнал включен в библиографическую базу данных научных публикаций «Российский индекс научного цитирования» (РИНЦ).

Журнал Белорусского государственного университета. Физика. № 2. 2018

Учредитель:
Белорусский государственный университет

Юридический адрес: пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск.
Почтовый адрес: пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск.
Тел. (017) 259-70-74, (017) 259-70-75.
E-mail: jphys@bsu.by

«Журнал Белорусского государственного университета. Физика» издается с января 1969 г. До 2017 г. выходил под названием «Вестник БГУ. Серия 1, Физика. Математика. Информатика» (ISSN 1561-834X).

Редактор *Е. В. Павлова*
Технический редактор *В. В. Кильдишева*
Корректор *Л. А. Меркуль*

Подписано в печать 31.05.2018.
Тираж 140 экз. Заказ 176.

Республиканское унитарное предприятие «Информационно-вычислительный центр Министерства финансов Республики Беларусь».
ЛП № 02330/89 от 03.03.2014.
Ул. Кальварийская, 17, 220004, г. Минск.

© БГУ, 2018

Journal of the Belarusian State University. Physics. No. 2. 2018

Founder:
Belarusian State University

Registered address: 4 Niezaliežnasci Ave., Minsk 220030.
Correspondence address: 4 Niezaliežnasci Ave., Minsk 220030.
Tel. (017) 259-70-74, (017) 259-70-75.
E-mail: jphys@bsu.by

«Journal of the Belarusian State University. Physics» published since January, 1969.
Until 2017 named «Vestnik BGU. Seriya 1, Fizika. Matematika. Informatika» (ISSN 1561-834X).

Editor *E. V. Pavlova*
Technical editor *V. V. Kil'disheva*
Proofreader *L. A. Merkul'*

Signed print 31.05.2018.
Edition 140 copies. Order number 176.

Republican Unitary Enterprise «Informatsionno-vychislitel'nyi tsentr Ministerstva finansov Respubliki Belarus'».
License for publishing No. 02330/89, 3 March, 2014.
17 Kal'varyjskaja Str., Minsk 220004.

© BSU, 2018