



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

3

2017

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.
- Малярович 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 «Белмикрoанализ» 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.
- Хайнцманн 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.
Pogrebnyak 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.

УДК 681.785.554

МНОГОЩЕЛЕВОЙ СПЕКТРОМЕТР С ДИФРАКЦИОННОЙ РЕШЕТКОЙ ДЛЯ СПЕКТРОСКОПИИ С ПРОСТРАНСТВЕННЫМ РАЗРЕШЕНИЕМ

И. М. ГУЛИС¹⁾, А. Г. КУПРЕЕВ¹⁾, И. Д. ДЕМИДОВ¹⁾, Е. С. ВОРОПАЙ¹⁾

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

Отмечено, что многощелевые дисперсионные приборы для спектроскопии с пространственным разрешением обеспечивают одновременное получение на детекторе полного куба данных $I(x, y, \lambda)$. Как правило, в таких спектрометрах в качестве диспергирующего элемента используются призмы, но из-за значительной спектральной зависимости величины их дисперсии эффективность использования площади двумерного фотоприемника, на котором отображается информация, содержащаяся в кубе данных $I(x, y, \lambda)$, существенно уменьшается. Предложен принцип использования дифракционной решетки в качестве диспергирующего элемента, позволяющий существенно увеличить информационную емкость благодаря тому, что на детектор попадают световые пучки только необходимого порядка дифракции. Это обеспечивается за счет использования пропускающей дифракционной решетки, расположенной вблизи многощелевой входной маски спектрометра в неколлимированном пучке. Достоинством предложенной системы является возможность оперативного изменения дисперсии путем смещения

Образец цитирования:

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

For citation:

Gulis I. M., Kupreyeu A. G., Demidov I. D., Voropay E. S. Multislit diffraction grating spectrometer for imaging spectroscopy. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2017. No. 3. P. 4–11 (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.

Евгений Семенович Воропай – доктор физико-математических наук, профессор; заведующий кафедрой лазерной физики и спектроскопии физического факультета.

Authors:

Igor Gulis, doctor of science (physics and mathematics); professor at the department of laser physics and spectroscopy, faculty of physics.

gulis@bsu.by

Alexander 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 Demidov, postgraduate student at the department of laser physics and spectroscopy, faculty of physics.

ivandemidov@tut.by

Eugene Voropay, doctor of science (physics and mathematics), full professor; head of the department of laser physics and spectroscopy, faculty of physics.

voropay@bsu.by

дифракционной решетки вдоль оптической оси. Проведено численное моделирование многоцелевого спектрометра. Показано, что при использовании объективов Nikon Nikkor AF 50 mm 1.4D полуширина кружков рассеяния в направлении дисперсии не превышает 15 мкм в рабочем спектральном диапазоне 405–700 нм, что соответствует спектральному разрешению на уровне 10 нм при числе разрешаемых пространственных элементов до $2 \cdot 10^4$.

Ключевые слова: мультиспектральный; дисперсионный; дифракционная решетка; многоцелевой.

MULTISLIT DIFFRACTION GRATING SPECTROMETER FOR IMAGING SPECTROSCOPY

I. M. GULIS^a, A. G. KUPREYEU^a, I. D. DEMIDOV^a, E. S. VOROPAY^a

^aBelarusian State University, Niezaliežnasci Avenue, 4, 220030, Minsk, Belarus

Corresponding author: I. M. Gulis (gulis@bsu.by)

Multislit dispersive instruments for imaging spectroscopy allow to snapshot a data cube $I(x, y, \lambda)$ on a photodetector. Usually such spectrometers use a prism as a dispersive element. Due to a significant spectral dependence of the prism dispersion, the efficacy of using the 2D photodetector area, where a data cube $I(x, y, \lambda)$ is projected, is substantially decreased. According to our approach, a diffraction grating dispersive element offers a dramatic increase in the information capacity owing to elimination of the useless diffraction-order rays due to location of a transmission diffraction grating near the multislit entrance mask of a spectrometer in a noncollimated beam. The proposed design has the advantage of quick dispersion tuning by shift of the grating along the optical axis. A computer simulation of a multislit spectrometer has been performed. It is shown that FWHM of beam spots in the dispersion direction is not higher than 15 μm in the working spectral range 405–700 nm when using the Nikon Nikkor AF 50 mm 1.4D photographic lenses. That corresponds to a spectral resolution of about 10 nm for the number of resolved spatial elements up to $2 \cdot 10^4$.

Key words: multispectral; dispersive; diffraction grating; multislit.

Спектроскопия с пространственным разрешением (СПР) в последние десятилетия все активнее используется в дистанционном зондировании земной поверхности, медицине, сельском хозяйстве, криминалистике, фармакологии, контроле качества продукции и других областях [1–5]. Массив спектрально-пространственной информации об объекте $I(x, y, \lambda)$ чаще всего получают путем последовательной регистрации спектра для участков изображения объекта (сканирование может осуществляться различными способами) [6], а также регистрации квазимонохроматических изображений интересующей области целиком в наборе длин волн (посредством переключаемых либо перестраиваемых светофильтров) [7]. Существенным ограничением обоих подходов является необходимость последовательного выполнения серии измерений, что не только времязатратно, но и принципиально ограничивает их применимость к работе с нестационарными объектами (например, земной ландшафт с движущимися объектами и изменяющейся освещенностью, органы и ткани *in vivo*, предметы на конвейере, пламя). В связи с этим перспективно направление СПР, в рамках которого разрабатываются подходы для получения $I(x, y, \lambda)$ в одном акте измерения (snapshot hyperspectroscopy [8], или мгновенная гиперспектроскопия – МГС).

В большинстве актуальных подходов МГС куб данных $I(x, y, \lambda)$ регистрируется на двумерной матрице фотоприемника, при этом способ отображения куба на плоскость имеет существенное значение с точки зрения информационной емкости и характеристик сигнала. Чаще всего используются различные варианты размещения на детекторе совокупности узкополосных спектральных изображений объекта либо спектров набора пространственных выборок (срезов) изображения объекта [9; 10]. Разрабатываются также подходы на основе более сложных принципов (хроматографический изображающий спектрометр (CTIS) [11], методы фурье-спектроскопии [12] и прочие), однако они ограниченно применимы для анализа объектов с резкими пространственными вариациями характеристик, а обеспечиваемый ими результат восстановления $I(x, y, \lambda)$ недостаточно устойчив к шумам.

Подходы, основанные на получении спектров от пространственных фрагментов изображения объекта, могут быть реализованы в различных вариантах. Так, реформатирование двумерного входного поля

изображения в столбец, выполняющий функцию входной щели дисперсионного спектрометра, осуществляется оптоволоконной системой [9], однако приборы такого рода сложные и дорогие, поэтому их применение целесообразно в рамках уникальных масштабных проектов, например астрономических. В более простом варианте изображение объекта строится на матрице микролинз [13], в общей фокальной плоскости которой формируется совокупность кружков рассеяния, выступающих в качестве функционального аналога системы входных щелей дисперсионного спектрометра. В результате в фокальной плоскости камерного объектива прибора формируется множество спектров. Недостатком такого подхода является высокий вклад рассеянного света от соседних микролинз и их границ [13], а также требование малой расходимости пучков, формирующих изображение на микролинзовой матрице.

В еще более простом варианте многощелевого дисперсионного спектрометра (МДС) в плоскости промежуточного изображения объекта размещается маска, содержащая множество отверстий, расположенных регулярным образом [14]. В таких приборах в качестве дисперсионного элемента обычно используются призмы невысокой дисперсии. При этом если рабочий спектральный диапазон МДС широк (например, от 400 до 700–800 нм), то проблемой становится сильная спектральная зависимость угловой дисперсии призмы (дисперсия большинства стекол в указанном диапазоне изменяется в 10–12 раз). Ослабление спектральной зависимости может быть достигнуто использованием составных призм [14], скомбинированных в установке с вычитанием дисперсии (расчеты показывают, что так можно уменьшить диапазон изменения дисперсии примерно до трехкратного). Однако при этом неизбежно существенное снижение общей дисперсии, которая может оказаться недостаточной для получения спектров даже небольшой длины от отдельных входных щелей – локальных спектров (ЛС) – в плоскости фотоприемника МДС.

Использование дифракционной решетки в качестве дисперсионного элемента позволяет обеспечить пренебрежимо малую спектральную вариацию угловой дисперсии даже в широком спектральном диапазоне. Однако традиционная схема установки дифракционной решетки в спектрометре (в параллельном пучке, формируемом коллиматорным объективом) неприемлема для МДС из-за неэффективного использования площади фотоприемника и уменьшения информационной емкости куба данных, поскольку отображает на детекторе близко расположенные спектры нулевого и ± 1 -го порядков (более высокие порядки целесообразно «отсекать» светофильтром).

В настоящей работе предложены варианты схемных решений МДС с пропускающей дифракционной решеткой, в которых устранена проблема нежелательных порядков. Расчеты и экспериментальные оценки ориентированы на достижение спектрального разрешения $\delta\lambda \sim 10$ нм в диапазоне 400–700 нм (~ 30 спектральных полос), что достаточно для регистрации с минимальными искажениями спектров отражения земной поверхности, растений и других биологических объектов: как правило, в подобных спектрах отсутствуют структурные элементы с $\delta\lambda < 30$ нм.

Если предположить, что оптическая система спектрометра имеет увеличение 1:1, а ширина щелей и размеры пикселей составляют менее 5 мкм, то размер кружков рассеяния в направлении дисперсии будет определяться преимущественно абберациями оптической системы. В качестве ожидаемой ширины абберационно уширенного спектрального изображения щели $\Delta l_{\text{абер}}$ примем 15 мкм, что соответствует разрешению, достижимому при использовании в качестве объективов фотообъективов Nikon AF 50 mm. Таким образом, длина ЛС при 30 разрешаемых спектральных элементах составит ~ 450 нм. Указанным требованиям удовлетворяет маска со структурой, приведенной на рис. 1, а. Маска обеспечивает длину спектра 400 мкм, а выделенная на рис. 1, а, пунктирной линией структурная ячейка имеет размер примерно 100×100 мкм, что определяет пространственное разрешение на уровне 100 точек на 1 мм^2 . Оценив площадь рабочей области на фотоприемной матрице в 200 мм^2 , приходим к общему разрешению системы в размере $2 \cdot 10^4$ пространственных элементов, что достаточно для многих задач СПР.

Фотолитографически изготовлено несколько масок подобной структуры размером 24×36 мм, отличающихся масштабом структурных ячеек – 50×50 ; 100×100 и 200×200 мкм – и пропорциональными (аналогично рис. 1, а) размерами щелей. В целях экспериментальной апробации масок и оценки реальной разрешающей способности объективов был собран макет МДС в традиционной конфигурации с объективами Nikon Nikkor AF 50 mm 1.4D и Nikon Nikkor AF 50 mm 1.8D (Япония) в качестве коллиматорного и камерного соответственно и с призмой с преломляющим углом 30° в качестве дисперсионного элемента. На рис. 1, б, представлен фрагмент изображения на фотоприемнике (камера Nikon D3300, матрица 16×22 мм, $24 \cdot 10^6$ пк размером 4×4 мкм), полученный при равномерной засветке входной маски излучением ртутной лампы ПРК-4. На рис. 1, в, приведен пример ЛС, отмечены линии 435 и 546 нм и неразрешенный дублет 577/579 нм. Видно, что достигаемое спектральное разрешение – не хуже 10 нм, присутствует значительная вариация спектрального разрешения в зависимости от длины волны. Пространственное разрешение оценивается в 15 мкм.

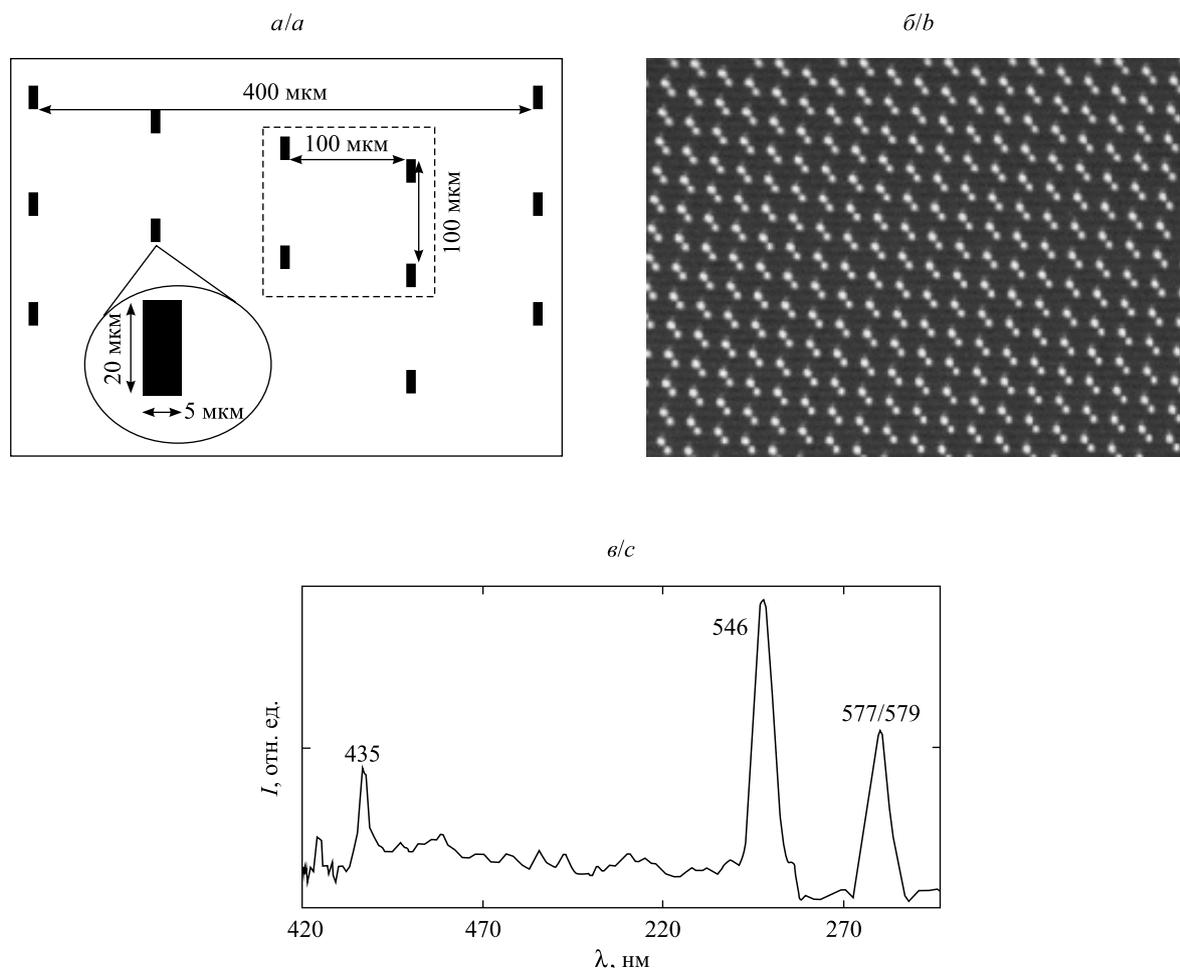


Рис. 1. Результаты экспериментальной апробации макета МДС с призмой в качестве диспергирующего элемента:
 а – структура маски; б – изображение множества ЛС на фотоприемнике;
 в – пример ЛС. I – интенсивность излучения

Fig. 1. Results of experimental approbation of a multislit dispersive spectrometer model with a prism as a dispersive element: a – mask scheme; b – image of several local spectra on the photodetector; c – example of a local spectrum. I – intensity of radiation

Предлагаемый принцип использования пропускающей дифракционной решетки в МДС иллюстрируется на рис. 2, a . На рис. 2, b , показано мнимое изображение (O_λ) точки O , соответствующее лучам с длиной волны λ , прошедшим через решетку; на фотодетекторе P ему соответствует точка O_λ^1 . Линейная дисперсия такого спектрометра следующая:

$$\frac{dl}{d\lambda} = h \frac{d\varphi}{d\lambda} \frac{l_b}{l_f} = h \frac{m}{t \cos \beta} \frac{l_b}{l_f},$$

где $\frac{d\varphi}{d\lambda}$ – угловая дисперсия решетки; h – расстояние от маски до решетки; $\frac{l_b}{l_f}$ – увеличение системы;

m и β – порядок и угол дифракции; t – период решетки (см. рис. 2). Для получения ЛС небольшой длины дифракционную решетку следует располагать на малом расстоянии от маски. К примеру, для решетки с 300 штрих/мм при $h = 5$ мм и нормальном падении для первого порядка $\frac{dl}{d\lambda} = 1,5 \cdot 10^{-3}$ мм/нм спектральный интервал $\Delta\lambda = 300$ нм отображается на длине 450 мкм. Выбором числовой апертуры входных (формирующих изображение на маске) пучков и диаметра линзы L можно блокировать прохождение пучков всех порядков дифракции, кроме первого.

Ряд факторов ограничивают возможности и область применения такой простой системы. Прежде всего, это aberrации, вносимые решеткой при большой числовой апертуре проходящих пучков. В качестве приблизительной оценки влияния этого фактора могут быть использованы результаты анализа

отклонения точек пересечения с плоскостью M (см. рис. 2) краевых лучей пучка от соответствующей точки для осевого луча (что определяет верхний предел размеров абберационного кружка рассеяния): для решетки с 300 штрих/мм при числовой апертуре (NA), равной 0,05, отклонение не превышает 10 мкм.

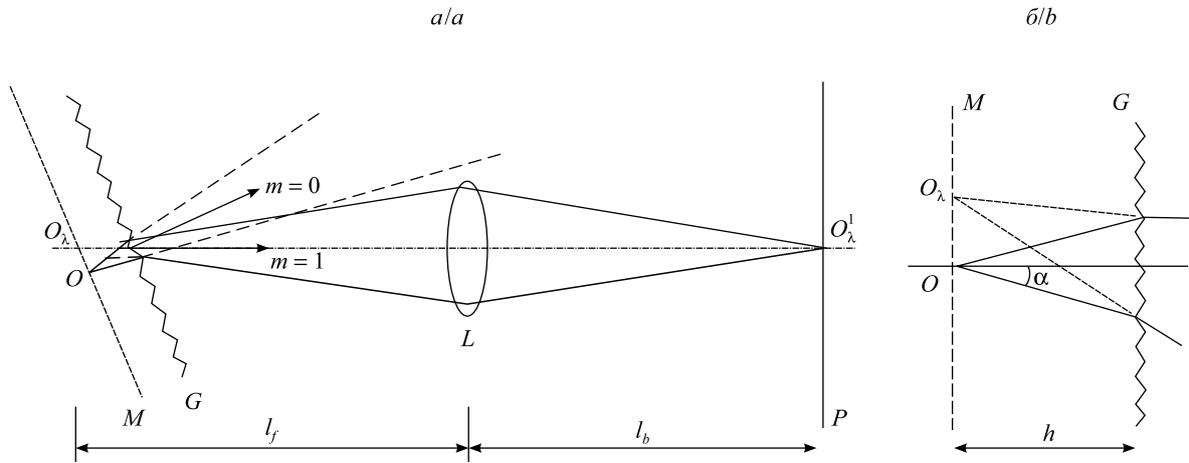


Рис. 2. Схема формирования спектрального изображения в МДС с дифракционной решеткой:
a – расположение компонентов системы и прохождение пучков разных порядков дифракции;
b – увеличенный фрагмент области, содержащей объект и дифракционную решетку.
M – щелевая маска; *G* – дифракционная решетка; *L* – объектив; *P* – фотодетектор;
 α – апертурный угол; *m* – порядок дифракции

Fig. 2. Schematic of the spectral image formation in a multislit dispersive spectrometer with a diffraction grating: *a* – system layout and propagation of different diffraction order beams; *b* – zoomed fragment of area containing object and diffraction grating. *M* – slit mask; *G* – diffraction grating; *L* – lens; *P* – photodetector; α – aperture angle; *m* – diffraction order

В реальной системе абберации объективов зачастую вносят существенный вклад в размер кружка рассеяния. Моделирование схемы, приведенной на рис. 2, в программе для оптического дизайна *ZEMAX*[®] показало, что использование объектива Nikon Nikkor AF 50 mm (увеличение варьировалось от 0,5 до 2,0) дает неудовлетворительные результаты по размерам кружков рассеяния, что, вероятно, обусловлено оптимизацией объектива для работы с удаленными объектами. В связи с этим предложен и проанализирован вариант схемы с двумя объективами (рис. 3).

Учитывая то, что объективы оптимизированы для работы с объектами, расстояние до которых много больше расстояния до изображения, целесообразно рассматривать систему, в которой оси отклоненных дифракционной решеткой пучков от разных точек поля (маски) параллельны друг другу (телецентрическая система) и для средней длины волны рабочего диапазона параллельны оптической оси объектива. Тогда угол α_0 падения осевых лучей пучков, формирующих изображение на маске, должен быть равен $\alpha_0 = \arcsin \frac{m\lambda}{t}$ (к примеру, при $m = 1$, N (количество штрихов) = $\frac{1}{t} = 300 \text{ мм}^{-1}$ и $\lambda_0 = 550 \text{ нм}$, $\alpha_0 = 0,166$).

Рабочей областью маски будем считать окружность с радиусом R_{\max} . Осевые лучи пучков от отдельных щелей маски параллельны оптической оси, поэтому они пересекаются в переднем фокусе объектива 3 – в точке O . Разместив объектив 5 так, что его соответствующий фокус совпадает с точкой O , получаем симметричную схему. В плоскости P , перпендикулярной общей оптической оси и проходящей через точку O , целесообразно разместить диафрагму, блокирующую порядки дифракции.

Размер пятна D'_0 , получаемого от точки маски, находящейся на удалении R_{\max} от центра в плоскости P в направлении оси y , приближенно равен

$$D'_0 = \frac{f \cdot 2NA}{\cos \left(\arctg \frac{R_{\max}}{f} \right)},$$

где f – фокусное расстояние объектива; NA – числовая апертура пучков, формирующих изображение на маске. Условие отсутствия пересечения пятна в плоскости D от пучка, отвечающего коротковолновому краю рабочего диапазона $\lambda_c = 400 \text{ нм}$, с пятном от пучка нулевого порядка можно оценить как

$$y_0 - y_c = f \left(\operatorname{tg} \alpha_0 - \operatorname{tg} \left(\arcsin \left(\frac{m(\lambda_0 - \lambda_c)}{t} \right) \right) \right) > D'_0, \quad (1)$$

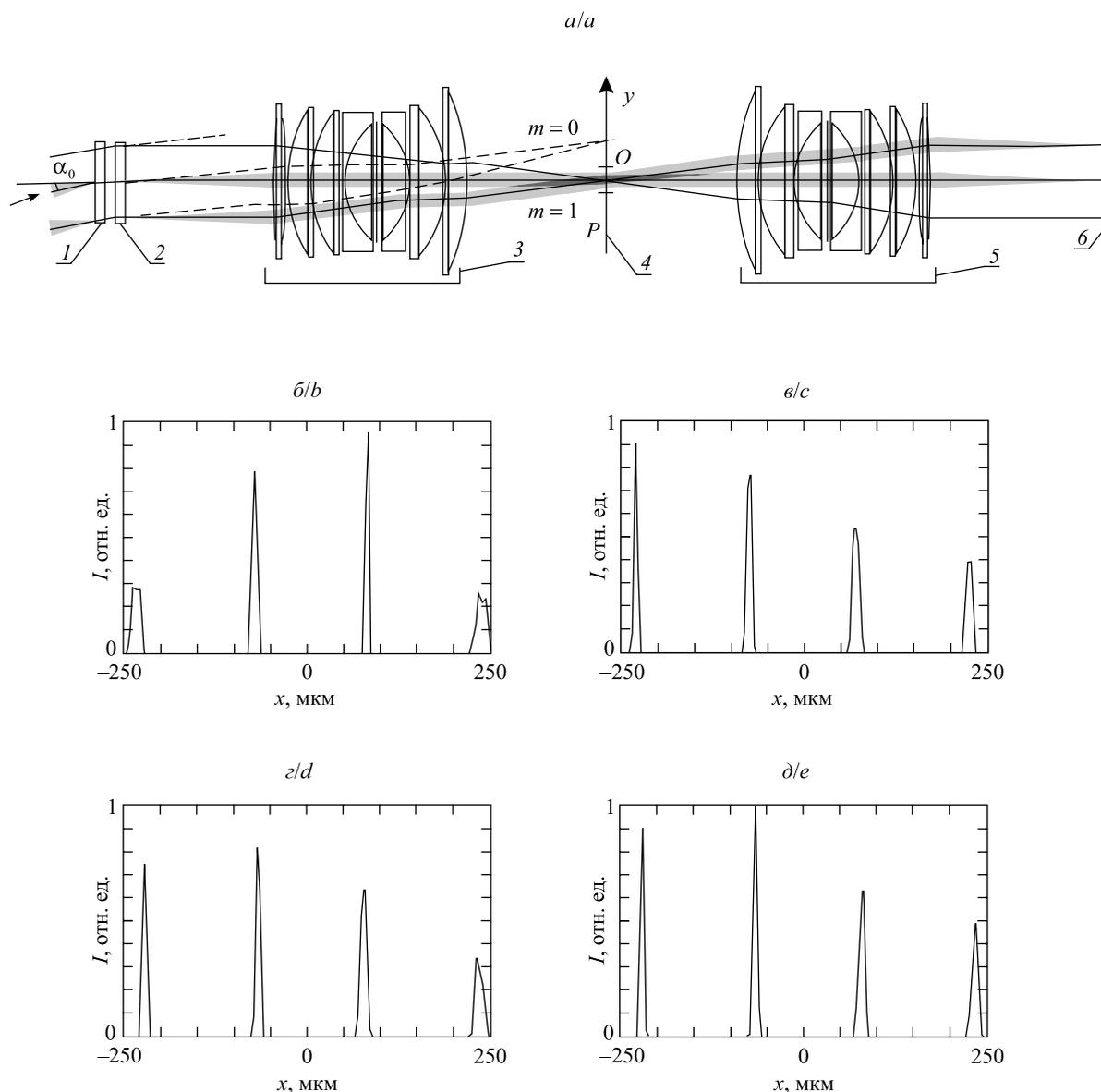


Рис. 3. Оптическая схема МДС на основе объективов Nikon Nikkor AF 50 mm (a):
 1 – многосщелевая маска; 2 – пропускающая дифракционная решетка; 3, 5 – объектив;
 4 – диафрагма; 6 – детектор. Направление дисперсии (ось y) указано стрелкой,
 ось x перпендикулярна плоскости рисунка; результаты численного моделирования
 сечения кружков рассеяния в направлении y для центра поля (б), крайней точки поля,
 лежащей на биссектрисе угла между x и y (в), края поля в направлении y (д)
 и направлении x (е)

Fig. 3. Optical design of a multislit dispersive spectrometer based on Nikon Nikkor AF 50 mm lenses (a):
 1 – multislit mask; 2 – transmission diffraction grating; 3, 5 – lens; 4 – diaphragm; 6 – detector.
 The dispersion direction (y -axis) is indicated by an arrow, the x -axis is perpendicular to the plane of the figure;
 the computer simulation results for beam spots in the y direction at the center of the field (b),
 at the extreme point lying on the bisector of the angle between the x and y directions (c),
 at the field edge in the y (d) and x (e) directions

где y_c – смещение центра кружка рассеяния пучка с λ_c относительно центра кружка пучка с λ_0 ; y_0 – смещение оси пучка нулевого порядка. Для малых углов α_0 условие (1) можно упростить:

$$\text{NA} < \frac{1}{2} \left(\alpha_0 - \frac{\lambda_0 - \lambda_c}{t} \right). \quad (2)$$

К примеру, при указанных выше параметрах из (2) следует, что NA должна быть меньше 0,05. Оптимальна овальная форма диафрагмы для отсечения порядков с размером b_y (вдоль направления y) и в перпендикулярном направлении b_x (вдоль направления x):

$$b_y = f \left(\frac{\lambda_K - \lambda_C}{t} + 2NA \right), \quad b_x = f \cdot 2NA,$$

где λ_K – длина волны длинноволнового края рабочего спектрального диапазона.

Для оценки изображающих характеристик предложенной системы проведено численное моделирование в программе *ZEMAX*[®]. Оптическая система построена на базе объективов Nikon Nikkor AF 50 mm 1.4D. Для формирования изображения на маске применялся четырехлинзовый микроскопный объектив (МО) (увеличение ~8,5 раза). Диаметр рабочего поля изображения составляет 16 мм (минимальный размер детектора камеры Nikon D3300), что соответствует диаметру поля в предметной плоскости МО, равному 1,95 мм. Для того чтобы сделать параллельными оси пучков от разных точек поля после прохождения МО, использована плоско-выпуклая линза, расположенная вблизи плоскости маски (стекло ВК7 с $n = 1,5168$, радиус составляет 85 мм, толщина – 1 мм).

При моделировании задавался размер щелей в маске 5×20 мкм, толщина ее подложки – 2 мм, толщина пропускающей дифракционной решетки – 2 мм (обе – стекло ВК7). Моделирование проводилось для спектрального диапазона 405–700 нм (центральная длина волны размером 550 нм – ось соответствующего пучка, параллельная оптической оси системы). Результаты показывают, что полуширина кружков рассеяния в направлении дисперсии $\Delta l \leq 15$ мкм (лишь для края диапазона в отдельных точках $\Delta l \leq 20$ мкм). На рис. 3, б–г, показаны сечения кружков рассеяния для длин волн 405; 500; 600 и 700 нм.

Предложенный принцип СПР с использованием многощелевой маски и дифракционной решетки в качестве диспергирующего элемента обеспечивает одновременную регистрацию пространственно-спектрального куба данных с дисперсией, практически неизменной во всем спектральном рабочем диапазоне. При этом величина линейной дисперсии системы может изменяться посредством продольного сдвига дифракционной решетки, что позволяет в широких пределах варьировать аналитические характеристики приборов, построенных на основе предлагаемого принципиального схемного решения. Проанализированный вариант оптической системы адаптирован для экспериментального прототипирования. Представляется перспективным использование прибора для СПР биообъектов, включая флуоресцентную микроспектрометрию, в исследованиях в области фотодинамической терапии.

Библиографические ссылки

1. Xie Y., Sha Z., Yu M. Remote sensing imagery in vegetation mapping : a review // *J. Plant Ecol.* 2008. Vol. 1, № 1. P. 9–23.
2. Lu G., Fei B. Medical hyperspectral imaging : a review // *J. of Biomed. Optics.* 2014. Vol. 19, № 1. P. 010901-1–010901-23.
3. 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.
4. Kuula J., Pölonen I., Puupponen 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.
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, № 2. P. 157–171.
6. Mouroulis P., Green R. O., Chrien T. G. Design of pushbroom imaging spectrometers for optimum recovery of spectroscopic and spatial information // *Appl. Opt.* 2000. Vol. 39, № 13. P. 2210–2220.
7. Tran C. D. Principles, Instrumentation, and Applications of Infrared Multispectral Imaging, An Overview // *Anal. Lett.* 2005. Vol. 38, № 5. P. 735–752.
8. Hagen N., Kudenov M. W. Review of snapshot spectral imaging technologies // *Opt. Eng.* 2013. Vol. 52, № 9. P. 090901-1–090901-23.
9. Bland-Hawthorn J., Bryant J., Robertson G., et al. Hexabundles: imaging fiber arrays for low-light astronomical applications // *Opt. Expr.* 2011. Vol. 19, № 3. P. 2649–2661.
10. Bodkin A., Sheinis A., Norton A., et al. Video-rate chemical identification and visualization with snapshot hyperspectral imaging // *Proc. SPIE.* 2012. Vol. 8374. P. 83740C-1–83740C-13.
11. Volin C. E., Gleeson T. M., Descour M. R., et al. Portable computed-tomography imaging spectrometer // *Proc. SPIE.* 1996. Vol. 2819. P. 224–230.
12. Kudenov M. W., Dereniak E. L. Compact real-time birefringent imaging spectrometer // *Opt. Expr.* 2012. Vol. 20, № 16. P. 17973–17986.
13. 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.
14. Bodkin A., Sheinis A., Norton A., et al. Snapshot hyperspectral imaging – the hyperpixel array camera // *Proc. SPIE.* 2009. Vol. 7334. P. 73340H-1–73340H-11.

References

1. Xie Y., Sha Z., Yu M. Remote sensing imagery in vegetation mapping : a review. *J. Plant Ecol.* 2008. Vol. 1, No. 1. P. 9–23.
2. Lu G., Fei B. Medical hyperspectral imaging : a review. *J. Biomed. Optics.* 2014. Vol. 19, No. 1. P. 010901-1–010901-23.
3. 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.

4. Kuula J., Pölonen I., Puupponen 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.
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, No. 2. P. 157–171.
6. Mouroulis P., Green R. O., Chrien T. G. Design of pushbroom imaging spectrometers for optimum recovery of spectroscopic and spatial information. *Appl. Opt.* 2000. Vol. 39, No. 13. P. 2210–2220.
7. Tran C. D. Principles, Instrumentation, and Applications of Infrared Multispectral Imaging, An Overview. *Anal. Lett.* 2005. Vol. 38, No. 5. P. 735–752.
8. Hagen N., Kudenov M. W. Review of snapshot spectral imaging technologies. *Opt. Eng.* 2013. Vol. 52, No. 9. P. 090901-1–090901-23.
9. Bland-Hawthorn J., Bryant J., Robertson G., et al. Hexabundles: imaging fiber arrays for low-light astronomical applications. *Opt. Expr.* 2011. Vol. 19, No. 3. P. 2649–2661.
10. Bodkin A., Sheinis A., Norton A., et al. Video-rate chemical identification and visualization with snapshot hyperspectral imaging. *Proc. SPIE*. 2012. Vol. 8374. P. 83740C-1–83740C-13.
11. Volin C. E., Gleeson T. M., Descour M. R., et al. Portable computed-tomography imaging spectrometer. *Proc. SPIE*. 1996. Vol. 2819. P. 224–230.
12. Kudenov M. W., Dereniak E. L. Compact real-time birefringent imaging spectrometer. *Opt. Expr.* 2012. Vol. 20, No. 16. P. 17973–17986.
13. 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.
14. Bodkin A., Sheinis A., Norton A., et al. Snapshot hyperspectral imaging – the hyperpixel array camera. *Proc. SPIE*. 2009. Vol. 7334. P. 73340H-1–73340H-11.

Статья поступила в редколлегию 05.05.2017.
Received by editorial board 05.05.2017.

ФОРМИРОВАНИЕ ЦЕНТРОСИММЕТРИЧНЫХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ СВЕТОВОЙ ИНТЕНСИВНОСТИ ДЛЯ ЭКСПОНИРОВАНИЯ ФОТОЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ ОРИЕНТИРУЮЩИХ СЛОЕВ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ЛИНЗ

**В. С. БЕЗРУЧЕНКО¹⁾, В. В. МОГИЛЬНЫЙ²⁾, А. И. СТАНКЕВИЧ²⁾,
Ал. Ан. МУРАВСКИЙ¹⁾, Ан. Ал. МУРАВСКИЙ¹⁾, И. Н. КУХТО¹⁾**

¹⁾Институт химии новых материалов НАН Беларуси, ул. Ф. Скорины, 36, 220141, г. Минск, Беларусь

²⁾Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Беларусь

Отмечено, что при УФ-облучении слоев градиентных бензальдегидных полимеров происходит плавный переход от гомеотропной к планарной ориентации жидкокристаллических молекул на их поверхности. В целях использования этого эффекта для создания жидкокристаллических линз необходимо при облучении обеспечить неоднородное локальное распределение освещенности на поверхности ориентирующего слоя с максимальной интенсивностью в центре освещенного круга и ее уменьшением к границам. Подобные распределения можно получить, освещая фоточувствительный слой через фотомаску с круглыми отверстиями. Существенно, что применение такой схемы обеспечивает также возможность создания в один прием подложек для массивов из повторяющихся линзовых структур, имеющих большое прикладное значение. Проведено численное моделирование световых распределений от плоских круговых ламбертовских источников для экспонирования фоточувствительных ориентирующих слоев жидкокристаллических линз. Выполнен экспериментальный анализ профиля распределения интенсивности излучения, создаваемого коллимированным световым пучком и фотомаской с круглыми отверстиями. Определены условия для формирования профиля распределения интенсивности излучения, близкого к параболическому. Изготовлены ориентирующие слои на основе градиентных полимеров с бензальдегидными боковыми группами и жидкокристаллическая ячейка с массивом управляемых линз.

Ключевые слова: жидкокристаллическая линза; градиентные ориентирующие слои; фотосшиваемые бензальдегидные полимеры.

Образец цитирования:

Безрученко В. С., Могильный В. В., Станкевич А. И., Муравский Ал. Ан., Муравский Ан. Ал., Кухто И. Н. Формирование центросимметричных распределений световой интенсивности для экспонирования фоточувствительных ориентирующих слоев жидкокристаллических линз // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2017. № 3. С. 12–19.

For citation:

Bezruchenko V. S., Mahilny U. V., Stankevich A. I., Muravsky Al. An., Muravsky An. Al., Kukhta I. N. The formation of the centrosymmetric distributions of light intensity for exposure of photosensitive alignment layers of LC lenses. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2017. No. 3. P. 12–19 (in Russ.).

Авторы:

Вероника Сергеевна Безрученко – младший научный сотрудник лаборатории материалов и технологий ЖК-устройств.

Владимир Васильевич Могильный – доктор физико-математических наук, профессор; профессор кафедры физической оптики физического факультета.

Александр Ильич Станкевич – кандидат химических наук; старший научный сотрудник кафедры физической оптики физического факультета.

Александр Анатольевич Муравский – кандидат физико-математических наук; заведующий лабораторией материалов и технологий ЖК-устройств.

Анатолий Александрович Муравский – кандидат физико-математических наук; ведущий научный сотрудник лаборатории материалов и технологий ЖК-устройств.

Ирина Николаевна Кухто – научный сотрудник лаборатории материалов и технологий ЖК-устройств.

Authors:

Veronika Bezruchenko, junior researcher at the laboratory of materials and technologies of LC devices.

veronika.bezruchenko@gmail.com

Uladzimir Mahilny, doctor of science (physics and mathematics), full professor; professor at the department of physical optics, faculty of physics.

mogilny@bsu.by

Alexander Stankevich, PhD (chemistry); senior researcher at the department of physical optics, faculty of physics.

stankevich_aleks@mail.ru

Alexander Muravsky, PhD (physics and mathematics); head of the laboratory of materials and technologies of LC devices.

alexander.muravsky@ichnm.basnet.by

Anatoli Muravsky, PhD (physics and mathematics); leading researcher at the laboratory of the materials and technologies of LC devices.

anatoli_murauski@yahoo.com

Iryna Kukhta, researcher at the laboratory of the materials and technologies of LC devices.

iryna.kukhta@tut.by

THE FORMATION OF THE CENTROSYMMETRIC DISTRIBUTIONS OF LIGHT INTENSITY FOR EXPOSURE OF PHOTSENSITIVE ALIGNMENT LAYERS OF LC LENSES

V. S. BEZRUCHENKO^a, U. V. MAHILNY^b, A. I. STANKEVICH^b,
Al. An. MURAVSKY^a, An. Al. MURAVSKY^a, I. N. KUKHTA^a

^aInstitute of Chemistry of New Materials, National Academy of Sciences of Belarus,
F. Skaryny Street, 36, 220141, Minsk, Belarus

^bBelarusian State University, Niezaliežnasti Avenue, 4, 220030, Minsk, Belarus
Corresponding author: V. S. Bezruchenko (veronika.bezruchenko@gmail.com)

Under UV irradiation of the gradient benzaldehyde polymer layers, a gradual transition from homeotropic to planar alignment of mesogenic molecules occurs on their surface. To use this effect to produce liquid crystal lenses, it is necessary to create an inhomogeneous local distribution of illumination on the surface of the orienting layer with a maximum intensity in the center of the illuminated circle and with its decrease to the boundaries. Similar distributions can be obtained by illuminating the photosensitive layer through a photomask with round holes. It is essential that the use of such a scheme also provides the possibility of creating in one process the substrates for arrays of repetitive lens structures which are of great value in engineering. In this paper, the light distributions from planar round Lambert sources for exposure of the photosensitive alignment layers of liquid crystal lenses are modeled by the numerical methods. An experimental analysis of the radiation intensity profile created by using the collimated light beam and photomask with round holes is performed. The conditions for the formation of a radiation intensity distribution profile close to the parabolic one are chosen. The alignment layers based on gradient polymers with benzaldehyde side groups and the liquid crystal cell with an array of switchable lenses are manufactured.

Key words: liquid crystal lens; gradient alignment layer; photocrosslinking benzaldehyde polymers.

Введение

Существует ряд методов изготовления адаптивных линзовых структур в жидкокристаллических (ЖК) ячейках [1–4]. В то же время оптимизация технологического исполнения и достигаемых технических параметров ЖК-линз остается актуальной задачей. Особенно это касается способов и процессов изготовления массивов (блоков) ЖК-линз в связи с их прикладным значением для камер и микроскопов светового поля [5; 6], автостереоскопических дисплеев [7] и других приложений линзовых растров.

Некоторые способы создания ЖК-линз и их массивов основываются на формировании в ЖК-ячейке колоколообразного распределения (распределений) углов преднаклона ЖК-молекул [8; 9] (рис. 1). Вместе с ним возникают аналогичное по форме распределение показателя преломления для соответствующей поляризации и фокусирующий эффект, зависящий от приложенного напряжения.

Одна из перспективных возможностей локального изменения угла преднаклона связана с явлением фотоориентации жидких кристаллов на поверхности fotocувствительных слоев, облученных некогерентным линейно-поляризованным светом [10; 11]. Результат такого облучения – постепенное нарастание с увеличением дозы азимутальной энергии сцепления жидких кристаллов с поверхностью слоя. При достаточной величине эффекта первоначально гомеотропная ориентация жидких кристаллов может через промежуточные значения углов преднаклона перейти в планарную [12].

Недавно обнаружено явление фотостимулированной ориентации жидких кристаллов после натирания слоев бензальдегидных полимеров [13]. Неполаризованное некогерентное

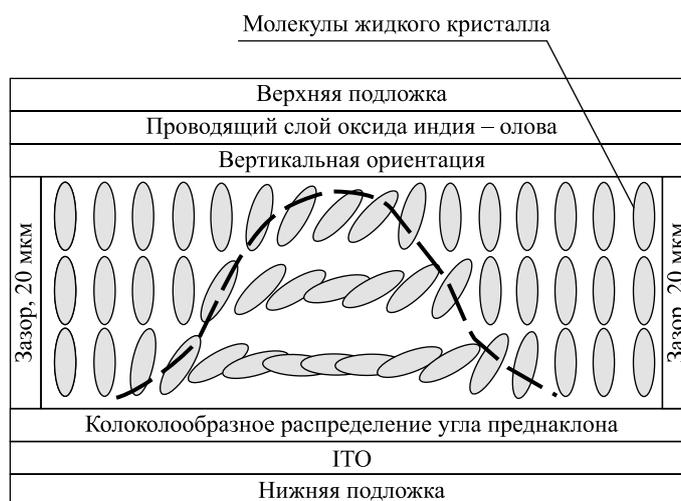


Рис. 1. Схематическая диаграмма ЖК-линзы в ЖК-ячейке.
ITO (оксид индия – олова) – проводящий слой

Fig. 1. Schematic diagram of an LC lens in an LC cell.
ITO (indium tin oxide) is a conductive layer

фотооблучение натертого слоя в этом случае также увеличивает азимутальную энергию сцепления жидких кристаллов с поверхностью и может вызвать уменьшение угла преднаклона (градиентные полимеры) [14].

Формирование распределения директора в ЖК-ячейке, подобного приведенному на рис. 1, с применением фотоориентации или фотостимулированной ориентации после натирания слоя предполагает создание кругового поля экспонирования с радиальной симметрией освещенности. Для ориентирующих материалов типа бензальдегидных полимеров, азимутальная энергия сцепления с которыми возрастает при облучении, интенсивность должна быть максимальной в центре освещенного круга и спадать к его границам. Тогда распределение углов преднаклона в ячейке будет соответствовать представленному на рис. 1.

Цель настоящей работы – создание оптической схемы и оценка ее оптимальных параметров для формирования полей экспонирования с колоколообразным распределением освещенности, пригодных для создания линзовых структур в ЖК-ячейке с ориентирующими слоями на основе бензальдегидных полимеров.

Моделирование освещенности полей экспонирования

Предположим, что отверстие фотомаски, находящееся на расстоянии d от плоскости экспонирования, является ламбертовским источником (ЛИ) в виде диска радиусом r_0 . Нетрудно показать, что радиально-симметричное распределение интенсивности света $I(R)$, формируемое таким источником, определяется выражением

$$I(R) = L \int_0^{2\pi} \int_0^{r_0} \frac{rd^2}{(d^2 + r^2 + R^2 - 2rR \cos(\varphi))^2} dr d\varphi, \quad (1)$$

где r и R – координаты точки источника и точки наблюдения соответственно; φ – азимутальный угол в полярной системе координат, связанной с источником излучения (рис. 2); L – яркость источника.

Для ЛИ радиусом $r_0 = 0,4$ мм нормированное распределение интенсивности $I_{\text{отн}}(R)$ будет выглядеть так, как представлено на рис. 3.

Если ввести декартову систему координат на облучаемой поверхности, выражение (1) преобразуется путем замены R на $\sqrt{x^2 + y^2}$ следующим образом:

$$I(x, y) = L \int_0^{2\pi} \int_0^{r_0} \frac{rd^2}{(d^2 + r^2 + x^2 + y^2 - 2r\sqrt{x^2 + y^2} \cos(\varphi))^2} dr d\varphi. \quad (2)$$

Модельные расчеты распределения интенсивности света на плоскости экспонирования дают трехмерную картину, приведенную на рис. 4.

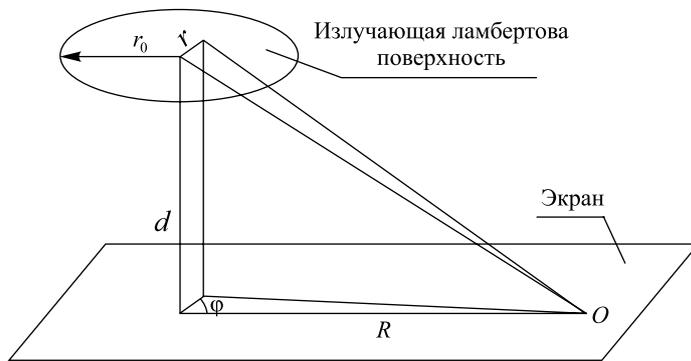


Рис. 2. Схема для определения интенсивности излучения на расстоянии R от проекции центра ЛИ (O – произвольная координата, зависящая от величины R)

Fig. 2. Scheme for the radiation intensity determination at the distance R from the projection of the Lambert source center (O is an arbitrary coordinate, depending on the value of R)

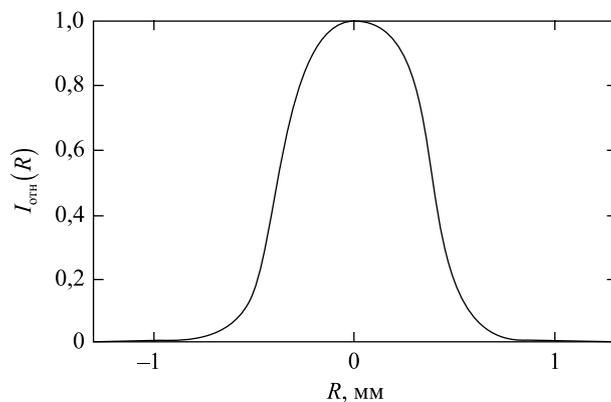


Рис. 3. Распределение интенсивности света $I_{отн}(R)$ на экране, формируемое ЛИ в форме диска радиусом $r_0 = 0,4$ мм на расстоянии $d = 0,15$ мм от облучаемой поверхности

Fig. 3. The light intensity distribution $I_{rel}(R)$ formed at the screen by the disc-shaped Lambert source with the radius $r_0 = 0.4$ mm at the distance $d = 0.15$ mm from the exposed surface

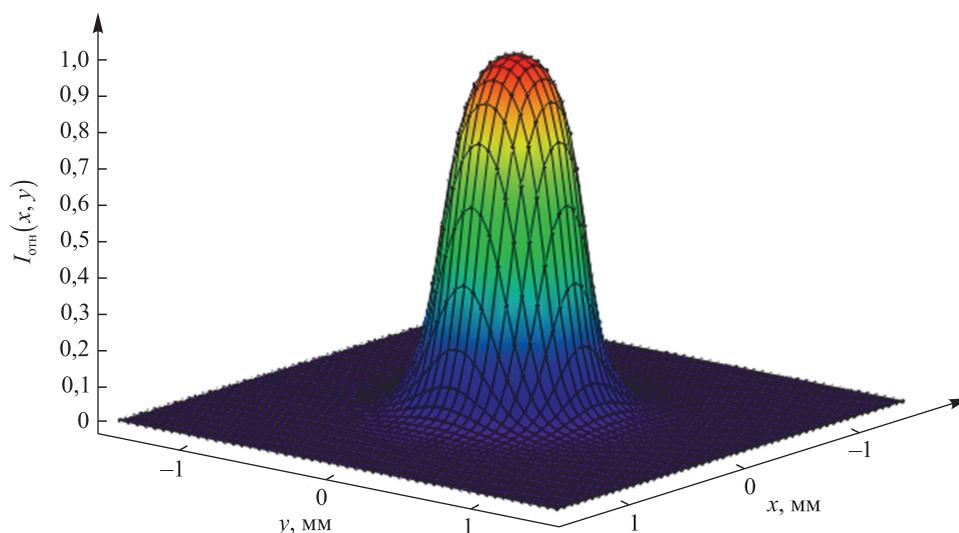


Рис. 4. Распределение интенсивности света, формируемое дисковидным ЛИ-радиусом $r_0 = 0,4$ мм на экране при $d = 0,15$ мм

Fig. 4. The light intensity distribution from the disc-shaped Lambert source with the radius $r_0 = 0.4$ mm formed at the screen when $d = 0.15$ mm

Рассмотрим осветитель из девяти ЛИ радиусом $r_0 = 0,4$ мм, расположенных с шагом $c = 1,1$ мм (рис. 5). С помощью формулы (2) в соответствии с рис. 5 получим выражение для освещенности в заданной точке экрана как сумму вкладов от всех ЛИ:

$$\begin{aligned}
 I_0(x, y) &= I_1(x, y) + I_2(x, y) + \dots + I_9(x, y) = \\
 &= L \int_0^{2\pi} \int_0^{r_0} \frac{rd^2}{\left(d^2 + r^2 + x^2 + y^2 - 2r\sqrt{x^2 + y^2} \cos(\varphi)\right)^2} dr d\varphi + \\
 &+ L \int_0^{2\pi} \int_0^{r_0} \frac{rd^2}{\left(d^2 + r^2 + (x+c)^2 + y^2 - 2r\sqrt{(x+c)^2 + y^2} \cos(\varphi)\right)^2} dr d\varphi + \dots \\
 &\dots + L \int_0^{2\pi} \int_0^{r_0} \frac{rd^2}{\left(d^2 + r^2 + (x-c)^2 + (y-c)^2 - 2r\sqrt{(x-c)^2 + (y-c)^2} \cos(\varphi)\right)^2} dr d\varphi.
 \end{aligned}$$

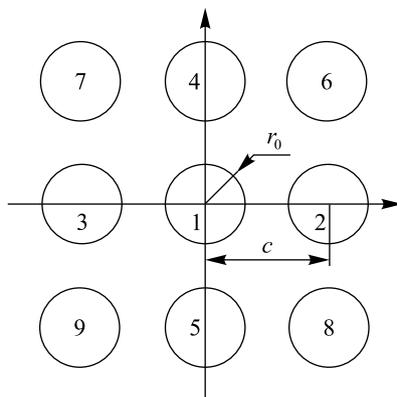


Рис. 5. Схема осветителя из 9 ЛИ

Fig. 5. The illuminator scheme including 9 Lambert sources

Расчеты распределения интенсивности света в плоскости экспонирования при использовании такого осветителя дают картину, представленную на рис. 6.

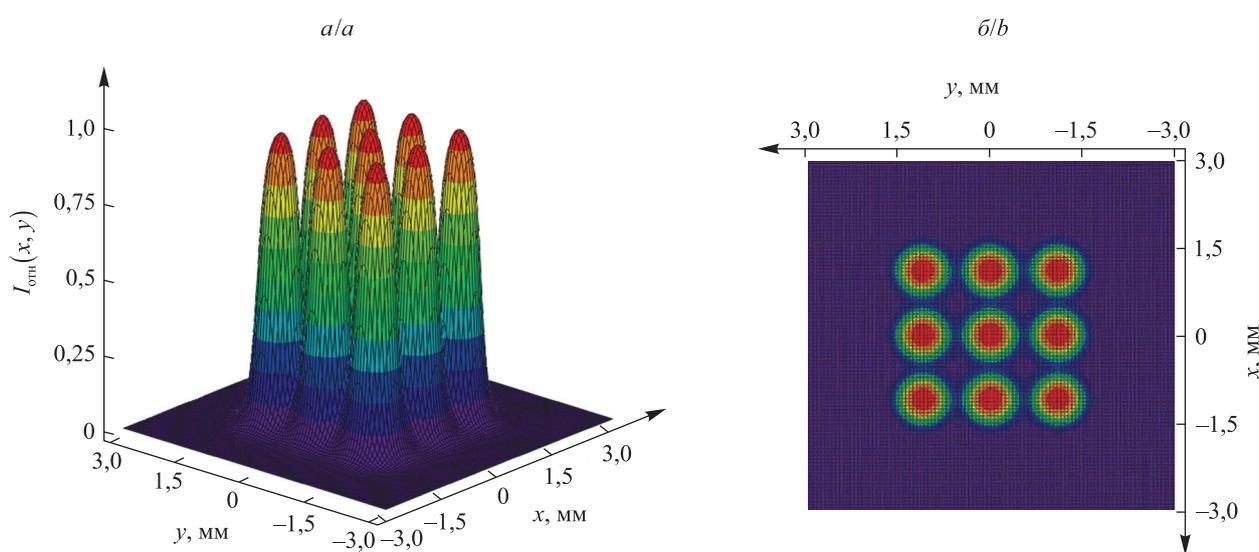


Рис. 6. Рассчитанное распределение освещенности, формируемое девятью отстоящими на 1,1 мм дисковидными ЛИ радиусом $r_0 = 0,4$ мм при $d = 0,15$ мм, в трехмерном (а) и двумерном (б) виде

Fig. 6. The calculated illumination distribution formed by 9 disc-shaped Lambert sources, spaced by 1.1 mm, with the radius $r_0 = 0.4$ mm when $d = 0.15$ mm in the three-dimensional (a) and two-dimensional (b) form

Расстояние от ЛИ до плоскости экспонирования d подбиралось таким образом, чтобы облученные области находились максимально близко друг к другу, но не перекрывались ($d = 0,15$ мм).

Рассчитанные распределения интенсивности качественно демонстрируют принципиальную возможность применения масок с круглыми отверстиями для формирования полей экспонирования ориентирующих слоев ЖК-линз. Однако экспериментально реализовать схему, приведенную на рис. 2, без существенных светопотерь не представляется возможным, учитывая реальную геометрию распространенных источников УФ-излучения (лампы различной формы: шаровой, трубчатой, спиральной). В связи с этим были проведены эксперименты, в которых использовалось преобразование светового пучка от удаленного источника фотомаской с круглыми отверстиями.

Экспериментальная апробация оптической схемы

Разработка фотомаски с круглыми отверстиями для формирования ЖК-линз в фоточувствительных бензальдегидных слоях является нетривиальной задачей. Для формирования плавного геометрического профиля линз на основе жидких кристаллов отверстия фотомаски должны быть идеально круглыми

с заданным диаметром; края отверстий фотомаски – без дефектов; сторона маски, обращенная к ориентирующему материалу, не должна вносить вклад (отражение, переотражение) в облучение градиентного материала. В качестве фотомасок нами были использованы черненные бронзовые пластины, в которых отверстия высверливались на станке с числовым программным управлением.

Получены световые распределения освещенности на экране при прохождении коллимированного излучения через круглые отверстия фотомаски, имеющие радиус $r_0 = 0,15$ мм. В эксперименте использован поляризационный микроскоп, производимый в Беларуси, Микро 200Т [15], на подвижной столик которого помещалась фотомаска, расстояние d изменялось от 0,00 до 0,53 мм путем пошагового выхода из фокуса границ отверстия фотомаски. Схема установки для определения зависимостей освещенности при прохождении фотомаски с отверстием представлена на рис. 7, а.

Экспериментальные распределения освещенности на экране для фотомаски с одним отверстием при d , равном 0,00; 0,13; 0,23; 0,28; 0,33 и 0,53 мм, приведены на рис. 7, б, из которого видно, что кривые приобретают колоколообразный профиль при удалении фотомаски от экрана (фокуса) на расстояние $d \geq 0,28$ мм. Согласно нашим расчетам в случае ЛИ (см. рис. 3) это расстояние меньше ($\sim 0,15$ мм). Такая разница, очевидно, связана с различием световых пучков от ЛИ и источника света в микроскопе – лампы накаливания с коллиматором. Вероятно, при использовании источника света с неколлимированным пучком приемлемая величина лежит в промежутке между этими значениями.

Изображения отверстий фотомаски, регистрируемые камерой, приведены на рис. 8.

С применением вышеизложенных результатов изготовлена ЖК-ячейка с массивом ЖК-линз.

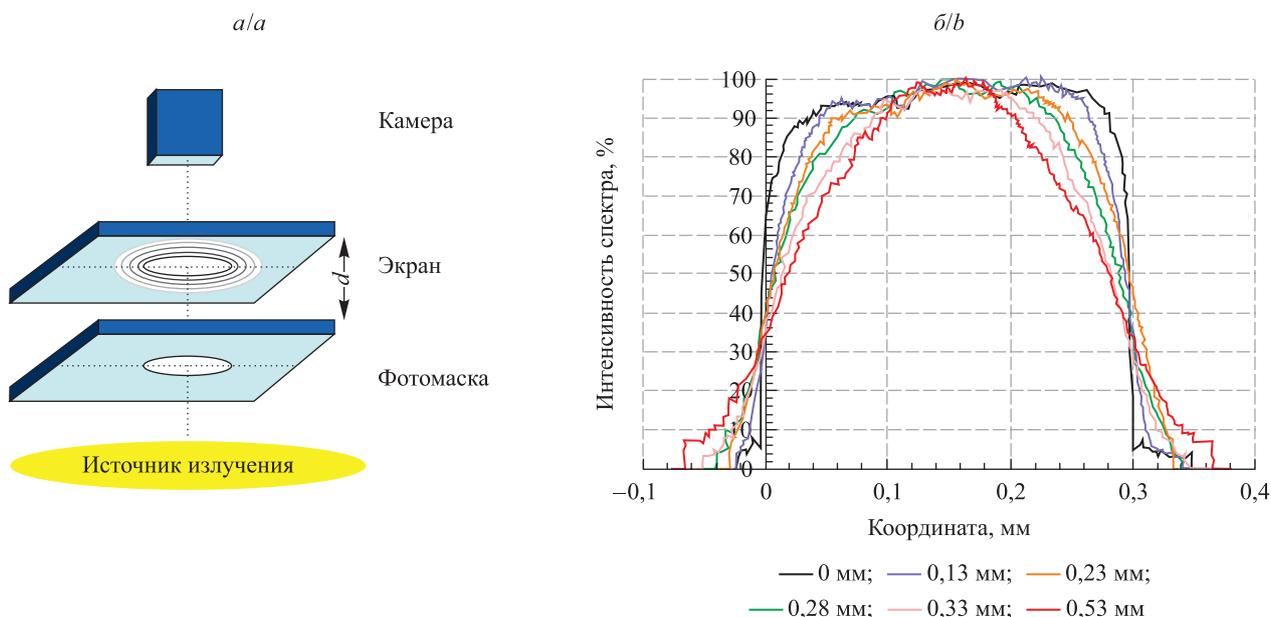


Рис. 7. Схема измерения распределения освещенности при прохождении коллимированного излучения через фотомаску с круглым отверстием радиусом $r_0 = 0,15$ мм (а); измеренные распределения освещенности при варьировании d от 0,00 до 0,53 мм (б)

Fig. 7. The illumination-distribution measuring scheme in the case when collimated radiation passes through a photomask with a circular hole having the radius $r_0 = 0.15$ mm (a); measured illumination distributions when d varies from 0.00 to 0.53 mm (b)

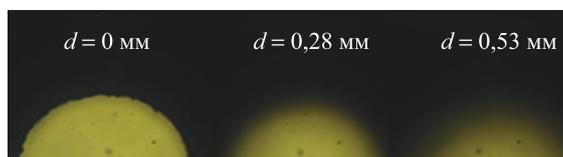


Рис. 8. Фотографии отверстия фотомаски ($r_0 = 0,15$ мм) при удалении ее из фокуса на расстояние d

Fig. 8. Microscopic images of the photomask hole ($r_0 = 0.15$ mm), when it is removed from the focus to the distance d

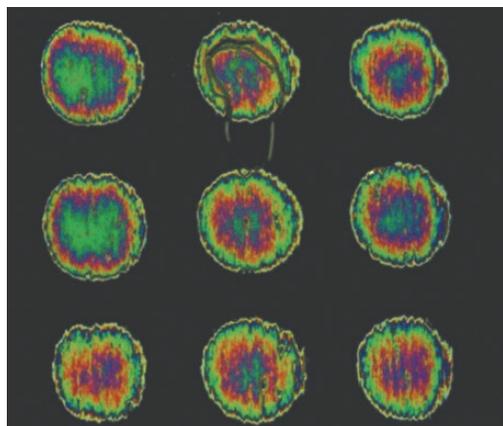


Рис. 9. Фотография ЖК-ячейки с массивом линз между скрещенными поляризаторами

Fig. 9. The LC lens array microscopic images in the LC cell under crossed polarizers

линз между скрещенными поляризаторами представлена на рис. 9 (направление натирания ориентировано под углом 45° относительно осей поляризаторов).

Фотография, приведенная на рис. 9, демонстрирует колоколообразное распределение двулучепреломления, а значит, и показателя преломления для соответствующей поляризации света. Полученные ЖК-линзы характеризуются круглой формой с наличием небольшого числа дефектов, расстояние между линзами достаточно большое, что говорит о возможности отнесения фотомаски над поверхностью ориентирующего слоя на большее расстояние.

Заключение

Представленные результаты позволяют заключить, что предложенная схема экспонирования на основе фотомаски с круглыми отверстиями дает возможность создавать на поверхности градиентных бензальдегидных полимеров зоны с центросимметричным распределением угла преднаклона, обеспечивающие формирование линзовых структур в ЖК-ячейке. В качестве источника активирующего УФ-излучения применимы люминесцентные лампы в виде колбы с матовой поверхностью (например, UVB-Glo10-E27), отнесенные на расстояние 4–5 см от фотомаски. Зазор между фотомаской и экспонируемым слоем при этом составляет около 0,2 мм.

Библиографические ссылки

1. Algorri J., Urruchi V., Garcia-Camara B., et al. Liquid crystal microlenses for autostereoscopic displays // *Materials*. 2016. Vol. 9, № 1. P. 1–17.
2. Dai H., Liu Y., Sun X., et al. A negative-positive tunable liquid-crystal microlens array by printing // *Opt. express*. 2009. Vol. 17, № 6. P. 4317–4323.
3. Hsu C. J., Sheu C. R. Using photopolymerization to achieve tunable liquid crystal lenses with coaxial bifocals // *Opt. express*. 2012. Vol. 20, № 4. P. 4738–4746.
4. Hwang S. J., Shieh Y. M., Lin K. R. Liquid crystal microlens using nanoparticle-induced vertical alignment // *J. Nanomater.* 2015. Vol. 2015. Article number: 840182.
5. Ng R., Levoy M., Bredif M., et al. Light field photography with a hand-held plenoptic camera // *Comp. Sci. Tech. Report CSTR*. 2005. Vol. 2, № 11. P. 1–11.
6. Levoy M., Zhang Z., McDowell I. Recording and controlling the 4D light field in a microscope using microlens arrays // *J. Microsc.* 2009. Vol. 235, № 2. P. 144–162.
7. Flack J., Harrold J., Woodgate G. J. A prototype 3D mobile phone equipped with a next-generation autostereoscopic display // *Proc. SPIE*. 2007. Vol. 6490, № 1. P. 502–523.
8. Tseng M. C., Fan F., Lee C. Y., et al. Tunable lens by spatially varying liquid crystal pretilt angles // *J. Appl. Phys.* 2011. Vol. 109, № 8. P. 083109.
9. Honma M., Nose T., Yanase S., et al. Liquid-crystal variable-focus lenses with a spatially-distributed tilt angles // *Opt. express*. 2009. Vol. 17, № 13. P. 10998–11006.
10. Ho J. Y. L., Chigrinov V. G., Kwok H. S. Variable liquid crystal pretilt angles generated by photoalignment of a mixed polyimide alignment layer // *Appl. Phys. Lett.* 2007. Vol. 90, № 24. P. 243506.
11. Kawatsuki N. Photoalignment and photoinduced molecular reorientation of photosensitive materials // *Chem. Lett.* 2011. Vol. 40, № 6. P. 548–554.
12. Iimura Y., Akiyama H., Li X. T., et al. Photoalignment control of LC and its applications to LCD fabrication // *Proc. of SPIE*. 1998. Vol. 3297. P. 8–18.

13. Могильный В. В., Станкевич А. И., Трофимова А. В. Модуляция двулучепреломления ЖК-мономера неполяризованным УФ-облучением полимерного ориентанта // Взаимодействие излучения с твердым телом : материалы XI Междунар. конф. (Минск, 23–25 сент. 2015 г.). Минск, 2015. С. 254–255.
14. Безрученко В. С., Муравский А. А. Изучение зависимостей углов подвеса градиентных фоточувствительных полимерных материалов от дозы экспонирования // Вести НАН Беларуси. Сер. физ.-техн. наук. 2015. № 1. С. 31–33.
15. Муравский А. А., Муравский А. А., Агабеков В. Е. Установка для одновременного измерения азимутальной и полярной энергии сцепления жидкого кристалла в одной ячейке в автоматическом режиме // Вестн. МГОУ. Сер. физ.-мат. 2013. № 1. С. 51–55.
16. Bezruchenko V. S., Muravsky A. A., Murauski A. A., et al. Tunable Liquid Crystal Lens Based on Pretilt Angle Gradient Alignment // *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* 2016. Vol. 626, № 1. P. 222–228.

References

1. Algorri J., Urruchi V., Garcia-Camara B., et al. Liquid crystal microlenses for autostereoscopic displays. *Materials*. 2016. Vol. 9, No. 1. P. 1–17.
2. Dai H., Liu Y., Sun X., et al. A negative-positive tunable liquid-crystal microlens array by printing. *Opt. express*. 2009. Vol. 17, No. 6. P. 4317–4323.
3. Hsu C. J., Sheu C. R. Using photopolymerization to achieve tunable liquid crystal lenses with coaxial bifocals. *Opt. express*. 2012. Vol. 20, No. 4. P. 4738–4746.
4. Hwang S. J., Shieh Y. M., Lin K. R. Liquid crystal microlens using nanoparticle-induced vertical alignment. *J. Nanomater.* 2015. Vol. 2015. Article number: 840182. DOI: 10.1155/2015/840182.
5. Ng R., Levoy M., Bredif M., et al. Light field photography with a hand-held plenoptic camera. *Comp. Sci. Tech. Report CSTR*. 2005. Vol. 2, No. 11. P. 1–11.
6. Levoy M., Zhang Z., McDowell I. Recording and controlling the 4D light field in a microscope using microlens arrays. *J. Microsc.* 2009. Vol. 235, No. 2. P. 144–162.
7. Flack J., Harrold J., Woodgate G. J. A prototype 3D mobile phone equipped with a next-generation autostereoscopic display. *Proc. SPIE*. 2007. Vol. 6490, No. 1. P. 502–523.
8. Tseng M. C., Fan F., Lee C. Y., et al. Tunable lens by spatially varying liquid crystal pretilt angles. *J. Appl. Phys.* 2011. Vol. 109, No. 8. P. 083109.
9. Honma M., Nose T., Yanase S., et al. Liquid-crystal variable-focus lenses with a spatially-distributed tilt angles. *Opt. express*. 2009. Vol. 17, No. 13. P. 10998–11006.
10. Ho J. Y. L., Chigrinov V. G., Kwok H. S. Variable liquid crystal pretilt angles generated by photoalignment of a mixed polyimide alignment layer. *Appl. Phys. Lett.* 2007. Vol. 90, No. 24. P. 243506.
11. Kawatsuki N. Photoalignment and photoinduced molecular reorientation of photosensitive materials. *Chem. Lett.* 2011. Vol. 40, No. 6. P. 548–554.
12. Iimura Y., Akiyama H., Li X. T., et al. Photoalignment control of LC and its applications to LCD fabrication. *Proc. SPIE*. 1998. Vol. 3297. P. 8–18.
13. Mogil'nyi V. V., Stankevich A. I., Trofimova A. V. Optical radiation influence on the photoinduced birefringence in the layers of benzaldehyde polymers. *Interaction of Radiation with Solids* : materials of the XI Intern. conf. (Minsk, 23–25 Sept., 2015). Minsk, 2015. P. 254–255 (in Russ.).
14. Bezruchenko V. S., Muravskii A. A. Investigation of tilt angle dependence of gradient photosensitive polymeric material on exposure dose. *Vesti NAN Belarusi. Ser. Fiz.-tekh. nauk.* 2015. No. 1. P. 31–33 (in Russ.).
15. Murauski A. A., Muravsky A. A., Agabekov V. E. Setup for simultaneous measurement of azimuthal and polar anchoring energy of liquid crystal within single cell in automatic regime. *Vestnik MGOU. Ser. fiz.-mat.* 2013. No. 1. P. 51–55 (in Russ.).
16. Bezruchenko V. S., Muravsky A. A., Murauski A. A., et al. Tunable Liquid Crystal Lens Based on Pretilt Angle Gradient Alignment. *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* 2016. Vol. 626, No. 1. P. 222–228.

Статья поступила в редакцию 05.05.2017.
Received by editorial board 05.05.2017.

ПОВЕРХНОСТЬ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЭНЕРГИИ ОСНОВНОГО ТРИПЛЕТНОГО СОСТОЯНИЯ МОЛЕКУЛЫ ТРИОКСИДА УРАНА UO_3

Д. Н. МЕНЯЙЛОВА¹⁾, М. Б. ШУНДАЛОВ^{1),2)}

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

²⁾НИИ «Институт прикладных физических проблем им. А. Н. Севченко» БГУ,
ул. Курчатова, 7, 220108, г. Минск, Беларусь

На основе квантово-химических *ab initio* расчетов в многоконфигурационном приближении полного активного пространства самосогласованного поля (complete active space self-consistent field) CASSCF(6,8) построены поверхности потенциальной энергии основного и первого возбужденного состояний молекулы триоксида урана UO_3 . Установлена плоская равновесная геометрическая конфигурация, промежуточная между T- и Y-формой и имеющая симметрию C_{2v} . Выявлено наличие трех эквивалентных устойчивых конфигураций, разделенных невысокими (40 см^{-1}) потенциальными барьерами. Показано, что на рассматриваемом уровне теории вблизи минимумов поверхности потенциальной энергии, имеющей нетривиальную топологию, основным состоянием молекулы UO_3 является триплетное. Триплетное состояние указывает на ненасыщенный характер химических связей молекулы и ее возможные парамагнитные свойства, что, в свою очередь, открывает перспективы для исследования таких молекул при помощи магнитооптических ловушек как альтернативы низкотемпературным матрицам инертных газов, взаимодействующих с изолированными в них молекулами.

Ключевые слова: UO_3 (триоксид урана); поверхность потенциальной энергии; CASSCF.

THE POTENTIAL ENERGY SURFACE OF THE TRIPLET GROUND STATE OF A URANIUM TRIOXIDE MOLECULE

D. N. MENAAILAVA^a, M. B. SHUNDALAU^{a,b}

^aBelarusian State University, Niezaliežnasci Avenue, 4, 220030, Minsk, Belarus

^bA. N. Sevchenko Institute of Applied Physical Problems, Belarusian State University,
Kurčataŭ Street, 7, 220108, Minsk, Belarus

Corresponding author: D. N. Menailava (menailava@bsu.by)

The potential energy surfaces of the ground and first excited states of the uranium trioxide molecule UO_3 were constructed on the basis of quantum-chemical *ab initio* calculations in the multi-configuration CASSCF(6,8) approximation. A planar equilibrium geometric configuration, which is intermediate between the T- and Y-form and having C_{2v}

Образец цитирования:

Меняйлова Д. Н., Шундалов М. Б. Поверхность потенциальной энергии основного триплетного состояния молекулы триоксида урана UO_3 // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2017. № 3. С. 20–25.

For citation:

Menailava D. N., Shundalau M. B. The potential energy surface of the triplet ground state of a uranium trioxide molecule. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2017. No. 3. P. 20–25 (in Russ.).

Авторы:

Дарья Николаевна Меняйлова – аспирантка кафедры физической оптики физического факультета. Научный руководитель – М. Б. Шундалов.

Максим Борисович Шундалов – кандидат физико-математических наук, доцент; доцент кафедры физической оптики физического факультета¹⁾; старший научный сотрудник лаборатории физикохимии полимерных материалов и природных органических соединений²⁾.

Authors:

Darya Menailava, postgraduate student at the department of physical optics, faculty of physics.

menailava@bsu.by

Maksim Shundalau, PhD (physics and mathematics), docent; associate professor at the department of physical optics, faculty of physics¹⁾; senior researcher at the laboratory of physical chemistry of polymer and natural organic compounds²⁾.

shundalov@bsu.by

symmetry, was established. The presence of three equivalent equilibrium configurations separated by low potential barriers (40 cm^{-1}) was reported. It was shown that at the considered level of theory near the minimum of the potential energy surface, which has a nontrivial topology, the ground state of the UO_3 molecule is a triplet. The triplet state indicates the transient character of the molecule and predicts its possible paramagnetic properties, which offer the possibilities for studying of such molecules by magneto-optical traps as an alternative to low-temperature inert gas matrices interacting with molecules isolated in them.

Key words: UO_3 (uranium trioxide); potential energy surface; CASSCF.

Введение

Важным продуктом процессов обогащения урана и переработки ядерного топлива является триоксид урана UO_3 , для которого в кристаллической фазе насчитывается не менее 6 полиморфических модификаций. В молекулярной форме триоксид урана впервые был экспериментально исследован в работе [1], где анализировались колебательные ИК-спектры молекул UO_2 и UO_3 , внедренных в низкотемпературную аргоновую матрицу. Далее, в работах [2–4] на основе анализа частот и интенсивностей в ИК-спектрах изотопомеров молекул U^{16}O_3 , $\text{U}^{16}\text{O}_2^{18}\text{O}$ и др., изолированных в низкотемпературных криптоновой и аргоновой матрицах, была выявлена плоская Т-образная форма равновесной конфигурации молекулы в основном состоянии с двумя эквивалентными связями U—O . Такая структура молекулы обладает нетипичной для триоксидов симметрией C_{2v} , поскольку многие триоксиды (SO_3 , CO_3 , NO_3 и др.) в молекулярной форме имеют более симметричное строение с тремя эквивалентными связями и относятся к точечной группе симметрии D_{3h} . Для объяснения C_{2v} -симметрии равновесной конфигурации молекулы UO_3 в [2–4] предложено рассматривать триоксид урана UO_3 как монооксид уранила $(\text{UO}_2)^{2+}(\text{O})^{2-}$, поскольку линейная форма иона уранила, характерная для его комплексных соединений, могла бы привести к Т-форме молекулы UO_3 . Дальнейшие спектральные исследования нейтральных и частично ионизированных оксидов урана [5; 6], полученных в результате лазерной абляции металлического урана в атмосфере кислорода и затем изолированных в низкотемпературных криптоновой и неоновой матрицах, подтвердили принадлежность молекулы UO_3 к точечной группе симметрии C_{2v} . Частоты колебаний, по данным [5; 6], соответствуют результатам исследований [2; 3] с учетом длинноволнового сдвига частот для криптоновой матрицы (относительно аргоновой) и коротковолнового – для неоновой. Следует особо подчеркнуть, что Т-образная форма молекулы определена на основе интерпретации колебательных спектров, а группа симметрии C_{2v} допускает не только Т-образную форму, но и более вытянутую, Y-образную, конфигурацию молекулы. Такая форма не противоречит интерпретации спектральных данных, полученных в [1–6].

Во всех названных выше работах подразумевается, что основное состояние молекулы UO_3 является синглетным. Неустойчивость рассматриваемого соединения в мономерной молекулярной форме в обычных условиях может быть вызвана ненасыщенностью его связей, что, в свою очередь, не исключает возможности для основного триплетного состояния молекулы.

Квантово-химические расчеты электронной структуры молекулы UO_3 в приближении Хартри – Фока выполнены в работе [7] с использованием эффективных остовных потенциалов (effective core potential, ECP) для атомов урана и кислорода. Расчеты подтвердили симметрию C_{2v} для равновесной (близкой к Т-образной) конфигурации молекулы; рассчитанные длины связей равны $1,75 \text{ \AA}$ (эквивалентные, или ураниловые, связи) и $1,83 \text{ \AA}$ (для третьей связи), угол между ураниловыми связями составил 161° . Более симметричная (D_{3h}) конфигурация с равными длинами связей ($1,806 \text{ \AA}$) соответствует седловой точке, лежащей выше минимума, отвечающего симметрии C_{2v} , на 49 кДж/моль . В [7] авторы предположили, что более низкая, чем D_{3h} , симметрия основного состояния молекулы триоксида урана может быть обусловлена эффектом Яна – Теллера. Расчеты [8], выполненные в приближении MP2 (метод теории возмущения второго порядка Меллера – Плессе), продемонстрировали похожие результаты: длины связей равны $1,745$ и $1,828 \text{ \AA}$, угол между эквивалентными связями составил $165,2^\circ$. В [8] указывается на несоответствие рассчитанной геометрии и экспериментальной, т. е. полученной на основе интерпретации экспериментальных спектральных данных (полностью Т-образной, с углом между эквивалентными связями, равным 180°), при этом не исключается возможность влияния матриц на полученную в эксперименте структуру молекулы.

Альтернативные приближению Хартри – Фока расчеты [6; 9], выполненные в рамках метода теории функционала плотности DFT (density functional theory) с функционалами B3LYP [6; 9] и PBE0 [9], ECP-базисными наборами для атома U и полноэлектронными базисами для атомов O, также приводят к устойчивой C_{2v} конфигурации молекулы. Данная конфигурация близка к Т-образной форме: длины

связей равны 1,81 Å (B3LYP [6]), 1,771 Å (PBE0 [9]) и 1,808 Å (B3LYP [9]) (эквивалентные связи), 1,850 Å (B3LYP [6]), 1,786 Å (PBE0 [9]) и 1,849 Å (B3LYP [9]); угол между эквивалентными связями составил 158,8° (B3LYP [6]), 161° (PBE0 [9]) и 157° (B3LYP [9]). Симметричная структура с тремя эквивалентными связями, по данным расчета [6], отвечает седловой точке, лежащей на 16 кДж/моль выше равновесной, менее симметричной конфигурации.

Ранее нами [10; 11] также в рамках метода DFT с использованием ECP-базиса для атома U и различных полноэлектронных базисов для атомов O было установлено, что, кроме T-образной формы молекулярного триоксида урана в основном состоянии, соответствующей углу между эквивалентными связями, равному 156–160°, имеется дополнительная устойчивая конфигурация (Y-форма), для которой угол между эквивалентными связями лежит в диапазоне 88–89°. Длины связей при этом оказались равными 1,80 Å (T-форма) и 1,83 Å (Y-форма) (ураниловые связи), 1,87 Å (T-форма) и 1,80 Å (Y-форма). По данным расчета [10], Y-форма лежит на 216 см⁻¹ ниже T-формы, а потенциальный барьер, разделяющий две конфигурации, соответствует углу 120° между ураниловыми связями; его высота равна 2731 см⁻¹. Рассчитанные колебательные спектры обеих форм подтвердили их устойчивость (мнимые частоты отсутствуют), а значения колебательных частот в целом соответствуют наблюдаемым данным.

Все приведенные выше расчеты выполнялись в одноконфигурационном приближении, которое для молекулярных систем, содержащих тяжелые атомы с большим количеством электронов, оказывается не всегда приемлемым [12]. В таких случаях необходимо учитывать большое количество возбужденных электронных конфигураций различных степеней возбуждения. Результаты квантово-химического *ab initio* расчета молекулы UO₃ в многоконфигурационном приближении CASPT2 приводятся в [13]. Установлено, что равновесная конфигурация молекулы близка к T-форме (длины связей равны 1,789 и 1,838 Å, угол между эквивалентными связями составил 161,3°), при этом мультиплетность основного состояния равна 1, а первое триплетное состояние лежит выше основного синглетного на 14 982 см⁻¹. Отметим, что расчеты, выполненные в [13], осуществлялись только для одной точки поверхности потенциальной энергии (ППЭ) молекулы, соответствующей ее локальному минимуму.

Анализ экспериментальных и теоретических данных позволяет утверждать, что даже в случае существования только одной симметричной равновесной конфигурации молекулы триоксида урана (T- или Y-формы), находящейся на диагональном сечении ППЭ как функции углов α_1 и α_2 между ураниловыми связями и третьей, неэквивалентной, связью (т. е. при $\alpha_1 = \alpha_2$), могут существовать и дополнительные, «боковые», формы, расположенные по обе стороны от диагонального сечения ППЭ (т. е. при $\alpha_1 = \beta$ или $\alpha_2 = \beta$, где β – угол между «ураниловыми» связями). В случае же эффекта Яна – Теллера как возможной причины понижения симметрии молекулы триоксида урана [7] до C_{2v} наличие боковых форм является обязательным.

Таким образом, основные цели настоящей работы – на базе расчета поверхностей потенциальной энергии основного и первого возбужденного состояний в многоконфигурационном приближении определить симметрию и форму молекулы триоксида урана в основном состоянии, его мультиплетность, а также выяснить возможность существования конформеров (т. е. наличие нескольких минимумов на ППЭ) рассматриваемой молекулы.

Методика расчета

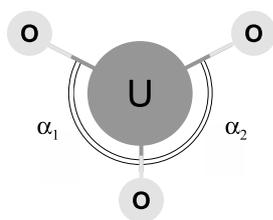


Рис. 1. Строение молекулы UO₃
Fig. 1. Structure of the UO₃ molecule

Расчеты поверхностей потенциальной энергии молекулы UO₃ выполнялись с помощью прикладного квантово-химического пакета GAMESS-US [14] в рамках многоконфигурационного метода CASSCF. Активное пространство включало 6 электронов на 8 орбиталях. Процедура усреднения матрицы плотности SA (state-averaged) осуществлялась для двух нижних состояний – синглетного и триплетного. Для описания атома урана использовался квазирелятивистский эффективный остовный потенциал Stuttgart ECP80 [15], замещающий 80 внутренних электронов, и трехкратно расщепленный (TZ) базисный набор (7s6p5d2f) → [5s4p4d2f] для оставшихся 12 электронов. Для атомов кислорода применялся стандартный корреляционно-согласованный полноэлектронный TZ-базис cc-pVTZ: (18s5p2d1f) → [4s3p2d1f] [16].

В качестве координат использовались углы α_1 и α_2 между двумя эквивалентными связями и третьей, неэквивалентной (рис. 1). Эти углы фиксировались, по остальным внутренним координатам (кроме угла выхода связей из плоскости) осуществлялась оптимизация геометрических параметров. Поскольку спектральные исследования [1–6] предсказывают плоскую форму молекулы, при расчетах задавалась группа симметрии C_s. Вычисления выполнялись на сетке 77,5–157,5° × 77,5–157,5° с шагом 2,5°. Для визуализации полученных результатов использовалась программа MacMolPlt [17].

Результаты расчета и их обсуждение

Контурная карта рассчитанной ППЭ основного состояния молекулы триоксида урана как функции углов α_1 и α_2 представлена на рис. 2. Изоэнергетические линии проведены через 53 см^{-1} . Каждая конфигурация молекулы на ППЭ может быть задана парой углов (α_1, α_2) . Результаты расчетов демонстрируют, что устойчивая конфигурация молекулы имеет структуру, промежуточную между Т- и Y-формой (см. рис. 1), при этом рассчитанные длины связей равны $2,25 \text{ \AA}$ (эквивалентные связи) и $1,90 \text{ \AA}$, угол между эквивалентными связями составил $123,72^\circ$. Рассматриваемая конфигурация молекулы расположена на диагональном сечении ППЭ при $\alpha_1 = \alpha_2 = 118,14^\circ$.

Диагональное сечение ППЭ изображено на рис. 3, а, из которого следует, что вблизи минимума ППЭ наиболее глубоко лежащим электронным состоянием молекулы UO_3 является триплетное, а первое синглетное состояние расположено выше на 15 см^{-1} . С увеличением углов α_1 и α_2 (т. е. с приближением конфигурации молекулы к Y-форме) разность энергий синглетного и триплетного состояний возрастает (см. рис. 3, б), а при уменьшении углов (т. е. с приближением конфигурации молекулы

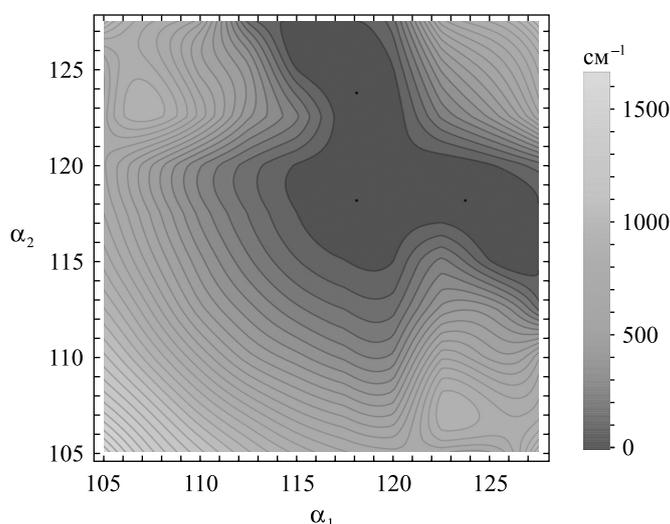


Рис. 2. Контурная карта ППЭ основного триплетного состояния молекулы UO_3 , рассчитанной в приближении CASSCF(6,8)

Fig. 2. Contour map of the PES of the ground triplet state of the UO_3 molecule calculated in CASSCF(6,8) approximation

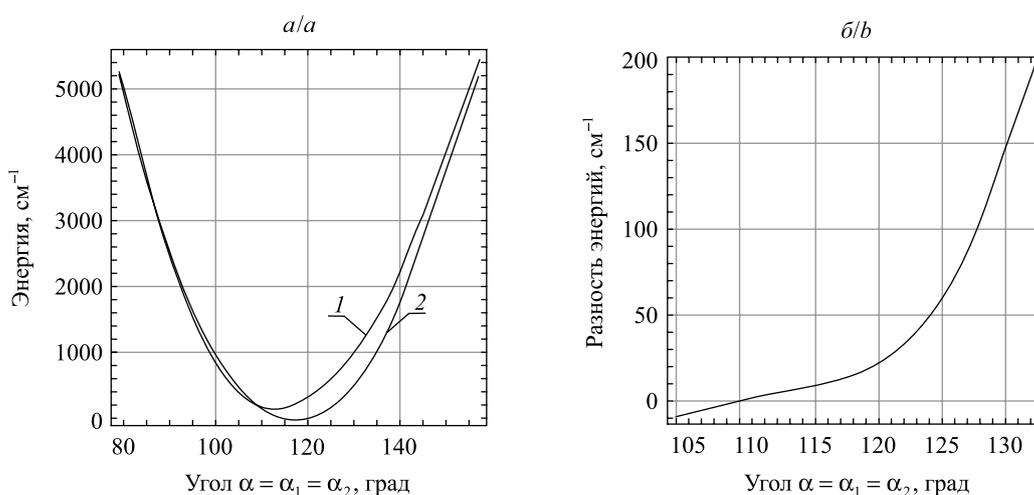


Рис. 3. Диагональное сечение ППЭ (а):
 1 – синглетное состояние, 2 – триплетное состояние; разность энергий между ППЭ синглетного и триплетного состояний вдоль диагонального сечения (б)

Fig. 3. Diagonal intersection of the PESs (a):
 1 – the singlet state, 2 – the triplet state; energy difference between PESs of the singlet and triplet states along the diagonal intersection (b)

к Т-форме) – понижается так, что при значениях углов α_1 и α_2 около 109° происходит коническое пересечение поверхностей, и нижним электронным состоянием оказывается синглетное. Обе ППЭ (триплетного и синглетного состояний) имеют похожую форму (на рис. 2 изображена ППЭ триплетного состояния).

Кроме этого, становится понятным, что эффект Яна – Теллера не может быть причиной понижения симметрии основного состояния с D_{3h} до C_{2v} , поскольку в этом случае наиболее симметричной конфигурации молекулы с углами $\alpha_1 = \alpha_2 = 120^\circ$ и тремя эквивалентными связями соответствовал бы локальный максимум, расположенный на диагональном сечении ППЭ. Об отсутствии такого максимума свидетельствует рис. 3, а. Таким образом, причиной отличия структуры молекулярной формы триоксида урана от наиболее симметричной конфигурации и неэквивалентности трех его U—O-связей является, вероятнее всего, недостаток электронной плотности, локализованной на этих связях.

Поскольку для трех рассматриваемых углов (α_1 , α_2 и β) выполняется условие $\alpha_1 + \alpha_2 + \beta = 360^\circ$, это приводит к дополнительной симметрии ППЭ. Каждая из находящихся на диагональном сечении ППЭ конфигураций молекулы (т. е. все симметричные формы, для которых $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$) с координатами (α, α) имеет по два симметрично расположенных вне диагонали аналога: $(\alpha, 360^\circ - 2\alpha)$ и $(360^\circ - 2\alpha, \alpha)$ (выше и ниже диагонали соответственно). Единственным исключением является конфигурация с координатами $(120^\circ, 120^\circ)$, встречающаяся на ППЭ только один раз. Таким образом, кроме расположенной на диагонали ППЭ устойчивой конфигурации с координатами $(118,14^\circ, 118,14^\circ)$, имеются еще две – с координатами $(118,14^\circ, 123,72^\circ)$ и $(123,72^\circ, 118,14^\circ)$ (см. рис. 2). Каждая конфигурация, не находящаяся на диагонали (например, лежащая при $\alpha_1 < \alpha_2$ выше диагонали конфигурация с координатами (α_1, α_2)) кроме очевидного аналога, расположенного ниже диагонали (α_2, α_1) , имеет еще четыре дополнительных аналога: два – выше диагонали с координатами $(\alpha_1, 360^\circ - \alpha_1 - \alpha_2)$ и $(\alpha_2, 360^\circ - \alpha_1 - \alpha_2)$ и два – ниже диагонали с координатами $(360^\circ - \alpha_1 - \alpha_2, \alpha_1)$ и $(360^\circ - \alpha_1 - \alpha_2, \alpha_2)$. Такие свойства симметрии приводят к следующей топологии ППЭ: диагональное сечение ППЭ в направлении от точки $(120^\circ, 120^\circ)$ в сторону уменьшения (увеличения) углов (т. е. к точке с координатами (α, α)) имеет по два эквивалентных сечения в направлениях точек $(\alpha, 360^\circ - 2\alpha)$ и $(360^\circ - 2\alpha, \alpha)$. В результате этого формируется звездообразный рельеф поверхности потенциальной энергии, на которой выделяются шесть лучей, разделяющих пологие «долины», вблизи соединения которых в точке $(120^\circ, 120^\circ)$ лежат три эквивалентных минимума ППЭ. Минимумы разделены невысоким потенциальным барьером, высота которого в «перевале» равна 40 см^{-1} .

Заключение

На основе квантово-химических *ab initio* расчетов в многоконфигурационном приближении CASSCF(6,8) построены поверхности потенциальной энергии двух нижних электронных состояний молекулы триоксида урана. Установлено равновесное геометрическое строение молекулы, отвечающее плоской конфигурации, промежуточной между Т- и Y-формой и имеющей симметрию C_{2v} . Определена нетривиальная топология ППЭ и выявлено наличие трех эквивалентных устойчивых конфигураций, разделенных невысокими потенциальными барьерами. Показано, что на рассматриваемом уровне теории вблизи минимумов ППЭ основным состоянием молекулы UO_3 является триплетное. Этот факт подчеркивает ненасыщенный характер химических связей молекулы и свидетельствует о ее возможных парамагнитных свойствах, что, в свою очередь, открывает потенциальные возможности для исследования таких молекул при помощи магнитооптических ловушек как альтернативы низкотемпературным матрицам инертных газов, взаимодействующих с изолированными в них молекулами.

Библиографические ссылки

1. Gabelnick S. D., Reedy G. T., Chasanov M. G. The infrared spectrum of matrix-isolated uranium oxide vapor species // Chem. Phys. Lett. 1973. Vol. 19, issue 1. P. 90–93.
2. Gabelnick S. D., Reedy G. T., Chasanov M. G. Infrared spectra of matrix-isolated uranium oxide species. I. The stretching region // J. Chem. Phys. 1973. Vol. 58, issue 10. P. 4468–4475.
3. Gabelnick S. D., Reedy G. T., Chasanov M. G. Infrared spectra of matrix-isolated uranium oxide species. II. Spectral interpretation and structure of UO_3 // J. Chem. Phys. 1973. Vol. 59, issue 12. P. 6397–6404.
4. Green D. W., Reedy G. T., Gabelnick S. D. Infrared spectra of matrix-isolated uranium oxide species. III. Lowfrequency modes // J. Chem. Phys. 1980. Vol. 73, issue 9. P. 4207–4216.
5. Hunt R. D., Andrews L. Reactions of pulsed-laser evaporated uranium atoms with molecular oxygen: Infrared spectra of UO , UO_2 , UO_3 , UO_2^+ , UO_2^{2+} , and $\text{UO}_3\text{—O}_2$ in solid argon // J. Chem. Phys. 1993. Vol. 98, issue 5. P. 3690–3686.
6. Zhou M., Andrews L. Infrared spectra of UO_2 , UO_2^+ , and UO_2^- in solid neon // J. Phys. Chem. A. 2000. Vol. 104, issue 23. P. 5495–5502.

7. Pyykkö P., Li J., Runeberg N. Quasirelativistic pseudopotential study of species isoelectronic to uranyl and the equatorial coordination of uranyl // *J. Phys. Chem.* 1994. Vol. 98, issue 18. P. 4809–4813.
8. Privalov T., Schimmelpfennig B., Wahlgren U., et al. Structure and thermodynamics of uranium(VI) complexes in the gas phase: a comparison of experimental and ab initio data // *J. Phys. Chem. A.* 2002. Vol. 106, issue 46. P. 11277–11282.
9. Zaitsevskii A. V. Molecular anions of uranium fluorides and oxides: first principle based relativistic calculations // *Radiochemistry.* 2013. Vol. 55, issue 4. P. 353–356.
10. Shundalau M. B., Zajogin A. P., Komiak A. I., et al. A DFT modeling of the uranium trioxide vibration spectra characteristics // *J. Spectrosc. Dyn.* 2012. Vol. 2. P. 19–24.
11. Shundalau M. B., Umreiko D. S. Quantum chemical analysis of uranium trioxide conformers // *J. Appl. Spectrosc.* 2014. Vol. 80, issue 6. P. 807–812.
12. Jensen F. *Introduction to Computational Chemistry.* Chichester, 2007.
13. Kovács A. Relativistic multireference quantum chemical study of the electronic structure of actinide trioxide molecules // *J. Phys. Chem. A.* 2017. Vol. 121, issue 12. P. 2523–2530.
14. Schmidt M. W., Baldrige K. K., Boatz J. A., et al. General atomic and molecular electronic structure system // *J. Comput. Chem.* 1993. Vol. 14, № 11. P. 1347–1363.
15. Moritz A., Cao X., Dolg M. Quasirelativistic energy-consistent 5f-in-core pseudopotentials for divalent and tetravalent actinide elements // *Theor. Chem. Acc.* 2007. Vol. 118, issue 5. P. 845–854.
16. Schuchardt K. L., Didier B. T., Elsethagen T., et al. Basis set exchange: A community database for computational sciences // *J. Chem. Inf. Model.* 2007. Vol. 47, № 3. P. 1045–1052.
17. Bode B. M., Gordon M. S. MacMolPlt: a graphical user interface for GAMESS // *J. Mol. Graph. Model.* 1998. Vol. 16, № 3. P. 133–138.

References

1. Gabelnick S. D., Reedy G. T., Chasanov M. G. The infrared spectrum of matrix-isolated uranium oxide vapor species. *Chem. Phys. Lett.* 1973. Vol. 19, issue 1. P. 90–93. DOI: 10.1016/0009-2614(73)87070-8.
2. Gabelnick S. D., Reedy G. T., Chasanov M. G. Infrared spectra of matrix-isolated uranium oxide species. I. The stretching region. *J. Chem. Phys.* 1973. Vol. 58, issue 10. P. 4468–4475. DOI: 10.1063/1.1679009.
3. Gabelnick S. D., Reedy G. T., Chasanov M. G. Infrared spectra of matrix-isolated uranium oxide species. II. Spectral interpretation and structure of UO_3 . *J. Chem. Phys.* 1973. Vol. 59, issue 12. P. 6397–6404. DOI: 10.1063/1.1680018.
4. Green D. W., Reedy G. T., Gabelnick S. D. Infrared spectra of matrix-isolated uranium oxide species. III. Lowfrequency modes. *J. Chem. Phys.* 1980. Vol. 73, issue 9. P. 4207–4216. DOI: 10.1063/1.440704.
5. Hunt R. D., Andrews L. Reactions of pulsed-laser evaporated uranium atoms with molecular oxygen: Infrared spectra of UO , UO_2 , UO_3 , UO_2^+ , UO_2^{2+} , and $\text{UO}_3\text{—O}_2$ in solid argon. *J. Chem. Phys.* 1993. Vol. 98, issue 5. P. 3690–3686. DOI: 10.1063/1.464045.
6. Zhou M., Andrews L. Infrared spectra of UO_2 , UO_2^+ , and UO_2^- in solid neon. *J. Phys. Chem. A.* 2000. Vol. 104, issue 23. P. 5495–5502. DOI: 10.1021/jp000292q.
7. Pyykkö P., Li J., Runeberg N. Quasirelativistic pseudopotential study of species isoelectronic to uranyl and the equatorial coordination of uranyl. *J. Phys. Chem.* 1994. Vol. 98, issue 18. P. 4809–4813. DOI: 10.1021/j100069a007.
8. Privalov T., Schimmelpfennig B., Wahlgren U., et al. Structure and thermodynamics of uranium(VI) complexes in the gas phase: a comparison of experimental and ab initio data. *J. Phys. Chem. A.* 2002. Vol. 106, issue 46. P. 11277–11282. DOI: 10.1021/jp0260402.
9. Zaitsevskii A. V. Molecular anions of uranium fluorides and oxides: first principle based relativistic calculations. *Radiochemistry.* 2013. Vol. 55, issue 4. P. 353–356. DOI: 10.1134/S1066362213040012.
10. Shundalau M. B., Zajogin A. P., Komiak A. I., et al. A DFT modeling of the uranium trioxide vibration spectra characteristics. *J. Spectrosc. Dyn.* 2012. Vol. 2. P. 19–24.
11. Shundalau M. B., Umreiko D. S. Quantum chemical analysis of uranium trioxide conformers. *J. Appl. Spectrosc.* 2014. Vol. 80, issue 6. P. 807–812. DOI: 10.1007/s10812-014-9848-2.
12. Jensen F. *Introduction to Computational Chemistry.* Chichester, 2007.
13. Kovács A. Relativistic multireference quantum chemical study of the electronic structure of actinide trioxide molecules. *J. Phys. Chem. A.* 2017. Vol. 121, issue 12. P. 2523–2530. DOI: 10.1021/acs.jpca.7b01344.
14. Schmidt M. W., Baldrige K. K., Boatz J. A., et al. General atomic and molecular electronic structure system. *J. Comput. Chem.* 1993. Vol. 14, No. 11. P. 1347–1363. DOI: 10.1002/jcc.540141112.
15. Moritz A., Cao X., Dolg M. Quasirelativistic energy-consistent 5f-in-core pseudopotentials for divalent and tetravalent actinide elements. *Theor. Chem. Acc.* 2007. Vol. 118, issue 5. P. 845–854. DOI: 10.1007/s00214-007-0330-6.
16. Schuchardt K. L., Didier B. T., Elsethagen T., et al. Basis set exchange: A community database for computational sciences. *J. Chem. Inf. Model.* 2007. Vol. 47, No. 3. P. 1045–1052. DOI: 10.1021/ci600510j.
17. Bode B. M., Gordon M. S. MacMolPlt: a graphical user interface for GAMESS. *J. Mol. Graph. Model.* 1998. Vol. 16, No. 3. P. 133–138. DOI: 10.1016/S1093-3263(99)00002-9.

Статья поступила в редколлегию 17.05.2017.
Received by editorial board 17.05.2017.

УДК 521.372.512.23

ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЙ МЕТОД УСКОРЕННОГО ОБНАРУЖЕНИЯ И ДИФФЕРЕНЦИАЦИИ МИКРООРГАНИЗМОВ НА ОСНОВЕ ПЛЕНОЧНЫХ БИОСТРУКТУР И ПЛАНАРНО-ЕМКОСТНЫХ ЧИП-ФОРМАТОВ

А. И. ДРАПЕЗА¹⁾, В. А. ЛОБАН¹⁾, А. И. ХМЕЛЬНИЦКИЙ¹⁾, Г. А. СКОРОХОД¹⁾, В. А. СЫСОВ¹⁾

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

На основе пленочных биоструктур и планарно-емкостных чип-форматов разработан электрофизический метод обнаружения и дифференциации микроорганизмов *S. aureus*, *E. coli*, *P. aeruginosa* и *C. albicans* в течение 40 мин. Используются планарно-емкостные чип-форматы сенсоров нефарадеевского типа с алюминиевыми микроэлектродами, изолированными плотной композитной пленкой, состоящей из Al_2O_3 (200 нм) + SiO_2 (100 нм). Формирование и измерение зарядовых характеристик пленочных биоструктур проводили в воздушной среде при температуре 37 °С и относительной влажности воздуха 5 %. Величину заряда пленочных биоструктур определяли по площади под кривой зависимости тока от времени после ее полиномиальной аппроксимации для количества

Образец цитирования:

Драпеца А. И., Лобан В. А., Хмельницкий А. И., Скороход Г. А., Сысов В. А. Электрофизический метод ускоренного обнаружения и дифференциации микроорганизмов на основе пленочных биоструктур и планарно-емкостных чип-форматов // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2017. № 3. С. 26–32.

For citation:

Drapeza A. I., Loban V. A., Khmelnsky A. I., Skorokhod G. A., Sysov V. A. Electrophysical method for accelerated detection and differentiation of microorganisms based on film biostructures and planar-capacitive chip-formats. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2017. No. 3. P. 26–32 (in Russ.).

Авторы:

Александр Иванович Драпеца – кандидат технических наук, доцент; заведующий научно-исследовательской лабораторией биоаналитических систем физического факультета.

Валерий Александрович Лобан – кандидат технических наук; ведущий научный сотрудник научно-исследовательской лаборатории биоаналитических систем физического факультета.

Александр Ильич Хмельницкий – кандидат физико-математических наук, доцент; доцент кафедры биофизики физического факультета.

Геннадий Алексеевич Скороход – кандидат медицинских наук, доцент; заведующий научно-исследовательской лабораторией внутрибольничных инфекций.

Валерий Александрович Сысов – студент физического факультета. Научный руководитель – А. И. Драпеца.

Authors:

Aleksandr Drapeza, PhD (engineering), docent; head of the research laboratory of bioanalytical systems, faculty of physics. drapeza@bsu.by

Valery Loban, PhD (engineering); leading researcher at the research laboratory of bioanalytical systems, faculty of physics. loban_v@bsu.by

Aleksandr Khmelnsky, PhD (physics and mathematics), docent; associate professor at the department of biophysics, faculty of physics. khmelnsky@bsu.by

Gennady Skorokhod, PhD (medicine), docent; head of the laboratory of intrahospital infection research. labsuper@yandex.ru

Valery Sysov, student at the faculty of physics. valera.sysov@gmail.com

измерений $n = 2000$ и надежности $\alpha = 99,9\%$. Статистическую обработку выборочной совокупности однотипных измерений выполняли с использованием *Excel 2007* для $n = 3$ и $\alpha = 90\%$ в предположении, что случайная величина распределена по нормальному закону. Показано, что выборочные совокупности ($n = 3$, $\alpha = 90\%$, $t = 2,4$) являются репрезентативными для обнаружения и дифференциации микроорганизмов по информативным показателям заряда их пленочных биоструктур с доверительной вероятностью $P \leq 0,1$.

Ключевые слова: электрофизический метод; планарно-емкостной чип-формат; пленочные биоструктуры; микроорганизмы *S. aureus*, *E. coli*, *P. aeruginosa*, *C. albicans*; обнаружение и дифференциация.

ELECTROPHYSICAL METHOD FOR ACCELERATED DETECTION AND DIFFERENTIATION OF MICROORGANISMS BASED ON FILM BIOSTRUCTURES AND PLANAR-CAPACITIVE CHIP-FORMATS

A. I. DRAPEZA^a, V. A. LOBAN^a, A. I. KHMELNITSKY^a, G. A. SKOROKHOD^a, V. A. SYSOV^a

^aBelarusian State University, Niezaliežnasci Avenue, 4, 220030, Minsk, Belarus

Corresponding author: A. I. Drapeza (drapeza@bsu.by)

Based on the film biostructures and planar-capacitive chip-formats, an electrophysical method for the detection and differentiation of *S. aureus*, *E. coli*, *P. aeruginosa* and *C. albicans* microorganisms within 40 minutes was developed. The planar-capacitive chip-formats of the non-Faraday type sensors, with aluminum microelectrodes isolated by a dense composite film consisting of Al_2O_3 (200 nm) + SiO_2 (100 nm), were used. The formation and measurements of the charge characteristics of film biostructures were carried out in the air at 37 °C and 5 % relative humidity. A charge of the film biostructures was determined from the area under the current-time curve after its polynomial approximation for $n = 2000$ and $\alpha = 99.9\%$. A sample set of similar measurements was processed statistically using *Excel 2007* for the number of measurements $n = 3$ and reliability $\alpha = 90\%$ on the assumption that a random variable was distributed according to the normal law. It was shown that selective populations ($n = 3$, $\alpha = 90\%$, $t = 2.4$) were representative enough to detect and differentiate microorganisms, according to the informative indices of the charge of their film biostructures, with the confidence coefficient $P \leq 0.1$.

Key words: electrophysical method; planar-capacitive chip-format; film biostructures; *S. aureus*, *E. coli*, *P. aeruginosa*, *C. albicans* microorganisms; detection and differentiation.

Введение

При использовании в качестве сенсорных элементов планарно-емкостных микроэлектродных конструкций дифференциального типа в жидких гетерогенных средах, имеющих высокие значения диэлектрической проницаемости ($\epsilon \approx 80$), возникают проблемы выделения информативных сигналов и обеспечения необходимой чувствительности и достоверности измерений. В таких средах это может быть обусловлено незначительными различиями измерительного и референтного микроэлектродов (например, в размерах и/или в электрохимических свойствах их поверхности), которые возникают в процессе изготовления. Это, в свою очередь, требует дополнительных усилий для обнаружения различий и отбраковки сенсоров, используемых для проведения измерений [1].

Для ускоренного обнаружения и дифференциации микроорганизмов необходим поиск информативных и чувствительных электрофизических методов, а также условий, режимов проведения измерений и методик подготовки исследуемых образцов, которые позволят исключить влияние жидких гетерогенных сред на процесс измерений и обеспечить высокий уровень достоверности получаемых результатов.

Цель настоящей работы – создание электрофизического метода ускоренного обнаружения и дифференциации микроорганизмов на основе биоструктур пленочного типа и планарно-емкостных биосенсоров.

Материалы и методы исследований

Для достижения поставленной цели использован микрокапельный чип-формат на основе планарно-емкостных сенсоров, на поверхность чувствительной области которых наносятся микрокапли суспензий различных микроорганизмов, и из них формируются биоструктуры пленочного типа.

Материалом для исследований служили суспензии интактных популяций эталонных штаммов бактерий *S. aureus*, *E. coli*, *P. aeruginosa* и грибов *C. albicans*, а также фильтраты этих суспензий. В качестве

питательной среды использовали 5 % раствор глюкозы. Суспензии популяций готовили смывом 5 % раствора глюкозы 24-часовых культур, выращенных на мясо-пептонном агаре. Количество микроорганизмов в суспензиях доводили до концентрации $1 \cdot 10^9$ КОЕ/мл с последующим разведением этим же раствором до $1 \cdot 10^5$ КОЕ/мл. Контроль концентрации микроорганизмов осуществляли на фотометре РВ2201 («Солар ЛС», Беларусь) по методу Макфарланда [2]. Фильтраты получали пропусканием суспензий ($1 \cdot 10^9$ КОЕ/мл) через микропористый фильтр (диаметр пор – 200 нм) фирмы *Corning* (Германия). Полученный фильтрат разбавляли до степени разведения суспензии популяций интактных микроорганизмов $1 \cdot 10^5$ КОЕ/мл.

В исследованиях использовали планарно-емкостные чип-форматы сенсоров нефарадеевского типа с алюминиевыми микроэлектродами [1], которые были изолированы плотной композитной пленкой, состоящей из Al_2O_3 (200 нм) + SiO_2 (100 нм).

Результаты исследований и их обсуждение



Общий вид лабораторной системы для формирования биоструктур пленочного типа и измерения их зарядовых характеристик

General view of the laboratory system for the formation of film-type biostructures and measurement of their charge characteristics

Для проведения исследований использовали лабораторный вариант разработанной нами аналитической системы *Bacteria viability meter*, общий вид которой приведен на рис. 1 [2].

В состав системы входят: термостат, блок измерения и поддержания температуры в камере термостата с помощью элементов Пельтье, узел измерения относительной влажности воздуха в камере термостата, узел вентиляции и поддержания влажности, узел измерения вольт-амперных характеристик (ВАХ), узел задания режима формирования пленки, 10-канальный планарно-емкостной чип-формат, универсальный мультиплексор с режимами работы $10 \cdot 1$ и произвольный, которые используются при измерении ВАХ и формировании биоструктур пленочного типа соответственно.

Формирование пленочных биоструктур, а также измерение их зарядовых характеристик [3] проводили

при температуре $37^\circ C$ и относительной влажности воздуха не более 5 % в камере термостата системы, приведенной на рисунке. Данные значения температуры и относительной влажности воздуха в камере термостата поддерживались постоянными в течение всего процесса сушки. Значение температуры $37^\circ C$ было выбрано из условия обеспечения целостности мембран в процессе формирования пленок. Пленочные биоструктуры *E. coli*, *S. aureus*, *P. aeruginosa*, *C. albicans* и аналогичные биоструктуры из их фильтратов формировали в течение 40 мин в термостате из микрокапли объемом 10 мкл из разведений в концентрации 10^5 КОЕ/мл. Формирование осуществляли в условиях подачи на микроэлектроды используемых чип-форматов напряжения амплитудой $U = 0,5$ мВ и при ее отсутствии.

Определение заряда созданных пленочных биоструктур проводили сразу же после формирования пленок путем измерения ВАХ, которые регистрировали отдельно в диапазонах напряжений (от 0 до ± 2000) мВ. Время развертки напряжения от нулевого до конечного значения диапазона составляло 20 с. Время преобразования АЦП было выбрано 10 мс. Изменения тока регистрировали в диапазоне от -3 до $+3$ нА. Величины зарядов пленочных биоструктур оценивали по площади под кривой тока от времени после ее полиномиальной аппроксимации для $n = 2000$ и $\alpha = 99,9\%$ в программной среде *CurveExpert Professional 2.0.4*. Статистическую обработку выборочной совокупности однотипных измерений проводили с помощью программного обеспечения *Excel 2007* для количества измерений $n = 3$ и надежности $\alpha = 90\%$ в предположении, что случайная величина распределена по нормальному закону.

Результаты статистической обработки заряда пленочных биоструктур микроорганизмов *E. coli*, *S. aureus*, *P. aeruginosa* и *C. albicans* различных условий формирования, полученного при поляризации линейно нарастающим напряжением в диапазоне (от 0 до $+2000$) мВ, представлены в табл. 1.

Из данных табл. 1 видно, что пленочные биоструктуры суспензии, сформированные при напряжении $U = 0,5$ мВ, имеют меньшие усредненные значения заряда пленок, чем при нулевом напряжении. Для *E. coli*, *S. aureus*, *P. aeruginosa*, *C. albicans* это уменьшение составляет 30; 17; 20 и 56 % соответственно. Более высокое среднее значение заряда пленок при нулевом потенциале объясняется, по всей видимости, тем, что под воздействием сил поверхностного натяжения согласно так называемому *coffee ring* эффекту [4] микроорганизмы вытесняются к самому краю формируемой пленочной биоструктуры и практически не принимают участия в компенсации заряда измеряемой области пленки.

Уменьшение отношения погрешности определения заряда к величине его среднего значения при напряжении $U = 0,5$ мВ обусловлено возникающим клеточным электрофорезом, который обеспечивает быстрое электрокинетическое перемещение микроорганизмов в зону измерительного преобразователя, имеющую одинаковую чувствительность. Наличие микроорганизмов в суспензии приводит к компенсации заряда сформированной пленки [5].

Таблица 1

Заряд пленочных биоструктур суспензии и фильтрата различных микроорганизмов в зависимости от условий формирования при положительной поляризации

Table 1

The charge of the film biostructures in the suspension and the filtrate of various microorganisms as a function of the formation conditions with positive polarization

$(\bar{Q} \pm \Delta Q) \cdot 10^{-9}$, Кл			
<i>S. aureus</i>	<i>E. coli</i>	<i>P. aeruginosa</i>	<i>C. albicans</i>
Суспензии			
37 °C ($n = 3$, $\alpha = 90$ %), $U = 0$ мВ			
14 094 ± 2374 (±17 %)	18 745 ± 2051 (±11 %)	7540 ± 1017 (13 %)	5393 ± 878 (±16 %)
37 °C ($n = 3$, $\alpha = 90$ %), $U = 0,5$ мВ			
11 696 ± 585 (±5 %)	13 112 ± 815 (±6 %)	6009 ± 421 (±7 %)	2391 ± 167 (±7 %)
Фильтраты			
37 °C ($n = 3$, $\alpha = 90$ %), $U = 0$ мВ			
12 947 ± 2374 (±11 %)	16 027 ± 3205 (±20 %)	7748 ± 852 (±11 %)	5341 ± 694 (±13 %)
37 °C ($n = 3$, $\alpha = 90$ %), $U = 0,5$ мВ			
12 408 ± 1489 (±12 %)	15 712 ± 2985 (±19 %)	7702 ± 847 (±11 %)	5031 ± 604 (±13 %)

Пленочные биоструктуры, полученные из фильтрата, как видно из табл. 1, при изменении режима воздействия напряжения меняют свои исходные зарядовые показатели незначительно.

Достоверность различия усредненных значений заряда биоструктур пленочного типа для различных микроорганизмов оценена с использованием следующего критерия [6]:

$$t = \frac{|\bar{Q}_1 - \bar{Q}_2|}{\sqrt{(\Delta Q_1)^2 + (\Delta Q_2)^2}}, \quad (1)$$

где t – критерий достоверности различия; \bar{Q}_1, \bar{Q}_2 – усредненные значения заряда биоструктур пленочного типа для различных микроорганизмов; $\Delta Q_1, \Delta Q_2$ – ошибки измерения усредненных значений заряда.

Для условий статистической обработки ($n = 3$, $\alpha = 90$ %) из таблицы критических значений коэффициентов Стьюдента (t -критерия) определено значение критериального доверительного параметра $t = 2,4$. При $t \geq 2,4$ различие считается достоверным и представляется как $\alpha \geq 90$ % ($P \leq 0,1$). При $t < 2,4$ различие считается недостоверным и записывается в виде $\alpha < 90$ % ($P > 0,1$).

Результаты вычисления значений критерия t и оценки значений доверительной вероятности P , полученные на основании данных табл. 1, приведены в табл. 2.

Анализ результатов табл. 2 показывает, что рассчитанные значения критерия t для четырех пар микроорганизмов (*P. aeruginosa* – *E. coli*, *E. coli* – *C. albicans*, *S. aureus* – *C. albicans*, *S. aureus* – *P. aeruginosa*), сформированных в условиях отсутствия электрического поля между микроэлектродами, достоверно различаются между собой с доверительной вероятностью $P \leq 0,1$. Для двух пар (*E. coli* – *S. aureus*, *P. aeruginosa* – *C. albicans*) рассчитанные значения критерия t (1,5; 1,6) значительно меньше значения критериального доверительного параметра (2,4), поэтому различия между усредненными величинами зарядов пленочных биоструктур для данных микроорганизмов недостоверны. Обусловлены такие различия, скорее всего, наличием и/или разнообразием артефактов, например карбоновых кислот в среде роста [7].

У пленочных биоструктур, сформированных при напряженности поля 10 В/м (зазор между электродами 50 мкм), для пяти пар микроорганизмов (*P. aeruginosa* – *E. coli*, *E. coli* – *C. albicans*, *S. aureus* – *C. albicans*, *S. aureus* – *P. aeruginosa*, *P. aeruginosa* – *C. albicans*) наблюдается достоверное различие

между собой с доверительной вероятностью $P \ll 0,1$. Для пары микроорганизмов (*E. coli* – *S. aureus*), пленки которых сформированы в аналогичных условиях, доверительная вероятность $P > 0,1$. При этом вычисленный критериальный параметр $t = 1,4$ (см. табл. 2) существенно отличается от значения доверительного критериального параметра $t = 2,4$, что в условиях однополярной (положительной) поляризации может быть также вызвано отмеченными артефактами.

Таблица 2

Результаты вычисления значений критерия t и оценка доверительной вероятности P^*

Table 2

The calculation results for the criterion t and estimates of the confidence coefficient P^*

Микроорганизмы	Микроорганизмы			
	<i>S. aureus</i>	<i>E. coli</i>	<i>P. aeruginosa</i>	<i>C. albicans</i>
Режим формирования: 37 °C, $U = 0,0$ мВ				
<i>S. aureus</i>	–	$P > 0,1$	$P \leq 0,1$	$P \leq 0,1$
<i>E. coli</i>	1,5	–	$P \leq 0,1$	$P \leq 0,1$
<i>P. aeruginosa</i>	2,5	4,9	–	$P > 0,1$
<i>C. albicans</i>	3,4	6,0	1,6	–
Режим формирования: 37 °C, $U = 0,5$ мВ				
<i>S. aureus</i>	–	$P > 0,1$	$P \ll 0,1$	$P \ll 0,1$
<i>E. coli</i>	1,4	–	$P \ll 0,1$	$P \ll 0,1$
<i>P. aeruginosa</i>	7,9	7,8	–	$P \ll 0,1$
<i>C. albicans</i>	15,3	12,8	8,0	–

*Для оценки доверительной вероятности P в табл. 2 принято, что если $P \leq 0,1$, то значение такой вероятности отличается от единицы на величину порядка $0,0X$, а для $P \ll 0,1$ – на величину порядка $0,00X$, где X – десятичное число, оцениваемое из таблицы Стьюдента.

Доверительная вероятность $P \ll 0,1$ для пяти пар вышеназванных микроорганизмов в условиях положительной поляризации может определяться условиями формирования пленки при воздействии однородного электрического поля, но в большей степени, по нашему мнению, наличием и/или разнообразием артефактов в их питательных средах.

Устранить неконтролируемое влияние артефактов подобного рода на информативные показатели можно путем предварительного вычета зарядов пленки фильтра из усредненных зарядов пленки суспензии и последующего вычисления дифференциальных усредненных зарядов пленки без зарядов фильтра. Ниже приведены математические выражения для нахождения такого информативного показателя, обозначаемого как $(\Delta \overline{Q}_{i=1,2,3,4})$:

$$\begin{aligned}
 \Delta \overline{Q}_{i=1,2,3,4}^+ &= (\overline{Q}_{ci}^+ - \overline{Q}_{\phi i}^+) \pm \left| \Delta Q_{ci}^+ - \Delta Q_{\phi i}^+ \right| = \Delta \overline{Q}_{c\phi i}^+ \pm \left| \Delta Q_{c\phi i}^+ \right|, \\
 \Delta \overline{Q}_{i=1,2,3,4}^- &= (\overline{Q}_{ci}^- - \overline{Q}_{\phi i}^-) \pm \left| \Delta Q_{ci}^- - \Delta Q_{\phi i}^- \right| = \Delta \overline{Q}_{c\phi i}^- \pm \left| \Delta Q_{c\phi i}^- \right|, \\
 \Delta \overline{Q}_{i=1,2,3,4} &= (\overline{Q}_{c\phi i}^+ - \overline{Q}_{c\phi i}^-) \pm \left(\left| \Delta Q_{c\phi i}^+ \right| - \left| \Delta Q_{c\phi i}^- \right| \right),
 \end{aligned}
 \tag{2}$$

где c, ϕ – индексы обозначения суспензии и фильтра; $i = 1, 2, 3, 4$ – индекс числа исследуемых микроорганизмов; знаки + и – соответствуют индексам обозначения положительной и отрицательной поляризации; $\overline{Q}_{ci}^+, \overline{Q}_{\phi i}^+, \overline{Q}_{ci}^-, \overline{Q}_{\phi i}^-$ – усредненные значения заряда пленки суспензии и фильтра; $\Delta \overline{Q}_{c\phi i}^+, \Delta \overline{Q}_{c\phi i}^-$ – дифференциальный усредненный заряд пленки суспензии за вычетом заряда пленки фильтра; $\Delta Q_{ci}^+, \Delta Q_{\phi i}^+, \Delta Q_{ci}^-, \Delta Q_{\phi i}^-$ – ошибки измерения заряда пленки суспензии и фильтра; $\Delta Q_{c\phi i}^+, \Delta Q_{c\phi i}^-$ – ошибки

измерения заряда пленки суспензии за вычетом заряда пленки фильтрата; $\overline{\Delta Q_{i=1, 2, 3, 4}^+}$, $\overline{\Delta Q_{i=1, 2, 3, 4}^-}$ – дифференциальный усредненный заряд с учетом ошибки измерения; $\overline{\Delta Q_{i=1, 2, 3, 4}}$ – информативный показатель.

Дифференциальные значения информативного показателя $\overline{\Delta Q_{i=1, 2, 3, 4}}$, рассчитанного для различных микроорганизмов по дифференциальным усредненным зарядам пленочных биоструктур $\overline{\Delta Q_{i=1, 2, 3, 4}^+}$ и $\overline{\Delta Q_{i=1, 2, 3, 4}^-}$, представлены в табл. 3. Пленки сформированы в течение 40 мин при воздействии напряженности электрического поля 10 В/м. Численные значения зарядов получены с помощью математических выражений (2) по результатам исходной статистической обработки, часть которых для положительной поляризации взята из табл. 1.

Таблица 3

Значения дифференциальных усредненных зарядов пленочных биоструктур для различных микроорганизмов

Table 3

The differential averaged charges of film biostructures for various microorganisms

<i>S. aureus</i>	<i>E. coli</i>	<i>P. aeruginosa</i>	<i>C. albicans</i>
$\overline{\Delta Q_{i=1, 2, 3, 4}^+} \cdot 10^{-9}$, Кл			
-712 ± 904	-2600 ± 2170	-1693 ± 426	-2640 ± 437
$\overline{\Delta Q_{i=1, 2, 3, 4}^-} \cdot 10^{-9}$, Кл			
-1859 ± 480	-2733 ± 2202	-1485 ± 362	-2692 ± 422
$\overline{\Delta Q_{i=1, 2, 3, 4}}$ · 10 ⁻⁹ , Кл			
1147 ± 424	133 ± 32	-208 ± 64	52 ± 15

Статистическое различие показателей $\overline{\Delta Q_{i=1, 2, 3, 4}^+}$ или $\overline{\Delta Q_{i=1, 2, 3, 4}^-}$, представленных в табл. 3 и оцениваемых по критерию (1), является практически неинформативным, что не позволяет провести дифференцировку микроорганизмов.

Результаты вычисления значений критерия t и оценки значений доверительной вероятности P , полученные на основании данных табл. 3 для информационных показателей $\overline{\Delta Q_{i=1, 2, 3, 4}}$, приведены в табл. 4.

Таблица 4

Результаты вычисления значений критериального параметра t и оценки доверительной вероятности P информационных показателей $\overline{\Delta Q_{i=1, 2, 3, 4}}$

Table 4

The calculation results for the criterion t and estimates of the confidence coefficient P for the informative indices $\overline{\Delta Q_{i=1, 2, 3, 4}}$

Микроорганизмы	Микроорганизмы			
	<i>S. aureus</i>	<i>E. coli</i>	<i>P. aeruginosa</i>	<i>C. albicans</i>
<i>S. aureus</i>	–	$P \leq 0,1$	$P \leq 0,1$	$P \leq 0,1$
<i>E. coli</i>	2,4	–	$P \leq 0,1$	$P \leq 0,1$
<i>P. aeruginosa</i>	3,2	4,7	–	$P \leq 0,1$
<i>C. albicans</i>	2,6	2,4	3,9	–

Из результатов табл. 4 видно, что вычисленные критериальные параметры t и оценочные значения доверительных вероятностей P , в которых учтено влияние артефактов для различных микроорганизмов

путем вычета заряда пленки их фильтратов из усредненных значений для положительной и отрицательной поляризации с учетом аналогичных действий относительно ошибок измерения (см. (2)), различаются между собой с вероятностью, близкой к единице ($P \leq 0,1$), на величину порядка $0,0X$ для всех исследуемых микроорганизмов.

Заключение

Таким образом, разработан электрофизический метод на основе планарно-емкостных чип-форматов и биоструктур пленочного типа и получены результаты, которые показывают, что выборочные совокупности ($n = 3$, $\alpha = 90\%$, $t = 2,4$) являются методически репрезентативными с доверительной вероятностью $P \leq 0,1$ для обнаружения (в течение 40 мин) и дифференциации микроорганизмов *S. aureus*, *E. coli*, *P. aeruginosa* и *C. albicans* по информативным показателям заряда пленочных биоструктур. Разработанный метод может быть использован для автоматизации прикладного микробиологического эксперимента в различных областях медицины и санитарии.

Библиографические ссылки

1. Дραπεза А. И., Лобан В. А., Пleshko Н. В. и др. Перспективные материалы и конструкции датчиков для реализации информационных технологий экспрессной оценки жизнеспособности микробных популяций // Современные методы и технологии создания и обработки материалов : сб. науч. тр. : в 3 кн. Кн. 1. Материаловедение / редкол.: С. А. Астапчик (гл. ред.) [и др.]. Минск, 2014. С. 185–195.
2. Дραπεза А. И., Лазарук С. К., Пleshko Н. В. и др. Повышение информативности обнаружения и дифференциации микроорганизмов при использовании планарно-емкостных чип-форматов фарадеевского и нефарадеевского типа // Современные методы и технологии создания и обработки материалов : сб. науч. тр. : в 3 кн. Кн. 1. Материаловедение / редкол.: С. А. Астапчик (гл. ред.) [и др.]. Минск, 2016. С. 226–232.
3. Кухто А. В., Пleshko Н. В., Лобан В. А. и др. Проявление зарядовых свойств модифицированных полимерных нанокomпозитных тонкопленочных структур на основе графена и наночастиц меди в условиях вынужденной поляризации // Современные методы и технологии создания и обработки материалов : сб. науч. тр. : в 3 кн. Кн. 1. Материаловедение / редкол.: С. А. Астапчик (гл. ред.) [и др.]. Минск, 2014. С. 282–291.
4. Deegan R. D., Bakajin O., Dupont T. F., et al. Capillary flow as the cause of ring stains from dried liquid drops // Nature. 1997. Vol. 389, No. 6653. P. 827–829.
5. Pethig R. Application of A. C. electrical fields to the manipulation and characterization of cells // Automation in Biotech. / ed. by I. Karube. Amsterdam, 1991. P. 159–185.
6. Петри А., Сэбин К. Наглядная медицинская статистика : пер. с англ. / под ред. В. П. Леонова. 2-е изд., перераб. и доп. М., 2009.
7. Полевая У. В., Вахитов Т. Я., Яковлева Е. П. Штаммоспецифические особенности в составе и динамике карбоновых кислот при выращивании бактерий *ESHERICHIA COLI* и *SALMONELLA ENTERITIDIS* // Науч. журн. КубГАУ. 2012. № 77 (03). С. 1–15.

References

1. Drapeza A. I., Loban V. A., Pleshko N. V., et al. Perspektivnye materialy i konstruktsii datchikov dlya realizatsii informatsionnykh tekhnologiy ekspressnoy otsenki zhiznesposobnosti mikrobynykh populyatsiy [Perspective materials and sensor designs for the implementation of information technologies for the rapid assessment of the viability of microbial populations]. *Sovremennye metody i tekhnologii sozdaniya i obrabotki materialov* : sb. naychn. tr. : in 3 vol. Vol. 1. Materialovedenie. Minsk, 2014. P. 185–195 (in Russ.).
2. Drapeza A. I., Lazaryk S. K., Pleshko N. V., et al. Povysheniye informativnosti obnaruzheniya i differentsatsii mikroorganizmov pri ispol'zovanii planarno-yemkostnykh chip-formatov faradeyevskogo i nefaradeyevskogo tipa [Increase of information content of detection and differentiation of microorganisms using planar-capacitive chip formats of Faraday and non-Faraday type]. *Sovremennye metody i tekhnologii sozdaniya i obrabotki materialov* : sb. naychn. tr. : in 3 vol. Vol. 1. Materialovedenie. Minsk, 2016. P. 226–232 (in Russ.).
3. Kukhto A. V., Pleshko N. V., Loban V. A., et al. Proyavleniye predokvalifitsirovannykh svoystv modifitsirovannykh polimernykh nanokompozitnykh tonkopenochnykh struktur na osnove grafena i nanochastits medi v usloviyakh vynuzhdennoy polyarizatsii [The manifestation of the pre-qualified properties of modified polymeric nanocomposite thin-film structures based on graphene and copper nanoparticles under stimulated polarization conditions]. *Sovremennye metody i tekhnologii sozdaniya i obrabotki materialov* : sb. naychn. tr. : in 3 vol. Vol. 1. Materialovedenie. Minsk, 2014. P. 282–291 (in Russ.).
4. Deegan R. D., Bakajin O., Dupont T. F., et al. Capillary flow as the cause of ring stains from dried liquid drops. *Nature*. 1997. Vol. 389, No. 6653. P. 827–829. DOI: 10.1038/39827.
5. Pethig R. Application of A. C. electrical fields to the manipulation and characterization of cells. *Automation in Biotech*. Amsterdam, 1991. P. 159–185.
6. Petri A., Sebin K. Naglyadnaya meditsinskaya statistika [Visible medical statistics]. Moscow, 2009 (in Russ.).
7. Polevaya U. V., Vakhitov T. Ya., Yakovleva Ye. P. Shtammospetsificheskiye osobennosti v sostave i dinamike karbonovykh kislot pri vyrashchivaniy bakteriy *ESHERICHIA COLI* i *SALMONELLA ENTERITIDIS* [Strain Specific Features in the Composition and Dynamics of Carboxylic Acids in the Growth of *ESHERICHIA COLI* and *SALMONELLA ENTERITIDIS* Bacteria]. *Nauchn. zh. KubGAU*. 2012. No. 77 (03). P. 1–15 (in Russ.).

ФИЗИКА

ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ЯВЛЕНИЙ

PHYSICS

OF ELECTROMAGNETIC PHENOMENA

УДК 533.723:577.352.4(086.48)

ДИФФУЗИЯ БРОУНОВСКИХ ЧАСТИЦ В ПРОСТРАНСТВЕННО-ПЕРИОДИЧЕСКОМ ПОТЕНЦИАЛЕ С КОНЕЧНЫМ ВРЕМЕНЕМ ЖИЗНИ

**В. А. ВЫСОЦКАЯ¹⁾, И. В. ШАПОЧКИНА¹⁾,
В. М. РОЗЕНБАУМ²⁾, Л. И. ТРАХТЕНБЕРГ^{3), 4)}**

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

²⁾Институт химии поверхности им. А. А. Чуйко НАН Украины,
ул. Генерала Наумова, 17, 03164, г. Киев, Украина

³⁾Институт химической физики им. Н. Н. Семенова РАН, ул. Косыгина, 4, 119991, г. Москва, Россия

⁴⁾ГНЦ «Научно-исследовательский физико-химический институт им. Л. Я. Карпова»,
пер. Обуха, 3, 105064, г. Москва, Россия

Описывается движение броуновских частиц в периодическом асимметричном потенциале, имеющем конечное время жизни. Предполагается, что в начальный момент времени на каждом периоде потенциала и в определенной его точке находится по одной частице. Затем происходит диффузионное движение частиц в этом потенциале.

Образец цитирования:

Высоцкая В. А., Шапочкина И. В., Розенбаум В. М., Трахтенберг Л. И. Диффузия броуновских частиц в пространственно-периодическом потенциале с конечным временем жизни // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2017. № 3. С. 33–40.

For citation:

Vysotskaya U. A., Shapochkina I. V., Rozenbaum V. M., Trakhtenberg L. I. Diffusion of Brownian particles in a spatially periodic potential with a finite life-time. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2017. No. 3. P. 33–40 (in Russ.).

Авторы:

Влада Александровна Высоцкая – студентка физического факультета.

Ирина Викторовна Шапочкина – кандидат физико-математических наук, доцент; доцент кафедры компьютерного моделирования физического факультета.

Виктор Михайлович Розенбаум – доктор физико-математических наук, профессор; заведующий отделом теоретической и экспериментальной физики наносистем.

Леонид Израйлевич Трахтенберг – доктор физико-математических наук, профессор; заведующий лабораторией функциональных наноконструкций³⁾; главный научный сотрудник лаборатории теории физико-химических процессов⁴⁾.

Authors:

Ulada Vysotskaya, student at the faculty of physics.

Irina Shapochkina, PhD (physics and mathematics), docent; associate professor at the department of computer simulation, faculty of physics.

shapoch@mail.ru

Viktor Rozenbaum, doctor of science (physics and mathematics), full professor; head of the department of theoretical and experimental physics of nanosystems.

vik-roz@mail.ru

Leonid Trakhtenberg, doctor of science (physics and mathematics), full professor; head of the laboratory of functional nanocomposites³⁾; chief researcher at the laboratory of theory of physical and chemical processes⁴⁾.

litrakh@gmail.com

Ставится задача вычислить плотности вероятности нахождения частицы в рассматриваемом потенциальном профиле с заданным временем жизни. Показано, что искомая плотность вероятности является преобразованием Лапласа от функции Грина уравнения Смолуховского с периодическими граничными условиями. Поставленная задача решается аналитически для пилообразного потенциала, представляющего собой кусочно-линейную функцию. Получены явные выражения и дано графическое представление плотности вероятности, проанализированы ее свойства в зависимости от параметров задачи – времени жизни потенциального профиля и высоты потенциального барьера относительно тепловой энергии. Обсуждается применение полученных результатов для расчетов характеристик броуновских моторов, которыми моделируются искусственно создаваемые наноразмерные устройства, выпрямляющие неравновесные флуктуации в направленное движение частиц.

Ключевые слова: диффузионная динамика; состояния с конечным временем жизни; функции Грина; броуновские моторы.

Благодарность. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 15-59-32405 РТ-оми).

DIFFUSION OF BROWNIAN PARTICLES IN A SPATIALLY PERIODIC POTENTIAL WITH A FINITE LIFE-TIME

*U. A. VYSOTSKAYA^a, I. V. SHAPOCHKINA^a,
V. M. ROZENBAUM^b, L. I. TRAKHTENBERG^{c, d}*

^a*Belarusian State University, Niezaliežnasci Avenue, 4, 220030, Minsk, Belarus*

^b*Chuiko Institute of Surface Chemistry, National Academy of Sciences of Ukraine,
General Naumov Street, 17, 03164, Kiev, Ukraine*

^c*Semenov Institute of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences,
Kosygin Street, 4, 119991, Moscow, Russia*

^d*Karpov Institute of Physical Chemistry, Obukha Lane, 3, 105064, Moscow, Russia*

Corresponding author: I. V. Shapochkina (shapoch@mail.ru)

We consider the motion of Brownian particles in a spatially periodic asymmetric potential with a finite life-time. It is assumed that, at the initial time, there is one particle for each period at a certain point. Further, the diffusion in this potential takes place. The problem definition is to calculate the probability density to find a particle in the potential profile considered, which is characterized by a finite life-time. It is shown that the desired quantity is the Laplace transformation of Green's function of the Smoluchowski equation with certain boundary conditions. The problem is solved for the sawtooth potential profile described by a piecewise-linear function. The explicit analytical expressions have been obtained and the graphic interpretation of the probability density has been presented; the influence of the model parameters (life-time duration of the potential profile and the relation of its amplitude to thermal energy) on the features of the probability density has been analyzed. We also discuss the application of the results obtained to calculations of the characteristics of Brownian motors, which model artificial nano-devices, the systems that can rectify non-equilibrium fluctuations of different nature to the directional motion of particles.

Key words: diffusion dynamics; periodic potential with a finite life-time; Green's function; Brownian motors.

Acknowledgements. This work was financially supported by Russian Foundation for Basic Research (grant No. 15-59-32405 RT-omi).

Броуновское движение лежит в основе многих физических явлений и выступает в качестве определяющего при создании наномашин с заданными свойствами [1; 2]. Для организации направленного движения как результата неравновесных флуктуаций параметров системы (для получения рэтчет-эффекта), как правило, используются состояния, характеризующиеся асимметричными периодическими профилями потенциальной энергии наночастицы и конечным временем их жизни [3–7], т. е. осуществляются детерминистические либо стохастические переключения между потенциальными профилями. В связи с этим описание движения броуновской частицы в таких состояниях (потенциальных профилях с заданным временем жизни) представляется актуальной и интересной задачей. Основной величиной, в которой заключена вся информация о характере диффузии частицы в стационарном состоянии, является переходная (условная) плотность вероятности $P(x, t|x_0, 0)$. Она определяет вероятность нахождения частицы в точке x в момент времени t при условии, что в момент времени $t = 0$ частица находилась в точке x_0 . Далее, будем считать, что рассматриваемое состояние может распадаться со скоростью Γ ,

так что вероятность его распада в интервале времени от t до $t + dt$ равна $\Gamma \exp(-\Gamma t) dt$ ($t \geq 0$). Тогда соответствующая плотность вероятности найти частицу в таком состоянии (потенциальном профиле) с характерным временем жизни Γ^{-1} определится интегральным соотношением

$$G(x, x_0) = \Gamma \int_0^{\infty} dt P(x, t | x_0, 0) \exp(-\Gamma t). \quad (1)$$

Переходная плотность вероятности $P(x, t | x_0, 0)$ удовлетворяет уравнению Смолуховского

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \hat{J}(x) \right] P(x, t | x_0, 0) = 0 \quad (2)$$

с δ -образным начальным условием $P(x, 0 | x_0, 0) = \delta(x - x_0)$. Входящий в это уравнение оператор потока

$$\hat{J}(x) = -D e^{-\beta V(x)} \frac{\partial}{\partial x} e^{\beta V(x)} = -D \frac{\partial}{\partial x} - \beta D V'(x) \quad (3)$$

определяется коэффициентом диффузии $D = (\beta \zeta)^{-1}$, обратной тепловой энергией $\beta = (k_B T)^{-1}$ (k_B – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура, ζ – коэффициент трения) и потенциальной энергией $V(x)$, которая предполагается периодической (с периодом L) функцией. Умножая каждый член уравнения (2) на $\exp(-\Gamma t)$ и интегрируя по времени от нуля до бесконечности, получаем

$$-P(x, 0 | x_0, 0) + \left[\Gamma + \frac{\partial}{\partial x} \hat{J}(x) \right] \int_0^{\infty} dt P(x, t | x_0, 0) \exp(-\Gamma t) = 0. \quad (4)$$

Используя в (4) начальное условие для $P(x, t | x_0, 0)$ и определение (1), приходим к уравнению для искомой функции $G(x, x_0)$

$$\left[1 + \Gamma^{-1} \frac{\partial}{\partial x} \hat{J}(x) \right] G(x, y) = \delta(x - y) \quad (5)$$

(здесь и далее для удобства x_0 заменено на y). Заметим, что величину $G(x, y)$ можно рассматривать как преобразование Лапласа от функции Грина уравнения Смолуховского, поэтому ниже мы будем называть ее также функцией Грина.

Поскольку нас интересуют периодические решения уравнения (5), то достаточно его решать на одном периоде потенциала $[0, L]$, дополнив граничными условиями периодичности самой функции $G(x, y)$ и ее производной:

$$\begin{aligned} G(0, y) &= G(L, y), \\ \frac{\partial G(x, y)}{\partial x} \Big|_{x=0} &= \frac{\partial G(x, y)}{\partial x} \Big|_{x=L}. \end{aligned} \quad (6)$$

Наличие дельта-функции в правой части уравнения (5) накладывает на функцию $G(x, y)$ еще два специфических граничных условия в точке $x = y$. Первое из них – это условие непрерывности

$$G(y - \varepsilon, y) = G(y + \varepsilon, y), \quad \varepsilon \rightarrow 0. \quad (7)$$

Для получения второго условия проинтегрируем уравнение (5) по x в пределах от $y - \varepsilon$ до $y + \varepsilon$ и устремим ε к нулю. Это даст граничное условие скачка потока в точке $x = y$

$$\hat{J}(x) G(x, y) \Big|_{x=y+\varepsilon} - \hat{J}(x) G(x, y) \Big|_{x=y-\varepsilon} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \Gamma. \quad (8)$$

Дифференциальное уравнение (5) удобно рассматривать по отдельности на интервалах $[0, y)$ и $(y, L]$, поскольку на каждом из них оно является однородным. Общее решение этого уравнения

(в данном случае уравнения второго порядка) на каждом из интервалов содержит по две произвольные постоянные. Таким образом, имеются всего четыре произвольные постоянные. Их конкретные значения, определяющие периодическое частное решение – функцию $G(x, y)$, – как раз и находятся из решения системы четырех уравнений (6)–(8). Таким образом, схема решения неоднородного уравнения (5) с $\hat{J}(x)$ вида (3), дополненного граничными условиями (6)–(8) периодичности, непрерывности и скачка потока, заключается в сведении данного уравнения к решению двух однородных дифференциальных уравнений с теми же граничными условиями.

Выше изложена общая идея получения выражения для основной искомой величины $G(x, y)$, «ответственной» за расчет характеристик движения броуновской частицы в условиях исследуемой модели. Несмотря на лаконичность и наглядность общего подхода, аналитическое решение уравнения (2) для конкретных потенциалов оказывается весьма громоздким. Аналитическое представление функции $G(x, y)$ возможно получить, например, для кусочно-линейных профилей потенциальной энергии $V(x)$, когда производная $V'(x)$ есть постоянная величина V' на каждом линейном участке. Данный факт упрощает задачу, поскольку уравнение (5), записанное отдельно для каждого из двух участков, является дифференциальным уравнением второго порядка с постоянными коэффициентами:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} G(x, y) - \beta V' \frac{\partial}{\partial x} G(x, y) - \lambda^2 G(x, y) = 0, \quad \lambda^2 = \frac{\Gamma}{D}. \quad (9)$$

Его общее решение

$$G(x, y) = [A(y)e^{\Lambda x} + B(y)e^{-\Lambda x}]e^{-fx} \quad (10)$$

будет содержать две произвольные постоянные $A(y)$ и $B(y)$, не зависящие от x и являющиеся функциями только параметра y . Величины Λ и f не зависят от x и y и определяются коэффициентами уравнения (9):

$$\Lambda = \sqrt{f^2 + \lambda^2}, \quad f = \frac{1}{2}\beta V'. \quad (11)$$

Рассмотрим пространственно-периодический пилообразный потенциал с двумя линейными участками $[0, l]$ и $[l, L]$ и энергетическим барьером V : $V(x) = \frac{Vx}{l}$ для $x \in [0, l]$ и $V(x) = \frac{V(L-x)}{L-l}$ для $x \in [l, L]$. На этих участках из (11) имеем параметр $\Lambda = \Lambda_l = \sqrt{f_l^2 + \lambda^2}$ и $\Lambda = \Lambda_{L-l} = \sqrt{f_{L-l}^2 + \lambda^2}$ соответственно, где введены обозначения: $f_l = \frac{\beta V}{2l}$ и $f_{L-l} = \frac{-\beta V}{2(L-l)}$. Значение параметра y может принадлежать первому или второму участку. При этом дополнительно необходимо различать ситуации $x < y$ и $x > y$. Это означает, что на самом деле общее решение вида (10) записывается отдельно для трех участков, а шесть возникающих при этом произвольных постоянных должны находиться из четырех уравнений (6)–(8) и еще двух дополнительных уравнений непрерывности, записываемых по аналогии с уравнением (6), но в точке $x = l$. При $y < l$ этими тремя участками являются $[0, y]$, $[y, l]$ и $[l, L]$. Решение системы уравнений относительно искомых коэффициентов (условно обозначаемых здесь как $A_l(y)$, $B_l(y)$, $\tilde{A}_l(y)$, $\tilde{B}_l(y)$ и $A_{L-l}(y)$, $B_{L-l}(y)$, чтобы подчеркнуть их различие для каждого из фрагментов решения вида (10)) на этих участках и подстановка их в общее решение (10) приводят к следующим аналитическим выражениям для функции Грина:

$$\begin{aligned} G(x, y)_{0 < x < y < l < L} = & \lambda^2 \frac{e^{f_l(y-x)}}{\Delta \Lambda_l} \left\{ - (f_l - f_{L-l})^2 \operatorname{sh} \Lambda_{L-l}(L-l) \operatorname{sh} \Lambda_l(l-y) \operatorname{sh} \Lambda_l x - \right. \\ & - (f_l - f_{L-l}) \Lambda_l \operatorname{sh} \Lambda_{L-l}(L-l) \operatorname{sh} \Lambda_l(x+y-l) + \\ & + \Lambda_l \Lambda_{L-l} \left[\operatorname{ch} \Lambda_{L-l}(L-l) \operatorname{sh} \Lambda_l(x-y+l) - \operatorname{sh} \Lambda_l(x-y) \right] + \\ & \left. + \operatorname{sh} \Lambda_{L-l}(L-l) \left[\Lambda_l^2 \operatorname{ch} \Lambda_l(l-y) \operatorname{ch} \Lambda_l x + \Lambda_{L-l}^2 \operatorname{sh} \Lambda_l(l-y) \operatorname{sh} \Lambda_l x \right] \right\}; \quad (12) \end{aligned}$$

$$G(x, y)_{0 < y < x < l < L} = \lambda^2 \frac{e^{f_l(y-x)}}{\Delta \Lambda_l} \left\{ - (f_l - f_{L-l})^2 \operatorname{sh} \Lambda_{L-l}(L-l) \operatorname{sh} \Lambda_l y \operatorname{sh} \Lambda_l(l-x) - \right. \\ \left. - (f_l - f_{L-l}) \Lambda_l \operatorname{sh} \Lambda_{L-l}(L-l) \operatorname{sh} \Lambda_l(x+y-l) + \right. \\ \left. + \Lambda_l \Lambda_{L-l} \left[- \operatorname{ch} \Lambda_{L-l}(L-l) \operatorname{sh} \Lambda_l(x-y-l) + \operatorname{sh} \Lambda_l(x-y) \right] + \right. \\ \left. + \operatorname{sh} \Lambda_{L-l}(L-l) \left[\Lambda_l^2 \operatorname{ch} \Lambda_l y \operatorname{ch} \Lambda_l(x-l) + \Lambda_{L-l}^2 \operatorname{sh} y \operatorname{sh} \Lambda_l(l-x) \right] \right\}; \quad (13)$$

$$G(x, y)_{0 < y < l < x < L} = \lambda^2 \frac{e^{f_l y + f_{L-l}(L-x)}}{\Delta} \left\{ (f_l - f_{L-l})^2 \left[\operatorname{sh} \Lambda_l(l-y) \operatorname{sh} \Lambda_{L-l}(x-l) - \right. \right. \\ \left. - \operatorname{sh} \Lambda_l y \operatorname{sh} \Lambda_{L-l}(L-x) \right] + \Lambda_{L-l} \left[\operatorname{sh} \Lambda_l(l-y) \operatorname{ch} \Lambda_{L-l}(x-l) + \operatorname{sh} \Lambda_l y \operatorname{ch} \Lambda_{L-l}(L-x) \right] + \\ \left. + \Lambda_l \left[\operatorname{ch} \Lambda_l(l-y) \operatorname{sh} \Lambda_{L-l}(x-l) + \operatorname{ch} \Lambda_l y \operatorname{sh} \Lambda_{L-l}(L-x) \right] \right\}, \quad (14)$$

где

$$\Delta = 2(\lambda^2 + f_l f_{L-l}) \operatorname{sh} \Lambda_l l \operatorname{sh} \Lambda_{L-l}(L-l) + 2\Lambda_l \Lambda_{L-l} [\operatorname{ch} \Lambda_l l \operatorname{ch} \Lambda_{L-l} - 1]. \quad (15)$$

Для получения аналогичных формул на интервале $l < y < L$ достаточно в выражениях (12)–(15) выполнить следующие преобразования:

$$l \leftrightarrow L-l, \quad x \leftrightarrow L-x, \quad y \leftrightarrow L-y, \quad f_l \leftrightarrow -f_{L-l}. \quad (16)$$

Соотношения (12)–(16) являются основным результатом настоящей работы, они определяют функцию $G(x, y)$ – плотность вероятности найти частицу в состоянии, распадающемся со скоростью Γ («конечноживущем» состоянии) в точке x в момент времени t при условии, что она находилась в точке y в начальный момент времени.

Легко проверить, что при $\Gamma \rightarrow 0$ (долгоживущие состояния) величина $G(x, y)$ стремится к распределению Больцмана $\rho^{(0)}(x) = \frac{\exp[-\beta V(x)]}{\int_0^L dx \exp[-\beta V(x)]}$ и не зависит от y , в то время как при $\Gamma \rightarrow \infty$ (коротко-

живущие состояния) она стремится к начальному дельтаобразному распределению $\delta(x-y)$. Легко также проверить, что в случае свободной диффузии, когда $V(x) \rightarrow 0$, приведенные соотношения воспроизводят известный результат работы [8]:

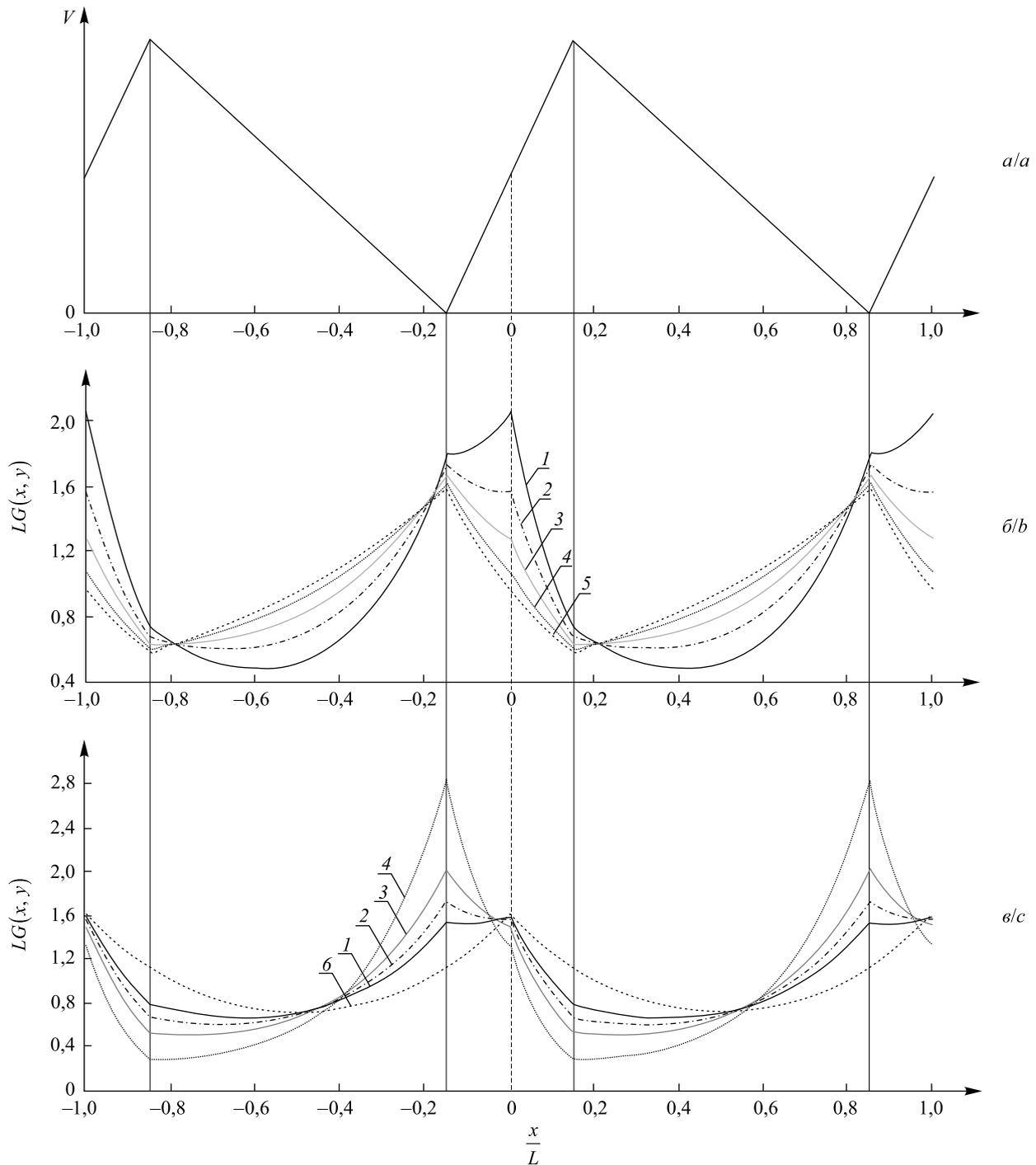
$$G(x, y) = G(x-y) = \frac{\lambda L}{\operatorname{sh} \lambda L} \operatorname{ch} \left[\lambda L \left(1 - \frac{2|x-y|}{L} \right) \right]. \quad (17)$$

Тот факт, что $G(x, y)$ зависит только от разности аргументов $x-y$, отражает свойство однородности пространства, которое имеет место для свободной диффузии в отсутствие потенциала.

Анализ структуры выражений (12)–(15) показывает, что характер координатных зависимостей функции $G(x, y)$ определяется относительными вкладами величин f_l^2 и λ^2 в параметр $\Lambda_l = \sqrt{f_l^2 + \lambda^2}$. В связи с этим целесообразно ввести безразмерный параметр

$$v = \frac{\lambda^2}{f_l^2} = \frac{4\Gamma l^2}{D(\beta V)^2} = \frac{4\Gamma \zeta l^2}{\beta V^2}, \quad (18)$$

величина которого характеризует вклад степени информации о начальном состоянии в рассматриваемое распределение $G(x, y)$. Очевидно, что при $v < 1$ движение частицы в потенциальном рельефе доминирует над диффузионным движением, быстрее устанавливается равновесное распределение и информация о начальном состоянии стирается. Предельное значение $v = 0$ соответствует распределению Больцмана, в котором информация о начальном состоянии вообще отсутствует. В случае $v > 1$, наоборот, начальное



Плотности вероятности $G(x, y)$ в единицах L^{-1} (б, в) найти частицу в точке x в пилообразном потенциальном профиле (а) с пространственным периодом L и временем жизни Γ^{-1} для различных значений управляющего параметра ν (18): 6,0; 3,0; 1,5; 0,5; 0; ∞ (кривые 1–6). Основания крутого и пологого склонов потенциала выбраны $\frac{l}{L} = 0,3$ и $\frac{1-l}{L} = 0,7$ соответственно; начальное положение частицы $y = 0$ совпадает с серединой основания крутого склона. При выбранных ν семейство кривых (б) соответствует фиксированному $\beta V = 1$ (так что значения $\lambda L = 4,1; 2,9; 2,0; 1,2; 0$ для кривых 1–5), семейство кривых (в) – фиксированному значению $\lambda L = 2,9$ (так что значения $\beta V = 0,71; 1,0; 1,4; 2,5; 0$ для кривых 1–4, 6)

Probability densities $G(x, y)$ in L^{-1} units (b, c) to find a particle at the point x in the saw-tooth potential profile (a), with the spatial period L and life-time Γ^{-1} , for different values of the control parameter ν (18): 6.0; 3.0; 1.5; 0.5; 0; ∞ (curves 1–6).

The bases of the steep and gentle slopes of the potential are $\frac{l}{L} = 0.3$ and $\frac{1-l}{L} = 0.7$ respectively; the initial particle position $y = 0$ coincides with the center of the base of the steep slope. At chosen ν values, the family of curves (b) corresponds to the fixed βV value, $\beta V = 1$ (so that $\lambda L = 4.1; 2.9; 2.0; 1.2; 0$ for the curves 1–5), the family of curves (c) corresponds to the fixed λL value, $\lambda L = 2.9$ (so that $\beta V = 0.71; 1.0; 1.4; 2.5; 0$ for the curves 1–4, 6)

состояние дает большой вклад в распределение $G(x, y)$, который проявляется в существовании максимума в точке $x = y$. Предельное значение $\nu = \infty$ соответствует распределению (17), имеющему место в отсутствие потенциала.

Для иллюстрации обсуждаемых закономерностей был выбран пилообразный потенциал с основаниями крутого и пологого склонов, равными $l = 0,3L$ и $L - l = 0,7L$ соответственно. Начальное положение частицы, совпадающее с началом выбранной системы координат ($y = 0$), находилось на половине основания крутого склона (см. рисунок *a*). Рассматривались следующие значения управляющего параметра $\nu : \infty; 6,0; 3,0; 1,5; 0,5; 0$. Поскольку очевидно, что эти значения могут реализоваться разными наборами значений λ и βV , на рисунках *b* и *в* приведены семейства кривых по λ (при фиксированном βV) и βV (при фиксированном λ), соответствующие одному и тому же набору значений ν . Предложенный способ графического представления функции $G(x, y)$ позволил понять, какие особенности поведения функции распределения $G(x, y)$ управляются параметром ν , а какие – параметрами λ и βV .

Из рисунков *b* и *в* видно, что на интервале $-\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2}$ максимумы функции $G(x, y)$ могут достигаться только в точках $x = 0$ и $x = -0,15$, соответствующих начальному положению частицы и минимуму потенциального профиля. По мере уменьшения параметра ν ослабляется влияние положения минимума потенциала и усиливается вклад начального состояния. Наряду с указанными закономерностями имеет место различие в форме распределений в зависимости от того, какой параметр является управляющим – время жизни потенциального профиля либо отношение его амплитуды к тепловой энергии.

В заключение отметим, что полученная в данной статье функция Грина $G(x, y)$ позволяет рассчитать скорость движения броуновского мотора с малыми флуктуациями потенциального профиля [9]. Задачи такого рода являются особенно актуальными при разработке теории наноразмерных устройств, использующих принцип выпрямления неравновесных флуктуаций в направленное движение; именно в них флуктуационная составляющая потенциальной энергии, как правило, значительно меньше основного вклада, формируемого молекулярными взаимодействиями. Предложенный подход допускает расчет характеристик моторов с различными пространственными профилями, охватывая не только моторы классов *flashing* и *rocking ratchets* [1], но и комбинированные модели, демонстрирующие нетривиальные свойства, как, например, наличие точек остановки [10; 11]. Полученные в настоящей работе закономерности поведения плотности распределения броуновских частиц в периодическом потенциале с конечным временем жизни также важны для анализа динамики и свойств броуновских фотомоторов, в которых время жизни потенциального профиля определяется длительностью импульсов лазерного излучения, приводящего фотомотор в движение [12].

Библиографические ссылки

1. Reimann P. Brownian motors: noisy transport far from equilibrium // Phys. Rep. 2002. Vol. 361. P. 57–265.
2. Schadschneider A., Chowdhury D., Nishinari K. Stochastic Transport in Complex Systems: From Molecules to Vehicles. Amsterdam, 2010.
3. Magnasco M. O. Forced thermal ratchets // Phys. Rev. Lett. 1993. Vol. 71. P. 1477–1481.
4. Chauwin J.-F., Ajdari A., Prost J. Force-free motion in asymmetric structures: a mechanism without diffusive steps // Europhys. Lett. 1994. Vol. 27, № 6. P. 421–426.
5. Astumian R. D., Bier M. Fluctuation driven ratchets: molecular motors // Phys. Rev. Lett. 1994. Vol. 72. P. 1766–1769.
6. Sokolov I. M. Irreversible and reversible modes of operation of deterministic ratchets // Phys. Rev. E. 2001. Vol. 63. P. 021107-1–021107-6.
7. Hänggi P., Marchesoni F. Artificial Brownian motors: Controlling transport on the nanoscale // Rev. Mod. Phys. 2009. Vol. 81. P. 387–442.
8. Rozenbaum V. M., Shapochkina I. V., Sheu S.-Y., et al. High-temperature ratchets with sawtooth potentials // Phys. Rev. E. 2016. Vol. 94. P. 052140-1–052140-8.
9. Rozenbaum V. M., Shapochkina I. V., Lin S. H., et al. A theory of slightly fluctuating ratchets // JETP Lett. 2017. Vol. 105, № 8. P. 542–547.
10. Розенбаум В. М. Броуновские моторы в низкоэнергетическом приближении: классификация и свойства // Журн. эксперим. и теорет. физики. 2010. Т. 137, вып. 4. С. 740–750.
11. Швед Н. Ю., Шапочкина И. В., Розенбаум В. М. Температурное обращение движения адиабатического броуновского мотора // Вестн. БГУ. Сер. 1, Физика. Математика. Информатика. 2014. № 2. С. 27–32.
12. Rozenbaum V. M., Dekhtyar M. L., Lin S. H., et al. Photoinduced diffusion molecular transport // J. Chem. Phys. 2016. Vol. 145. P. 064110-1–064110-12.

References

1. Reimann P. Brownian motors: noisy transport far from equilibrium. *Phys. Rep.* 2002. Vol. 361. P. 57–265.
2. Schadschneider A., Chowdhury D., Nishinari K. *Stochastic Transport in Complex Systems: From Molecules to Vehicles*. Amsterdam, 2010.
3. Magnasco M. O. Forced thermal ratchets. *Phys. Rev. Lett.* 1993. Vol. 71. P. 1477–1481.
4. Chauwin J.-F., Ajdari A., Prost J. Force-free motion in asymmetric structures: a mechanism without diffusive steps. *Europhys. Lett.* 1994. Vol. 27, No. 6. P. 421–426.
5. Astumian R. D., Bier M. Fluctuation driven ratchets: molecular motors. *Phys. Rev. Lett.* 1994. Vol. 72. P. 1766–1769.
6. Sokolov I. M. Irreversible and reversible modes of operation of deterministic ratchets. *Phys. Rev. E.* 2001. Vol. 63. P. 021107-1–021107-6.
7. Hänggi P., Marchesoni F. Artificial Brownian motors: Controlling transport on the nanoscale. *Rev. Mod. Phys.* 2009. Vol. 81. P. 387–442.
8. Rozenbaum V. M., Shapochkina I. V., Sheu S.-Y., et al. High-temperature ratchets with sawtooth potentials. *Phys. Rev. E.* 2016. Vol. 94. P. 052140-1–052140-8.
9. Rozenbaum V. M., Shapochkina I. V., Lin S. H., et al. A theory of slightly fluctuating ratchets. *JETP Lett.* 2017. Vol. 105, No. 8. P. 542–547.
10. Rozenbaum V. M. Brownian motors in the low-energy approximation: Classification and properties. *Zh. Éksp. Teor. Fiz. [J. Exp. Theoretical Phys.]*. 2010. Vol. 137, issue 4. P. 740–750 (in Russ.).
11. Shved N. Yu., Shapochkina I. V., Rozenbaum V. M. Temperature-governed motion reversal of adiabatic Brownian motor. *Vestnik BGU. Ser. 1, Fiz. Mat. Inform.* 2014. No. 2. P. 27–32 (in Russ.).
12. Rozenbaum V. M., Dekhtyar M. L., Lin S. H., et al. Photoinduced diffusion molecular transport. *J. Chem. Phys.* 2016. Vol. 145. P. 064110-1–064110-12.

Статья поступила в редколлегию 13.03.2017.
Received by editorial board 13.03.2017.

РАССЕЯНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН НЕОДНОРОДНЫМИ ЦИЛИНДРИЧЕСКИ- СИММЕТРИЧНЫМИ БИАНИЗОТРОПНЫМИ ОБЪЕКТАМИ

А. В. НОВИЦКИЙ^{1), 2)}, Р. Х. АЛЬВАРЕС РОДРИГЕС¹⁾, В. М. ГАЛЫНСКИЙ¹⁾

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

²⁾Институт фотоники Технического университета Дании, ул. Эрстеда, 343, 2800, г. Конгенс Люнбю, Дания

Применен операторный подход к определению электрического и магнитного полей волн, распространяющихся в радиально-неоднородных цилиндрически-симметричных бианизотропных средах. Для волн в плоскости сечения цилиндра возможно построить произвольное аналитическое решение уравнений Максвелла, если неоднородный материал бианизотропный или анизотропный, но не биизотропный или изотропный. Найдены решения в виде цилиндрических волн Лежандра и определены соответствующие им материальные параметры сред. Теория рассеяния обобщена на случай неоднородных цилиндрических частиц и применена к неоднородным объектам, в которых распространяются электромагнитные волны Лежандра.

Ключевые слова: распространение электромагнитных волн; метаматериалы; рассеяние света.

Благодарность. Авторы благодарят Белорусский республиканский фонд фундаментальных исследований (грант № Ф16Р-049) за финансовую поддержку.

ELECTROMAGNETIC WAVE SCATTERING BY INHOMOGENEOUS CYLINDRICALLY SYMMETRIC BIANISOTROPIC OBJECTS

A. V. NOVITSKY^{a, b}, R. J. ALVAREZ RODRIGUEZ^a, V. M. GALYNSKY^a

^aBelarusian State University, Niezaliežnasci Avenue, 4, 220030, Minsk, Belarus

^bDTU Fotonik, Technical University of Denmark, Ørstedes Plads, 343, 2800, Kgs. Lyngby, Denmark

Corresponding author: V. M. Galynsky (galynsky@bsu.by)

Operator approach is elaborated for determining electric and magnetic fields of the waves propagating in radially inhomogeneous cylindrically symmetric bianisotropic media. For the waves in the cylinder cross-section it is feasible to derive any closed-form solution of the Maxwell equations provided inhomogeneous materials are bianisotropic or anisotropic,

Образец цитирования:

Новицкий А. В., Родригес Р. Х. Альварес, Галынский В. М. Рассеяние электромагнитных волн неоднородными цилиндрически-симметричными бианизотропными объектами // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2017. № 3. С. 41–49.

For citation:

Novitsky A. V., Rodriguez R. J. Alvarez, 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.).

Авторы:

Андрей Викторович Новицкий – доктор физико-математических наук, доцент; профессор кафедры теоретической физики и астрофизики физического факультета¹⁾; старший научный сотрудник лаборатории метаматериалов²⁾.

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 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 meta-materials group^b.

novitsky@bsu.by

Richard Jose Alvarez Rodriguez, postgraduate student at the department of theoretical physics and astrophysics, faculty of physics.

richardfby@gmail.com

Vladimir Galynsky, PhD (physics and mathematics); associate professor at the department of theoretical physics and astrophysics, faculty of physics.

galynsky@bsu.by

but not biisotropic or isotropic. In this paper we find the particular solutions in the form of the Legendre cylindrical waves and determine the corresponding material parameters of the media. Scattering theory is generalized to the inhomogeneous cylindrical particles and applied to the inhomogeneous objects supporting Legendre electromagnetic waves.

Key words: propagation of electromagnetic waves; metamaterials; light scattering.

Acknowledgements. The authors acknowledge financial support from the Belarusian Republican Foundation for Fundamental Research (grant No. F16R-049).

Введение

Распространение электромагнитных волн в однородных цилиндрах хорошо изучено и имеет множество приложений, связанных прежде всего с возбуждением волоконных мод [1–3] и рассеянием света [4–6]. В последние годы интерес также поддерживается оптикой метаматериалов [7–9] (искусственные периодические структуры), элементарными ячейками которых могут быть диэлектрические или металлические цилиндры. Волны в таком материале могут обладать гиперболической дисперсией [10]. Отметим, что для гиперболических метаматериалов характерен ряд необычных свойств, которые усиливают скорость спонтанного излучения и улучшают разрешающую способность линз [11–13].

Неоднородные круглые цилиндрические волокна используются уже давно [1–3]. Их неоднородность слабая, благодаря чему теоретический расчет может быть сделан с использованием приближенных методов, таких как метод Вентцеля – Крамерса – Бриллюэна (геометрическая оптика) и борновское приближение. Численные методы расчета не всегда обладают достаточной точностью и требуют больших вычислительных мощностей [14], но могут использоваться для анализа асимптотического рассеяния [15] или нахождения рассеянных полей в приближении дискретных диполей [16]. Точное аналитическое решение уравнений Максвелла в неоднородных анизотропных средах потребовалось недавно в связи с развитием так называемой трансформационной оптики [17; 18]. Следует, однако, признать, что подход трансформационной оптики ограничен средами определенного вида, тогда как общий подход к изучению волн в неоднородных средах по-прежнему отсутствует. В настоящей статье предложен метод получения решений, отличных от тех, которые рассматриваются в рамках трансформационной оптики. Важно, что неоднородные анизотропные цилиндрические структуры могут применяться в качестве волноводов и элементарных ячеек метаматериалов, обладающих выдающимися свойствами.

Цель настоящей работы – на основе операторного (матричного) метода построить пласт аналитических решений уравнений Максвелла для электромагнитных волн, распространяющихся в радиально-неоднородных цилиндрических материалах. Цель будет достигнута в результате решения задач, которые можно сформулировать следующим образом:

- найти новые аналитические решения для света в плоскости сечения неоднородного бианизотропного цилиндра;
- вывести условия, накладываемые на решения для анизотропных, биизотропных и изотропных сред;
- рассмотреть цилиндрические волны Лежандра в частном случае неоднородной анизотропной среды;
- решить задачу о рассеянии электромагнитных волн на неоднородной цилиндрической частице.

В работе широко используется операторный подход к электродинамике слоистых сред [19]. Операторный подход хорошо зарекомендовал себя в применении к планарным [20], цилиндрически-симметричным [21] и сферически-симметричным [22] структурам. Он позволяет рассчитать электромагнитные поля в многослойных бианизотропных средах и определить эволюционные операторы слоев и тензоры поверхностного импеданса. Знание этих величин делает операторный подход универсальным средством для расчета коэффициентов отражения и пропускания, рассеянных полей, волноводных и поверхностных мод в структурах различной геометрии.

Операторный подход для цилиндрически-симметричных сред

Рассмотрим цилиндрически-симметричную бианизотропную среду, тензоры диэлектрической ϵ и магнитной μ проницаемости и псевдотензоры гирации α и κ которой даются выражением $\xi(r) = \xi_r(r)\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r + \xi_\varphi(r)\mathbf{e}_\varphi \otimes \mathbf{e}_\varphi + \xi_z(r)\mathbf{e}_z \otimes \mathbf{e}_z$, где ξ принимает одно из значений ϵ , μ , α или κ ; (r, φ, z) – цилиндрические координаты; \mathbf{e}_r , \mathbf{e}_φ и \mathbf{e}_z – базисные векторы цилиндрической системы координат. Материальные уравнения бианизотропных сред связывают векторы индукции \mathbf{D} и \mathbf{B} с напряженностями \mathbf{E} и \mathbf{H} полей согласно $\mathbf{D} = \epsilon\mathbf{E} + \alpha\mathbf{H}$ и $\mathbf{B} = \mu\mathbf{E} + \kappa\mathbf{H}$. Таким образом, среда может быть диэлектриком, ферромагнетиком, металлом или метаматериалом. Пусть монохроматические электромагнитные пучки (ω – круговая частота) распространяются в плоскости (x, y) , как показано на рис. 1. Это

значит, что волновые векторы парциальных плоских волн находятся в плоскости (x, y) , а напряженности (а также индукции) электрического и магнитного полей равны $\mathbf{E}(r, \varphi, z, t) = \exp(im\varphi - i\omega t)\mathbf{E}(r)$ и $\mathbf{H}(r, \varphi, z, t) = \exp(im\varphi - i\omega t)\mathbf{H}(r)$ соответственно. Цель настоящей работы – поиск аналитических решений уравнений Максвелла в неоднородных цилиндрически-симметричных средах.

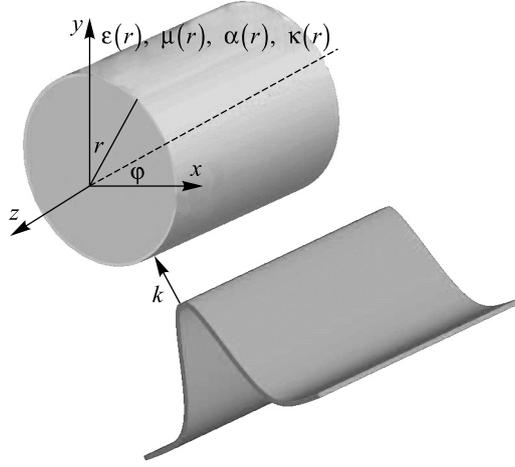


Рис. 1. Двумерная в плоскости (x, y) электромагнитная волна распространяется в неоднородной бианизотропной цилиндрически-симметричной среде

Fig. 1. Two-dimensional in (x, y) plane electromagnetic wave propagates in inhomogeneous bianisotropic cylindrically symmetric medium

Поскольку неизвестной осталась лишь функциональная зависимость от радиальной координаты, уравнения Максвелла можно переписать в виде обыкновенного дифференциального уравнения для вектора тангенциальных компонент \mathbf{W} [21]:

$$\frac{d\mathbf{W}}{dr} = ik_0 M(r) \mathbf{W}(r),$$

где

$$M(r) = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}, \quad \mathbf{W}(r) = \begin{pmatrix} \mathbf{H}_t \\ \mathbf{E}_t \end{pmatrix},$$

$$A = \frac{i}{k_0 r} \mathbf{e}_\varphi \otimes \mathbf{e}_\varphi + \mathbf{e}_r^\times \alpha I + \kappa_r \delta \frac{m^2}{k_0^2 r^2} \mathbf{e}_\varphi \otimes \mathbf{e}_z, \quad B = \mathbf{e}_r^\times \epsilon I + \epsilon_r \delta \frac{m^2}{k_0^2 r^2} \mathbf{e}_\varphi \otimes \mathbf{e}_z, \quad (1)$$

$$C = -\mathbf{e}_r^\times \mu I - \mu_r \delta \frac{m^2}{k_0^2 r^2} \mathbf{e}_\varphi \otimes \mathbf{e}_z, \quad D = \frac{i}{k_0 r} I - \mathbf{e}_r^\times \kappa I - \alpha_r \delta \frac{m^2}{k_0^2 r^2} \mathbf{e}_\varphi \otimes \mathbf{e}_z,$$

где $\delta = (\epsilon_r \mu_r - \alpha_r \kappa_r)^{-1}$, $k_0 = \frac{\omega}{c}$, – волновое число в вакууме; $\mathbf{E}_t = I\mathbf{E}$ и $\mathbf{H}_t = I\mathbf{H}$ – тангенциальные составляющие полей; $I = 1 - \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r$ – проектор на плоскость, перпендикулярную \mathbf{e}_r ; \mathbf{e}_r^\times – тензор, дуальный вектору \mathbf{e}_r ($\mathbf{e}_r^\times \mathbf{a} = \mathbf{e}_r \mathbf{a}^\times = \mathbf{e}_r \times \mathbf{a}$) [19; 23]. Матрица $M(r)$ может быть записана согласно

$$M(r) = M^{(0)}(r) + \frac{M^{(1)}(r)}{r} + \frac{M^{(2)}(r)}{r^2}, \quad (2)$$

причем неоднородность среды задается зависимостью матриц $M^{(0)}$, $M^{(1)}$, $M^{(2)}$ от координаты r , а степенная зависимость от r в (2) – следствие цилиндрической симметрии. $M^{(0)}$, $M^{(1)}$ и $M^{(2)}$ равны

$$M^{(0)}(r) = M_{\varphi z}^{(0)}(r) \mathbf{e}_\varphi \otimes \mathbf{e}_z + M_{z\varphi}^{(0)}(r) \mathbf{e}_z \otimes \mathbf{e}_\varphi, \quad M^{(1)} = \frac{i}{k_0} \mathbf{e}_\varphi \otimes \mathbf{e}_\varphi, \quad M^{(2)}(r) = \frac{m^2}{k_0^2} M_{\varphi z}^{(2)}(r) \mathbf{e}_\varphi \otimes \mathbf{e}_z,$$

где

$$M_{\varphi z}^{(0)} = \begin{pmatrix} -\alpha_z(r) & -\varepsilon_z(r) \\ \mu_z(r) & \kappa_z(r) \end{pmatrix}, \quad M_{z\varphi}^{(0)} = \begin{pmatrix} \alpha_\varphi(r) & \varepsilon_\varphi(r) \\ -\mu_\varphi(r) & -\kappa_\varphi(r) \end{pmatrix}, \quad M_{\varphi z}^{(2)} = \delta(r) \begin{pmatrix} \alpha_r(r) & \varepsilon_r(r) \\ -\mu_r(r) & -\kappa_r(r) \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Перепишем систему уравнений (1) в виде дифференциального уравнения второго порядка для неизвестного двумерного вектора, образованного z -компонентами полей:

$$\frac{d^2}{dr^2} \begin{pmatrix} H_z \\ E_z \end{pmatrix} + \left(Q_1(r) + \frac{1}{r} \right) \frac{d}{dr} \begin{pmatrix} H_z \\ E_z \end{pmatrix} + \left(Q_2(r) + \frac{1}{r^2} Q_3(r) \right) \begin{pmatrix} H_z \\ E_z \end{pmatrix} = 0, \quad (4)$$

где двумерные матрицы Q_1 , Q_2 и Q_3 выражаются через матрицы $M_{z\varphi}^{(0)}$, $M_{\varphi z}^{(0)}$ и $M_{\varphi z}^{(2)}$ следующим образом:

$$Q_1 = -\frac{dM_{z\varphi}^{(0)}}{dr} M_{z\varphi}^{(0)-1}, \quad Q_2 = k_0^2 M_{z\varphi}^{(0)} M_{\varphi z}^{(0)}, \quad Q_3 = m^2 M_{z\varphi}^{(0)} M_{\varphi z}^{(2)}. \quad (5)$$

Важно, что матрицы Q_1 , Q_2 и Q_3 можно задать независимо друг от друга таким образом, чтобы получить желаемое аналитическое решение уравнения (4). В этом случае двумерные матрицы $M_{z\varphi}^{(0)}$, $M_{\varphi z}^{(0)}$ и $M_{\varphi z}^{(2)}$ выражаются с помощью соотношений, следующих из (5):

$$M_{z\varphi}^{(0)} = \exp' \left(-\int Q_1(r) dr \right) M_0, \quad M_{\varphi z}^{(0)} = k_0^{-2} M_{z\varphi}^{(0)-1} Q_2, \quad M_{\varphi z}^{(2)} = m^{-2} M_{z\varphi}^{(0)-1} Q_3, \quad (6)$$

где Q_3 нужно выбирать пропорциональным m^2 , чтобы материальные параметры не зависели от целого числа m ; M_0 – произвольная постоянная матрица; выражение $\exp' \left(-\int Q_1(r) dr \right)$ записано с учетом хронологического упорядочивания. Только в случае постоянных собственных векторов матрицы $Q_1 = \sum_{i=1}^2 q_{1i}(r) \mathbf{a}_i \otimes \tilde{\mathbf{a}}_i$ получается обычная матричная экспонента

$$\exp' \left(-\int Q_1(r) dr \right) = \exp \left(-\int Q_1(r) dr \right) = \sum_{i=1}^2 \exp \left(-\int q_{1i}(r) dr \right) \mathbf{a}_i \otimes \tilde{\mathbf{a}}_i,$$

где q_{1i} – собственные значения матрицы Q_1 , \mathbf{a}_i и $\tilde{\mathbf{a}}_i$ – правые и левые собственные векторы Q_1 . Теперь найдем материальные тензоры среды, в которой распространяются искомые цилиндрические волны. Для известных матриц $M_{z\varphi}^{(0)}$, $M_{\varphi z}^{(0)}$ и $M_{\varphi z}^{(2)}$, задаваемых (6), определяем компоненты тензоров диэлектрической, магнитной проницаемостей и псевдотензоров гирации из соотношений (8):

$$\begin{aligned} \varepsilon(r) &= \frac{\left(\mathbf{e}_1 M_{\varphi z}^{(2)} \mathbf{e}_2 \right)}{\det \left(M_{\varphi z}^{(2)} \right)} \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r + \left(\mathbf{e}_1 M_{z\varphi}^{(0)} \mathbf{e}_2 \right) \mathbf{e}_\varphi \otimes \mathbf{e}_\varphi - \left(\mathbf{e}_1 M_{\varphi z}^{(0)} \mathbf{e}_2 \right) \mathbf{e}_z \otimes \mathbf{e}_z, \\ \mu(r) &= -\frac{\left(\mathbf{e}_2 M_{\varphi z}^{(2)} \mathbf{e}_1 \right)}{\det \left(M_{\varphi z}^{(2)} \right)} \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r - \left(\mathbf{e}_2 M_{z\varphi}^{(0)} \mathbf{e}_1 \right) \mathbf{e}_\varphi \otimes \mathbf{e}_\varphi + \left(\mathbf{e}_2 M_{\varphi z}^{(0)} \mathbf{e}_1 \right) \mathbf{e}_z \otimes \mathbf{e}_z, \\ \alpha(r) &= \frac{\left(\mathbf{e}_1 M_{\varphi z}^{(2)} \mathbf{e}_1 \right)}{\det \left(M_{\varphi z}^{(2)} \right)} \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r + \left(\mathbf{e}_1 M_{z\varphi}^{(0)} \mathbf{e}_1 \right) \mathbf{e}_\varphi \otimes \mathbf{e}_\varphi - \left(\mathbf{e}_1 M_{\varphi z}^{(0)} \mathbf{e}_1 \right) \mathbf{e}_z \otimes \mathbf{e}_z, \\ \kappa(r) &= -\frac{\left(\mathbf{e}_2 M_{\varphi z}^{(2)} \mathbf{e}_2 \right)}{\det \left(M_{\varphi z}^{(2)} \right)} \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r - \left(\mathbf{e}_2 M_{z\varphi}^{(0)} \mathbf{e}_2 \right) \mathbf{e}_\varphi \otimes \mathbf{e}_\varphi + \left(\mathbf{e}_2 M_{\varphi z}^{(0)} \mathbf{e}_2 \right) \mathbf{e}_z \otimes \mathbf{e}_z, \end{aligned} \quad (7)$$

где \mathbf{e}_1 и \mathbf{e}_2 – единичные вектор-столбцы (1; 0) и (0; 1) соответственно.

Далее, запишем тангенциальные компоненты векторов полей через известные решения уравнения (4):

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} H_z \\ E_z \end{pmatrix} \mathbf{e}_z + \begin{pmatrix} H_\varphi \\ E_\varphi \end{pmatrix} \mathbf{e}_\varphi = \begin{pmatrix} H_z \\ E_z \end{pmatrix} \mathbf{e}_z + M_{z\varphi}^{(0)-1} \frac{1}{ik_0} \frac{d}{dr} \begin{pmatrix} H_z \\ E_z \end{pmatrix} \mathbf{e}_\varphi. \quad (8)$$

Решение векторного уравнения (4) имеет четыре постоянных интегрирования, которые можно объединить в четырехмерный вектор-столбец \mathbf{C} и представить (8) в виде [24]

$$\mathbf{W}(r) = S(r)\mathbf{C}, \quad S(r) = \begin{pmatrix} \eta_1(r) & \eta_2(r) \\ \zeta_1(r) & \zeta_2(r) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{C} = \begin{pmatrix} \mathbf{c}_1 \\ \mathbf{c}_2 \end{pmatrix}, \quad (9)$$

где матрицы $\eta_{1,2}$ и $\zeta_{1,2}$ задают два независимых решения для магнитного и электрического полей соответственно. Решение (9) может быть переписано в альтернативном виде:

$$\mathbf{W}(r) = \Omega(r, r_0)\mathbf{W}(r_0),$$

где $\Omega(r, r_0) = S(r)S^{-1}(r_0)$ – пространственный эволюционный оператор $\Omega(r, r_0)$ (матрица 4×4). Каждая из независимых волн характеризуется тензором импеданса $\Gamma_{1,2}(r) = \zeta_{1,2}(r)\eta_{1,2}^{-1}(r)$.

Решения для различных типов сред

Исследуем, каким образом модифицируется описанная выше теория, если искать решения для конкретного вида среды. Для того чтобы получить решения для анизотропных сред ($\alpha = \kappa = 0$), необходимо положить, что матрицы (3) имеют не общий вид матриц 2×2 , а матриц с нулевыми элементами на диагоналях:

$$M_{\varphi z}^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 & -\varepsilon_z \\ \mu_z & 0 \end{pmatrix}, \quad M_{z\varphi}^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 & \varepsilon_\varphi \\ -\mu_\varphi & 0 \end{pmatrix}, \quad M_{\varphi z}^{(2)} = \frac{1}{\varepsilon_r \mu_r} \begin{pmatrix} 0 & \varepsilon_r \\ -\mu_r & 0 \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Это значит, что двумерные матрицы Q должны задаваться таким образом, чтобы согласно (6) обеспечить вид матриц (10). Довольно просто решение подобного вида получается для матриц Q , пропорциональных двумерной единичной матрице: $Q_1 = f(r)$, $Q_2 = k_2^0 g(r)$ и $Q_3 = m^2 h(r)$, где введенные скалярные функции произвольны. Тогда матрицы (6) принимают вид

$$M_{z\varphi}^{(0)} = e^{-\int f(r) dr} M_0, \quad M_{\varphi z}^{(0)} = g(r) e^{\int f(r) dr} M_0^{-1}, \quad M_{\varphi z}^{(2)} = h(r) e^{\int f(r) dr} M_0^{-1},$$

причем постоянная матрица M_0 должна быть выбрана таким образом, чтобы матрицы имели вид (10), т. е.

$$M_0 = \begin{pmatrix} 0 & m_{12} \\ m_{21} & 0 \end{pmatrix}, \quad M_0^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{m_{21}} \\ \frac{1}{m_{12}} & 0 \end{pmatrix}. \quad (11)$$

Скалярные функции позволяют задать произвольное уравнение второго порядка (4) для компонент полей, т. е. можно получить произвольное аналитическое решение для продольных полей в неоднородной анизотропной среде. Это не так для биизотропных (все материальные параметры – скаляры) и изотропных (проницаемости – скаляры, а псевдотензоры гирации равны нулю) сред. Действительно, в этом случае все матрицы $M_{\varphi z}^{(0)} = -M_{z\varphi}^{(0)} = -M_{\varphi z}^{(2)} \det(M) = M$ выражаются через одну матрицу M , а уравнение (4) нельзя задать произвольным образом, так как входящие в него матрицы оказываются связанными: $Q_1 = -\left(\frac{dM}{dr}\right)M^{-1}$, $Q_2 = -k_0^2 M^2$ и $Q_3 = \frac{m^2 M^2}{\det(M)}$. Необходимо модифицировать метод решения этой задачи, так как нельзя задать матрицы Q_1 , Q_2 и Q_3 произвольным образом. Сначала зададим матрицу M , затем выразим через нее матрицы Q_1 , Q_2 и Q_3 и подставим в (4). Представляя $M = \sum_{i=1}^2 f_i(r) \mathbf{b}_i \otimes \tilde{\mathbf{b}}_i$

и $\begin{pmatrix} H_z \\ E_z \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^2 w_i(r) \mathbf{b}_i$, уравнение (4) сводится к паре связанных уравнений для $i = 1, 2$:

$$\frac{d^2 w_i}{dr^2} + \left(\frac{1}{r} - \frac{f_i'}{f_i} \right) \frac{dw_i}{dr} - \left(k_0^2 - \frac{m^2}{r^2 f_1 f_2} \right) f_i^2 w_i = 0. \quad (12)$$

В отличие от бианизотропных и анизотропных сред определение аналитических решений уравнения (12) для некоторой функции $f_i(r)$ является технически более сложной задачей. Упростить ее можно за счет выбора матрицы $M = f(r)$, пропорциональной единичной. Тогда вместо двух уравнений (12) получим одно уравнение, соответствующее $f_1(r) = f_2(r) = f(r)$.

Цилиндрические волны Лежандра

В данном разделе будут найдены поля цилиндрических волн в неоднородной бианизотропной среде, которые описываются не обычными цилиндрическими функциями Бесселя, а полиномами Лежандра. Для этого выберем матрицы Q_i ($i = 1, 2, 3$) в следующем виде:

$$Q_1 = \frac{\gamma}{2 + \gamma r}, \quad Q_2 = \frac{\gamma k_0^2}{r(2 + \gamma r)} \hat{q}_2, \quad Q_3 = \frac{m^2 \gamma r}{2 + \gamma r} \hat{q}_3, \quad (13)$$

где γ – постоянный параметр с размерностью m^{-1} ; \hat{q}_2 и \hat{q}_3 – размерная (m^2) и безразмерная постоянные матрицы 2×2 . Отметим, что величина γ может быть как положительной, так и отрицательной, но будем считать, что $2 + \gamma r > 0$. Тогда уравнение (4) примет вид уравнения Лежандра

$$\frac{d^2}{dX^2} \begin{pmatrix} H_z \\ E_z \end{pmatrix} - \frac{2X}{1 - X^2} \frac{d}{dX} \begin{pmatrix} H_z \\ E_z \end{pmatrix} + \frac{\hat{n}(\hat{n} + 1)}{1 - X^2} \begin{pmatrix} H_z \\ E_z \end{pmatrix} = 0, \quad (14)$$

где $X = 1 + \gamma r$, а $\hat{n}(\hat{n} + 1) = (k_0^2 \hat{q}_2 + m^2 \hat{q}_3)$ – двумерная матрица. Хотя на матрицы \hat{q}_2 и \hat{q}_3 не накладывается никаких ограничений, мы выберем их в диагональном виде с собственными значениями q_{2i} и q_{3i} ($i = 1, 2$) соответственно. Собственные значения матрицы \hat{n} становятся равными $n_i = -\frac{1}{2} \pm \sqrt{k_0^2 q_{2i} + m^2 q_{3i} + \frac{1}{4}}$, причем можно выбрать любой знак. Решением уравнения (14) являются функции Лежандра первого и второго рода вида $F_n^{(1,2)}(1 + \gamma r)$.

Матрицы (6) при определенных выше значениях матриц (13) равны

$$M_{z\varphi}^{(0)} = \frac{M_0}{2 + \gamma r}, \quad M_{\varphi z}^{(0)} = \frac{\gamma}{r} M_0^{-1} \hat{q}_2, \quad M_{\varphi z}^{(2)} = \gamma r M_0^{-1} \hat{q}_3,$$

где постоянная безразмерная двумерная матрица M_0 определена согласно (11) для анизотропной среды с материальными параметрами

$$\begin{aligned} \varepsilon &= \frac{m_{12}}{q_{31} \gamma r} \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r + \frac{m_{12}}{2 + \gamma r} \mathbf{e}_\varphi \otimes \mathbf{e}_\varphi - \frac{q_{22} \gamma}{m_{21} r} \mathbf{e}_z \otimes \mathbf{e}_z, \\ \mu &= -\frac{m_{21}}{q_{32} \gamma r} \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r + \frac{m_{21}}{2 + \gamma r} \mathbf{e}_\varphi \otimes \mathbf{e}_\varphi - \frac{q_{21} \gamma}{m_{12} r} \mathbf{e}_z \otimes \mathbf{e}_z. \end{aligned} \quad (15)$$

Тангенциальные составляющие полей (8) равны

$$\mathbf{w} = \sum_{i=1}^2 \left(\begin{aligned} & \left[F_{n_i}^{(1)}(1 + \gamma r) c_1 + F_{n_i}^{(2)}(1 + \gamma r) c_1' \right] \mathbf{e}_z + \frac{2 + \gamma r}{ik_0 m_{12}} \frac{d \left[F_{n_i}^{(1)}(1 + \gamma r) c_2 + F_{n_i}^{(2)}(1 + \gamma r) c_2' \right]}{dr} \mathbf{e}_\varphi \\ & \left[F_{n_i}^{(1)}(1 + \gamma r) c_2 + F_{n_i}^{(2)}(1 + \gamma r) c_2' \right] \mathbf{e}_z + \frac{2 + \gamma r}{ik_0 m_{21}} \frac{d \left[F_{n_i}^{(1)}(1 + \gamma r) c_1 + F_{n_i}^{(2)}(1 + \gamma r) c_1' \right]}{dr} \mathbf{e}_\varphi \end{aligned} \right).$$

Объединяя постоянные интегрирования в векторы $\mathbf{c}_1 = (c_1, c_1')^T$ и $\mathbf{c}_2 = (c_2, c_2')^T$, можно переписать решение в соответствии с (9). При этом вводятся матрицы

$$\eta_{1,2} = F_{n_1}^{(1,2)} \mathbf{e}_z \otimes \mathbf{e}_z + \frac{\gamma(2+\gamma r)}{ik_0 m_{21}} \left(F_{n_2}^{(1,2)} \right)' \mathbf{e}_\varphi \otimes \mathbf{e}_\varphi,$$

$$\zeta_{1,2} = F_{n_2}^{(1,2)} \mathbf{e}_z \otimes \mathbf{e}_\varphi + \frac{\gamma(2+\gamma r)}{ik_0 m_{12}} \left(F_{n_1}^{(1,2)} \right)' \mathbf{e}_\varphi \otimes \mathbf{e}_z,$$

где штрих обозначает дифференцирование по аргументу функции. Тензор импеданса волн в такой анизотропной среде следующий:

$$\Gamma_{1,2}(r) = \zeta_{1,2}(r) \eta_{1,2}^{-1}(r) = \frac{ik_0 m_{21}}{\gamma(2+\gamma r)} \frac{F_{n_2}^{(1,2)}}{\left(F_{n_2}^{(1,2)} \right)'} \mathbf{e}_z \otimes \mathbf{e}_\varphi + \frac{\gamma(2+\gamma r)}{ik_0 m_{12}} \frac{\left(F_{n_1}^{(1,2)} \right)'}{F_{n_1}^{(1,2)}} \mathbf{e}_\varphi \otimes \mathbf{e}_z.$$

Теперь найдем электромагнитные поля, рассеянные цилиндром с материальными тензорами (15). Воспользуемся теорией рассеяния, предложенной в работе [24]. Выполняя разложение падающего электромагнитного поля \mathbf{H}_{inc} , \mathbf{E}_{inc} по ортогональным функциям $\exp(im\varphi)$, задающим азимутальную зависимость, для каждого значения целого числа m находим тангенциальную составляющую рассеянного поля на границе раздела частица / окружающая среда:

$$\mathbf{H}_m^{(sc)} = \left(\tilde{\Gamma} - \Gamma_1 \right)^{-1} \left(\Gamma_1, -I \right) \mathbf{W}_m^{(inc)}, \quad \mathbf{W}_m^{(inc)} = \int_0^{2\pi} e^{-im\varphi} \begin{pmatrix} I \mathbf{H}_{inc}(R, \varphi) \\ I \mathbf{E}_{inc}(R, \varphi) \end{pmatrix} d\varphi,$$

где R – радиус цилиндра; $\tilde{\Gamma}(R)$ и $\Gamma_1(R)$ – тензоры поверхностного импеданса рассеянных волн и волн в цилиндре соответственно. При этом следует помнить, что в центре цилиндрической частицы функция Лежандра второго рода обратится в бесконечность и нужно оставлять только регулярное решение $F_{n_1}^{(1)}(1+\gamma r)$, для которого записывается тензор импеданса $\Gamma_1(R)$.

Результаты расчета дифференциального сечения рассеяния, нормированного на геометрическое сечение частицы πR^2 , при падении плоской электромагнитной волны ТЕ- и ТМ-поляризации показаны на рис. 2.

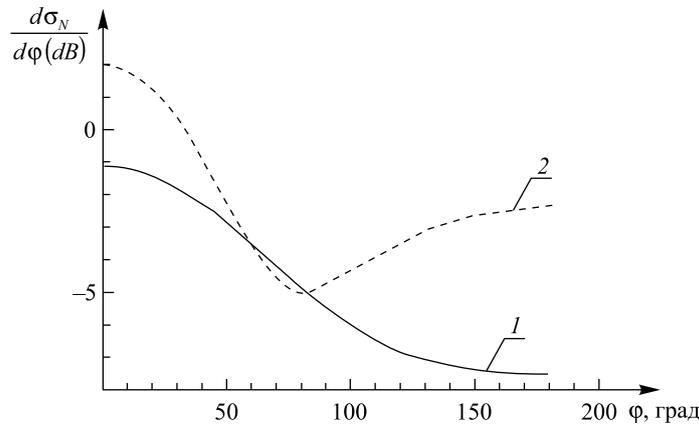


Рис. 2. Дифференциальное сечение рассеяния плоской электромагнитной волны на неоднородном цилиндре с материальными параметрами (15) в пустом пространстве:

1 – ТЕ-поляризация волны; 2 – ТМ-поляризация волны.

Параметры расчета: $k_0 R = 1$; $\gamma = 1, 2$; $m_{12} = 1$; $m_{21} = 2$; $q_{21} = 1$; $q_{22} = 2$; $q_{31} = 3$; $q_{32} = 1$

Fig. 2. Differential cross-section of the plane electromagnetic wave in free space scattered by inhomogeneous cylinder with material parameters (15):

1 – wave's TE polarization; 2 – wave's TM polarization.

Parameters: $k_0 R = 1$; $\gamma = 1, 2$; $m_{12} = 1$; $m_{21} = 2$; $q_{21} = 1$; $q_{22} = 2$; $q_{31} = 3$; $q_{32} = 1$

Цилиндр рассматриваемого радиуса обладает электрическим и магнитным дипольными моментами, а высшими моментами можно пренебречь. ТЕ-поляризованная волна, у которой электрическое поле направлено вдоль оси цилиндра z , рассеивается преимущественно вперед. В то же время ТМ-поляризованная волна имеет значительное рассеяние назад, а интенсивность рассеянного света в целом выше, чем для ТЕ-поляризации. Такая асимметрия связана с эффективностью возбуждения дипольных моментов и может использоваться для управления интенсивностью взаимодействия света и вещества.

Заклучение

Операторный подход применен для поиска аналитических решений уравнений Максвелла в радиально-неоднородных бианизотропных средах с цилиндрической симметрией. В явном виде выписан и реализован алгоритм решения, заключающийся в задании двумерных матриц Q_1 , Q_2 и Q_3 , решении уравнения для продольных компонент полей (4), определении тангенциальных компонент полей (9), а значит, и всех компонент. Затем восстановлены материальные параметры среды (7), допускающие выбранный тип аналитического решения. Таким образом, были проведены расчеты для среды, в которой распространяются цилиндрические волны Лежандра. В этом случае решена задача о рассеянии света анизотропным цилиндром и найдены сечения рассеяния.

Отметим, что описанное выше решение задачи невозможно в случае анизотропных сферически-симметричных сред, потому что переход от матриц Q_1 , Q_2 и Q_3 к матрицам M оказывается более сложным и требует рассмотрения системы матричных нелинейных дифференциальных уравнений [25; 26]. В случае цилиндрически-симметричных материалов, исследованных в данной работе, можно получить произвольные продольные компоненты электромагнитного поля, так как матрицы Q_1 , Q_2 и Q_3 в уравнении (4) могут быть любыми. При этом материальные параметры (7) задаются неоднозначным образом.

Библиографические ссылки

1. Адамс М. Введение в теорию оптических волноводов. М., 1984.
2. Унгер Х.-Г. Планарные и волоконные оптические волноводы. М., 1980.
3. Снайдер А., Лав Дж. Теория оптических волноводов. М., 1987.
4. Bohren C. F., Huffman D. R. Absorption and scattering of light by small particles. New York, 1983.
5. Tsang L., Kong J. A., Ding K.-H. Scattering of electromagnetic waves: Theories and applications. New York, 2000.
6. Van de Hulst H. C. Light scattering by small particles. New York, 1981.
7. Shvets G., Tsukerman I. Plasmonics and plasmonic metamaterials: Analysis and applications. Singapore, 2012.
8. Tutorials in metamaterials / ed. by M. A. Noginov, V. A. Podolskiy. Boca Raton, 2012.
9. Cai W., Shalaev V. Optical metamaterials: Fundamentals and applications. Heidelberg, 2010.
10. Mirmoosa M. S., Kosulnikov S. Yu., Simovski C. R. Magnetic hyperbolic metamaterial of high-index nanowires // Phys. Rev. B. 2016. Vol. 94. P. 075138.
11. Poddubny A. N., Belov P. A., Kivshar Yu. S. Purcell effect in wire metamaterials // Phys. Rev. B. 2013. Vol. 87. P. 035136.
12. Benisty H., Goudail F. Dark-field hyperlens exploiting a planar fan of tips // J. Opt. Soc. Am. B. 2012. Vol. 29. P. 2595–2602.
13. Kosulnikov S., Filonov D., Glybovski S., et al. Wire-medium hyperlens for enhancing radiation from subwavelength dipole sources // IEEE Trans. Antennas Propag. 2015. Vol. 63. P. 4848–4856.
14. Soifer V. A. Diffractive nanophotonics. Boca Raton, 2014.
15. Miyazaki Y. Scattering and diffraction of electromagnetic waves by inhomogeneous dielectric cylinder // Radio Science. 1981. Vol. 16. P. 1009–1014.
16. Virkki A., Muinonen K., Penttilä A. Radar albedos and circular-polarization ratios for realistic inhomogeneous media using the discrete-dipole approximation // J. Quant. Spectros. Radiat. Transf. 2014. Vol. 146. P. 480–491.
17. Pendry J. B., Schurig D., Smith D. R. Controlling electromagnetic fields // Science. 2006. Vol. 312. P. 1780–1782.
18. Leonhardt U. Optical conformal mapping // Science. 2006. Vol. 312. P. 1777–1780.
19. Барковский Л. М., Фурс А. Н. Операторные методы описания оптических полей в сложных средах. Минск, 2003.
20. Borzdov G. N. Frequency domain wave-splitting techniques // J. Math. Phys. 1997. Vol. 38. P. 6328–6366.
21. Novitsky A. V., Barkovskii L. M. Operator matrices for describing guiding propagation in circular bianisotropic fibres // J. Phys. A: Math. Gen. 2005. Vol. 38. P. 391–404.
22. Novitsky A. V., Barkovsky L. M. Matrix approach for light scattering from a multilayered rotationally symmetric bianisotropic sphere // Phys. Rev. A. 2008. Vol. 77. P. 033849.
23. Федоров Ф. И. Теория гиротропии. Минск, 1976.
24. Novitsky A. V. Matrix approach for light scattering by bianisotropic cylindrical particles // J. Phys.: Condens. Matter. 2007. Vol. 19. P. 1–11.
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. Novitsky A., Shalin A. S., Lavrinenko A. V. Spherically symmetric inhomogeneous bianisotropic media: Wave propagation and light scattering // Phys. Rev. A. 2017. Vol. 95. P. 053818.

References

1. Adams M. An introduction to optical waveguides. Moscow, 1984 (in Russ.).
2. Unger H.-G. Planar optical waveguides and fibres. Moscow, 1980 (in Russ.).
3. Snyder A., Love J. Optical waveguide theory. Moscow, 1987 (in Russ.).
4. Bohren C. F., Huffman D. R. Absorption and scattering of light by small particles. New York, 1983.
5. Tsang L., Kong J. A., Ding K.-H. Scattering of electromagnetic waves: Theories and applications. New York, 2000.
6. Van de Hulst H. C. Light scattering by small particles. New York, 1981.
7. Shvets G., Tsukerman I. Plasmonics and plasmonic metamaterials: Analysis and applications. Singapore, 2012.

8. Noginov M. A., Podolskiy V. A. (eds.). *Tutorials in metamaterials*. Boca Raton, 2012.
9. Cai W., Shalaev V. *Optical metamaterials: Fundamentals and applications*. Heidelberg, 2010.
10. Mirmoosa M. S., Kosulnikov S. Yu., Simovski C. R. Magnetic hyperbolic metamaterial of high-index nanowires. *Phys. Rev. B*. 2016. Vol. 94. P. 075138.
11. Poddubny A. N., Belov P. A., Kivshar Yu. S. Purcell effect in wire metamaterials. *Phys. Rev. B*. 2013. Vol. 87. P. 035136.
12. Benisty H., Goudail F. Dark-field hyperlens exploiting a planar fan of tips. *J. Opt. Soc. Am. B*. 2012. Vol. 29. P. 2595–2602.
13. Kosulnikov S., Filonov D., Glybovski S., et al. Wire-medium hyperlens for enhancing radiation from subwavelength dipole sources. *IEEE Trans. Antennas Propag.* 2015. Vol. 63. P. 4848–4856.
14. Soifer V. A. *Diffraction nanophotonics*. Boca Raton, 2014.
15. Miyazaki Y. Scattering and diffraction of electromagnetic waves by inhomogeneous dielectric cylinder. *Radio Science*. 1981. Vol. 16. P. 1009–1014.
16. Virkki A., Muinonen K., Penttilä A. Radar albedos and circular-polarization ratios for realistic inhomogeneous media using the discrete-dipole approximation. *J. Quant. Spectros. Radiat. Transf.* 2014. Vol. 146. P. 480–491.
17. Pendry J. B., Schurig D., Smith D. R. Controlling electromagnetic fields. *Science*. 2006. Vol. 312. P. 1780–1782.
18. Leonhardt U. Optical conformal mapping. *Science*. 2006. Vol. 312. P. 1777–1780.
19. Barkovsky L. M., Furs A. N. *Operator methods of description of optical fields in complex media*. Minsk, 2003 (in Russ.).
20. Borzdov G. N. Frequency domain wave-splitting techniques. *J. Math. Phys.* 1997. Vol. 38. P. 6328–6366.
21. Novitsky A. V., Barkovskii L. M. Operator matrices for describing guiding propagation in circular bianisotropic fibres. *J. Phys. A: Math. Gen.* 2005. Vol. 38. P. 391–404.
22. Novitsky A. V., Barkovsky L. M. Matrix approach for light scattering from a multilayered rotationally symmetric bianisotropic sphere. *Phys. Rev. A*. 2008. Vol. 77. P. 033849.
23. Fedorov F. I. *Theory of gyrotropy*. Minsk, 1976 (in Russ.).
24. Novitsky A. V. Matrix approach for light scattering by bianisotropic cylindrical particles. *J. Phys.: Condens. Matter*. 2007. Vol. 19. P. 1–11.
25. Novitsky A. V., Alvarez Rodriguez R. J., Galynsky V. M. Spherical Bessel solution 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., Shalin A. S., Lavrinenko A. V. Spherically symmetric inhomogeneous bianisotropic media: Wave propagation and light scattering. *Phys. Rev. A*. 2017. Vol. 95. P. 053818.

Статья поступила в редколлегию 07.04.2017.
Received by editorial board 07.04.2017.

ФИЗИКА ЯДРА И ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ

ATOMIC NUCLEUS AND ELEMENTARY PARTICLE PHYSICS

УДК 621.039.587

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ АМПЛИТУД ИМПУЛЬСОВ ИОНИЗАЦИИ ИОНИЗАЦИОННОЙ КАМЕРЫ ДЕЛЕНИЯ ВСЛЕДСТВИЕ РАЗБРОСА ФРАГМЕНТОВ ДЕЛЕНИЯ ПО ВЕЛИЧИНАМ ИХ ЗАРЯДА, МАССЫ И ЭНЕРГИИ

ЛЭ ТХИ ЗИЕУ ХЬЕН¹⁾, А. А. ХРУЩИНСКИЙ²⁾, С. А. КУТЕНЬ²⁾

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

²⁾НИУ «Институт ядерных проблем» БГУ, ул. Бобруйская, 11, 220030, г. Минск, Беларусь

Рассмотрен вопрос о распределении амплитуд импульсов ионизации в ионизационной камере деления вследствие разброса фрагментов деления по величинам их заряда, массы и энергии для потоков нейтронов с различной формой спектра. Расчеты выполнены с помощью программ *GEF* (для моделирования процессов ядерного деления) и *SRIM* (для расчета энергетических потерь ионов в веществе). Показано, что эмпирическая функция распределения импульсов по амплитуде имеет два максимума и слабо зависит от формы энергетического спектра

Образец цитирования:

Лэ Тхи Зиеу Хьен, Хрущинский А. А., Кутень С. А. Распределение амплитуд импульсов ионизации ионизационной камеры деления вследствие разброса фрагментов деления по величинам их заряда, массы и энергии // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2017. № 3. С. 50–56.

For citation:

Le Thi Dieu Hien, Khrutchinsky A. A., Kuten S. A. The distribution of the ionization pulse amplitudes in ionization fission chamber due to the fission fragments spread in terms of their charge, mass, and energy. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2017. No. 3. P. 50–56 (in Russ.).

Авторы:

Лэ Тхи Зиеу Хьен – аспирантка кафедры ядерной физики физического факультета. Научный руководитель – С. А. Кутень.
Аркадий Аркадьевич Хрущинский – кандидат физико-математических наук; ведущий научный сотрудник лаборатории теоретической физики и моделирования ядерных процессов.
Семен Адамович Кутень – кандидат физико-математических наук; заведующий лабораторией теоретической физики и моделирования ядерных процессов.

Authors:

Le Thi Dieu Hien, postgraduate student at the department of nuclear physics, faculty of physics.
hienle.job@gmail.com
Arkady Khrutchinsky, PhD (physics and mathematics); leading researcher at the laboratory of theoretical physics and modeling of nuclear problems.
arluchr@mail.ru
Siamion Kuten, PhD (physics and mathematics); head of the laboratory of theoretical physics and modeling of nuclear problems.
kut@inp.bsu.by

нейтронов. Этот результат позволяет утверждать, что при калибровке ионизационной камеры деления, работающей в импульсном режиме, можно использовать нейтроны с различным спектром, что должно существенно упростить процесс калибровки таких камер.

Ключевые слова: ионизационная камера деления; импульсный режим; распределение амплитуд импульсов ионизации; пробег; фрагмент.

THE DISTRIBUTION OF THE IONIZATION PULSE AMPLITUDES IN IONIZATION FISSION CHAMBER DUE TO THE FISSION FRAGMENTS SPREAD IN TERMS OF THEIR CHARGE, MASS, AND ENERGY

LE THI DIEU HIEN^a, A. A. KHRUTCHINSKY^b, S. A. KUTEN^b

^aBelarusian State University, Niezaliežnasci Avenue, 4, 220030, Minsk, Belarus

^bResearch Institute for Nuclear Problems, Belarusian State University,
Babrujskaja Street, 11, 220030, Minsk, Belarus

Corresponding author: S. A. Kuten (kut@inp.bsu.by)

In the present paper, the distribution of the ionization pulse amplitudes in a fission chamber (FC) due to the spread of fission fragments in terms of their charge, mass and energy is considered for different neutron flux spectra. The estimates are implemented by means of the programs: (i) *GEF* describing the nuclear fission processes and (ii) *SRIM* used to calculate the energy losses of ions in the matter. The obtained results demonstrate that the empirical distribution function of ionization pulse amplitudes has two maxima, being practically independent of the types of a neutron flux spectrum. This result allows us to conclude that neutrons with different spectra may be used to calibrate a pulsed mode FC. This should greatly simplify the calibration process for such cameras.

Key words: fission chamber; pulse mode; amplitude distribution; trajectory; fission fragments.

Введение

Ионизационная камера деления (ИКД) представляет собой газовой-разрядный детектор [1; 2], широко используемый для измерения нейтронных потоков в ядерных реакторах [1–3]. В простейшем случае ИКД состоит из двух электродов, один из которых (радиатор) покрывается тонким слоем делящегося вещества, обычно ^{235}U (могут быть также слои ^{238}U , ^{232}Th , ^{239}Pu). При каждом делении ядра в радиаторе ИКД рождаются два осколка деления (фрагменты). Поскольку два осколка испускаются в противоположных направлениях, один из них обычно удерживается в радиаторе, другой летит в рабочий объем камеры, наполняемой специальным газом [4]. При делении ядер ^{235}U тепловыми нейтронами образуются более сорока разных пар осколков деления [5; 6]. Различным аспектам распределения этих пар осколков деления по их заряду (Z), массе (m) и энергии (E) посвящено много работ, в том числе [5–7]. Каждый осколок деления, который попадает в рабочий объем ИКД, производит ионизацию газа и создает определенное число пар ионов вдоль трека. Полный заряд, обусловленный производимыми электронами и ионизированными атомами, в импульсном режиме работы камеры собирается на ее электродах и определяет величину регистрируемого электрического импульса. Представляет интерес исследование разброса этих импульсов при реальном распределении фрагментов деления по параметрам Z , m и E , образуемых при делении ядра под действием нейтронов с различным энергетическим спектром.

В работе рассматриваются ИКД, поперечный размер которых превышает длину пробега осколков деления в газе, обычно используемые для вне реакторного контроля потоков нейтронов [8]. Учитывалась только первичная ионизация осколком деления, вторичная ионизация и рекомбинация ионов не рассматривались. В этом приближении амплитуда электрического импульса ИКД пропорциональна числу пар ионов, создаваемых осколком деления [9]. Естественно, в настоящей работе не рассматривается возможное искажение амплитуды импульса электрической схемой регистрации (в частности, неполный сбор заряда). На данном этапе, чтобы не рассматривать краевые эффекты, связанные с выходом осколка, не потерявшего всю энергию, на электрод, предполагалось, что межэлектродное расстояние превосходит максимальную длину трека. Далее, под распределением амплитуд импульсов ионизации будет пониматься распределение числа пар ионов, создаваемых осколками деления.

Разброс фрагментов деления по указанным параметрам (Z , m и E) моделировался с помощью программы *GEF* (*The General Description of Fission Observables*), предназначенной для моделирования процессов ядерного деления [10]. Величина первичной ионизации, создаваемая конкретным осколком в объеме ИКД, рассчитывалась программой *SRIM* (*The Stopping and Range of Ions in Matter*), предназначенной для расчета энергетических потерь ионов в веществе [11]. Синхронизированную работу обеих программ контролировал специальный скрипт, написанный на языке программы *Mathematica*. При моделировании в качестве рабочего газа рассматривался аргон при давлении 1 атм.

Если удельная ионизационная потеря энергии заряженной частицы равна $\frac{dE}{dx}$, а энергия для создания одной пары ионов равна ϵ , то число созданных пар ионов на единице пути на расстоянии s от точки генерации иона записывается уравнением

$$n = \frac{1}{\epsilon} \cdot \left. \frac{dE}{dx} \right|_{x=s}.$$

Энергия аргона, используемого в целях заполнения рабочего объема камеры, которая необходима для создания одной пары ионов, следующая: $\epsilon = 26,4$ эВ [12].

Расчет числа пар ионов, создаваемых осколками деления, осуществляется с помощью скрипта на языке программы *Mathematica*, запускающего программу *GEF*, которая для заданного энергетического распределения падающих на ИКД нейтронов рассчитывает два типа двумерных распределений осколков вынужденного деления ядра ^{235}U на плоскостях (m, Z) и (m, E) соответственно.

Программа *GEF* рассчитывает распределение осколков деления после излучения осколками как мгновенных, так и запаздывающих нейтронов и гамма-квантов. Типичное время дрейфа осколков в камере составляет доли наносекунд (10^{-10} с) [9], а время запаздывания – от нескольких миллисекунд до нескольких минут [6; 7]. Поскольку время запаздывания значительно превосходит время дрейфа осколков в камере, в дальнейшем исследуется только распределение осколков деления после излучения ими мгновенных нейтронов.

Для моноэнергетического потока падающих тепловых нейтронов ($E = 2,5 \cdot 10^{-8}$ МэВ) эти распределения, полученные в программе *GEF*, приведены для (m, Z) и (m, E) пар переменных на рис. 1, *a*, *б*, соответственно. Число событий на рис. 1, *a*, *б*, соразмерно числу осколков деления, попадающих в соответствующий элементарный двумерный интервал (dm, dZ) или (dm, dE) , при розыгрыше падающих на радиатор N нейтронов с заданным спектром (для рис. 1 $N = 100\,000$). При этом амплитуда на рис. 1, *a*, выражена в процентах.

Оба распределения, как следует из рис. 1, существенно отличны от нуля в двух областях по каждой из пар переменных (m, Z) и (m, E) .

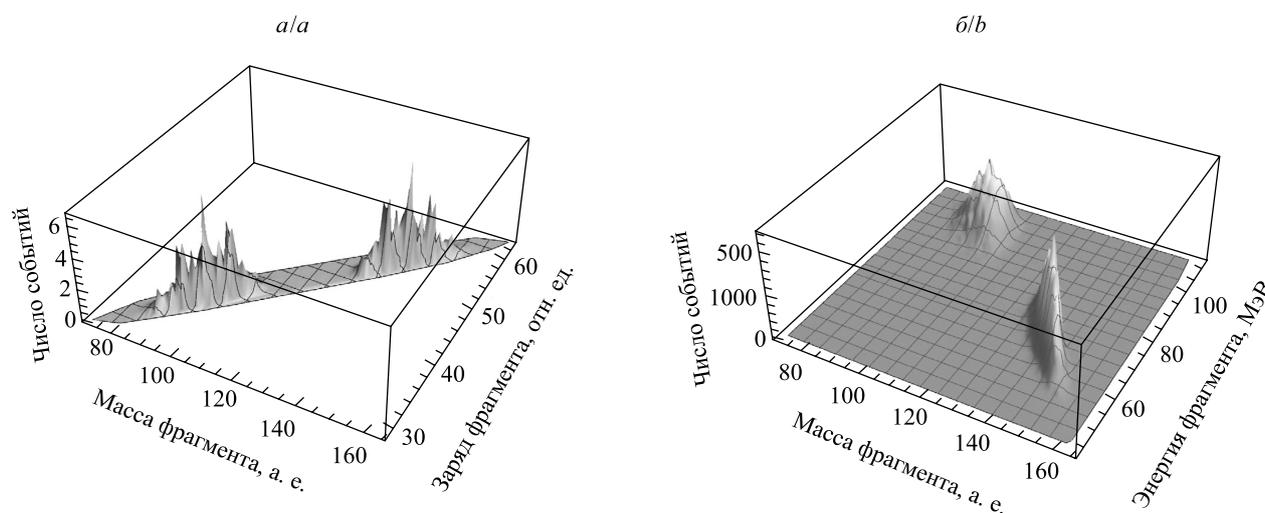


Рис. 1. Распределение фрагментов деления при делении ядра ^{235}U под действием потока нейтронов с энергией $E = 2,5 \cdot 10^{-8}$ МэВ:
a – по массе и заряду; *б* – по массе и энергии

Fig. 1. The distribution of fission fragments when the fission of the ^{235}U nucleus under the irradiation of a neutron flux with the energy $E = 2.5 \cdot 10^{-8}$ MeV:
a – on mass and charge; *b* – on mass and energy

Вкратце процедура построения распределения амплитуд импульсов ионизации состоит в следующем. Для сокращения времени расчета из полученных распределений (m, Z) и (m, E) в дальнейшем используются только значимые области, в которых содержится основная часть распределений и которые можно аппроксимировать двумя параллелограммами (в основании распределений (см. рис. 1)). Из указанных областей путем розыгрыша случайных событий производится случайная выборка по Z, m, E с весом, определяемым значением соответствующих функций в этих областях. Эта выборка далее используется в программе *SRIM*.

Для каждой из этих областей определения (Z, m) -распределения из интервала (Z_{\min}, Z_{\max}) разыгрывается случайным образом переменная Z (предполагается ее равномерное распределение на указанном отрезке).

$$Z = Z_{\min} (1 - \zeta) + Z_{\max} \zeta, \quad (1)$$

где $0 \leq \zeta \leq 1$ – равномерно распределенная случайная величина.

Для полученного значения Z аналогично (1) случайным образом разыгрывается масса осколка m в соответствии с равномерным распределением на отрезке $(m_{\min}(Z), m_{\max}(Z))$.

Далее, аналогичным образом для выбранного значения m из области определения (m, E) -распределения разыгрывается случайным образом энергия осколка как одно из возможных значений E из интервала $(E_{\min}(m), E_{\max}(m))$ в соответствии с равномерным распределением для этой переменной.

Значения функций, рассчитанных в программе *GEF* в точках (m, Z) и (m, E) , могут рассматриваться как вес каждой из этих точек $P_1(Z, m)$ и $P_2(m, E)$ соответственно, которые далее используются при построении функции распределения амплитуд импульсов ионизации.

Вышеуказанный скрипт передает выбранную тройку параметров (Z, m, E) в программу *SRIM*, которая рассчитывает значения выделенной на единицу длины энергии и пробег выделенного осколка деления как функцию энергии. По этим величинам сначала рассчитывается количество пар ионов на единицу длины как функции длины пробега, затем – полное число ионных пар (n) на весь трек.

Эмпирическая функция распределения вероятности амплитуд импульсов ионизации, понимаемая как функция распределения осколков по общему числу пар ионов, созданных осколком деления в рабочем объеме камеры, строится в виде гистограммы, в которой для частоты событий используется обобщенный вес $P(Z, m, E)$ выделенного осколка. Для этого в бин гистограммы, соответствующей разбиению интервала величин n , добавляется величина, равная произведению весов рассматриваемого осколка, рассчитанных выше с использованием *GEF*-результатов:

$$P(Z, m, E) = P_1(Z, m)P_2(m, E). \quad (2)$$

Далее, организуется цикл по всем точкам обоих распределений, при этом полученные суммы в бинах гистограммы делятся на полную сумму весов. Это в итоге позволяет построить гистограмму эмпирической функции распределения вероятности амплитуд импульсов ионизации (2).

Результаты моделирования методом Монте-Карло

Исследованы распределения амплитуд импульсов ионизации при облучении камеры потоком нейтронов с различным спектром: тепловых нейтронов с энергией $E = 0,025$ эВ, нейтронов со спектром Максвелла и реакторных нейтронов со спектром Уатта. Для случая спектра Максвелла рассмотрены распределения амплитуд импульсов, обусловленные двумя группами нейтронов: медленными нейтронами с температурой (T) $0,025$ эВ и быстрыми нейтронами с температурой $0,5$ МэВ. Нейтронный спектр Уатта, получаемый в реакторе при делении ядер ^{235}U тепловыми нейтронами, описывался формулой

$$f(E) = ce^{-E/a} \sinh(\sqrt{bE}),$$

где c – нормировочная постоянная; величины a и b для ядра ^{235}U составляют: $a = 0,988$ МэВ, $b = 2,249$ МэВ $^{-1}$ [13].

Во всех случаях распределения амплитуд импульсов ионизации качественно подобны друг другу: распределение имеет два явно выраженных максимума для трех типов спектра, указанных выше. Эти максимумы соответствуют областям двугорбой поверхности (m, Z) и (m, E) на рис. 1.

Поскольку распределения амплитуд импульсов ионизации для трех типов нейтронного спектра практически не отличаются друг от друга, ниже приведены результаты только для спектра Максвелла в разных энергетических диапазонах – тепловые нейтроны ($T = 0,025$ эВ) (рис. 2) и быстрые нейтроны ($T = 0,5$ МэВ) (рис. 3). Сами амплитуды распределений (ординаты) на этих рисунках нормированы на их сумму по всей области значений числа пар ионов.

Первый максимум на рис. 1 и 2 соответствует числу пар ионов, создаваемых тяжелыми осколками деления, второй максимум обусловлен легкими осколками деления. Это следует из простых физических

соображений. Поскольку длина пробега осколков деления в газе камеры составляет несколько сантиметров [14], а в работе рассматриваются только сравнительно большие ИКД, радиус которых превышает длину пробега осколков деления (например, камеры КНТ-31, КНТ-54-1 [8; 15]), то осколки деления будут полностью тормозиться в рабочем объеме камеры. В этом случае ионизационная потеря энергии заряженного осколка равна его полной кинетической энергии. Кинетическая энергия тяжелых осколков деления меньше, чем легких осколков деления (см. рис. 1). Следовательно, число пар ионов, создаваемых тяжелыми осколками деления, меньше числа пар ионов, создаваемых легкими осколками деления. Этому соответствует первый пик в распределениях амплитуд ионизации на рис. 2 и 3.

В случае увеличения энергии тепловых нейтронов в четыре раза (см. рис. 2) второй максимум в распределении амплитуд импульсов ионизации, соответствующий более интенсивному образованию пар ионов, несколько уменьшается по своей амплитуде. В то же время при облучении камеры быстрыми нейтронами для аналогичного пика при таком же увеличении энергии нейтронов (см. рис. 3) наблюдается слабый рост его амплитуды.

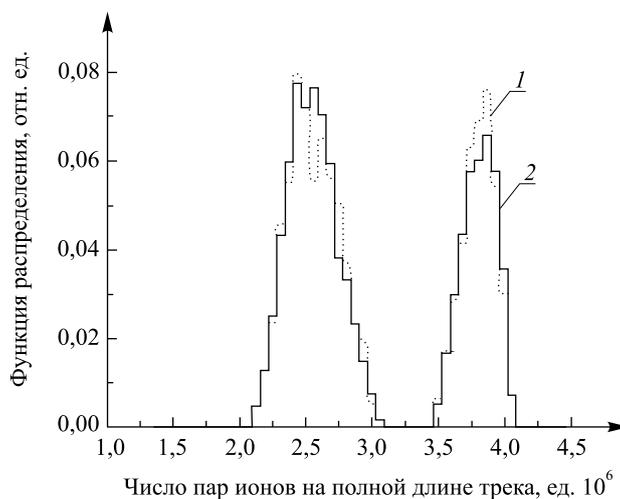


Рис. 2. Распределение амплитуд импульсов ионизации для потоков тепловых нейтронов, вызывающих деления и имеющих спектр Максвелла: 1 – $T = 0,025$ эВ; 2 – $T = 0,1$ эВ

Fig. 2. The distribution of the ionization pulse amplitudes for flux of thermal neutrons having the Maxwell spectrum and causing fission: 1 – $T = 0.025$ eV; 2 – $T = 0.1$ eV

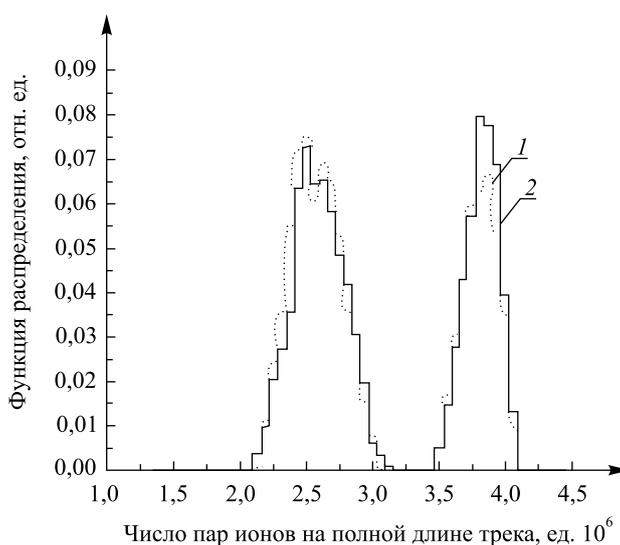


Рис. 3. Распределение амплитуд импульсов ионизации для потоков нейтронов, вызывающих деления и имеющих спектр Максвелла: 1 – $T = 0,5$ МэВ; 2 – $T = 2,0$ МэВ

Fig. 3. The distribution of the ionization pulse amplitudes for flux of fast neutrons having the Maxwell spectrum and causing fission: 1 – $T = 0.5$ MeV; 2 – $T = 2.0$ MeV

Поскольку в силу построения самого распределения площадь под двумя пиками не зависит от энергии падающих нейтронов, изменение площади под каждым из них служит качественным критерием изменения распределения в зависимости от энергии падающих нейтронов. Среднее изменение, понимаемое как полусумма изменений отдельных пиков, составляет 3,3 %, для тепловых и быстрых нейтронов – 9 %. Анализ показывает, что эти закономерности вызваны в конечном итоге особенностями двугорбого распределения осколков деления по массовым числам при делении ядра ^{235}U тепловыми и быстрыми нейтронами.

Следует отметить, что, несмотря на вышеуказанную относительно слабую зависимость двухпиковой картины распределения амплитуд импульсов ионизации от энергии падающих нейтронов, эта картина в принципе может быть использована для получения грубой информации о спектре падающих нейтронов. Для этого надо применить в схеме регистрации камеры амплитудную дискриминацию, что позволит отделить пики друг от друга.

Заключение

В работе проведено исследование разброса амплитуд импульсов ионизации в ионизационной камере деления на основе ^{235}U из-за разброса фрагментов деления по заряду, массе и энергии.

С использованием разработанного подхода и программ *GEF* и *SRIM* рассчитаны эмпирические функции распределения для разброса амплитуд импульсов ионизации в ИКД для потоков нейтронов различных спектров (моноэнергетические тепловые нейтроны, максвелловский спектр, спектр Уатта). Для всех спектров на распределении имеются два максимума, соответствующих двум областям, в которых с наибольшей вероятностью лежат параметры фрагментов деления. Форма распределения амплитуд импульсов ионизации слабо зависит от энергетического распределения нейтронов (изменение составляет около 3 и 9 % для тепловых и быстрых нейтронов соответственно). Это позволяет утверждать, что при калибровке ИКД, работающей в импульсном режиме, можно использовать нейтроны с различными спектрами, что должно существенно упростить процесс калибровки таких камер.

Библиографические ссылки

1. Малышев Е. К., Засадыч Ю. Б., Стабровский С. А. Газоразрядные детекторы для контроля ядерных реакторов. М., 1991.
2. Ле Thi Dieu Hien, Kuten S. A., Khutchinsky A. A. Распределение начальной ионизации в рабочем объеме ионизационной камеры // Весці Нац. акад. навук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. 2017. № 1. С. 111–119.
3. Filliatrea P., Jammes C., Geslot B., et al. A Monte Carlo simulation of the fission chambers neutron-induced pulse shape using the GARFIELD suite // Nucl. Instr. Meth. A. 2012. Vol. 678. P. 139–147.
4. Tsoufanidis N. Measurement and detection of radiation, second edition. Washington, 1995.
5. Elmer E. Lewis. Fundamentals of Nuclear Reactor Physics. New York, 2008.
6. Климов А. Н. Ядерная физика и ядерные реакторы. М., 1985.
7. Бартоломей Г. Г., Байбаков В. Д., Алхутков М. С. и др. Основы теории и методы расчета ядерных энергетических реакторов. М., 1982.
8. Волков С. В., Кирилкин Н. С. Детекторы нейтронов для программно-управляемых каналов контроля нейтронного потока // Приборы и системы. Управление, контроль, диагностика. 2006. № 10. С. 42–50.
9. Калашишкова В. И., Козодаев М. С. Детекторы элементарных частиц. М., 1966.
10. Schmidt K.-H., Jurado B., Amouroux Ch. General description of fission observables, GEF model // JEFF Report 24, NEA Data Bank of the OECD. 2014.
11. Ziegler J. F., Biersack J. P., Littmark U. SRIM – The Stopping and Range of Ions in Solids. New York, 1996.
12. Chabod S., Fioni G., Letourneau A., et al. Modeling of Fission Chambers in Current Mode – Analytical Approach // Nucl. Instr. Meth. A. 2006. Vol. 566. P. 633–653.
13. MCNP – A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 4B / ed. by J. F. Briesmeister. Los Alamos, 1997.
14. Poujade O., Lebrun A. Modeling of the saturation current of a fission chamber taking into account the distortion of electric field due to space charge effects // Nucl. Instr. Meth. A. 1999. Vol. 433. P. 673.
15. Дмитриев А. Б., Малышев Е. К. Нейтронные ионизационные камеры для реакторной техники. М., 1975.

References

1. Malyshev E. K., Zasadych Yu. B., Stabrovsky S. A. Gas-Discharge detectors for the nuclear reactors control. Moscow, 1991 (in Russ.).
2. Le Thi Dieu Hien, Kuten S. A., Khutchinsky A. A. Initial ionization distribution in active volume of ionization chamber. *Proc. Natl. Acad. Sci. Belarus. Ser. phys.-math. sci.* 2017. No. 1. P. 111–119 (in Russ.).
3. Filliatrea P., Jammes C., Geslot B., et al. A Monte Carlo simulation of the fission chambers neutron-induced pulse shape using the GARFIELD suite. *Nucl. Instr. Meth. A.* 2012. Vol. 678. P. 139–147.
4. Tsoufanidis N. Measurement and detection of radiation, second edition. Washington, 1995.
5. Elmer E. Lewis. Fundamentals of Nuclear Reactor Physics. New York, 2008.

6. Klimov A. N. Nuclear physics and nuclear reactors. Moscow, 1985 (in Russ.).
7. Bartolomey G. G., Baibakov V. D., Alhutov M. S., et al. Basic theory and methods for calculating nuclear power reactors. Moscow, 1982 (in Russ.).
8. Volkov S. V., Kirilkin N. S. Neutron detectors for software control channels of neutron flux. *Prib. sist. Upravlenie, kontrol', diagn.* 2006. No. 10. P. 42–50 (in Russ.).
9. Kalashnikova V. I., Kozodaev M. S. Detectors of elementary particles. Moscow, 1966 (in Russ.).
10. Schmidt K.-H., Jurado B., Amouroux Ch. General description of fission observables, GEF model. *JEFF Report 24, NEA Data Bank of the OECD.* 2014.
11. Ziegler J. F., Biersack J. P., Littmark U. SRIM – The Stopping and Range of Ions in Solids. New York, 1996.
12. Chabod S., Fioni G., Letourneau A., et al. Modeling of Fission Chambers in Current Mode – Analytical Approach. *Nucl. Instr. Meth. A.* 2006. Vol. 566. P. 633–653.
13. MCNP – A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 4B. Los Alamos, 1997.
14. Poujade O., Lebrun A. Modeling of the saturation current of a fission chamber taking into account the distortion of electric field due to space charge effects. *Nucl. Instr. Meth. A.* 1999. Vol. 433. P. 673.
15. Dmitriev A. B., Malyshev E. K. Neutron ionization chambers for reactor equipment. Moscow, 1975 (in Russ.).

Статья поступила в редколлегию 30.05.2017.
Received by editorial board 30.05.2017.

ФИЗИКА И ТЕХНИКА ПОЛУПРОВОДНИКОВ

SEMICONDUCTOR PHYSICS AND ENGINEERING

УДК 621.375.826:535.33

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ МИКРОВИБРАЦИЙ СЛАБОУТРАЖАЮЩИХ ОБЪЕКТОВ ПО КЕПСТРУ СИГНАЛА САМОСМЕШЕНИЯ В ПОЛУПРОВОДНИКОВОМ ЛАЗЕРЕ

Е. Д. КАРИХ¹⁾

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

Рассмотрен режим работы полупроводникового инжекционного лазера в условиях внутррезонаторного приема оптического экосигнала от внешнего объекта. Анализ основан на асимптотической модели лазера со слабой внешней оптической обратной связью. Показана адекватность одномодового приближения при амплитудах колебательного движения внешнего объекта от долей до нескольких длин волн генерируемого излучения. Продемонстрирована высокая чувствительность кепстра к наличию амплитудной модуляции колебаний объекта. Проведено сравнение реакций кепстра и спектра мощности сигнала самосмещения на параметры колебаний. Показано, что положение кепстральных линий практически не зависит от амплитуды вибраций и определяется частотами основного и модулирующего колебаний. Структура спектра мощности сигнала самосмещения достаточно сложна и зависит от амплитуды колебаний. Таким образом, частоты микровибраций могут быть установлены по положению линий кепстра, а оценка амплитуды получена по ширине спектра мощности сигнала самосмещения.

Ключевые слова: полупроводниковый лазер; внешняя оптическая обратная связь; самосмещение; микроколебания; спектр и кепстр сигнала самосмещения.

Образец цитирования:

Карих Е. Д. Определение параметров микровибраций слабоотражающих объектов по кепстру сигнала самосмещения в полупроводниковом лазере // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2017. № 3. С. 57–64.

For citation:

Karikh E. D. Determination of the parameters of low-reflecting object microvibrations by cepstrum of self-mixing signal in semiconductor laser. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2017. No. 3. P. 57–64 (in Russ.).

Автор:

Евгений Дмитриевич Карих – кандидат физико-математических наук, доцент; доцент кафедры квантовой радиофизики и оптоэлектроники факультета радиофизики и компьютерных технологий.

Author:

Evgenii Karikh, PhD (physics and mathematics), docent; associate professor at the department of quantum radio physics and optoelectronics, faculty of radio physics and computer technologies.
karikh@bsu.by

DETERMINATION OF THE PARAMETERS OF LOW-REFLECTING OBJECT MICROVIBRATIONS BY CEPSTRUM OF SELF-MIXING SIGNAL IN SEMICONDUCTOR LASER

E. D. KARIKH^a

^a*Belarusian State University, Niezaliežnasti Avenue, 4, 220030, Minsk, Belarus*

The operation mode of a semiconductor injection laser under conditions of intracavity reception of an optical echo signal from an external object is considered. The analysis is based on an asymptotic model of a laser with a weak external optical feedback. The adequacy of the single-mode approximation for amplitudes of the vibrational motion of an external object from some fractions of a wavelength to several wavelengths of the generated radiation is shown. High sensitivity of the cepstrum to the presence of amplitude modulation of the object's oscillations is demonstrated. The reactions of the cepstrum and the power spectrum of a self-mixing signal to the parameters of oscillations are compared. It is shown that the position of cepstral lines is practically independent of the amplitude of vibrations and is determined by the frequencies of the main and modulating oscillations. The structure of the power spectrum of a self-mixing signal is quite complex and depends on the oscillation amplitude. It is demonstrated that the frequencies of microvibrations may be found from the position of cepstral lines, and the amplitude can be estimated from the width of the power spectrum for a self-mixing signal.

Key words: semiconductor laser; external optical feedback; self-mixing; microvibrations; spectrum and cepstrum of self-mixing signal.

Введение

В традиционной лазерной интерферометрии используются специальные оптические схемы (Майкельсона, Маха – Цендера и др.) с оптическими элементами (призмы, линзы, зеркала), требующие тщательной юстировки. Развивающаяся в последнее время интерферометрия самосмещения [1] обладает рядом преимуществ перед традиционными схемами, поскольку обеспечивает простоту, компактность, легкость юстировки, возможность работы с диффузно отражающими объектами и др. Существенно также то, что когерентный прием излучения методом самосмещения в принципе реализуется без использования внешнего фотодетектора, опорного лазера и необходимости согласования их характеристик. Интерферометры на основе эффекта самосмещения применяются в оптико-физических, медико-биологических и других исследованиях, где важны бесконтактность, высокие чувствительность, спектральное и пространственное разрешение.

В ряде приложений, например при изучении динамических свойств естественных или искусственных объектов, требуется измерение параметров вибрационного движения [1–4]. Возбуждение вибраций с заданными характеристиками используется для определения расстояния до внешних объектов и их скорости [5–7]. При решении подобных задач применяется временной или спектральный анализ сигнала самосмещения [1; 5–7]. Переход от временного представления сигнала к частотному приводит к «сжатию» информации. Бесконечный гармонический сигнал в частотной области представляется одной линией. Однако спектр сигнала самосмещения даже при простых гармонических колебаниях отражателя достаточно широк. В работе [8] предложен способ определения частоты и амплитуды гармонических колебаний объекта по спектру мощности сигнала самосмещения в полупроводниковом лазере. Показано, что частота вибраций равна наименьшей частоте в спектре, а амплитуда может быть определена по положению спектральной составляющей с наибольшей мощностью. В случае негармонических колебаний отражателя спектр мощности и его интерпретация усложняются. В связи с этим особый интерес вызывает кепстральный анализ сигнала, который дает еще более компактное представление информации. В кепстре множеству гармоник спектра соответствует одна линия. С этой точки зрения кепстр мощности можно рассматривать как «спектр спектра». Это свойство особенно важно, если получаемый спектр содержит множество гармонических рядов. Принципиальная возможность использования кепстрального анализа для обработки сигнала самосмещения в полупроводниковом лазере продемонстрирована в [9].

Цель настоящей работы – установить практические возможности определения параметров микроколебаний внешнего отражающего объекта путем кепстрального анализа сигнала самосмещения в полупроводниковом лазере.

Аналитическая модель

Полупроводниковый инжекционный лазер с собственным резонатором обычно генерирует излучение, электрический вектор которого ориентирован в плоскости волноводного слоя (TE-поляризованное

излучение). В зависимости от свойств внешнего отражателя оптический эхосигнал, возвращающийся в лазер, может содержать как ТЕ-, так и ТМ-составляющую. В этом случае внешняя оптическая обратная связь (ВООС) оказывается комбинированной [10]. Когерентная ТЕ-составляющая взаимодействует непосредственно с внутренним полем лазера. Это означает, что лазер, как квантовый приемник когерентного типа, «выбирает» из всего набора пространственных мод отраженного излучения только ту, поляризация которой соответствует поляризации его внутреннего поля. Ортогональная (некогерентная) ТМ-составляющая не суммируется с внутренним лазерным полем (их фазовые соотношения не играют при этом никакой роли) и влияет на излучение только опосредованно – через электронную подсистему лазера (концентрацию неравновесных носителей заряда).

В работе [11] предложена асимптотическая модель лазера с ВООС, основанная на учете вклада спонтанного излучения в энергетический баланс моды. В рамках асимптотического подхода спектр продольных мод лазера с комбинированной ВООС [10] при малых коэффициентах отражения внешнего объекта может быть записан следующим образом:

$$P_q = P_{s0} \left\{ 1 + \frac{1}{\chi} \left[bq^2 + \gamma \rho R_{\text{ef}}^{\text{TM}} - \frac{\sqrt{\rho R_{\text{ef}}^{\text{TE}}}}{\Gamma g_0 L} \cos[2\pi\xi(1 + \sigma q)] \right] \right\}^{-1}, \quad (1)$$

где P_q – мощность q -й моды; $\chi = \frac{\alpha}{\Gamma g_0} - 1$ есть дефицит усиления; α – коэффициент потерь; g_0 – материальный коэффициент усиления; P_{s0} – мощность центральной ($q = 0$) моды в уединенном лазере; Γ – коэффициент оптического ограничения; $b = \frac{(hc)^2}{8(kT\bar{n}_g L)^2}$, h – постоянная Планка, c – скорость света в вакууме, k – постоянная Больцмана, T – температура, \bar{n}_g – групповой показатель преломления активной области, L – длина собственного резонатора лазера; γ – отношение коэффициентов усиления активной среды для мод ТМ и ТЕ; $\rho = \frac{(1 - R_2)^2}{R_2}$, R_2 – коэффициент отражения собственного зеркала лазера, обращенного к внешнему объекту; $R_{\text{ef}}^{\text{TE}}$ и $R_{\text{ef}}^{\text{TM}}$ – эффективные коэффициенты отражения внешнего объекта по интенсивности для излучения с поляризациями ТЕ и ТМ; $\xi = \frac{2l}{\lambda_0}$, l – расстояние от выходного зеркала лазера до объекта, λ_0 – длина волны излучения в вакууме; $\sigma = \frac{\lambda_0}{2\bar{n}_g L}$.

Сделаем некоторые численные оценки. При нормальном отражении ТЕ-поляризованного излучения от зеркальной поверхности $R_{\text{ef}}^{\text{TM}} = 0$. В случае практически полной деполаризации излучения, например при отражении от диффузной поверхности, $R_{\text{ef}}^{\text{TE}} \approx R_{\text{ef}}^{\text{TM}}$. Для типичных значений лазерных параметров $\gamma \approx 1$, $\rho = 1,45$, $\Gamma g_0 L = 1,625$ и при коэффициентах отражения $R_{\text{ef}}^{\text{TE}} \approx R_{\text{ef}}^{\text{TM}} \sim 10^{-6}$ имеем:

$\gamma \rho R_{\text{ef}}^{\text{TM}} \approx 1,45 \cdot 10^{-6}$, $\frac{\sqrt{\rho R_{\text{ef}}^{\text{TM}}}}{\Gamma g_0 L} \approx 0,741 \cdot 10^{-3}$. Таким образом, с достаточной степенью точности вкладом некогерентной (ортогонально-поляризованной) составляющей в указанных случаях можно пренебречь.

Рассмотрим теперь применимость асимптотической модели для расчетов в одномодовом приближении. Представим временную зависимость расстояния от выходного зеркала лазера до внешнего объекта в виде

$$l = l_0 + \delta l(t),$$

где $l_0 = \mu \lambda_0$; $\delta l(t) = \bar{x}_0 \lambda_0 x(t)$; $\xi = 2[\mu + \bar{x}_0 x(t)]$; $\max[x(t)] = 1$.

Изменение фазы косинуса в формуле (1) при изменении расстояния до объекта на δl для моды с номером q равно $\delta\varphi_q = \left(\frac{4\pi}{\lambda_0}\right)(1 + \sigma q)\delta l$, для центральной моды $\delta\varphi_0 = \frac{4\pi}{\lambda_0}\delta l$. Положим $\lambda_0 = 670$ нм,

$L = 250$ мкм, $\bar{n}_g = 4$. Тогда $\sigma = 3,35 \cdot 10^{-4}$. Даже для достаточно удаленной моды с $q = 9$ величина $\sigma q = 3,02 \cdot 10^{-3}$. Таким образом, значения $\delta\varphi_q$ для периферийных мод отличаются от $\delta\varphi_0$ для нулевой моды не более чем на доли процента. Изменения фазы для симметричных ($\pm q$) мод имеют противоположные знаки, поэтому фазовые отличия еще больше нивелируются. К тому же мощность периферийных мод значительно меньше, чем центральной.

Таким образом, при анализе отклика лазера на микроколебания внешнего отражателя с амплитудой порядка длины волны излучения с достаточной точностью можно ограничиться когерентным одномодовым приближением

$$P \approx P_{\Sigma} \left\{ 1 - \varepsilon \cdot \cos \left[4\pi \left[\mu + \bar{x}_0 x(t) \right] \right] \right\}^{-1}, \quad (2)$$

где $\varepsilon = \frac{\sqrt{\rho R_{\text{ef}}^{\text{TE}}}}{\Gamma g_0 L \chi} < 1$.

Лазерные модули зачастую снабжаются встроенным контрольным *pin*-фотодиодом. Временная зависимость вырабатываемого им электрического сигнала определяется характером движения отражающего объекта: $U_{\text{sm}}(t) = S_u k_p P[x(t)]$, где S_u – вольтовая чувствительность фотодиода; k_p – доля полной мощности, поступающая на фотодетектор. Заметим, что наличие контрольного фотодиода для регистрации сигнала самосмещения в принципе необязательно. В качестве полезного сигнала может быть использовано напряжение на самом лазере при питании его генератором тока (так называемый оптоэлектронный сигнал). Оптоэлектронный сигнал регистрируется как разность напряжений на p – n -переходе при генерации лазера на собственных зеркалах и с внешним отражателем.

Для подтверждения обоснованности применения одномодовой модели проведено сравнение экспериментально полученного сигнала самосмещения с расчетным (формула (2)). В эксперименте использован полупроводниковый инжекционный лазер на основе AlGaInP с напряженной структурой и множеством квантовых ям, работающий в области волны длиной 670 нм. Ток накачки превышал порог генерации приблизительно на 10 %. В этом режиме спектр содержит несколько продольных мод, а сигнал самосмещения имеет максимальную амплитуду. На рис. 1, а, приведена фотография осциллограммы выходного сигнала встроенного *pin*-фотодиода при приеме на лазер оптического эхосигнала от гармонически колеблющегося диффузного отражателя. Результат расчета по предложенной одномодовой модели показан на рис. 1, б ($\varepsilon = 0,1$, $\mu = 1,31$, $\bar{x}_0 = 1,865$). Как видно, имеет место практически полное совпадение форм экспериментального и расчетного временных треков.

Таким образом, предложенная модель вполне адекватна и может быть использована для выяснения возможностей кепстральной обработки сигнала самосмещения. Подчеркнем, что модель является квазистационарной, т. е. применимой до частот ниже резонансной частоты лазера, лежащей в гигагерцевой области. Предполагается также, что связь лазера с внешним объектом достаточно слабая, а оптический эхосигнал обладает полной временной когерентностью с внутренним полем лазера.

Кепстральный анализ сигнала самосмещения

Кепстр мощности $C_{\text{sm}}(\tau)$ рассчитывается как обратное преобразование Фурье логарифма спектра мощности $S_{\text{sm}}(f)$ сигнала самосмещения $U_{\text{sm}}(t)$. В качестве диагностического признака используем амплитуду кепстральных составляющих:

$$C_{\text{sm}}(\tau) = \text{Abs} \int_{-\infty}^{\infty} \ln[S_{\text{sm}}(f)] e^{i2\pi f\tau} df.$$

Аргумент функции $C_{\text{sm}}(\tau)$ имеет размерность времени (кепстральное время). Спектр мощности определяется через составляющие фурье-спектра сигнала самосмещения:

$$S_{\text{sm}}(f) = \left\{ \text{Abs} \int_{-\infty}^{\infty} U_{\text{sm}}(t) e^{-i2\pi ft} dt \right\}^2.$$

Кепстр мощности $C_{\text{sm}}(\tau)$ сигнала самосмещения от гармонически колеблющегося внешнего объекта, рассчитанный по модели (2), приведен на рис. 1, в. Положение первой (ненулевой) линии кепстра τ_1 и расстояние между соседними линиями $\Delta\tau_1$ соответствуют полупериоду $\frac{T_1}{2} = \tau_1 = \Delta\tau_1$ или удвоенной частоте колебаний объекта

$$2f_1 = \frac{1}{\tau_1} = \frac{1}{\Delta\tau_1}. \quad (3)$$

Спектр мощности сигнала самосмешения $S_{sm}(f)$ рассчитывается на этапе нахождения кепстра $C_{sm}(\tau)$. Ранее показано [8], что в случае гармонических колебаний частота вибраций равна наименьшей частоте в спектре сигнала самосмешения, а их амплитуда может быть определена по спектральной составляющей с наибольшей мощностью с точностью не хуже $\pm 3,6\%$.

Практически более интересна ситуация, когда вибрации объекта подвержены низкочастотной амплитудной модуляции. Если исследуемым объектом является, например, работающий двигатель, это может быть признаком его неисправностей. Вид кепстров сигнала самосмешения для такого режима приведен на рис. 2, а и 2, б. Частота несущей f_1 в обоих случаях одинакова и совпадает с частотой уже рассмотренного выше гармонического колебания (55 Гц).

Сравнение рис. 1 и 2 показывает, что линии кепстра несущего колебания сохраняют свое положение, образуя кластеры при малой глубине модуляции (см. рис. 2, а; $d = 2\%$). Сами кластеры расположены вблизи нуля кепстрального времени и значений $\tau_2 = \Delta\tau_2$, кратных периоду модулирующего низкочастотного сигнала. Отсюда определяется искомая частота модуляции

$$f_2 = \frac{1}{\tau_2} = \frac{1}{\Delta\tau_2}.$$

При более значительной глубине модуляции (см. рис. 2, б; $d = 50\%$) количество линий со сравнимой интенсивностью в кластерах уменьшается и в кепстре доминируют линии, отвечающие за период

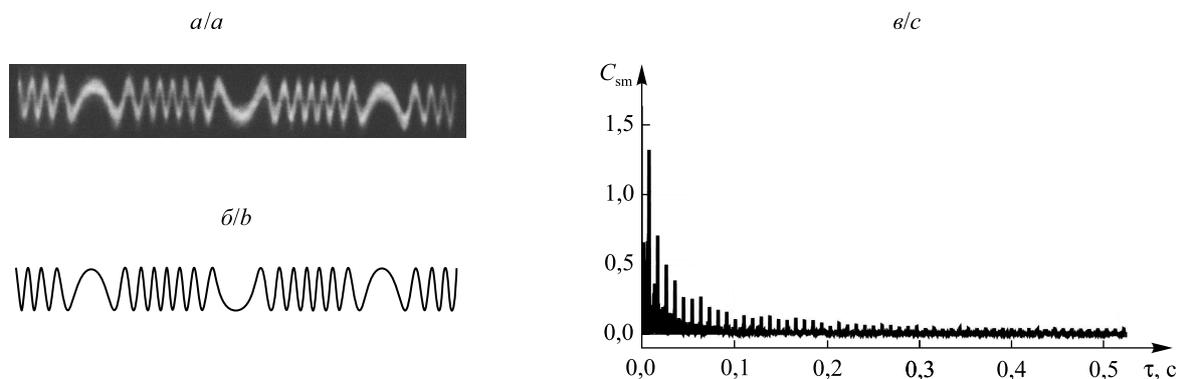


Рис. 1. Временной характер (а, б) и кепстр мощности (в) отклика лазера на гармонические колебания внешнего объекта с частотой 55 Гц: а – эксперимент; б, в – теория

Fig. 1. The temporal character (a, b) and the power cepstrum (c) of the laser response to harmonic oscillations of an external object with a frequency of 55 Hz: a – experiment; b, c – theory

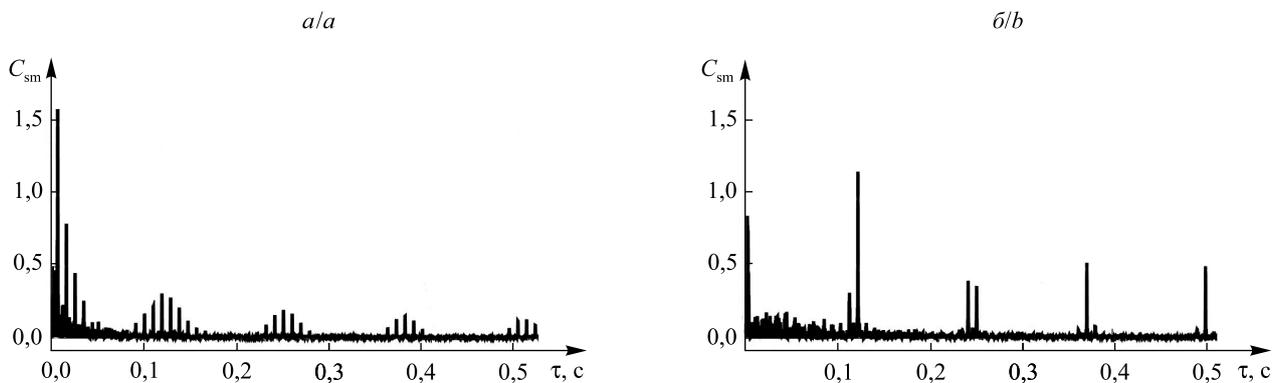


Рис. 2. Кепстры мощности сигнала самосмешения при амплитудной модуляции микроколебаний ($f_1 = 55$ Гц) низкочастотным сигналом ($f_2 = 8$ Гц).

Глубина модуляции d : 0,02 (а); 0,5 (б). Амплитуда немодулированного колебания $\bar{x}_0 = 1,9$

Fig. 2. Power cepstrums of the self-mixing signal in the case of amplitude modulated micro-oscillations ($f_1 = 55$ Hz) with a low-frequency signal ($f_2 = 8$ Hz). Modulation depth d : 0.02 (a); 0.5 (b). The amplitude of the unmodulated oscillation $\bar{x}_0 = 1.9$

или частоту амплитудной модуляции. Однако и в этом случае кепстр сохраняет информацию о частоте несущих колебаний f_1 в виде линии τ_1 , наиболее близкой к нулю, и расщепления линий $\Delta\tau_1$ вблизи максимумов кепстра.

Расчетные спектры и кепстры мощности отклика лазера на колебания объекта с различной амплитудой при одинаковой глубине модуляции приведены на рис. 3.

Как видно из рис. 3, с увеличением амплитуды колебаний при постоянных частотах вибрации f_1 и модулирующего воздействия f_2 положения линий в кепстре не изменяются, хотя спектр мощности сигнала при этом расширяется. Можно заметить, что периодичность линий в спектрах на рис. 3, *a, в*, одинакова, хотя интенсивности их различны. Таким образом, если принять во внимание тот факт, что в известном смысле кепстр можно рассматривать как «спектр спектра», вид полученных кепстров становится понятным.

В работе [8] отмечено, что в случае гармонических колебаний оценка амплитуды микровибраций может быть получена не только по положению спектральной составляющей с наибольшей мощностью, но и по наивысшей частоте в спектре сигнала самосмещения. Как показывает анализ, произведение $(1+d)\bar{x}_0$, характеризующее максимальное отклонение отражателя от состояния равновесия в случае амплитудно-модулированных колебаний, можно оценить, используя приближенное соотношение вида

$$f_{\max} \approx 8 \cdot f_1(1+d)\bar{x}_0, \quad (4)$$

где f_{\max} – наивысшая частота в спектре $S_{sm}(f)$. При глубине модуляции 50 % и частоте несущей 49 Гц формула (4) дает для f_{\max} следующие значения: 0,823 КГц ($\bar{x}_0 = 1,4$) и 1,176 КГц ($\bar{x}_0 = 2,0$). Сравнение

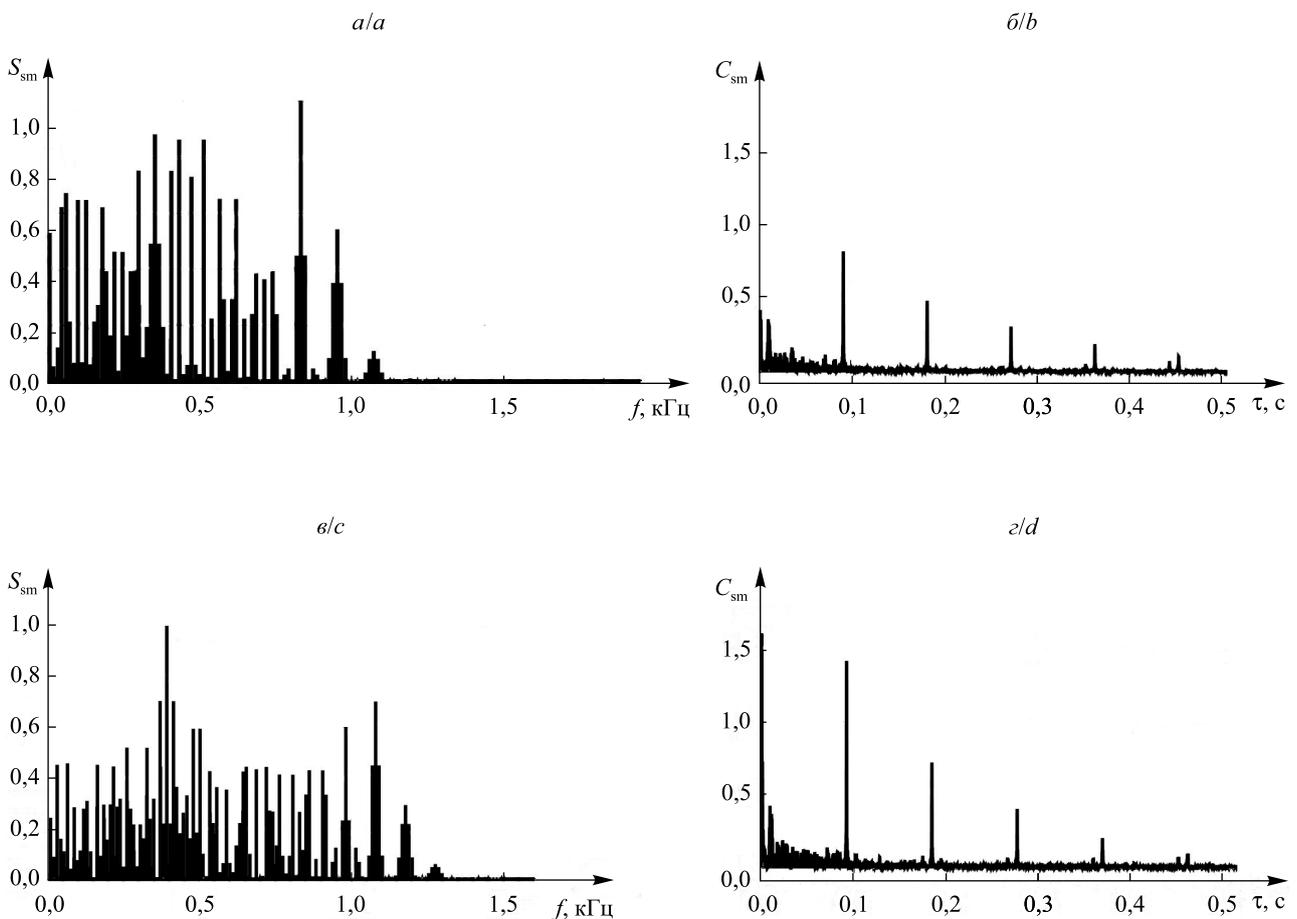


Рис. 3. Спектры (*a, в*) и кепстры мощности (*б, г*) при различных амплитудах микроколебаний \bar{x}_0 : 1,4 (*a, б*); 2,0 (*в, г*).
Частоты: $f_1 = 49$ Гц; $f_2 = 11$ Гц. Глубина модуляции $d = 0,5$

Fig. 3. Spectra (*a, c*) and power cepstrums (*b, d*) at different amplitudes of micro-oscillations \bar{x}_0 : 1.4 (*a, b*); 2.0 (*c, d*).
Frequencies: $f_1 = 49$ Hz; $f_2 = 11$ Hz. Modulation depth $d = 0.5$

с данными рис. 3 показывает хорошее соответствие численных оценок f_{\max} значениям $(1+d)\bar{x}_0$, при которых получены приведенные спектры.

Далее, обратим внимание на некоторые терминологические моменты. На степень временной когерентности излучения лазера с ВООС могут оказывать влияние квантовые флуктуации в лазере и неустойчивость режима генерации [12]. При этом речь идет не об ортогональности внутренней ТЕ-моды лазера и ТМ-составляющей отраженного излучения, а о потере временной когерентности в пределах самой ТЕ-моды. В режиме сильной связи возможен переход лазера в режим хаотических пульсаций и ВООС оказывается некогерентной [12]. В режиме слабой оптической обратной связи временная когерентность излучения сохраняется. Заметим, что в эксперименте условие слабой обратной связи легко может быть обеспечено путем использования оптических аттенюаторов.

Заключение

Таким образом, путем численного эксперимента установлена возможность определения параметров микровибраций слабоотражающих объектов с помощью кепстрального анализа сигнала самосмещения в полупроводниковом лазере. Положения кепстральных линий позволяют находить частоты несущего и модулирующего колебаний при микровибрациях объекта с амплитудами порядка длины волны лазерного излучения. Одновременный расчет спектра мощности сигнала самосмещения дает информацию о максимальном отклонении отражателя от состояния равновесия при амплитудно-модулированных колебаниях.

Библиографические ссылки

1. Giuliani G., Norgia M., Donati S., et al. Laser diode self-mixing technique for sensing applications // *J. of Optics A: Pure and Applied Optics*. 2002. Vol. 4. P. S283–S294.
2. Giuliani G., Bozzi-Pietra S., Donati S. Self-mixing laser diode vibrometer // *Measurement Sci. Techn.* 2003. Vol. 14. P. 24–32.
3. Norgia M., Svelto C. Novel measurement method for signal recovery in optical vibrometer // *IEEE Trans. Instrum. Measurement*. 2008. Vol. 57, № 8. P. 1703–1707.
4. Ruiz-Llata M., Lamela H. Self-mixing technique for vibration measurements in a laser diode with multiple modes created by optical feedback // *Appl. Opt.* 2009. Vol. 48, № 15. P. 2915–2923.
5. Усанов Д. А., Скрипаль Ал. В., Скрипаль Ан. В. Физика полупроводниковых радиочастотных и оптических автодинов. Саратов, 2003.
6. Усанов Д. А., Скрипаль А. В., Камышанский А. С. Измерение скорости нанометровых перемещений по спектру автодиного сигнала лазера на квантоворазмерных структурах // *Письма в ЖТФ*. 2004. Т. 30, вып. 7. С. 77–82.
7. Усанов Д. А., Скрипаль А. В., Авдеев К. С. Определение расстояния до объекта с помощью частотно модулированного полупроводникового лазерного автодина // *Письма в ЖТФ*. 2007. Т. 33, вып. 21. С. 72–77.
8. Карих Е. Д. Определение параметров микроколебаний по спектру сигнала самосмещения в полупроводниковом лазере // *Квантовая электроника : материалы X Междунар. науч.-техн. конф.* (Минск, 9–13 нояб. 2015 г.). Минск, 2015. С. 147.
9. Карих Е. Д. Кепстральный анализ эхо-сигнала квантового приемника на основе полупроводникового инжекционного лазера // *Квантовая электроника : материалы X Междунар. науч.-техн. конф.* (Минск, 9–13 нояб. 2015 г.). Минск, 2015. С. 148.
10. Карих Е. Д. Полупроводниковый лазер с комбинированной внешней оптической обратной связью // *Вестн. БГУ. Сер. 1, Физика. Математика. Информатика*. 2015. № 2. С. 35–39.
11. Карих Е. Д. Спектрально-ондуляционные характеристики полупроводникового лазера со слабой внешней оптической обратной связью // *Вестн. БГУ. Сер. 1, Физика. Математика. Информатика*. 2012. № 3. С. 7–11.
12. Карих Е. Д., Афоненко А. А. Влияние флуктуаций излучения на величину оптоэлектронного сигнала в полупроводниковых лазерах с внешней оптической обратной связью // *Журн. прикл. спектроскопии*. 2008. Т. 75, № 6. С. 809–813.

References

1. Giuliani G., Norgia M., Donati S., et al. Laser diode self-mixing technique for sensing applications. *J. of Optics A: Pure and Applied Optics*. 2002. Vol. 4. P. S283–S294.
2. Giuliani G., Bozzi-Pietra S., Donati S. Self-mixing laser diode vibrometer. *Measurement Sci. Techn.* 2003. Vol. 14. P. 24–32.
3. Norgia M., Svelto C. Novel measurement method for signal recovery in optical vibrometer. *IEEE Trans. Instrum. Measurement*. 2008. Vol. 57, No. 8. P. 1703–1707.
4. Ruiz-Llata M., Lamela H. Self-mixing technique for vibration measurements in a laser diode with multiple modes created by optical feedback. *Appl. Opt.* 2009. Vol. 48, No. 15. P. 2915–2923.
5. Usanov D. A., Skripal Al. V., Skripal An. V. Physics of semiconductor radio-frequency and optical autodynes. Saratov, 2003 (in Russ.).
6. Usanov D. A., Skripal A. V., Kamyshansky A. S. Measurement of the speed of nanometer-scale displacements by the spectrum of an autodyne laser signal on quantum-size structures. *Pis'ma v Zh. Eksp. Teor. Fiz.* 2004. Vol. 30, issue 7. P. 77–82 (in Russ.).
7. Usanov D. A., Skripal A. V., Avdeev K. S. Determination of the distance to the object with the help of a frequency-modulated semiconductor laser autodyne. *Pis'ma v Zh. Eksp. Teor. Fiz.* 2007. Vol. 33, issue 21. P. 72–77 (in Russ.).

8. Karikh E. D. Determination of the parameters of microvibrations from the spectrum of the self-mixing signal in a semiconductor laser. *Kvantovaya elektronika* : materialy X Mezhdunar. nauchn.-tekhn. konf. (Minsk, 9–13 Novemb., 2015). Minsk, 2015. P. 147 (in Russ.).

9. Karikh E. D. [Spectral analysis of the echo signal of a quantum receiver based on a semiconductor injection laser]. *Kvantovaya elektronika* : materialy X Mezhdunar. nauchn.-tekhn. konf. (Minsk, 9–13 Novemb., 2015). Minsk, 2015. P. 148 (in Russ.).

10. Karikh E. D. Semiconductor laser with combined external optical feedback. *Vestnik BGU. Ser. 1, Fiz. Mat. Inform.* 2015. No. 2. P. 35–39 (in Russ.).

11. Karikh E. D. Spectral and undulation characteristics of semiconductor laser with weak external optical feedback. *Vestnik BGU. Ser. 1, Fiz. Mat. Inform.* 2012. No. 3. P. 7–11 (in Russ.).

12. Karikh E. D., Afonenko A. A. Influence of radiation fluctuations on the magnitude of optoelectronic signal in semiconductor lasers with external optical feedback. *Zh. prikl. spektrosk.* 2008. Vol. 75, No. 6. P. 809–813 (in Russ.).

Статья поступила в редколлегию 24.05.2017.
Received by editorial board 24.05.2017.

УДК 537.87

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ВЫСОКОЧАСТОТНОГО РЕЗОНАНСА СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ УПРАВЛЕНИЯ ХАРАКТЕРИСТИКАМИ РАССЕЙНИЯ СВЧ-ИЗЛУЧЕНИЯ

Д. В. ЗАЕРКО¹⁾, Л. С. ГАЙДА¹⁾, А. Ч. СВИСТУН¹⁾, Л. А. КАЛОША²⁾

¹⁾Гродненский государственный университет им. Янки Купалы,
ул. Ожешко, 22, 230023, г. Гродно, Беларусь

²⁾Гродненский государственный колледж техники, технологий и дизайна,
ул. Горького, 86, 230009, г. Гродно, Беларусь

Изучались возможности управления характеристиками распространения СВЧ-излучения за счет изменения коэффициента диэлектрической проницаемости компонентов структур. Рассматривались сложноструктурированные периодические решетки с изменяемыми электрофизическими параметрами. Определялось их влияние на характеристики распространения электромагнитного излучения СВЧ-диапазона. Представлены результаты исследования рассеяния электромагнитных волн СВЧ-диапазона в периодических структурах на основе сегнетоэлектрических брусьев с изменяемыми электрофизическими параметрами. Показано влияние изменения диэлектрической проницаемости компонентов структуры на перераспределение энергии между гармониками рассеянного

Образец цитирования:

Заерко Д. В., Гайда Л. С., Свистун А. Ч., Калоша Л. А. Использование высокочастотного резонанса сегнетоэлектрических материалов для управления характеристиками рассеяния СВЧ-излучения // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2017. № 3. С. 65–72.

For citation:

Zaerko D. V., Gaida L. S., Svistun A. C., Kalosha L. A. Using high-frequency resonance of ferroelectric materials to control the characteristics of microwave-radiation scattering. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2017. No. 3. P. 65–72 (in Russ.).

Авторы:

Дмитрий Владимирович Заерко – старший преподаватель кафедры электротехники и электроники физико-технического факультета.

Леонид Станиславович Гайда – доктор физико-математических наук, профессор; профессор кафедры лазерной физики и спектроскопии физико-технического факультета.

Андрей Чеславович Свистун – кандидат физико-математических наук; доцент кафедры технической механики инженерно-строительного факультета.

Любовь Александровна Калоша – преподаватель.

Authors:

Dmitry Zaerko, senior lecturer at the department of electrical engineering and electronics, faculty of physico-technical. *dim.dia2011@yandex.by*

Leonid Gaida, doctor of science (physics and mathematics), full professor; professor at the department of laser physics and spectroscopy, faculty of physico-technical. *gls@grsu.by*

Andrey Svistun, PhD (physics and mathematics); associate professor at the department of technical mechanics, faculty of engineering and construction. *laser777@gmail.com*

Liubou Kalosha, lecturer. *ya-2009@tut.by*

электромагнитного излучения. Описан способ управления рассеянием СВЧ-поля на периодической решетке из сегнетоэлектрических брусьев за счет изменения диэлектрической проницаемости компонент решетки высокочастотным полем на резонансной частоте материала. Изложены сведения о механизме резонансного управления диэлектрическими характеристиками сегнетоэлектрика и рассеянием СВЧ-поля на эквидистантной решетке. Приведены результаты измерения рассеяния на периодической решетке электромагнитных волн СВЧ-диапазона. Полученные результаты позволяют определить требования к электрофизическим свойствам материалов, использование которых дает возможность осуществить контроль за распространением электромагнитных волн в системах с регулируемыми электрофизическими параметрами и управление им. Данные структуры могут быть использованы при разработке новых электронно-управляемых устройств в опто- и СВЧ-электронике.

Ключевые слова: периодические диэлектрические структуры; сегнетоэлектрики; коэффициент диэлектрической проницаемости; изменения S -параметров; управление характеристиками рассеяния СВЧ-излучения.

USING HIGH-FREQUENCY RESONANCE OF FERROELECTRIC MATERIALS TO CONTROL THE CHARACTERISTICS OF MICROWAVE-RADIATION SCATTERING

D. V. ZAERKO^a, L. S. GAIDA^a, A. C. SVISTUN^a, L. A. KALOSHA^b

^a*Yanka Kupala State University of Grodno, Ažėška Street, 22, 230023, Grodno, Belarus*

^b*Grodno State College of Engineering, Technology, and Design, Gorki Street, 86, 230009, Grodno, Belarus*

Corresponding author: L. A. Kalosha (ya-2009@tut.by)

This paper presents a study of the possibilities to control the microwave-radiation propagation characteristics by varying the dielectric constant of the structural components. The complex structured periodic lattice with adjustable electrophysical parameters is considered. The influence of electromagnetic parameters on the propagation characteristics of microwave-range electromagnetic radiation is studied. The construction method and choice of the periodic structures based on hollow dielectric rods with filling, offering the possibility to vary the dielectric constant, are substantiated. The measuring results for scattering of the microwave-range electromagnetic waves from the periodic structures when using ferroelectric beams with variable electrophysical parameters are given. The effect of variations in the dielectric constant of the structural components on the energy redistribution of the harmonics of scattered electromagnetic radiation is demonstrated. The technique to control scattering of the microwave field on a periodic lattice of ferroelectric due to changes in the dielectric constant of the lattice components by the high-frequency field at the resonance frequency of the material is proposed. A mechanism of the resonance control over the dielectric characteristics of ferroelectric and scattering of the microwave field at the equidistant lattice is given. Based on the simulation results, the requirements for the electrophysical properties of materials offering the control over the propagation of electromagnetic waves in systems with adjustable electrophysical parameters may be determined. Such structures can be used for the development of new electronics-controlled opto- and microwave devices.

Key words: periodic dielectric structures; ferroelectrics; dielectric constant; S -parameter changes; the control of the propagation characteristics of microwave scattering.

Введение

В настоящее время в результате создания и изучения новых материалов актуальна проблема управления электромагнитным излучением за счет его взаимодействия с периодическими решетками с управляемыми электрофизическими характеристиками [1; 2]. Выбор материалов и знание их свойств определяют характеристики новой электронной аппаратуры. Показателем этого являются исследования искусственных периодических структур на основе сегнетоэлектриков. Эти структуры составляют основу новых устройств обработки сигналов и активно применяются в СВЧ-электронике и оптоэлектронике. Примером могут служить переключающие и управляющие СВЧ-элементы, элементы памяти и др. [1–3].

Результаты численных исследований спектров рассеяния электромагнитного поля периодической структуры с периодами, обеспечивающими распространение только основных гармоник и гармоник высших порядков, которая состоит из параллельных диэлектрических брусьев с управляемой диэлектрической проницаемостью, показали, что в периодических структурах из диэлектрических брусьев с изменяемым коэффициентом диэлектрической проницаемости возможно управление характеристиками рассеяния СВЧ-излучения за счет перераспределения энергии электромагнитного поля между гармониками рассеянного спектра. Изменения значений амплитуд гармоник рассеянного спектра носят периодический характер, а частоты, соответствующие минимумам и максимумам амплитуд, зависят от

диэлектрической проницаемости брусьев периодической структуры. Полученный эффект может использоваться при создании устройств для управления направлением распространения и амплитудой электромагнитных волн [3–6].

Для проведения экспериментальных исследований использовались эквидистантные структуры на основе сегнетоэлектриков, которые представляют научный интерес как модельные объекты для изучения особенностей распространения электромагнитных волн в пространстве в целях выработки практических рекомендаций по созданию различных устройств СВЧ-диапазона, работающих на их основе.

Цель настоящей работы – дальнейшее исследование диэлектрических свойств сегнетоэлектриков и реализация возможности управления рассеянием СВЧ-излучения в периодических решетках из диэлектрических брусьев с изменяемыми электрофизическими характеристиками [4].

Материалы и методика измерений

В классе кристаллических диэлектриков отдельно выделяются материалы, обладающие, в отсутствие внешнего электрического поля, самопроизвольной ориентацией дипольных моментов частиц, входящих в состав кристаллической решетки, – сегнетоэлектрики. В отсутствие внешнего электрического поля сегнетоэлектрик имеет произвольную спонтанную поляризацию, но разбит на отдельные области – так называемые области Вейсса. Каждая из областей поляризована, но интеграционная поляризация всех областей равна нулю, так как электрический момент одних областей нейтрализуется действием других с противоположно направленной поляризацией.

Внешнее электрическое поле в таком веществе вызывает поляризацию не только из-за смещения электрических зарядов, но и благодаря ориентации в электрическом поле целых областей (доменов). Электрическое поле заставляет сегнетоэлектрические домены, ориентированные хаотично, приобретать одинаковую ориентацию, при этом с ростом напряженности поля поляризация достигает насыщения.

В суммарную поляризацию сегнетоэлектриков вносят вклад различные механизмы поляризации, причем для каждого вида поляризации характерен свой частотный диапазон и характер зависимости от частоты, обусловленные физической природой поляризации. Известно, что с поляризацией диэлектрика связана его диэлектрическая проницаемость. Исходя из вышеперечисленных электрофизических особенностей, для исследования выбраны сегнетоэлектрические материалы. На свойства сегнетоэлектриков существенно влияет их доменная структура. Процесс поляризации сегнетоэлектрика включает три этапа: зарождение доменов, их разрастание, слияние нескольких доменов в один. Для обеспечения данного процесса необходимо внешнее синусоидальное высокочастотное (ВЧ) электрическое поле, в котором поляризация кристалла с исходной полидоменной структурой осуществляется дополнительно за счет колебаний существующих доменных стенок около их начальных положений. Частота ВЧ-поля устанавливается на основе существования условия совпадения частоты поля с одной из собственных частот материала сегнетоэлектрика, определяемой частотой колебаний стенок доменов. Движение доменных стенок под действием электрического поля обуславливает нелинейные и частотные свойства сегнетоэлектриков в высокочастотном диапазоне [3].

Для исследования выбрана сегнетоэлектрическая керамика, основным компонентом которой является CaTiO_3 .

Методика измерений

Изучение изменения диэлектрической проницаемости композитного образца в ВЧ-диапазоне проводилось с помощью мостового метода в диапазоне частот 0,5–110,0 МГц. При измерениях диэлектрической проницаемости использовался измеритель импеданса ВМ-538 фирмы *Tesla* (Чехия) [5].

Напряженность внешнего электрического высокочастотного поля оказывает влияние на степень поляризации сегнетоэлектрика и, как следствие, на изменение его диэлектрической проницаемости. Измерена зависимость диэлектрической проницаемости от напряженности приложенного высокочастотного поля с частотой, на которой достигается максимальное значение диэлектрической проницаемости сегнетоэлектрика.

Рассматривалось рассеяние электромагнитных волн СВЧ-диапазона на периодической решетке из сегнетоэлектрических брусьев (рис. 1), математическое решение данной задачи дифракции описано в [6; 7].

Результаты моделирования в программном продукте *CST MICROWAVE STUDIO* рассеяния электромагнитного поля СВЧ-диапазона на представленной периодической решетке показали наличие перераспределения энергии основных гармоник между гармониками рассеянного спектра. Для постоянной частоты СВЧ-поля распределение энергии между пространственными гармониками зависит от диэлектрической проницаемости брусьев решетки. Методика проведения моделирования и основные результаты приведены в [7; 9]. На рис. 2 представлена диаграмма распределения энергии $\text{TE}(0,0)$ гармоники в гармонике высшего порядка.

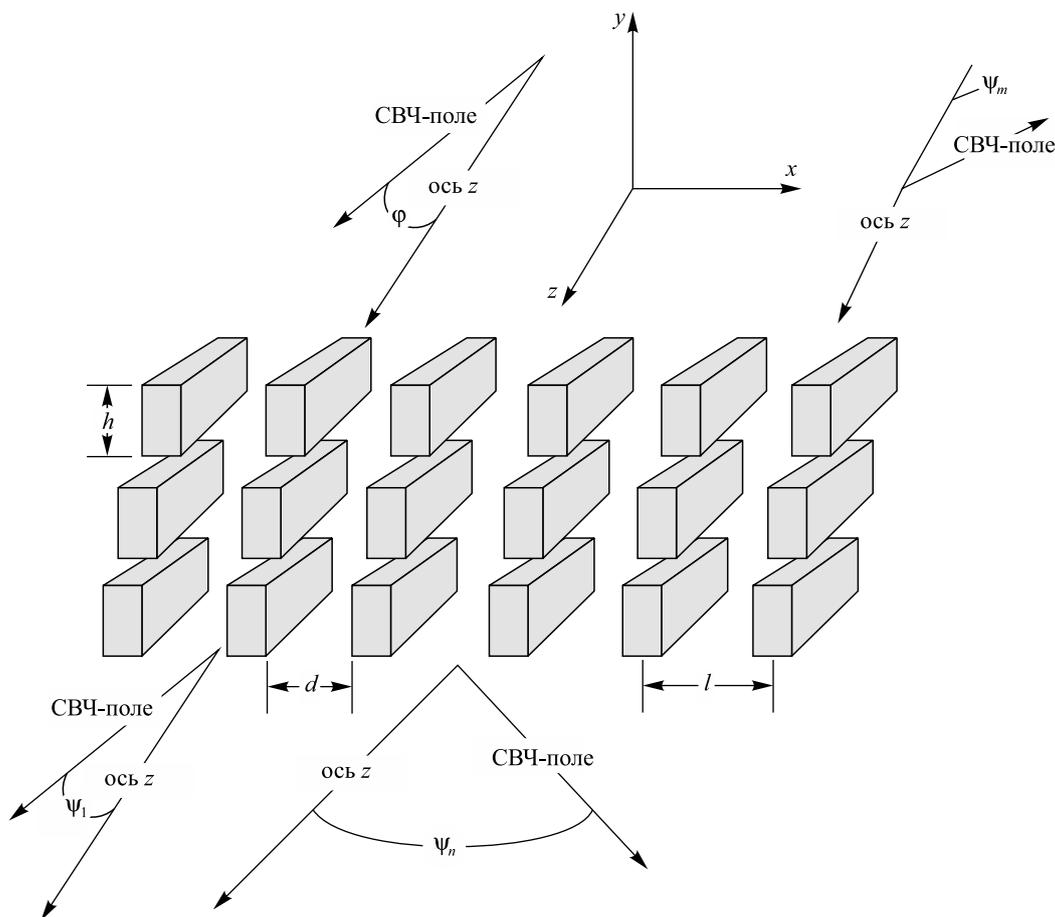


Рис. 1. Фрагмент решетки из диэлектрических брусьев:

l – период; d – расстояние между брусьями решетки;

h – высота брусьев решетки; φ – угол падения электромагнитной волны на решетку;

ψ_n – угол рассеяния n -й гармоники; ψ_m – угол рассеяния m -й гармоники

Fig. 1. Fragment of the lattice of dielectric rods:

l – period; d – space between the lattice rods; h – height of the lattice rods;

φ – incidence angle of an electromagnetic wave on the lattice;

ψ_n – scattering angle for the n harmonic; ψ_m – scattering angle for the m harmonic

Условием распространения m -й пространственной гармоники является положительное значение постоянной распространения:

$$\Gamma_m^\varepsilon = \sqrt{k^2 \varepsilon - \left[\frac{2m\pi + \psi}{d} \right]^2},$$

где Γ_m – постоянная распространения волны в среде; ε – диэлектрическая проницаемость среды; ψ – значение угла рассеяния m -й гармоники; k – волновой вектор; d – расстояние между элементами решетки [6; 8].

Для проведения исследования использовалась эквидистантная решетка с периодом, большим длины волны облучающего СВЧ-излучения, равным 4,5 см, позволяющая рассмотреть широкий спектр гармоник. При проведении исследования рассматривалось влияние изменения диэлектрической проницаемости брусьев решетки на амплитуду прошедших и отраженных электромагнитных волн в диапазоне облучающих частот 7,5–10,0 ГГц. Изменение диэлектрической проницаемости достигалось за счет помещения решетки во внешнее управляющее высокочастотное поле с частотой, совпадающей с резонансной частотой сегнетоэлектрика [4].

Экспериментальная периодическая решетка помещалась в отверстие поглощающего экрана, расположенного между передающей и приемной (с углом вращения 360°) рупорными пирамидальными антеннами. Управляющее ВЧ-поле формировалось с помощью прямоугольных пластин, расположенных за поглощающим экраном, между которыми размещалась исследуемая решетка. Размеры и расположение

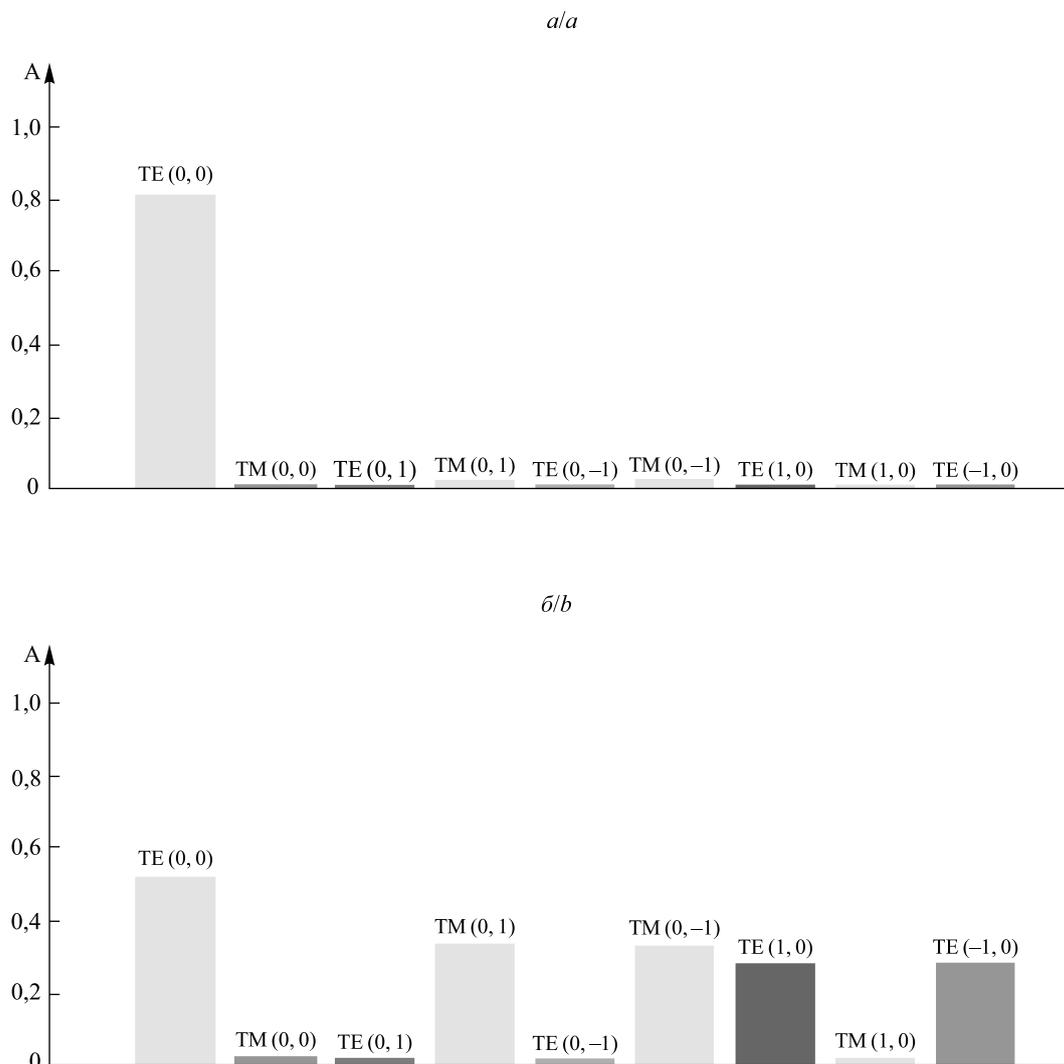


Рис. 2. Спектр прошедшего электромагнитного поля: *a* – для $\epsilon = 75$; *б* – для $\epsilon = 560$.

A – нормированные амплитуды гармоник рассеянного спектра

Fig. 2. Spectrum of the transmitted field: *a* – for $\epsilon = 75$; *b* – for $\epsilon = 560$.

A – normalized amplitudes of the harmonics of the scattered spectrum

пластин выбирались таким образом, чтобы формировалось однородное управляющее электрическое поле и не оказывалось влияние на диаграмму рассеяния СВЧ-поля. Расстояние от антенны до экрана выбиралось на основе условия существования плоской электромагнитной волны. Регистрировались показания напряжения на детекторе приемной антенны. Описание методики эксперимента представлено в [4; 5].

Результаты измерений

Зависимость относительной диэлектрической проницаемости ϵ от частоты высокочастотного поля F для исследуемого материала приведена на рис. 3.

Максимум значения диэлектрической проницаемости соответствует резонансной частоте 72 МГц сегнетоэлектрика, обусловленной частотой колебаний стенок доменов.

В случае увеличения напряженности E внешнего ВЧ-поля при нахождении в нем сегнетоэлектрика в состоянии полной поляризации происходит дезориентация изначально упорядоченных доменов, что приводит к уменьшению диэлектрической проницаемости сегнетоэлектрика. Данная зависимость представлена на рис. 4.

После поляризации сегнетоэлектрика постепенное увеличение напряженности ВЧ-поля позволило осуществлять управление диэлектрической проницаемостью брусьев решетки. Увеличение напряженности поля в диапазоне 0,9–2,6 В/см после полной поляризации сегнетоэлектрика приводит к появлению доменов с новой амплитудой и частотой колебаний, т. е. дезориентации доменов и образованию новых с различными энергиями зародышеобразования. Вследствие этого поляризация доменов принимает

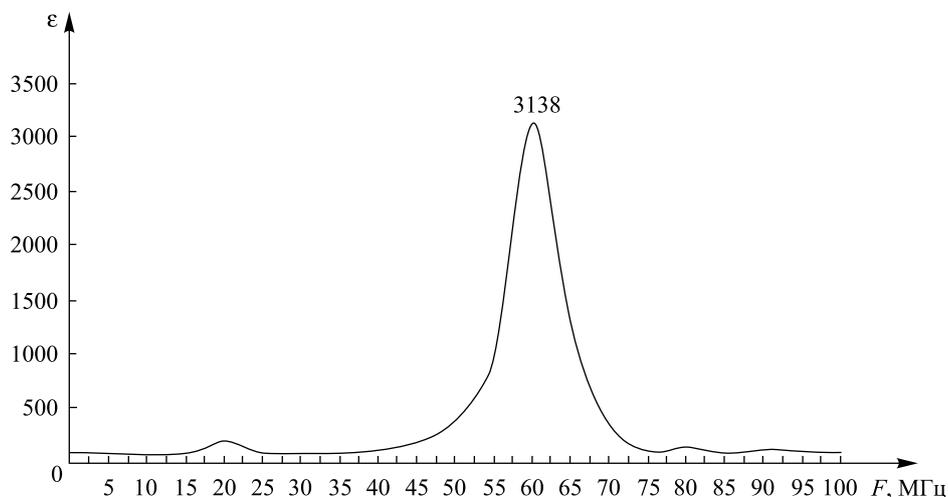


Рис. 3. Зависимость диэлектрической проницаемости образца от частоты ВЧ-поля

Fig. 3. Dielectric constant as a function of the microwave-field frequency

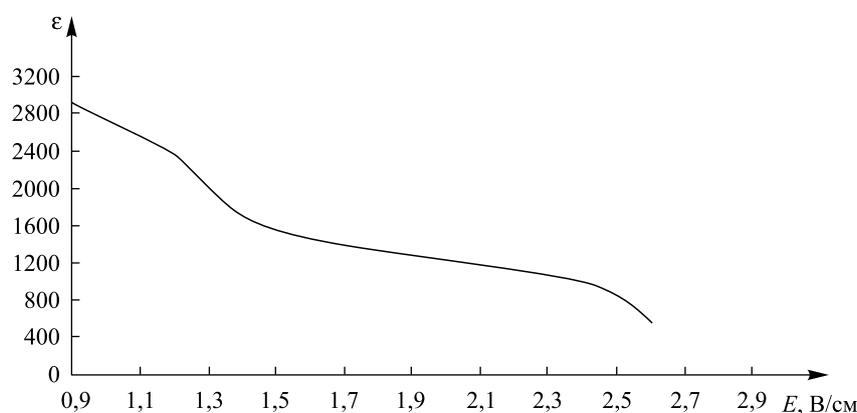


Рис. 4. Зависимость диэлектрической проницаемости образца от напряженности ВЧ-поля

Fig. 4. Dielectric constant of a sample as a function of the microwave-field strength

хаотический характер, что приводит к возникновению областей с различной диэлектрической проницаемостью и, как следствие, разными коэффициентами прохождения и отражения. Поляризованность материала будет уменьшаться, что обусловлено снижением диэлектрической проницаемости [9–11].

Данный эффект позволяет осуществить управление значением диэлектрической проницаемости сегнетоэлектрика. Реализация управления диэлектрической проницаемостью с использованием высокочастотного поля возможна за счет снижения энергий образования зародышей доменов при воздействии поля с частотой, соответствующей резонансной частоте сегнетоэлектрика.

В результате получены диаграммы рассеяния СВЧ-поля на периодической решетке из исследуемых материалов, отражающие зависимость амплитуд набора пространственных гармоник от напряженности управляющего ВЧ-электрического поля и, следовательно, от значения коэффициента диэлектрической проницаемости фрагментов решетки. Диаграммы направленности представлены на рис. 5.

Направление падающего СВЧ-излучения нормально к плоскости решетки. Частота СВЧ-поля постоянна и равна 8,6 ГГц. Частота управляющего поля соответствует резонансной частоте сегнетоэлектрика в ВЧ-диапазоне. С ростом напряженности воздействующего внешнего электрического высокочастотного поля наблюдаются увеличение амплитуды прошедшего излучения, изменение формы диаграммы направленности.

Рост амплитуды прошедшего излучения обусловлен изменением диэлектрической проницаемости под воздействием управляющего поля, а изменение формы может быть связано с наличием областей с различной ориентацией доменов, что определяет изменение коэффициента прохождения для СВЧ-излучения.

При прохождении в сегнетоэлектрической среде СВЧ-волны на участках, где домены переориентированы под воздействием управляющего поля, вследствие неоднородности диэлектрической проницаемости материала возможна передача энергии одной моды в другие, причем условия передачи энергии зависят от поляризации и конфигураций мод [9–11].

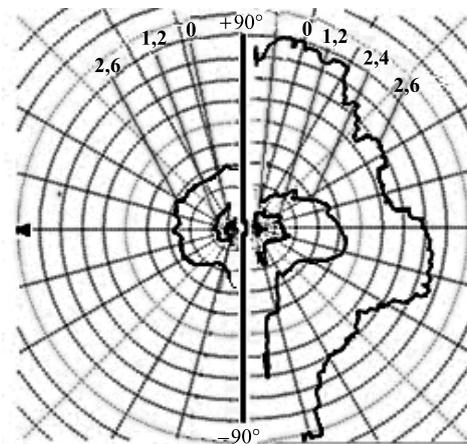


Рис. 5. Диаграммы рассеяния СВЧ-поля на периодической структуре при воздействии управляющего ВЧ-поля, В/см

Fig. 5. Diagrams of the scattering of a microwave field on a periodic structure under the influence of an RF control field, V/cm

Вклад в суммарное поле вносят все гармоники, распространение которых возможно в рассматриваемой периодической решетке. Математические расчеты и моделирование показали, что в рассеянном на исследуемой периодической решетке электромагнитном поле могут распространяться до 18 пространственных гармоник. Перераспределение энергии происходит в основном между первыми девятью гармониками (см. рис. 3). Углы распространения второй – четвертой гармоник находятся в диапазоне $10\text{--}20^\circ$. Пространственное распределение плотности энергии поля зависит от коэффициента прохождения, который неодинаков для гармоник с различной поляризацией. Все перечисленное обуславливает изменение формы диаграммы направленности для различной напряженности управляющего высокочастотного электрического поля.

Указанный выше способ управления диэлектрическими свойствами решетки, амплитудами прошедшего и отраженного полей, направленностью рассеянного поля можно осуществлять и в импульсном режиме. В импульсном режиме длительность фронта импульса управляющего поля определяется периодом управляющего поля и временем поляризации доменов.

Заключение

Получены зависимости диэлектрической проницаемости исследуемого сегнетоэлектрика от частоты и напряженности приложенного высокочастотного поля, а также диаграммы рассеяния электромагнитного СВЧ-поля на периодической решетке из параллельных диэлектрических брусьев из материала с управляемой диэлектрической проницаемостью.

Установлено, что при фиксированных частоте и направлении распространения облучающего электромагнитного СВЧ-поля изменение диэлектрической проницаемости элементов решетки может осуществляться путем приложения внешнего высокочастотного электрического поля с частотой, соответствующей одной из резонансных частот сегнетоэлектрического материала, обусловленной его доменной структурой. Управляющее воздействие приводит к изменению диаграмм направленности СВЧ-поля за счет перераспределения энергии между пространственными гармониками вследствие изменения диэлектрической проницаемости элементов решетки.

Резонансное управление электрофизическими параметрами материалов может использоваться при создании устройств с изменяемыми характеристиками рассеяния электромагнитных волн. Воздействие высокочастотного электрического поля на периодические структуры из сегнетоэлектрических компонент также может быть эффективно использовано для разработки, проектирования и построения новых устройств волновой техники, например пассивных антенно-фазированных решеток, разветвителей, оптических переключателей, модуляторов и т. д.

Библиографические ссылки

1. Photonic band gap materials / ed. by C. M. Soukoulis // Proc. NATO ASI Ser. E. Appl. Sci. 2014. Vol. 315.
2. Gaponenko S. Introduction to Nanophotonics. Cambridge, 2010.
3. Поплавко Ю. М., Переверзева Л. П., Раевский И. П. Физика активных диэлектриков / под ред. В. П. Сахненко. Ростов н/Д., 2009.
4. Рычков Ю. М., Акимов А. И., Василевич А. Е. Распространение электромагнитных волн СВЧ-диапазона в управляемых двумерных периодических структурах // Докл. НАН Беларуси. 2010. Т. 54, № 1. С. 50–53.

5. Акимов А. И., Василевич А. Е., Зайкова С. А. Особенности распространения электромагнитных волн СВЧ-диапазона в периодических структурах // Докл. НАН Беларуси. 2009. Т. 53, № 3. С. 49–52.
6. Шестопалов В. П., Литвиненко Л. Н., Масалов С. А. и др. Дифракция волн на решетках. Харьков, 1973.
7. Заерко Д. В., Гайда Л. С., Свистун А. Ч. и др. Моделирование рассеяния электромагнитных волн СВЧ-диапазона на структурах с изменяемыми электрофизическими параметрами // Вестн. БГУ Сер. 1, Физика. Математика. Информатика. 2016. № 3. С. 90–96.
8. Амтей Н., Галиндо В., Ву Ч. и др. Теория и анализ фазированных антенных решеток. М., 1974.
9. Заерко Д. В., Гайда Л. С. Моделирование управления рассеянием электромагнитных волн СВЧ-диапазона в сложно структурированных эквидистантных структурах с изменяемыми электрофизическими параметрами // Весн. Гродзен. дзярж. ун-та імя Янкі Купалы. Сер. 2, Матэматыка. Фізіка. Інфарматыка, вылічальная тэхніка і ўпраўленне. 2016. Т. 6, № 2. С. 64–69.
10. Заерко Д. В., Хацук Д. В., Самородов А. П. и др. Моделирование распространения СВЧ-излучения в структурированных диэлектрических системах // Инновации в науке : сб. ст. по материалам LVI Междунар. науч.-практ. конф. (Новосибирск, 27 апр. 2016 г.). Новосибирск, 2016. С. 64–69.
11. Ярив А., Юх П. Оптические волны в кристаллах. М., 1987.

References

1. Photonic band gap materials. *Proc. NATO ASI Ser. E. Appl. Sci.* 2014. Vol. 315.
2. Gaponenko S. Introduction to Nanophotonics. Cambridge, 2010.
3. Poplavko Yu. M., Pereverzeva L. P., Raevsky I. P. [Physics of active dielectrics]. Rostov-on-Don, 2009 (in Russ.).
4. Rychkov Yu. M., Akimov A. I., Vasilevich A. E. [The electromagnetic wave propagation of the microwave range in controlled three-dimensional periodic structures]. *Dokl. Nats. akad. nauk Belarusi.* 2010. Vol. 54, No. 1. P. 50–53 (in Russ.).
5. Akimov A. I., Vasilevich A. E., Zaikova S. A. [Features of distribution of electromagnetic waves of the microwave range in periodic structures]. *Dokl. Nats. akad. nauk Belarusi.* 2009. Vol. 53, No. 3. P. 50–53 (in Russ.).
6. Shestopalov V. P., Litvinenko L. N., Masalov S. A., et al. [Diffraction of waves on lattices]. Kharkov, 1973 (in Russ.).
7. Zaerko D. V., Gaida L. S., Svistun A. Ch., et al. [Simulation of scattering of the microwave-range electromagnetic radiation by the structures with variable electrophysical parameters]. *Vestnik BGU. Ser. 1, Fiz. Mat. Inform.* 2016. No. 3. P. 90–96 (in Russ.).
8. Amitay N., Galindo V., Vu Ch., et al. [Theory and analysis of phased array antennas]. Moscow, 1974 (in Russ.).
9. Zaerko D. V., Gaida L. S. [The modeling of electromagnetic waves scattering with microwave range in the complex structured and equidistant structures with adjustable electro-physical parameters]. *Vesnik Grodzenskaga dzjarzhavnaga universitjeta imja Janki Kupaly. Ser. 2, Matjematyka. Fizika. Infarmatyka, vylichal'naja tjehnika i wprawlenne.* 2016. Vol. 6, No. 2. P. 64–69 (in Russ.).
10. Zaerko D. V., Hatsuk D. V., Samorodov A. P., et al. [Modeling the propagation of microwave radiation in structured dielectric systems]. *Innovatsii v nauke* [Innovations in science] : a collection of articles on the mater. of LVI Intern. scientific and practical conf. (Novosibirsk, 27 April, 2016). Novosibirsk, 2016. P. 64–69 (in Russ.).
11. Yariv A., Yuh P. [Optical waves in crystals]. Moscow, 1987 (in Russ.).

Статья поступила в редколлегию 19.05.2017.
Received by editorial board 19.05.2017.

УДК 538.9

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА КВАНТОВЫЕ ПОПРАВКИ К ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ УГЛЕРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ

В. А. ДОРОСИНЕЦ¹⁾, ХО ВЬЕТ¹⁾

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

Проведены экспериментальные исследования влияния электрического поля на квантовые поправки к классической электропроводности Друде для металлоуглеродных образцов путем измерения нелинейности вольт-амперных характеристик. Для повышения чувствительности и уменьшения вклада разогрева образца измерения проводились на переменном токе методом генерации комбинационных частот в нелинейных системах. Электропроводность исследованного образца соответствует переходу металл – диэлектрик, а на кривой температурной зависимости сопротивления $R(T)$ на постоянном токе имеется выраженный минимум в температурной области проявления квантовых поправок. Отсутствие такого же изгиба на температурной зависимости выходного сигнала на комбинированной частоте позволяет исключить разогрев образца в качестве причины нелинейности вольт-амперных характеристик. Показано, что нелинейность обусловлена влиянием электрического поля на эффекты слабой локализации и электрон-электронного взаимодействия. Сделано предположение, что основным механизмом влияния электрического поля является повышение температуры электронной системы относительно кристаллической решетки, что согласно теории модифицирует вклады в электропроводность одновременно обоих типов квантовых поправок, разделение вкладов которых возможно при приложении внешнего магнитного поля.

Ключевые слова: углерод; переход металл – диэлектрик; квантовая поправка; слабая локализация; электрон-электронное взаимодействие.

Образец цитирования:

Доросинец В. А., Хо Вьет. Влияние электрического поля на квантовые поправки к электропроводности углеродных материалов // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2017. № 3. С. 73–78.

For citation:

Dorosinets V. A., Ho Viet. Electric-field effect on quantum corrections to electric conductivity in carbon materials. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2017. No. 3. P. 73–78 (in Russ.).

Авторы:

Владимир Адамович Доросинец – кандидат физико-математических наук; ведущий научный сотрудник научно-исследовательской лаборатории физики электронных материалов кафедры полупроводников и нанoeлектроники физического факультета.

Хо Вьет – аспирант кафедры физики полупроводников и нанoeлектроники физического факультета. Научный руководитель – кандидат физико-математических наук В. К. Ксенович.

Authors:

Vladimir Dorosinets, PhD (physics and mathematics); leading researcher at the research laboratory of physics of electronic materials, department of semiconductor physics and nanoelectronics, faculty of physics.
dorosinets@bsu.by

Ho Viet, postgraduate student at the department of semiconductor physics and nanoelectronics, faculty of physics.
hviet@hueic.edu.vn

ELECTRIC-FIELD EFFECT ON QUANTUM CORRECTIONS TO ELECTRIC CONDUCTIVITY IN CARBON MATERIALS

V. A. DOROSINETS^a, HO VIET^a

^aBelarusian State University, Niezaliežnasci Avenue, 4, 220030, Minsk, Belarus

Corresponding author: V. A. Dorosinets (dorosinets@bsu.by)

The electric field influence on quantum corrections to the classical Drude theory for metal-carbon samples has been estimated by means of experimental investigations of nonlinearities of the current-voltage characteristics. In order to increase the measurement sensitivity and to eliminate sample heating, the measurements were performed in ac-regime by a method of the combinatoric frequency generation in nonlinear systems. The conductivity of the sample represented corresponds to the metal – insulator transition; the dc-resistivity to temperature $R(T)$ curve exhibits a pronounced minimum in the temperature range, where the quantum corrections take place. The absence of the corresponding bending for the temperature dependence of the output signal on the combination frequency enables one to exclude sample heating as a reason for the nonlinearity. It was shown that the nonlinearity is caused by the electric field influence on both the weak localization and electron-electron interaction effects. It was suggested that the main mechanism of the electric field effect is the electronic system overheating relative to the crystal temperature that, according to the theory, modifies contributions to the electric conductivity for both types of quantum corrections. Application of an external magnetic field might be of use for separation of these contributions.

Key words: carbon; metal – insulator transition; quantum correction; weak localization; electron-electron interaction.

Введение

Для описания электропроводности материалов в области перехода металл – диэлектрик используются квантовые поправки к классической теории Друде, учитывающие эффекты слабой локализации (WL) и электрон-электронного взаимодействия (ЕЕI). В работе [1] эти поправки впервые применялись для объяснения отрицательного температурного коэффициента сопротивления в пироуглероде, полученном пиролизом метана на подложке из графита. Для исследованных образцов была характерна турбостратная структура, характеризующаяся случайной упаковкой плоскостей графена и увеличенным по сравнению с графитом значением расстояния между плоскостями. В целях получения углеродных материалов с электропроводностью, соответствующей переходу металл – диэлектрик, требовалась температура синтеза вплоть до 2800 °С. В работах [2; 3] для получения объектов на основе углерода с аналогичными характеристиками был разработан метод термообработки карбоксилированной целлюлозы после замены в ней протонов СООН-групп на катионы кобальта путем ионообменной сорбции. Образующиеся при термообработке наночастицы кобальта выполняли роль катализатора формирования графеновых плоскостей, что позволило понизить температуру синтеза композитных металлоуглеродных образцов С(Со) до 900 °С. Предложенный метод обеспечил получение серии образцов для плавного сканирования перехода металл – диэлектрик. Образцы для исследований представляют собой углеродную матрицу с турбостратной структурой, содержат изолированные наночастицы кобальта, причем электропроводность образцов определяется матрицей, а не туннелированием электронов между металлическими наночастицами [3].

Нормированные температурные зависимости электропроводности $\sigma(T)$ для четырех образцов С(Со) представлены на рис. 1. Вид этих зависимостей значительно меняется при небольшом изменении абсолютных значений электропроводности при температуре 4,2 К от типичного для металла (см. рис. 1, кривая 1) до типичного для диэлектрика (см. рис. 1, кривая 4). Анализ кривых позволяет сделать вывод об одновременном проявлении эффектов WL и ЕЕI в области низких температур для данной группы образцов, причем при низких температурах эффект WL носит двумерный характер, а ЕЕI – трехмерный [4]. Как следствие, зависимость электропроводности образцов может быть представлена в виде

$$\sigma(T) = \sigma_0 + \Delta\sigma_{\text{WL}}^{2\text{D}}(T) + \Delta\sigma_{\text{EEI}}^{3\text{D}}(T),$$

где σ_0 – вклад классической модели Друде; $\Delta\sigma_{\text{WL}}^{2\text{D}}$ – поправка за счет эффекта WL; $\Delta\sigma_{\text{EEI}}^{3\text{D}}$ – поправка за счет эффекта ЕЕI; индексы 2D и 3D характеризуют дву- и трехмерный характер электропроводности. Эти выводы совпадают с выводами работы [5], в которой для получения углеродных пленок с электропроводностью вблизи перехода металл – диэлектрик использовался метод имплантации полимерных пленок.

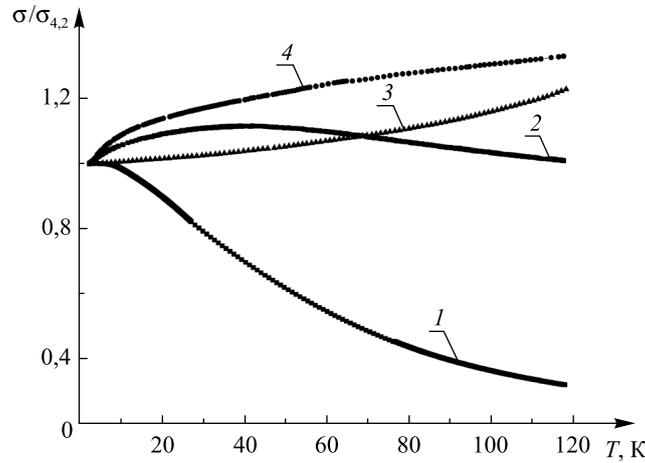


Рис. 1. Температурная зависимость электропроводности, нормированной к значению $T = 4,2$ К четырех образцов C(Co) (1, 2, 3, 4), соответствующих переходу (в последовательности 1–2–3–4) от металлического типа электропроводности к диэлектрическому

Fig. 1. Temperature dependence of the electric conductivity normalized to the value at $T = 4.2$ K for four C(Co)-samples (1, 2, 3, 4) corresponding to a continuous transition from the metallic- to the insulator-type electric conductivity (in sequence 1–2–3–4) for C(Co)-samples

Существуют теоретические и экспериментальные работы о влиянии температуры и магнитного поля на проявление эффектов WL и EEI [6], в то же время в вопросе влияния электрического поля на данные эффекты имеются противоречивые выводы в теоретических работах при почти полном отсутствии убедительных экспериментальных работ. В основном это обусловлено неоднозначностью, связанной с малостью эффекта и возможностью разогрева образцов при измерении вольт-амперных характеристик (ВАХ). Для восполнения этого пробела в настоящей работе приводятся результаты экспериментального исследования нелинейности ВАХ для образцов C(Co) и анализа механизмов, определяющих ее.

Метод исследования

Для исследования малых отклонений от линейности ВАХ образцов нами был применен метод смешивания частот в нелинейных системах [7], позволяющий проводить измерения на переменном токе при малых значениях амплитуды сигналов, чтобы исключить разогрев образцов, и в то же время обладающий повышенной чувствительностью по сравнению с прямым измерением на постоянном токе.

В общем случае при приложении к нелинейному элементу гармонического сигнала с частотой ω_1 в спектре выходного тока появятся компоненты с частотами $\omega_1, 2\omega_1, 3\omega_1$ и т. д. Для компонентов тока на частоте ω_1 , имеющей наибольшую амплитуду, ВАХ может быть представлена в виде ряда

$$j = \sigma_0 (1 + \beta E^2 + \nu E^4 + \dots) E, \quad (1)$$

где j – плотность тока; σ_0 – электропроводность; E – напряженность электрического поля; β – коэффициент нелинейности. В настоящей работе ограничимся только первыми двумя членами ряда (1), тогда последнее выражение переписется в виде

$$j = \sigma_0 (1 + \beta E^2) E. \quad (2)$$

В эксперименте использовалась схема генерации комбинационных частот в нелинейных цепях при пропускании двух гармонических сигналов с частотами ω_1 и ω_2 , когда сопротивление образца для второго сигнала периодически изменяется нелинейным образом под воздействием сигнала с большей амплитудой. Для случая, описываемого формулой (2), в спектре выходного сигнала появляется низкочастотная компонента с частотой $\Delta\omega$, равной $\omega_1 - 2\omega_2$. Для измерений использовались сигналы с частотами $\omega_1 = 2,003$ МГц и $\omega_2 = 1$ МГц, регистрация осуществлялась на низкой частоте $\omega_m = \Delta\omega = 3$ кГц, что позволяло избежать влияния высокочастотных сигналов на точность измерения. Согласно теории [7] амплитуда выходного сигнала на разностной частоте ω_m прямо пропорциональна коэффициенту нелинейности вольт-амперной характеристики образца β и выражается соотношением

$$U_m = \frac{3}{4} \beta U_1^2 U_2,$$

где U_1 и U_2 – амплитуды приложенных сигналов соответственно.

Результаты экспериментов и их обсуждение

Приводятся результаты исследования образца 2, для которого экспериментальная кривая $\sigma(T)$, отдельно представленная на рис. 2, а, характеризуется наличием перегиба приблизительно при температуре $T = 41$ К. Экспериментальная кривая зависимости амплитуды выходного сигнала с частотой ω_m как функция температуры приведена на рис. 2, б. В таблице даны значения электропроводности образца для ряда температур, рассчитанные из измерения температурной зависимости сопротивления на постоянном токе, и значения параметра β для этих температур. На рис. 3 представлены соответствующие этим параметрам рассчитанные идеальные ВАХ образца на постоянном токе в предположении отсутствия зависимости β от напряженности электрического поля и разогрева образца для температур 4,2; 2,0; 40,0; 60,0 К.

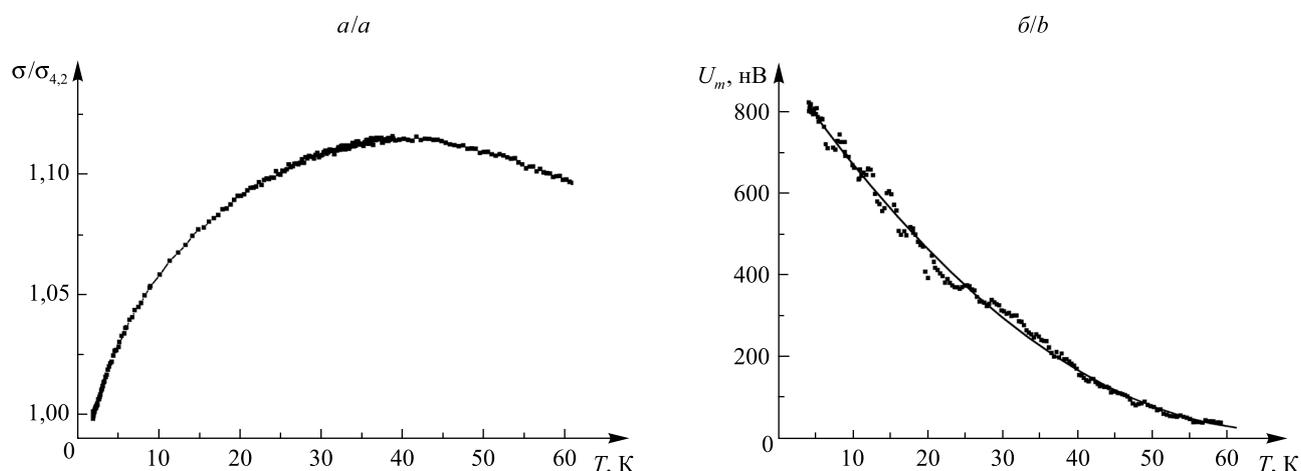


Рис. 2. Температурная зависимость нормированной электропроводности образца 2 C(Co) (а); амплитуда выходного сигнала этого образца на частоте $\omega_m = \omega_1 - 2\omega_2$ (экспериментальные точки и аппроксимационная кривая) (б)

Fig. 2. Temperature dependence of the normalized electric conductivity for the C(Co)-sample 2 (а); corresponding output signal amplitude for the frequency $\omega_m = \omega_1 - 2\omega_2$ (experimental points and approximation curve) (b)

Результаты расчета параметров σ , β для ряда температур The parameters σ , β calculated at different temperatures

T , К	$\sigma \cdot 10^2$, Ом ⁻¹ · м ⁻¹	β , 1/мВ ²
4,2	90	0,050
20,0	103	0,020
40,0	120	0,007
60,0	156	0,002

Образец 2 был выбран для исследования, поскольку обладает отрицательным значением температурного коэффициента сопротивления при умеренных температурах и положительным значением – при низких. Вследствие этого в случае разогрева образца при приложении измерительных сигналов его ВАХ должна была иметь суперлинейный характер для низких температур и сублинейный – для высоких. Согласно результатам измерений, приведенных на рис. 2, б, для амплитуды сигнала на комбинационной частоте ω_m и, соответственно, параметра β характерно плавное уменьшение с повышением температуры без особенностей в области изменения знака температурного коэффициента сопротивления. Суперлинейный характер рассчитанных ВАХ образца 2 во всем представляющем интерес температурном интервале $4,2 \text{ К} \leq T \leq 60 \text{ К}$ исключает разогрев образцов для предложенного метода исследования нелинейности на комбинационной частоте. В результате можно заключить, что наблюдаемая нелинейность ВАХ в образце C(Co) вблизи перехода металл – диэлектрик связана непосредственно с влиянием электрического поля на проявление эффектов WL и EEI.

В работе [1] обосновывалось отсутствие непосредственного влияния электрического поля на WL, поскольку оно не нарушает симметрию по отношению к обращению времени. Напротив, в [8] рассматривалась возможность такого влияния за счет модификации электрическим полем электронных состояний носителей заряда.

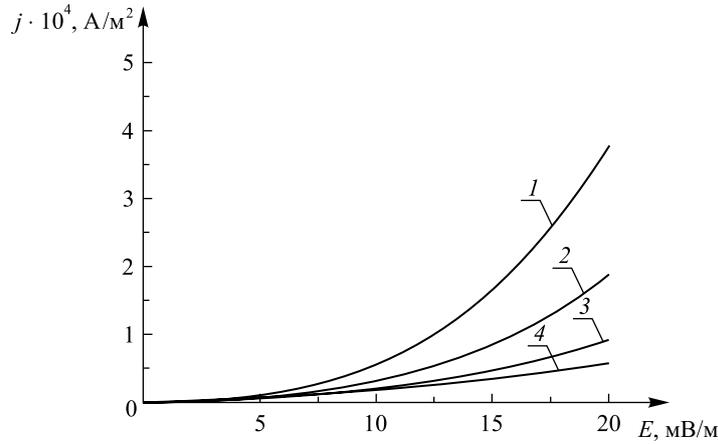


Рис. 3. Зависимости удельного тока j от напряженности электрического поля E для образца 2 C(Co) на постоянном токе для температур (T , K):
1 – 4,2; 2 – 20,0; 3 – 40,0; 4 – 60,0

Fig. 3. The calculated dc current density j to electric field strength E dependences for C(Co) sample 2 at different temperatures (T , K):
1 – 4.2; 2 – 20.0; 3 – 40.0; 4 – 60.0

Данный эффект возможен при условии, что энергия, приобретаемая электронами на длине l между двумя упругими рассеяниями на примесях, превышает величину уширения энергетических уровней, вызванную беспорядком и составляющую значение порядка $\frac{\hbar}{\tau}$, где \hbar – постоянная Планка; τ – постоянная времени упругого рассеяния. При отбрасывании множителя порядка 1 это условие имеет вид $eEl > \frac{\hbar}{\tau}$, где e – заряд электрона; E – напряженность электрического поля. При подстановке типичных значений для τ и использованных в эксперименте значений напряженности электрического поля для выполнения рассматриваемого неравенства значение l должно превышать 1 мм, что лишено смысла, поскольку согласно расчетам длина сбоя фазы волновой функции L_f для исследованных образцов составляет порядка 100 нм [5], а для наблюдения эффекта слабой локализации должны осуществляться многократные упругие рассеяния электрона на дефектах, что возможно только при выполнении условия $l \ll L_f$.

Второй возможной причиной отклонения от линейного поведения может быть вызванное электрическим полем повышение температуры электронной подсистемы относительно температуры кристаллической решетки. С учетом уравнения термического равновесия в режиме электронного разогрева отличие температур электронной и фононной систем образца описывается выражением [8]

$$(k_B T_e)^2 = (k_B T_{ph})^2 + \frac{6}{\pi^2} (eE)^2 D \tau_{e-ph},$$

где k_B – постоянная Больцмана; D – коэффициент диффузии; τ_{e-ph} – время электрон-фононного рассеяния. Полагая, что D равен 0,5 см²/с для углеродных материалов вблизи перехода металл – диэлектрик [5], а для τ_{e-ph} приводимые в литературе значения для грязных металлов составляют 10⁻⁹–10⁻¹² с в интервале температур от 4,2 до 60,0 К [9], можно оценить порядок разогрева электронов. Так, для $T = 4,2$ К разогрев электронов может лежать в интервале 0,1–1,0 К для напряженности электрического поля порядка 1 В/см. При повышении температуры рассогласование температур уменьшается, вследствие чего коэффициент β должен уменьшаться, что и наблюдается в эксперименте.

Поправка, обусловленная электрон-электронным взаимодействием для трехмерного случая, описывается выражением [6]

$$\Delta\sigma_{EEI}^{3D}(T) = \frac{e^2}{4\pi^2 \hbar} \frac{1,3}{\sqrt{2}} \left(\frac{4}{3} - \frac{3}{2} F \right) \sqrt{\frac{k_B T}{\hbar D}},$$

где F – степень электронного экранирования. Для случая сильного электронного экранирования, имеющего место в упорядоченных металлах, $F \approx 1$, тогда как при слабом экранировании, что характерно для сильно локализованных систем, $F \approx 0$. В [9] сделано предположение о возможности увеличения коэффициента F от минимального значения до 1 при последовательном повышении температуры электронной системы при приложении электрического поля. Возможной причиной смещения к металлическому

типу экранирования может быть обмен виртуальными электронами в диффузионном канале, который становится более интенсивным при разогреве электронов из-за доплеровского смещения частоты виртуальных фононов [9].

Согласно [10] разогрев электронной системы в электрическом поле сказывается и на проявлении эффекта слабой локализации за счет изменения электрон-фононного взаимодействия разогретых электронов. Результатом разогрева электронов являются уширение электронных уровней и их смещение, уменьшение времени неупругого рассеяния носителей заряда и, как следствие, длины Таулеса, что, в свою очередь, приводит к снижению величины квантовой поправки.

Заключение

Экспериментальное наблюдение нелинейной зависимости электропроводности от напряженности электрического поля для углеродных материалов в температурной области наблюдения квантовых поправок (WL и EEI) подтверждает выводы, сделанные в теоретических работах о влиянии электрического поля на проявление этих поправок. Предложенный метод генерации сигнала на комбинационной частоте при смешивании двух гармонических сигналов на нелинейном элементе позволил исключить разогрев образцов в качестве причины нелинейности их ВАХ и определить порядок изменения значений поправок в электрическом поле. Разделение вкладов в изменение электропроводности от эффектов WL и EEI возможно при проведении измерений во внешнем магнитном поле в широком интервале значений магнитной индукции, поскольку влияние магнитного поля существенно для эффекта WL и пренебрежительно при умеренных значениях индукции магнитного поля для эффекта EEI.

Библиографические ссылки

1. Bayot V., Piraux L., Michenaud J.-P., et al. Weak localization in pregraphitic carbon fibers // *Phys. Rev. B*. 1989. Vol. 40, № 6. P. 3514–3523.
2. Башмаков И. А., Доросинец В. А., Лукашевич М. Г. и др. Получение и электрофизические свойства кобальтосодержащих углеродных волокон // *Физика твердого тела*. 2002. Т. 44, № 9. С. 1614–1621.
3. Bashmakov I. A., Dorosinets V. A., Lukashevich M. G., et al. Preparation, structure, and magnetic properties of cobalt nanoparticles in carbon fibers // *J. Mat. Res.* 2001. Vol. 16, № 10. P. 2832–2835.
4. Dorosinets V. A., Ksenevich V. K., Seliuta D., et al. Investigation of Quantum Effects in Carbonaceous Materials Near the Metal – Insulator Transition by Means of THz Photoconductivity // *Acta Phys. Polonica A*. 2008. Vol. 113, № 3. P. 875–879.
5. Du G., Prigodin V. N., Burns A., et al. Unusual semimetallic behavior of carbonized ion-implanted polymers // *Phys. Rev. B*. 1998. Vol. 58, № 8. P. 4485–4495.
6. Гантмахер В. Ф. Электроны в неупорядоченных средах. М., 2013.
7. Атабеков Г. И., Купалян С. Д., Тимофеев А. Б. и др. Нелинейные электрические цепи. Электромагнитное поле. М., 1979.
8. Lei X. L., Cai J. Investigation of the electric-field effect on weak localization using the balance-equation approach // *Phys. Rev. B*. 1990. Vol. 42, № 3. P. 1574–1581.
9. Kashirin V. Y., Komnik Y. F. Electron-electron interaction in thin bismuth films // *Phys. Rev. B*. 1994. Vol. 50, № 23. P. 16845–16850.
10. Anderson P. W., Abrahams E., Ramakrishnan T. V. Possible Explanation of Nonlinear Conductivity in Thin-Film Metal Wires // *Phys. Rev. Lett.* 1979. Vol. 43, № 10. P. 718–720.

References

1. Bayot V., Piraux L., Michenaud J.-P., et al. Weak localization in pregraphitic carbon fibers. *Phys. Rev. B*. 1989. Vol. 40, No. 6. P. 3514–3523
2. Bashmakov I. A., Dorosinets V. A., Lukashevich M. G., et al. [Preparation and electrical properties of cobalt-containing carbon fibers]. *Fiz. tverd. tela*. 2002. Vol. 44, No. 9. P. 1614–1621 (in Russ.).
3. Bashmakov I. A., Dorosinets V. A., Lukashevich M. G., et al. Preparation, structure, and magnetic properties of cobalt nanoparticles in carbon fibers. *J. Mat. Res.* 2001. Vol. 16, No. 10. P. 2832–2835.
4. Dorosinets V. A., Ksenevich V. K., Seliuta D., et al. Investigation of Quantum Effects in Carbonaceous Materials Near the Metal – Insulator Transition by Means of THz Photoconductivity. *Acta Phys. Polonica A*. 2008. Vol. 113, No. 3. P. 875–879.
5. Du G., Prigodin V. N., Burns A., et al. Unusual semimetallic behavior of carbonized ion-implanted polymers. *Phys. Rev. B*. 1998. Vol. 58, No. 8. P. 4485–4495.
6. Gantmacher V. F. [Electrons in disordered media]. Moscow, 2013 (in Russ.).
7. Atabekov G. I., Kupaljan S. D., Timofeev A. B., et al. [Nonlinear electric circuits. Electromagnetic field]. Moscow, 1979 (in Russ.).
8. Lei X. L., Cai J. Investigation of the electric-field effect on weak localization using the balance-equation approach. *Phys. Rev. B*. 1990. Vol. 42, No. 3. P. 1574–1581.
9. Kashirin V. Y., Komnik Y. F. Electron-electron interaction in thin bismuth films. *Phys. Rev. B*. 1994. Vol. 50, No. 23. P. 16845–16850.
10. Anderson P. W., Abrahams E., Ramakrishnan T. V. Possible Explanation of Nonlinear Conductivity in Thin-Film Metal Wires. *Phys. Rev. Lett.* 1979. Vol. 43, No. 10. P. 718–720.

Статья поступила в редакцию 13.04.2017.
Received by editorial board 13.04.2017.

ФИЗИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ В ЛАЗЕРНОМ ИСТОЧНИКЕ ИОНОВ АЛЮМИНИЯ С УПРАВЛЯЕМОЙ ЭНЕРГИЕЙ ДЛЯ НАНЕСЕНИЯ НАНОПЛЕНОК

В. К. ГОНЧАРОВ¹⁾, М. В. ПУЗЫРЕВ¹⁾, В. Ю. СТУПАКЕВИЧ²⁾

¹⁾НИУ «Институт прикладных физических проблем им. А. Н. Севченко» БГУ,
ул. Курчатова, 7, 220108, г. Минск, Беларусь

²⁾Гродненский государственный университет им. Янки Купалы,
ул. Ожешко, 22, 230023, г. Гродно, Беларусь

Рассмотрены физические процессы в лазерном источнике ионов алюминия для нанесения нанопленок. Обоснована электрическая схема источника ионов с двумя независимыми друг от друга источниками питания. Ионный источник представляет собой мишень и воздействующее на нее лазерное излучение, подложку и сетку, расположенные между ними. Заряженные частицы (электроны и ионы) из эрозионного лазерного факела движутся на подложку, на которую осаждается нанопленка за счет потока ионов алюминия. Методом контроля электронного и ионного токов экспериментально найдены условия, при которых после сетки на подложку движутся заряженные частицы, преимущественно в виде ионов. Проведены исследования временных характеристик ионных потоков в промежутке сетка – подложка при разных постоянных положительных потенциалах сетки по отношению к подложке и различных плотностях мощности воздействующего лазерного излучения. В наших экспериментах расстояние мишень – сетка составило 6 см, расстояние сетка – подложка равнялось 6 см, прозрачность сетки – 86 %. В качестве материала лазерной мишени использовался алюминий марки А7. Плотность мощности лазерного излучения изменялась в интервале (от 2,54 до 5,41) · 10⁸ Вт/см². Показано, что технологическими режимами осаждения нанопленок можно управлять с помощью положительного потенциала на сетке по отношению к подложке, изменяя величину ионного потока на подложку и его длительность. Кроме того, режимами осаждения нанопленок можно управлять, изменяя плотность мощности воздействующего лазерного излучения и сопротивление утечки зарядов с подложки.

Ключевые слова: эрозионная лазерная плазма; алюминиевая мишень; плазменный источник ионов.

Образец цитирования:

Гончаров В. К., Пузырев М. В., Ступакевич В. Ю. Физические процессы в лазерном источнике ионов алюминия с управляемой энергией для нанесения нанопленок // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2017. № 3. С. 79–87.

For citation:

Goncharov V. K., Puzyrev M. V., Stupakevich V. Y. Physical processes in a laser source of aluminum ions with the controlled energy for nanofilm deposition. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2017. No. 3. P. 79–87 (in Russ.).

Авторы:

Виктор Константинович Гончаров – доктор физико-математических наук, профессор; заведующий лабораторией лазерной плазменной динамики.

Михаил Валентинович Пузырев – кандидат физико-математических наук, доцент; ведущий научный сотрудник лаборатории лазерной плазменной динамики.

Валерий Юзефович Ступакевич – старший преподаватель кафедры информационных систем и технологий физико-технического факультета.

Authors:

Victor Goncharov, doctor of science (physics and mathematics), full professor; head of the laboratory of laser plasma dynamics.

Mikhail Puzyrev, PhD (physics and mathematics), docent; leading researcher of the laboratory of laser plasma dynamics.
puzyrev@bsu.by

Valery Stupakevich, senior lecturer at the department of information systems and technologies, physico-technical faculty.
tv_sad@grsu.by

PHYSICAL PROCESSES IN A LASER SOURCE OF ALUMINUM IONS WITH THE CONTROLLED ENERGY FOR NANOFILM DEPOSITION

V. K. GONCHAROV^a, M. V. PUZYREV^a, V. Y. STUPAKEVICH^b

^aA. N. Sevchenko Institute of Applied Physical Problems, Belarusian State University,
Kurčatava Street, 7, 220108, Minsk, Belarus

^bYanka Kupala State University of Grodno, Ažėška Street, 22, 230023, Grodno, Belarus

Corresponding author: M. V. Puzyrev (puzyrev@bsu.by)

The physical processes in a laser source of aluminum ions for deposition of nanofilms have been considered. The electric scheme of an ion source with two power supplies has been substantiated. Power supplies were independent of each other. The ion source represented a target that was exposed to the effect of laser radiation, the substrate and a grid located between them. From the erosive laser plume, the charged particles (electrons and ions) moved to the substrate. Aluminum nanofilm was formed on the substrate due to the flux of aluminum ions. The conditions under which the charged particles moving to the substrate after the grid were represented mainly by ions have been found experimentally. The time characteristics of the ion flux within the grid-substrate space have been determined at various constant positive potentials of the grid with respect to the substrate and at several power densities of laser radiation. In our experiments, the target-grid distance was 6 cm, the grid-substrate distance was 6 cm, the grid transparency was 86 %. The laser target was made of aluminum (Al 1070). The power density of laser radiation was varying as (from 2.54 to 5.41) · 10⁸ W/cm². It has been shown that the technological regimes of nanofilm deposition may be controlled using a positive potential at the grid relative to the substrate by changes in the ion flux to the substrate and in its duration. Besides, deposition of nanofilms may be controlled by changes in the power density of laser radiation and by resistance of the charge leakage from the substrate.

Key words: erosive laser plasma; aluminum target; plasma ion source.

Введение

При достижении веществом размеров хотя бы по одной координате 100 нм и менее [1] оно приобретает свойства наноматериалов, которые изменяют свои характеристики по сравнению с массивными образцами не только в зависимости от физических свойств вещества, но и от размеров. В настоящее время многие модификации различных материалов включают в себя тонкопленочные покрытия толщиной 100 нм и менее вплоть до нескольких нанометров. Характеристики таких покрытий можно менять, варьируя их толщину. По функциональному назначению такие покрытия связаны практически со всеми разделами физики – механикой, электричеством, магнетизмом и оптикой.

Одним из методов нанесения нанопленок на различные материалы (подложки) является лазерно-плазменный [2; 3]. Он имеет несколько преимуществ перед другими методами. Во-первых, это возможность получать плазму практически из любого вещества, во-вторых, – стерильность, т. е. при нанесении пленок в вакууме лазерное излучение не вносит дополнительных примесей в осаждаемое покрытие. Кроме того, лазерно-плазменный метод позволяет относительно легко автоматизировать процесс нанесения пленок.

Для изменения режимов нанесения пленок лазерно-плазменным методом варьировали плотность мощности воздействующего на мишень лазерного излучения и расстояния от лазерной мишени до подложки. Это несколько затрудняет автоматизацию процесса ввиду сложной пространственной структуры эрозионного лазерного факела в вакууме [4]. В [5] был предложен лазерно-плазменный источник ионов с регулируемой энергией для создания пленок, в котором для нанесения покрытий используется поток ионов из эрозионного лазерного факела. В этом источнике с помощью воздействия лазерного излучения на мишень получается плазма. Между источником плазмы (лазерной мишенью) и подложкой, где происходит осаждение пленки, помещается сетка, на которую подается отрицательный потенциал по отношению к мишени, и от сетки к подложке идет поток преимущественно из ионов. Подавая на сетку различный положительный потенциал по отношению к подложке, можно легко регулировать энергию ионов для создания пленок на различные подложки и тем самым управлять технологическими режимами нанесения покрытий. В [5] рассмотрены некоторые физические процессы в промежутке мишень – сетка для графитовой мишени. Однако сложные плазодинамические процессы в таком источнике ионов изучены недостаточно полно.

Цель настоящей работы – исследовать физические процессы в лазерно-плазменном источнике ионов алюминия с регулируемой энергией для нанесения нанопленок.

Экспериментальное оборудование

Для воздействия на мишень был использован YAG : Nd³⁺-лазер LS-2137 фирмы «ЛОТИС ТИИ» (Беларусь) с длиной волны λ , равной 1064 нм, и длительностью импульса на полувысоте $\tau = 20$ нс. Мишень устанавливалась под углом 45° к оси лазерного луча. Эксперименты проводились в вакууме при давлении остаточных газов, равном приблизительно 10^{-3} Па. Мишень вращалась со скоростью 2 об/мин, чтобы предотвратить образование глубокого кратера на поверхности мишени, что может сказаться на пространственной форме эрозионного факела; она была изготовлена из технически чистого алюминия марки А7. Контроль временных характеристик проводился с помощью осциллографа Tektronix TDS 2022В (США).

Результаты экспериментов и их обсуждение

Общая схема эксперимента представлена на рис. 1. Взаимное расположение мишени, сетки, подложки и лазерного луча значительно зависит от объема и формы вакуумной камеры. В настоящих экспериментах расстояние мишень – подложка составляло 12 см, а сетка располагалась между ними, т. е. на расстоянии 6 см от поверхности мишени.

Это расстояние определяется некоторыми факторами, в частности формированием в эрозионном лазерном факеле двойного электрического слоя, и способом подвода энергии лазерного излучения к поверхности мишени. В [6] проведены зондовые измерения потенциалов в эрозионном лазерном факеле, сформированном в вакууме. Было показано, что уже на расстоянии 2,5 см от поверхности мишени формируется двойной электрический слой, когда удобно разделять электронные и ионные потоки. Расположить сетку ближе чем на 2,5 см к поверхности мишени затрудняет подвод лазерного излучения к мишени.

В условиях экспериментов [6] достаточно было подать на сетку отрицательный потенциал 5 В, чтобы после сетки поток заряженных частиц состоял преимущественно из ионов. При увеличении расстояния мишень – сетка до 6 см достаточно было подать на сетку 10 В.

Однако все эксперименты проводились с небольшой плотностью мощности воздействующего излучения. В настоящей работе ставилась задача провести исследования при максимально возможных в наших условиях плотностях мощности лазерного излучения. При этом в эрозионном лазерном факеле увеличиваются концентрация заряженных частиц и их первоначальные скорости, двойной электрический слой может сформироваться позже, и поэтому расстояние мишень – сетка было увеличено до 6 см. Расстояние мишень – подложка влияет на размер площади наносимой пленки. В нашем случае оно ограничивается размерами камеры. При расстоянии мишень – подложка, равном 12 см, удается нанести равномерную пленку размером $\sim 5 \times 5$ см.

Формирование ионного потока в промежутке сетка – подложка при подаче тормозящего потенциала для электронов лазерной плазмы на сетку рассматривалось в нескольких вариантах: заземленная мишень, заземленная подложка и заземленная сетка. В результате экспериментов и анализа их результатов авторы пришли к выводу, что наиболее приемлемым вариантом при этом является вариант с заземленной сеткой. В других случаях имеется динамическая связь процессов, происходящих в промежутках мишень – сетка и сетка – подложка.

Таким образом, была обоснована электрическая схема лазерно-плазменного источника ионов с регулируемой энергией, представленная на рис. 1.

Сопротивления величиной 390 Ом, изображенные на рис. 1, являются сопротивлениями как нагрузки, с которых снимаются сигналы на осциллографы (ОСЦ1 и ОСЦ2), так и утечки зарядов с мишени и подложки.

Анализ эквивалентной схемы (см. рис. 1) показал, что при любых физических процессах в промежутках мишень – сетка и сетка – подложка независимо от подаваемых напряжений U_1 и U_2 источники питания автономны.

Первоначально был рассмотрен вариант, когда на сетку по отношению к лазерной мишени подавался различный отрицательный потенциал U_1 , а на промежуток сетка – подложка потенциал не подавался, т. е. $U_2 = 0$. Результаты эксперимента приведены на рис. 2.

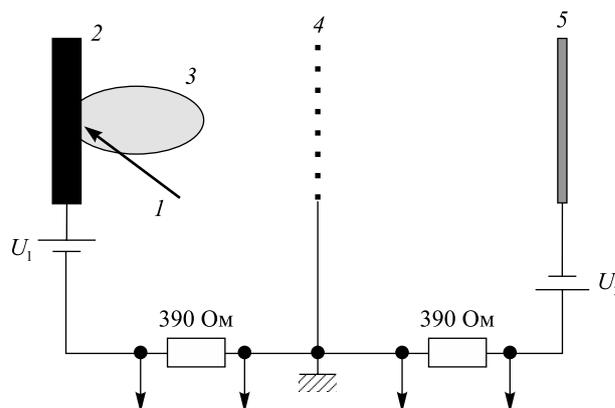


Рис. 1. Схема эксперимента:

1 – лазерное излучение; 2 – алюминиевая мишень; 3 – эрозионный факел; 4 – сетка; 5 – подложка

Fig. 1. Experimental scheme: 1 – laser radiation; 2 – aluminum target; 3 – erosive plume; 4 – grid; 5 – substrate

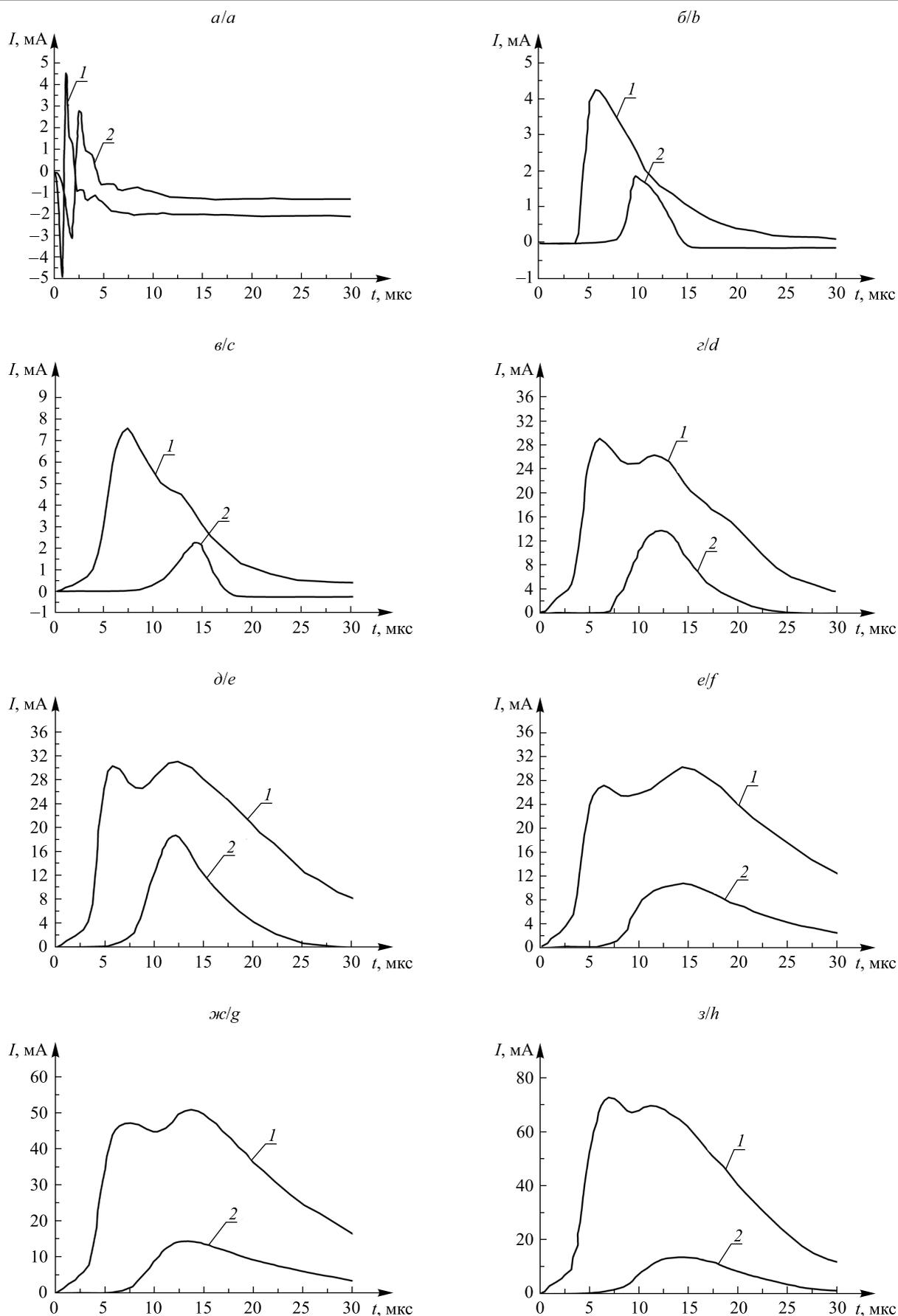


Рис. 2. Зависимость тока (I) сетки (1) и подложки (2) от потенциала между сеткой (-) и мишенью (+):
а - 0 В; б - 10; в - 20; г - 30; д - 50; е - 100; ж - 200; з - 400 В

Fig. 2. The grid (1) and substrate (2) current (I) as a function of the potential between the grid (-) and the target (+):
а - 0 V; б - 10; в - 20; г - 30; д - 50; е - 100; ж - 200; з - 400 V

Если потенциал на сетке по отношению к мишени $U_1 = 0$, то на сетку приходят сначала более быстрые электроны, а затем более медленные ионы (см. рис. 2, а). На подложке при этом тоже сначала наблюдаются электроны, а затем приходят ионы.

При подаче на сетку напряжения, отрицательного по отношению к мишени, равного 10 В, электроны не доходят до сетки, и на ней регистрируется только положительный сигнал ионного тока (см. рис. 2, б). На подложке при этом фиксируется импульс ионного тока. В конце этого импульса наблюдается небольшой по амплитуде, но длительный импульс обратного тока ионов, отраженных от положительно заряженной подложки за счет ионов переднего фронта.

При подаче на сетку потенциала, отрицательного по отношению к мишени, равного 20 В, у сигнала на спаде появляется «горбинка» (см. рис. 2, в). Это связано с увеличением обратного тока электронов к мишени после прохождения ионами сеточного пространства и усилением отрицательного постоянного потенциала сетки по отношению к электронам в связи с уменьшением экранирующего действия ионами постоянного потенциала сетки. При этом на подложке наблюдается импульс ионного тока, у которого задняя часть срезана обратным током ионов по механизму, описанному выше.

В случае подачи на сетку потенциала, отрицательного по отношению к мишени, величиной 30 В обратный ток электронов возрастает (см. рис. 2, г) в связи с увеличением отрицательного потенциала на сетке при уменьшении экранировки сеточного потенциала после пролета ионов через сетку. При этом необходимо отметить, что все эти процессы (с обратным током электронов) происходят в промежутке сетка – мишень и никак не влияют на процессы в промежутке сетка – подложка.

При отрицательном потенциале 30 В ионы попадают на подложку с большей энергией, за счет этого исчезает отсечка ионного тока на подложку (см. рис. 2, г). В случае увеличения отрицательного потенциала до 50 В и более (см. рис. 2, д, е, ж, з) форма кривых объясняется вышесказанным.

Было показано, что в наших условиях при подаче отрицательного потенциала на сетку по отношению к мишени $U_1 = -10$ В поток заряженных частиц на подложку состоит преимущественно из ионов, поэтому следующие эксперименты проводились при таком потенциале на сетке по отношению к мишени. Со второго источника питания U_2 на сетку подавались различные потенциалы, положительные по отношению к подложке. Эти эксперименты проводились при плотности мощности воздействующего лазерного излучения $2,86 \cdot 10^8$ Вт/см². Их результаты приведены на рис. 3. Без подачи потенциала на сетку по отношению к подложке, т. е. $U_2 = 0$, первоначальный ионный поток определяется условиями (потенциалом) на сетке. Однако с течением времени на подложке по отношению к сетке появляется положительный потенциал за счет ионного тока и сигнал на подложке определяется как прямым током ионов, так и обратным. Через некоторое время ионы на подложке нейтрализуются через нагрузочное сопротивление и сигнал на подложке становится равным нулю (см. рис. 3, а, кривая 1).

При подаче на сетку по отношению к подложке потенциала 0,5 В отрицательная часть импульса подложки уменьшается (см. рис. 3, а, кривая 2). Это происходит за счет некоторого увеличения скорости ионов в промежутке сетка – подложка.

Если потенциал на сетке по отношению к подложке достигает 1 В, обратный ток ионов полностью исчезает (см. рис. 3, а, кривая 3).

В наших условиях при подаче на сетку отрицательного по отношению к подложке потенциала 1,5 В сигнал на подложке приобретает сложную форму (см. рис. 3, б, кривая 4). Первоначально он определяется потоком ионов, свободно летящих в ускоряющем отрицательном поле подложки. Затем за счет заряда подложки ионами происходит частичная экранировка постоянного отрицательного потенциала подложки и ионы уже летят с меньшей скоростью, чем первоначально: они скапливаются у поверхности подложки и происходят некоторая стабилизация процессов прихода ионов на подложку из промежутка сетка – подложка и нейтрализация заряда подложки через ее сопротивление (см. рис. 3, б, кривая 4).

Когда потенциал сетки по отношению к подложке достигает 2 В, ток во второй половине импульса увеличивается (см. рис. 3, б, кривая 5). Еще нагляднее это проявляется при потенциале на сетке по отношению к подложке 5 В (см. рис. 3, б, кривая 6) и потенциале 10 В (см. рис. 3, б, кривая 7).

При увеличении положительного потенциала на сетке по отношению к подложке до 20 и 30 В происходит такое ускорение ионов в промежутке сетка – подложка, что даже более медленные ионы ускоряются так, что достигают подложки. Импульс ионного тока в целом становится шире. Это происходит из-за влияния частичной экранировки постоянного потенциала подложки (см. рис. 3, б, кривая 8; рис. 3, в, кривая 9).

В случае увеличения потенциала сетки по отношению к подложке до 50 В заметной экранировки уже нет (см. рис. 3, в, кривая 10). Импульс ионного тока увеличивается по амплитуде, что хорошо видно при дальнейшем увеличении положительного потенциала сетки по отношению к подложке (см. рис. 3, в, кривые 11–13). Кроме того, на рис. 3 видно, что при увеличении постоянного положительного потенциала сетки по отношению к подложке скорость ионного потока увеличивается и ионы быстрее достигают подложки.

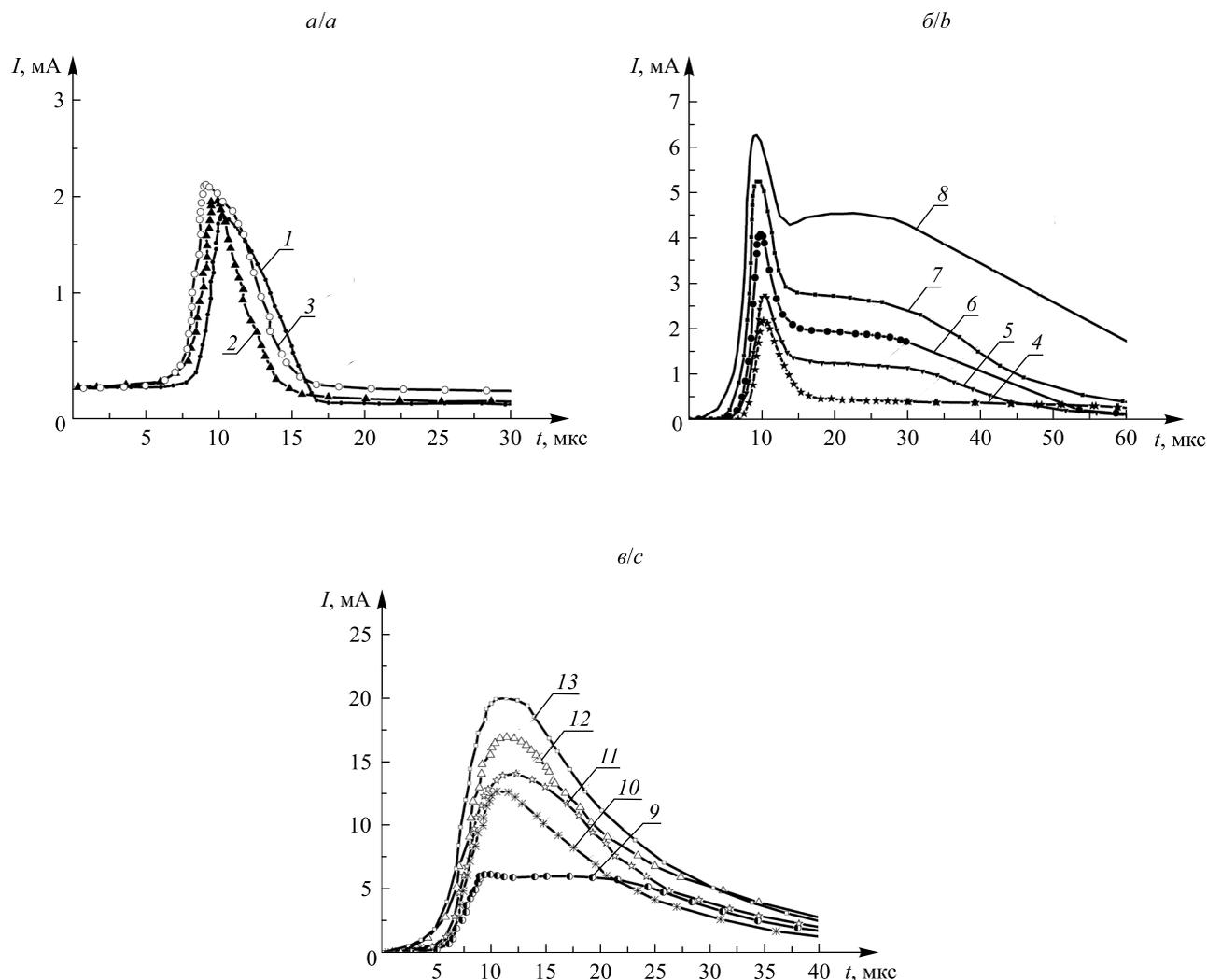


Рис. 3. Зависимость тока подложки от времени при различных положительных потенциалах сетки по отношению к подложке: 1 – 0 В; 2 – 0,5; 3 – 1; 4 – 1,5; 5 – 2; 6 – 5; 7 – 10; 8 – 20; 9 – 30; 10 – 50; 11 – 100; 12 – 200; 13 – 400 В. Промежуток сетка – мишень имеет постоянный отрицательный потенциал на сетке по отношению к мишени, равный 10 В

Fig. 3. The substrate current versus time at various positive potentials of the grid relative to the substrate: 1 – 0 V; 2 – 0.5; 3 – 1; 4 – 1.5; 5 – 2; 6 – 5; 7 – 10; 8 – 20; 9 – 30; 10 – 50; 11 – 100; 12 – 200; 13 – 400 V. The grid – target interval has a constant negative potential on the grid relative to the target 10 V

Эти эксперименты показали, что режимы нанесения пленок на подложки можно регулировать с помощью изменения положительного по отношению к подложке постоянного потенциала, подаваемого на сетку.

Все эти эксперименты были проведены при плотности мощности излучения $2,86 \cdot 10^8$ Вт/см². Однако при изменении плотности мощности воздействующего на мишень лазерного излучения меняются условия ионизации плазмы и, меняя концентрацию заряженных частиц, можно регулировать и режимы нанесения пленок на подложку. В связи с этим были проведены эксперименты с различной плотностью мощности воздействующего на мишень лазерного излучения.

Поскольку при больших плотностях мощности лазерного излучения увеличивается ионизация в плазме, то для задержки электронов в промежутке мишень – сетка было увеличено постоянное отрицательное напряжение, подаваемое на сетку, по отношению к мишени до 30 В.

Исследования проводились для трех различных положительных потенциалов на сетке по отношению к подложке: 50; 200 и 400 В. Такие измерения выполнялись при разных энергиях лазерного импульса: $2,54 \cdot 10^8$ Вт/см²; $2,86 \cdot 10^8$; $3,34 \cdot 10^8$; $3,66 \cdot 10^8$; $5,41 \cdot 10^8$ Вт/см².

Результаты экспериментов приведены на рис. 4.

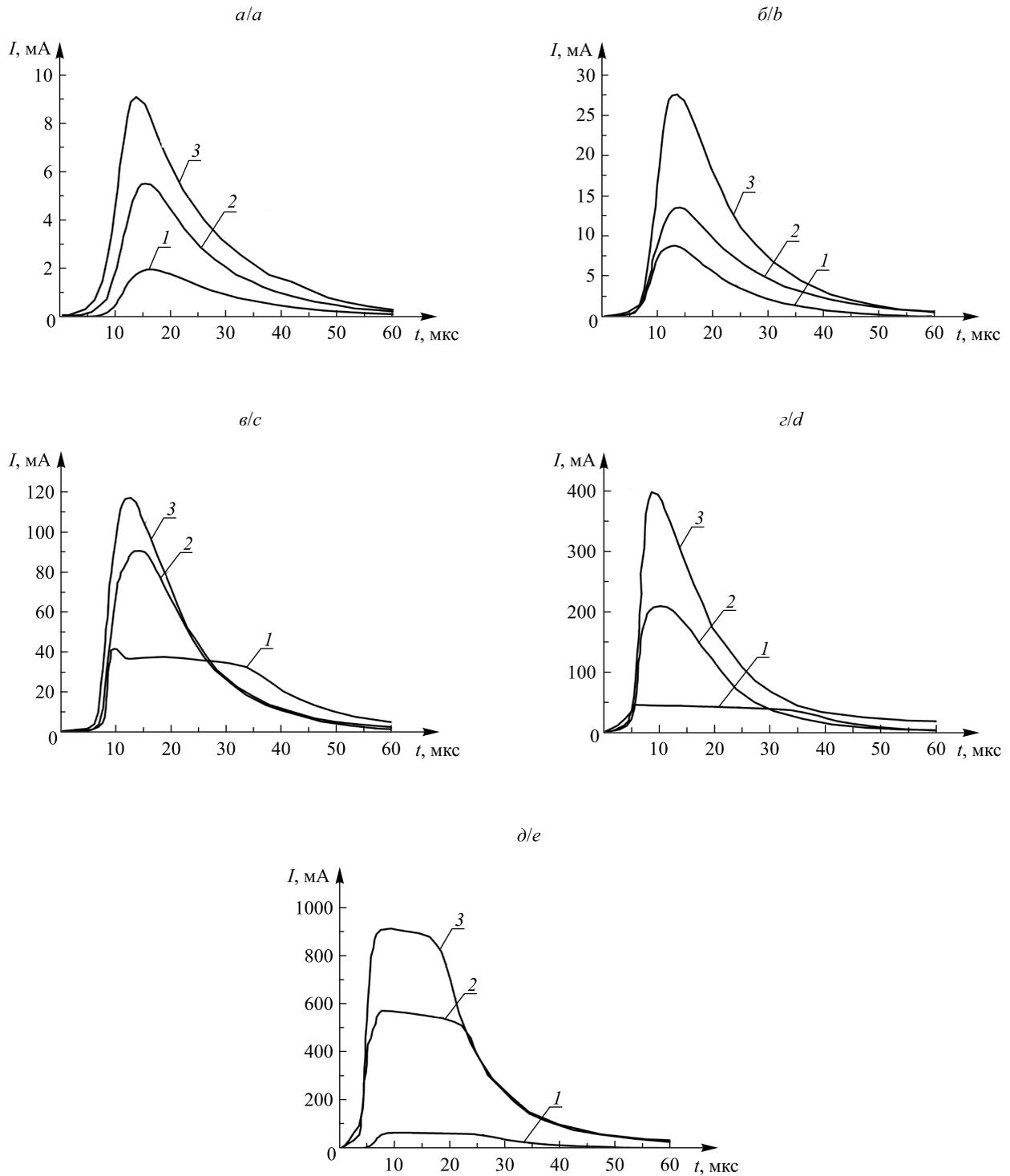


Рис. 4. Зависимость тока на подложке от времени при различных плотностях мощности лазерного излучения и разных ускоряющих потенциалах между сеткой и подложкой (отрицательный потенциал на подложке):
 $a - 2,54 \cdot 10^8 \text{ Вт/см}^2$; $b - 2,86 \cdot 10^8$; $в - 3,34 \cdot 10^8$; $г - 3,66 \cdot 10^8$; $д - 5,41 \cdot 10^8 \text{ Вт/см}^2$;
 $1 - 50 \text{ В}$; $2 - 200$; $3 - 400 \text{ В}$. Промежуток сетка – мишень имеет постоянный отрицательный потенциал на сетке по отношению к мишени, равный 30 В.
 Сопротивление утечки в цепи сетка – подложка составляет 390 Ом

Fig. 4. The substrate current versus time at various power densities of laser radiation and various accelerating potentials between the grid and the substrate, with a negative potential on the substrate: $a - 2.54 \cdot 10^8 \text{ W/cm}^2$; $b - 2.86 \cdot 10^8$; $c - 3.34 \cdot 10^8$; $d - 3.66 \cdot 10^8$; $e - 5.41 \cdot 10^8 \text{ W/cm}^2$; $1 - 50 \text{ V}$; $2 - 200$; $3 - 400 \text{ V}$. The grid – target interval has a constant negative potential on the grid relative to the target 30 V. The leakage resistance in a grid – substrate circuit is 390 Ω

При малых плотностях мощности воздействующего лазерного излучения до $2,54 \cdot 10^8$ Вт/см² ионные потоки, поступающие на подложку, зависят от приложенного потенциала к промежутку сетка – подложка (см. рис. 4, а). При этом временная форма импульсов близка к временной форме лазерной плазмы.

При увеличении плотности мощности лазерного излучения до $2,86 \cdot 10^8$ Вт/см² качественные результаты аналогичны предыдущему случаю, однако заметно значительное увеличение ионного потока на подложку (см. рис. 4, б).

В случае воздействия лазерного излучения плотностью мощности $3,34 \cdot 10^8$ Вт/см² на алюминиевую мишень при потенциале между сеткой и подложкой 50 В наблюдается резкое изменение временной формы ионного тока (см. рис. 4, в, кривая 1). После достижения максимума ионный ток на подложку не спадает по экспоненциальному закону, а некоторое время стабилизируется во времени. Это может быть связано с тем, что поток ионов вследствие большей ионизации увеличивается, и он начинает экранировать постоянный отрицательный потенциал, подаваемый на подложку по отношению к сетке. Наступает момент, когда число подлетающих к подложке ионов сравнивается с числом ионов, нейтрализованных через сопротивление утечки. После того как интенсивность ионного потока на подложку снижается из-за распада плазменного факела, общий ионный поток на подложку уменьшается вплоть до нуля.

При увеличении постоянного потенциала на промежутке сетка – подложка эффект стабилизации ионного тока пропадает, так как в этом случае потенциал подложки при таких потоках ионов трудно компенсировать (см. рис. 4, в, кривые 2, 3). В этом случае ионный поток на подложку существенно больше, чем в предыдущих случаях.

В случае воздействия на алюминиевую мишень лазерного излучения плотностью мощности $3,66 \cdot 10^8$ Вт/см² форма импульсов ионного тока на подложку похожа на предыдущий случай, однако величины токов существенно увеличиваются (см. рис. 4, з).

При воздействии на алюминиевую мишень лазерного излучения плотностью мощности $5,41 \cdot 10^8$ Вт/см² ионные потоки обладают такой величиной, что при этом стабилизация ионного тока наблюдается даже при постоянном потенциале на промежутке сетка – подложка, составляющем 400 В (см. рис. 4, д). Это объясняется большим потоком ионов на подложку.

Скорость нейтрализации заряда с подложки определяется сопротивлением нагрузки, внутренним сопротивлением источника питания, емкостью подложки и паразитной индуктивностью конструктивных и проводящих элементов.

Для подтверждения нашего предположения о стабилизации тока при прохождении через подложку был проведен эксперимент по снижению сопротивления нагрузки, через которую происходит нейтрализация ионного заряда подложки с 390 до 30 Ом. Результат такого эксперимента приведен на рис. 5 при потенциале на подложке 400 В и плотности мощности воздействующего лазерного излучения $5,41 \cdot 10^8$ Вт/см².

Как видно из рис. 5, при уменьшении сопротивления разрядного контура ограничение ионного тока отсутствует, а токи при этом значительно увеличиваются.

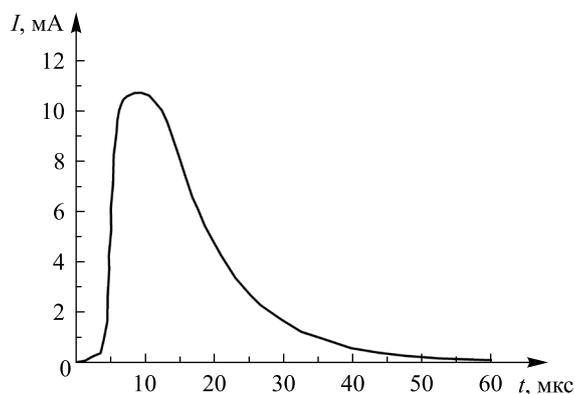


Рис. 5. Зависимость тока подложки от времени при плотности мощности воздействующего лазерного излучения $5,41 \cdot 10^8$ Вт/см². Промежуток сетка – мишень имеет постоянный отрицательный потенциал сетки по отношению к мишени, равный 30 В. Ускоряющий потенциал между сеткой и подложкой (положительный потенциал на сетке) равен 400 В. Сопротивление утечки в цепи сетка – подложка составляет 30 Ом

Fig. 5. The substrate current versus time at the power density $5,41 \cdot 10^8$ W/cm². The grid – target interval has a constant negative potential on the grid relative to the target 30 V. The accelerating potential between the grid and the substrate, with a negative potential on the substrate, is 400 V. The leakage resistance in a grid – substrate circuit is 30 Ω

Заключение

Проведенные эксперименты показали, что из эрозионной лазерной плазмы при подаче отрицательного потенциала на сетку по отношению к мишени можно получить поток заряженных частиц, состоящий преимущественно из ионов.

Найдена электрическая схема питания двумя источниками промежутков мишень – сетка и сетка – подложка с общей заземленной сеткой. При этом оба источника питания являются независимыми.

Электронные потоки в промежутке мишень – сетка не влияют на режимы управления ионными потоками в промежутке сетка – подложка.

Таким образом, технологические режимы нанесения пленок можно регулировать отрицательным потенциалом на сетке по отношению к мишени, получая при этом потоки ионов; изменяя величину положительного потенциала на сетке по отношению к подложке, можно менять величину ионного потока на подложку. Кроме того, режимы нанесения различных пленок можно регулировать изменением плотности мощности воздействующего лазерного излучения и сопротивления утечки зарядов с подложки.

Использование источника ионов с регулируемой энергией дает возможность комплексной обработки подложки. При больших скоростях ионов происходит травление поверхности подложки, при умеренных – создание псевдодиффузионного слоя, и при уменьшении скорости ионов можно получать пленки различной толщины с высокой адгезией.

Библиографические ссылки

1. Аваделькарим О. О., Бай Ч., Капица С. П. Нанонаука и нанотехнологии : энциклопедия систем жизнеобеспечения. М., 2011.
2. Chrisey D. B., Hubler G. K. Pulsed Laser Deposition of Thin Films. New York, 1994.
3. Bonelli M., Miotello A., Mosaner P. Pulsed laser deposition of diamondlike carbon films on polycarbonate // *J. Appl. Phys.* 2003. Vol. 93. P. 859–865.
4. Гончаров В. К., Пузырев М. В., Ступакевич В. Ю. Пространственные и временные характеристики эрозионного факела на графитовой мишени в вакууме // *Вестн. БГУ. Сер. 1, Физика. Математика. Информатика.* 2016. № 1. С. 79–83.
5. Гончаров В. К., Василевич А. Е., Пузырев М. В. и др. Лазерно-плазменный источник ионов с регулируемой энергией для нанесения нанопленок // *Электроника-инфо.* 2016. № 11. С. 54–57.
6. Гончаров В. К., Гусаков Г. А., Пузырев М. В. и др. Зондовые исследования эрозионного плазменного факела углерода в вакууме // *Физика и диагностика лабораторной и астрофизической плазмы : тр. XI Белорус.-серб. симп. (Минск, 15–19 дек. 2016 г.).* Минск, 2016. С. 4–7.

References

1. Avadelkarim O. O., Bai Ch., Kapitsa S. P. [Nanoscience and nanotechnologies : encyclopedia of life support systems]. Moscow, 2011 (in Russ.).
2. Chrisey D. B., Hubler G. K. Pulsed Laser Deposition of Thin Films. New York, 1994.
3. Bonelli M., Miotello A., Mosaner P. Pulsed laser deposition of diamondlike carbon films on polycarbonate. *J. Appl. Phys.* 2003. Vol. 93. P. 859–865.
4. Goncharov V. K., Puzyrev M. V., Stupakevich V. Yu. Spatial and temporal characteristics of the graphite-target erosive laser plume in the vacuum. *Vestnik BGU. Ser. 1, Fiz. Mat. Inform.* 2016. No. 1. P. 79–83 (in Russ.).
5. Goncharov V. K., Vasilevich A. E., Puzyrev M. V., et al. [Laser plasma source of ions with control energy for deposition nanofilms]. *Elektronika-info.* 2016. No. 11. P. 54–57 (in Russ.).
6. Goncharov V. K., Gusakov G. A., Puzyrev M. V., et al. [Probe investigations of the carbon erosive plasma plume in vacuum]. *Physics and diagnostics of laboratory and astrophysical plasmas : proc. of the XI Belarusian-Serbian symposium (Minsk, 15–19 Dec., 2016).* Minsk, 2016. P. 4–7 (in Russ.).

Статья поступила в редколлегию 07.06.2017.
Received by editorial board 07.06.2017.

О ВЛИЯНИИ УПРУГИХ НАПРЯЖЕНИЙ НА ДИФФУЗИЮ БОРА В КРЕМНИИ

В. Б. ОДЖАЕВ¹⁾, В. И. ПЛЕБАНОВИЧ²⁾, М. И. ТАРАСИК¹⁾, А. Р. ЧЕЛЯДИНСКИЙ¹⁾

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

²⁾ОАО «ПЛАНАР», пр. Партизанский, 2, 220033, г. Минск, Беларусь

Исследовано влияние упругих напряжений на диффузию имплантированного бора в слоях кремния, дополнительно легированных примесями IV группы Ge или C с противоположным воздействием на период решетки кремния. В слоях, предварительно легированных германием и затем подвергшихся имплантации ионами В⁺, достигается компенсация упругих напряжений, тогда как дополнительная имплантация в слои с бором ионов С⁺ повышает напряжения в них. В слоях, дополнительно легированных как германием, так и углеродом, коэффициенты диффузии имплантированного бора уменьшаются в силу того, что ответственные за его ускоренную диффузию междоузельные атомы Si расходятся на вытеснение атомов Ge и C из узлов решетки кремния (эффект Воткинса). Из полученных результатов следует, что упругие напряжения существенно не влияют на скорость диффузии бора в кремнии.

Ключевые слова: кремний; бор; диффузия; упругие напряжения.

ABOUT THE INFLUENCE OF ELASTIC STRESSES ON THE IMPLANTED BORON DIFFUSION IN SILICON

V. B. ODZAEV^a, V. I. PLEBANOVICH^b, M. I. TARASIK^a, A. R. CHELYADINSKII^a

^aBelarusian State University, Niezaliežnasci Avenue, 4, 220030, Minsk, Belarus

^b«Planar» Co., Partyzanski Avenue, 2, 220033, Minsk, Belarus

Corresponding author: A. R. Chelyadinski (chelyadinski@bsu.by)

The influence of elastic stresses on the implanted boron diffusion in silicon layers supplementary doped with IV group Ge or C elements, having the reverse effect on the silicon lattice period, is studied. Compensation of elastic stresses is achieved in the layers doped with Ge and then implanted with В⁺ ions, whereas supplementary implantation of С⁺ ions

Образец цитирования:

Оджаев В. Б., Плебанович В. И., Тарасик М. И., Челядинский А. Р. О влиянии упругих напряжений на диффузию бора в кремнии // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2017. № 3. С. 88–94.

For citation:

Odzaev V. B., Plebanovich V. I., Tarasik M. I., Chelyadinski A. R. About the influence of elastic stresses on the implanted boron diffusion in silicon. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2017. No. 3. P. 88–94 (in Russ.).

Авторы:

Владимир Борисович Оджаев – доктор физико-математических наук, профессор; заведующий кафедрой физики полупроводников и нанoeлектроники физического факультета.

Владимир Иванович Плебанович – кандидат технических наук; заместитель генерального директора.

Мария Иосифовна Тарасик – кандидат физико-математических наук; старший научный сотрудник кафедры энергофизики физического факультета.

Алексей Романович Челядинский – доктор физико-математических наук; главный научный сотрудник кафедры физики полупроводников и нанoeлектроники физического факультета.

Authors:

Vladimir Odzaev, doctor of science (physics and mathematics), full professor; head of the department of semiconductor physics and nanoelectronics, faculty of physics.

odzaev@bsu.by

Vladimir Plebanovich, PhD (technical); deputy general director.

pleba@mail.com

Mariya Tarasik, PhD (physics and mathematics); senior researcher at the department of energy physics, faculty of physics.

tarasik@bsu.by

Aleksei Chelyadinski, doctor of science (physics and mathematics); chief researcher at the department of semiconductor physics and nanoelectronics, faculty of physics.

chelyadinski@bsu.by

leads to the increased elastic stresses within the layers implanted with B⁺ ions. In the layers supplementary doped with Ge or C, the diffusion coefficients of implanted boron decrease because the silicon self-interstitials responsible for the enhanced boron diffusion are spent in the process of substitution of Ge and C atoms (Watkins effect). The obtained results indicate that elastic stresses do not influence considerably the boron diffusion coefficient in silicon.

Key words: silicon; boron; diffusion; elastic stresses.

Введение

Аномально ускоренная диффузия примесей в полупроводниках в [1–3] связывается с воздействием на этот процесс упругих напряжений, возникающих в слое и на границе легированного слоя и подложки. В [4] теоретически рассмотрено влияние упругих напряжений в слое на диффузию примеси.

Наиболее значительными могут быть упругие напряжения в кремнии при высоком уровне его легирования бором, обусловленные существенным различием ковалентных радиусов В (0,8 Å) и Si (1,175 Å).

Цель настоящей работы – изучение влияния упругих напряжений на диффузию имплантированного бора в слоях кремния, дополнительно легированных элементами IV группы – Ge или С. Эти примеси имеют противоположный характер воздействия на решетку кремния. Тетраэдрический ковалентный радиус Ge (1,22 Å) больше, чем у Si, и совместное легирование его с бором должно компенсировать упругие напряжения несоответствия. Однако ковалентный радиус атома С (0,7 Å) меньше радиуса Si, и его внедрение в слой кремния с бором может только увеличивать упругие напряжения. Примеси Ge и С являются электрически нейтральными в кремнии, поэтому не влияют на диффузию вследствие электростатического взаимодействия с бором.

Методика эксперимента

Профили диффузии имплантированного бора определялись путем измерения эффекта Холла и проводимости методом Ван-дер-Пау [5] в сочетании с контролируемым удалением тонких слоев кремния. Измеренные значения слоевой концентрации носителей заряда N_s в исследованных слоях кремния, созданных имплантацией бора и термообработанных в печи или подвергнутых ламповому отжигу, совпадали с дозами ионов бора. Эти результаты позволяют судить о профилях диффузии бора на основе измеренных профилей концентрации (С) носителей заряда. Исходные профили были получены методом масс-спектрометрии вторичных ионов. Концентрации радиационных дефектов оценивались по результатам измеренных значений изменения периода решетки в слое и в предположении, что смещение атомов в первой координационной сфере в области дефекта составляет 0,02 нм.

Результаты эксперимента и их обсуждение

Рентгенодифракционные исследования структур кремния, созданных имплантацией ионов бора в дозе $1,3 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$ (энергия – 45 кэВ), показали, что после отжига при 1050 °С в течение 15 мин разница в периодах решетки слоя и подложки составляет $2 \cdot 10^{-3} \text{ Å}$. В этих структурах упругие напряжения при электрической активации имплантированного бора могут достигать $1 \cdot 10^8 \text{ Н} \cdot \text{м}^{-2}$ и приводить к генерации в слое дислокаций несоответствия. Микрофотографии, сделанные методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) ионно-легированных структур, приведены на рис. 1, а, и, как видно, содержат сетку дислокаций. При такой дозе ионов достаточно велика концентрация точечных дефектов и должны быть видны остаточные протяженные нарушения типа дислокационных петель, однако они не фиксируются. Эти остаточные дефекты выявляются в слое кремния, имплантированного ионами В⁺ в дозе $1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$ и дополнительно ионами Si⁺ с энергией 100 кэВ в дозе $4 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$. При такой дозе бора его концентрация в слое недостаточна для возникновения упругих напряжений, обеспечивающих генерацию дислокаций несоответствия. Концентрация точечных дефектов также невелика для образования при термообработке остаточных нарушений, и это потребовало дополнительного облучения слоя ионами Si⁺. Образующиеся в этих слоях остаточные нарушения в виде дислокационных петель представлены на рис. 2. Изменение периода решетки в этом слое ($2 \cdot 10^{-3} \text{ Å}$) такое же, как в слое кремния, имплантированном ионами В⁺ в дозе $1,3 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$, т. е. концентрации радиационных дефектов в этих слоях практически одинаковы. Однако в случае имплантации ионов В⁺ в дозе $1,3 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$ дислокационные петли и дефекты упаковки не фиксируются (см. рис. 1, а). Это является результатом того, что при термообработке точечные дефекты, ответственные за образование остаточных нарушений, поглощаются дислокациями несоответствия.

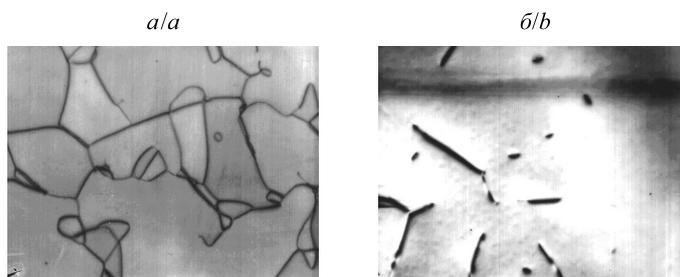


Рис. 1. Электронные микрофотографии на просвет имплантированных слоев кремния (кратность увеличения составляет 18 000 раз).

Отжиг – при 1050 °С: $1,8 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$ – доза ионов B^+ (а);
 $1,8 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$ – доза ионов B^+ , $1 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$ – доза ионов Ge^+ (б)

Fig. 1. TEM micrographs of implanted silicon ($\times 18\,000$ magnification).

Annealing – 1050 °С: $1,8 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$ is dose of B^+ (a);
 $1,8 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$ is dose of B^+ , $1 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$ is dose of Ge^+ (b)

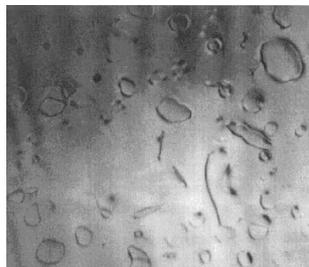


Рис. 2. Электронные микрофотографии на просвет имплантированных слоев кремния (кратность увеличения составляет 18 000 раз).

Отжиг – при 1050 °С в течение 15 мин: $1,8 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$ – доза ионов B^+ ,
 $4 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$ – доза ионов Si^+

Fig. 2. TEM micrographs of implanted silicon ($\times 18\,000$ magnification).

Annealing – 1050 °С, 15 min: $1,8 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$ is dose of B^+ ,
 $4 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$ is dose of Si^+

В структурах, созданных имплантацией бора и германия и отожженных в тех же условиях, что и структуры без германия, различие в периодах решетки подложки и слоя не регистрируется. Германий в кремнии, как известно [6], имеет неограниченную растворимость. В этом случае доза ионов бора составляла $1,3 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$ (энергия – 45 кэВ), доза ионов германия – $1 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$ (энергия – 300 кэВ), и напряжения на границе слоя и подложки практически компенсируются. Дислокации несоответствия при этом не образуются, выявляются только отдельные стержнеобразные дефекты (см. рис. 1, б).

На рис. 3 представлены профили диффузии имплантированного бора (доза – $1,3 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$) в кремнии и в слоях кремния, предварительно легированных германием в дозах $5 \cdot 10^{15}$ и $1 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$, после термоотжига в печи. Температура составляла 1050 °С, длительность отжига – 15 мин. Видно, что с увеличением дозы ионов Ge диффузия бора замедляется. Коэффициент диффузии бора в слоях с германием (доза – $1 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$) равнялся $4 \cdot 10^{-14} \text{ см}^2 \cdot \text{с}^{-1}$, т. е. был значительно ниже, чем в контрольном образце ($5 \cdot 10^{-13} \text{ см}^2 \cdot \text{с}^{-1}$). Аналогичный эффект наблюдался нами и при ламповом отжиге (рис. 4): при температуре 1050 °С и длительности 15 с. При дозе (Φ) ионов бора $6 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$ коэффициент диффузии бора в контрольном образце составлял $2 \cdot 10^{-12} \text{ см}^2 \cdot \text{с}^{-1}$. В слоях кремния, предварительно легированных германием, коэффициент диффузии бора был равен $6 \cdot 10^{-13} \text{ см}^2 \cdot \text{с}^{-1}$.

По мнению авторов [1], при высокой концентрации бора вследствие различий в ковалентных радиусах бора и кремния возникающие напряжения повышают упругую энергию кристалла. По этой причине часть атомов В уходит из узлов в междоузлия, и коэффициент диффузии бора увеличивается.

В работе [4] на основании предположения о том, что упругие напряжения, создаваемые в решетке кремния атомами бора, приводят к изменению коэффициента диффузии, записано уравнение диффузии, численное решение которого дает удовлетворительное совпадение расчетных и экспериментальных профилей диффузии.

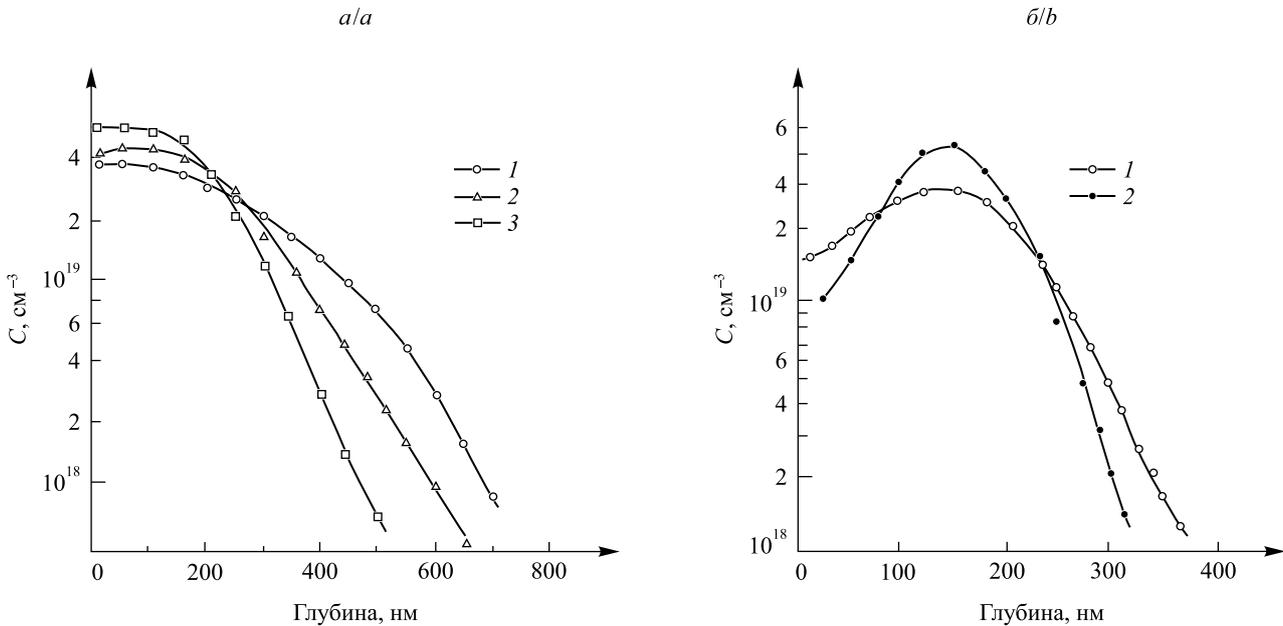


Рис. 3. Профили диффузии B^+ ($1,3 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$) в кремнии (1) и в слоях кремния, предварительно легированных Ge: $\Phi_{\text{Ge}} = 5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$ (2), $\Phi_{\text{Ge}} = 1 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$ (3). Термоотжиг – при $1050 \text{ }^\circ\text{C}$ в течение 15 мин (а); профили диффузии имплантированного бора ($6 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$, 45 кэВ) в кремнии (1) и в слоях кремния, предварительно легированных Ge в дозе $5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$ (2). Ламповый отжиг – при $1050 \text{ }^\circ\text{C}$ в течение 15 с (б)

Fig. 3. Diffusion profiles of implanted B^+ ($1.3 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$) in silicon (1) and in the layers predoped with Ge: $\Phi_{\text{Ge}} = 5 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ (2), $\Phi_{\text{Ge}} = 1 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ (3). Annealing at $1050 \text{ }^\circ\text{C}$, 15 min (a); diffusion profiles of implanted B^+ ($6 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$, 45 keV) in silicon (1) and in the layers predoped with Ge (2), $\Phi_{\text{Ge}} = 5 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$. RTA at $1050 \text{ }^\circ\text{C}$, 15 s (b)

При дополнительном легировании слоя германием происходит компенсация внутренних напряжений, растворимость бора по узлам увеличивается, коэффициент диффузии бора снижается.

Помимо внутренних напряжений в слое возникают напряжения на границе кремния и легированного бором слоя кремния. Они также могут быть причиной ускорения диффузии бора при его высокой концентрации. В результате диффузии, т. е. снижения объемной концентрации бора в слое, уменьшаются напряжения на границе слоя и подложки и внутренняя энергия структуры. В [3] сказано, что ускорение диффузии бора может быть обусловлено не непосредственно упругими напряжениями, а генерацией вакансий дислокациями, образующимися в зоне диффузии за счет упругих напряжений несоответствия. Однако в [7] установлено, что диффузия бора по избыточным вакансиям является замедленной по отношению к собственной.

Эффект замедления диффузии можно было бы связать с компенсацией упругих макронапряжений на границе кремния и слоя кремния, легированного бором и германием. Для проверки этого предположения были исследованы структуры, созданные имплантацией бора и углерода. Углерод, так же как и бор, располагаясь в узлах решетки, в противоположность германию сжимает решетку кремния. Растворимость углерода по узлам решетки кремния невысокая – около 10^{18} см^{-3} . Однако в имплантированном кремнии при высокой концентрации точечных дефектов его растворимость возрастает на два порядка [8]. Профили диффузии бора в кремнии и в слоях кремния, дополнительно легированных углеродом, представлены на рис. 4. Доза имплантированного бора составляла $6 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$, энергия – 45 кэВ, доза углерода – $1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$, энергия ионов – 50 кэВ, так что исходные профили бора и углерода были совмещены. Диффузия протекала при ламповом отжиге при температуре $1050 \text{ }^\circ\text{C}$ и длительности 7 с. Коэффициенты диффузии бора составляют $1 \cdot 10^{-12}$ и $1 \cdot 10^{-13} \text{ см}^{-2}$ соответственно, т. е. за счет углерода наблюдается снижение коэффициента диффузии бора в 10 раз.

В [9] высказано предположение о том, что междоузельный атом кремния располагается в разреженном пространстве – между первой координационной сферой атомов кремния, вокруг узлового атома углерода, и второй сферой. Действительно, известен комплекс атома углерода и междоузельного атома кремния [10]. Однако этот комплекс отжигается при температуре $65 \text{ }^\circ\text{C}$.

В соответствии с той точкой зрения, что ускоренная диффузия имплантированного бора в кремнии – результат избыточных междоузельных атомов Si [11], можно связать уменьшение коэффициентов

диффузии бора в слоях, легированных примесями Ge или C, с потерей междоузельных атомов Si. Избыточные атомы Si возникают при термообработке имплантированных структур и развале устойчивых при комнатных температурах комплексов типа Si – P6 и Si – B3 [11]. В [12] сделано предположение, что при отжиге часть междоузельных атомов Si образуют протяженные остаточные дефекты типа дефектов упаковки внедрения, стержнеобразных дефектов {113}. Затем они, перестраиваясь, поддерживают избыточную концентрацию междоузельных атомов Si, которые ответственны за ускоренную диффузию бора. Но по мнению авторов [13], в результате взаимодействия точечных дефектов и атомов примеси с остаточными дефектами упаковки ускоренная диффузия уменьшается.

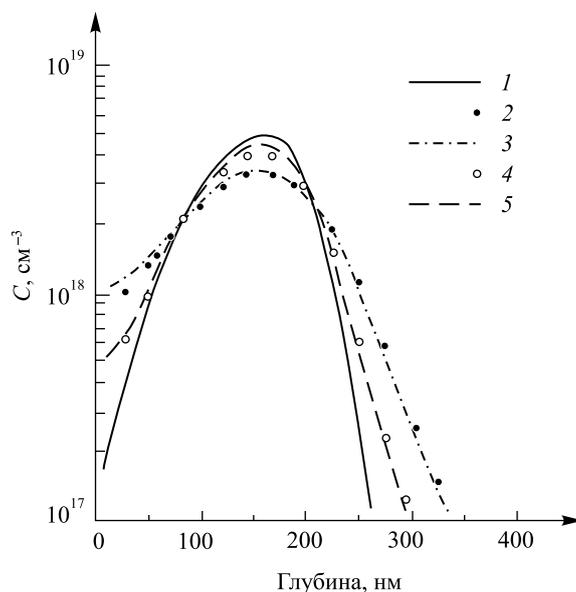


Рис. 4. Профили диффузии имплантированного бора ($6 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$, 45 кэВ) в кремнии (2, 3) и в слоях кремния, предварительно легированных углеродом в дозе $1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$ (4, 5). Ламповый отжиг – при 1050 °С в течение 15 с; 1 – исходный расчетный; 2, 4 – экспериментальные; 3, 5 – расчетные

Fig. 4. Diffusion profiles of implanted boron ($6 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, 45 keV) in silicon (2, 3) and in the layers pre-doped with C (4, 5), dose $1 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$. RTA at 1050 °C, 15 s; 1 – as implanted; 2, 4 – experimental; 3, 5 – calculated

Механизмом потерь избыточных атомов Si, по нашему мнению, является эффект замещения атомов Ge или C междоузельными атомами Si (эффект Воткинса). Эффект вытеснения атомов C из узлов решетки наблюдался с помощью метода электронного парамагнитного резонанса [10] в кристаллах кремния, облученных электронами. Вытеснение атомов B отмечалось даже при температурах 1,6 К и затем 0,5 К [14]. Возникло представление об атермической миграции атомов кремния в кремнии. Мы полагаем, что причиной атермической миграции междоузельных атомов Si в кремнии и последующего замещения являются сами легирующие примеси с ковалентными радиусами, отличными от ковалентных радиусов атомов решетки как в большую, так и в меньшую сторону. Примесные атомы в узлах решетки вследствие несовпадения ковалентных радиусов с радиусами атомов решетки создают вокруг себя упругодеформированную сферу, попадая в которую атомы Si направленно движутся к центру дилатации (рис. 5, а) либо сжатия (рис. 5, б). Атомы решетки, смещенные из своих равновесных положений относительно примесного атома, в первой координационной сфере и во все меньшей степени в последующих сферах (затухание) поляризуются и генерируют электрический дипольный момент. Под влиянием дипольных моментов смещенных атомов междоузельные атомы получают наведенный дипольный момент. Поскольку величина дипольных моментов смещенных из узловых положений атомов круто нарастает к центру дилатации (сжатия), междоузельный атом Si движется к примесному атому и вытесняет его из узла, занимая его место.

Одинаковый эффект воздействия примесей Ge и C с противоположным знаком создаваемых ими упругих напряжений в структурах кремний – слои кремния, легированные бором, на коэффициент диффузии имплантированного бора указывает на то, что ускоренная диффузия имплантированного бора не зависит от упругих напряжений.

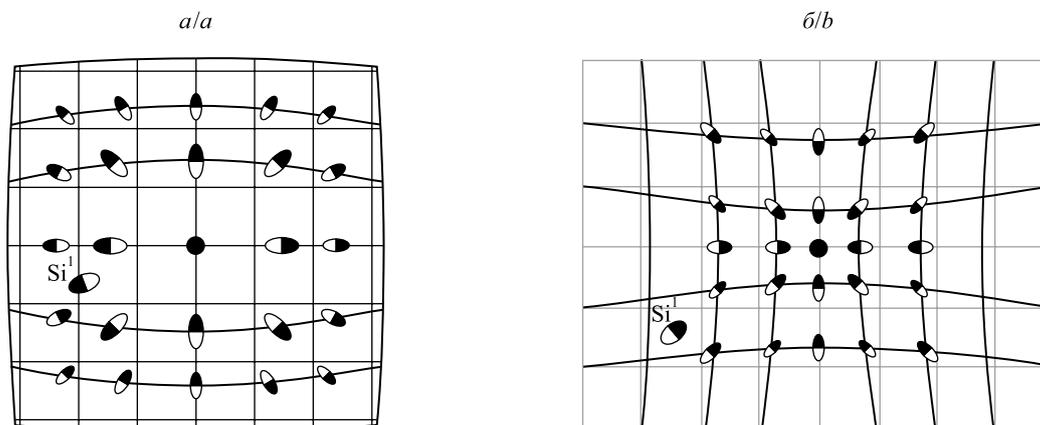


Рис. 5. Движение междуузельного атома Si в поле упругих деформаций: ковалентный радиус примеси замещения: больше радиуса атома решетки (а); меньше радиуса атома решетки (б)

Fig. 5. Motion of the interstitial Si atom in a field of elastic stresses.

The covalent radius of the substitutional impurity is greater (a) than the lattice atom radius and smaller (b) than the lattice atom radius

В случае обычной термодиффузии при высокой концентрации примеси источником избыточных атомов Si является сам процесс легирования. Выполненные нами эксперименты показали [11], что при дозе ионов бора $1,3 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$ дополнительное введение радиационных дефектов путем облучения ионами Si^+ (дозы от $6 \cdot 10^{13}$ до $6 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$) не приводит к росту скорости диффузии. Атомы бора, располагаясь в узлах решетки, создают тем самым избыточные междуузельные атомы Si, которые затем вытесняют бор из узлов в быстрый междуузельный канал диффузии. Последующие захват бора в узлы решетки и его вытеснение из узлов определяют процесс ускоренной диффузии бора при его высокой концентрации. Примеси Ge и C в силу эффекта Воткинса поглощают избыточные атомы Si, что ведет к снижению коэффициента диффузии бора.

Заключение

Из полученных результатов следует, что упругие напряжения, обусловленные несовпадением ковалентных радиусов атомов примеси и атомов кремния, существенно не влияют на скорость диффузии бора.

Библиографические ссылки

1. Пантелеев В. А., Гугина Т. С., Муравьев В. А. Влияние упругих напряжений на диффузионные процессы в полупроводниках // Физика твердого тела. 1978. Т. 20, № 2. С. 562–564.
2. Герасименко Н. Н., Мордкович В. Н. Радиационные эффекты в системе полупроводник – диэлектрик // Поверхность. Физика, химия, механика. 1987. Т. 6. С. 5–19.
3. Hu S. M. General theory of impurity diffusion in semiconductors via the vacancy mechanism // Phys. Rev. 1969. Vol. 180, № 3. P. 773–784.
4. Dao Khac An. Numerical solution of the nonlinear diffusion equation for the anomalous boron diffusion in silicon // Phys. Stat. Sol. (a). 1985. Vol. 90. P. 173–177.
5. Van der Pauw L. J. A method of measuring specific resistivity and Hall effect of discs of arbitrary shape // Philips Res. Repts. 1958. Vol. 13, № 1. P. 1–9.
6. Peterstrom S., Svensson B. G. Transient boron diffusion in medium dose Ge-implanted silicon // J. Appl. Phys. 1992. Vol. 71, № 3. P. 1215–1219.
7. Stelmakh V. F., Suprun-Belevich Yu. R., Tkachev V. D., et al. Diffusion of boron implanted into silicon // Phys. Stat. Sol. (a). 1985. Vol. 89. P. K45–K49.
8. Strane J. W., Lee S. R., Stein H. J., et al. Carbon incorporation into Si at high concentrations by ion implantation and solid phase epitaxy // J. Appl. Phys. 1976. Vol. 79, № 2. P. 637–646.
9. Crystiano F., Bonafos C., Nejim A., et al. Interstitial trapping efficiency of C^+ implanted into preamorphised silicon: Control of EOR defects // Nucl. Inst. Meth. B. 1997.
10. Watkins G. D., Brower K. L. EPR observation of the isolated interstitial carbon atom in silicon // Phys. Rev. Lett. 1976. Vol. 36, № 22. P. 1329–1332.
11. Челябинский А. П., Комаров Ф. Ф. Дефектно-примесная инженерия в имплантированном кремнии // УФН. 2003. Т. 173, № 8. С. 813–846.
12. Claverie A., Giles L. F., Omri M., et al. Nucleation, growth and dissolution of extended defects in implanted silicon: impact on dopant diffusion // NIM B. 1999. Vol. 147. P. 1–12.

13. Servidori J., Solmi S., Zaumseil P., et al. Interaction between point defects and dislocation loops as the phenomenon able to reduce anomalous diffusion of phosphorus implanted in silicon // *J. Appl. Phys.* 1989. Vol. 65, № 1. P. 98–104.

14. Gwozdz P. S., Koehler J. S. Changes in ac conductivity of silicon with electron irradiation at 0.5 K // *Phys. Rev.* 1972. Vol. 6, № 10. P. 4571–4574.

References

1. Panteleev V. A., Gugina T. S., Murav'ev V. A. [Influence of the elastic strains on the diffusion processes in semiconductors]. *Fiz. tverd. tela.* 1978. Vol. 20, No. 2. P. 562–564 (in Russ.).

2. Gerasimenko N. N., Mordkovich V. N. [Radiation effects in a semiconductor – dielectric systems]. *Poverkhn. Fiz., khim., mekh.* 1987. Vol. 6. P. 5–19 (in Russ.).

3. Hu S. M. General theory of impurity diffusion in semiconductors via the vacancy mechanism. *Phys. Rev.* 1969. Vol. 180, No. 3. P. 773–784.

4. Dao Khac An. Numerical solution of the nonlinear diffusion equation for the anomalous boron diffusion in silicon. *Phys. Stat. Sol. (a)*. 1985. Vol. 90. P. 173–177.

5. Van der Pauw L. J. A method of measuring specific resistivity and Hall effect of discs of arbitrary shape. *Philips Res. Repts.* 1958. Vol. 13, No. 1. P. 1–9.

6. Peterstrom S., Svensson B. G. Transient boron diffusion in medium dose Ge-implanted silicon. *J. Appl. Phys.* 1992. Vol. 71, No. 3. P. 1215–1219.

7. Stelmakh V. F., Suprun-Belevich Yu. R., Tkachev V. D., et al. Diffusion of boron implanted into silicon. *Phys. Stat. Sol. (a)*. 1985. Vol. 89. P. K45–K49.

8. Strane J. W., Lee S. R., Stein H. J., et al. Carbon incorporation into Si at high concentrations by ion implantation and solid phase epitaxy. *J. Appl. Phys.* 1976. Vol. 79, No. 2. P. 637–646.

9. Crystiano F., Bonafos C., Nejim A., et al. Interstitial trapping efficiency of C⁺ implanted into preamorphised silicon: Control of EOR defects. *Nucl. Inst. Meth. B.* 1997.

10. Watkins G. D., Brower K. L. EPR observation of the isolated interstitial carbon atom in silicon. *Phys. Rev. Lett.* 1976. Vol. 36, No. 22. P. 1329–1332.

11. Chelyjdinskii A. R., Komarov F. F. Defektno-primesnaya inzheneriya v implantirovannom kremnii [Defect-impurity engineering in implanted silicon]. *Usp. fiz. nauk.* 2003. Vol. 173, No. 8. P. 813–846. DOI: 10.3367/UFNr.0173.200308b.0813 (in Russ.).

12. Claverie A., Giles L. F., Omri M., et al. Nucleation, growth and dissolution of extended defects in implanted silicon: impact on dopant diffusion. *NIM B.* 1999. Vol. 147. P. 1–12.

13. Servidori J., Solmi S., Zaumseil P., et al. Interaction between point defects and dislocation loops as the phenomenon able to reduce anomalous diffusion of phosphorus implanted in silicon. *J. Appl. Phys.* 1989. Vol. 65, No. 1. P. 98–104.

14. Gwozdz P. S., Koehler J. S. Changes in ac conductivity of silicon with electron irradiation at 0.5 K. *Phys. Rev.* 1972. Vol. 6, No. 10. P. 4571–4574.

Статья поступила в редакцию 07.07.2017.

Received by editorial board 07.07.2017.

УДК 537.311.322:538.955

ВЛИЯНИЕ ВАКУУМИРОВАНИЯ, ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНОГО ВЕЩЕСТВА, ДЛИТЕЛЬНОГО ТЕПЛОВОГО НАГРЕВА И ОБЛУЧЕНИЯ УЛЬТРАФИОЛЕТОВЫМ ИЗЛУЧЕНИЕМ НА СВОБОДНЫЕ РАДИКАЛЫ В ПОРОШКАХ ДЕТОНАЦИОННЫХ НАНОАЛМАЗОВ

ТХИ ТХАНЬ БИНЬ НГУЕН¹⁾

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

Исследовано влияние вакуумирования, поверхностно-активного вещества, длительного теплового нагрева и облучения ультрафиолетовым излучением на свободные радикалы в порошках детонационных наноалмазов методом электронного парамагнитного резонанса. Установлена модель частицы детонационных наноалмазов, состоящая из ядра алмазной решетки и фуллереноподобной оболочки с покрытой функциональными группами поверхностью. Большинство парамагнитных центров, экранируемых от воздействий откачки воздуха и молекул поверхностно-активного вещества, локализируются внутри ядра частицы детонационных наноалмазов. Около 10 % парамагнитных центров находятся на внешней стороне фуллереноподобной оболочки. Наблюдается изменение в форме контура линии электронных парамагнитных резонансных спектров при указанных воздействиях, что отражает изменение в распределении парамагнитных центров в целом в порошках детонационных наноалмазов.

Ключевые слова: порошок детонационного наноалмаза; электронный парамагнитный резонанс; откачка воздуха; поверхностно-активное вещество; отжиг; ультрафиолетовое излучение; форма контура линии электронного парамагнитного резонанса.

THE EFFECT OF EVACUATION, SURFACTANT, PROLONGED THERMAL HEATING AND IRRADIATION WITH ULTRAVIOLET RADIATION ON FREE RADICALS IN DETONATION NANODIAMOND POWDERS

THI THANH BINH NGUYEN^a

^aBelarusian State University, Niezaliežnasci Avenue, 4, 220030, Minsk, Belarus

The effect of evacuation, surfactant, prolonged thermal heating, and irradiation with ultraviolet radiation on free radicals in detonation nanodiamond (DND) powders was studied by electron paramagnetic resonance. A model of a DND particle consisting of a diamond lattice core and a fullerene-like shell with a surface covered by functional groups is established. Most of paramagnetic centers (PC), shielded from the effects of evacuation and surfactant molecules, are localized within the core of particle. About 10 % paramagnetic centers are on the outside of fullerene-like shell. A change is observed in the EPR line shape under these effects, which reflects the change in the distribution of the PC as a whole in DND powders.

Key words: detonation nanodiamond powder; electron paramagnetic resonance; evacuation; surfactant; annealing; ultraviolet radiation; EPR line shape.

Образец цитирования:

Нгуен Тхи Тхань Бинь. Влияние вакуумирования, поверхностно-активного вещества, длительного теплового нагрева и облучения ультрафиолетовым излучением на свободные радикалы в порошках детонационных наноалмазов // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2017. № 3. С. 95–101.

For citation:

Nguyen Thi Thanh Binh. The effect of evacuation, surfactant, prolonged thermal heating and irradiation with ultraviolet radiation on free radicals in detonation nanodiamond powders. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2017. No. 3. P. 95–101 (in Russ.).

Автор:

Тхи Тхань Бинь Нгуен – аспирантка кафедры физики полупроводников и нанoeлектроники физического факультета. Научный руководитель – кандидат физико-математических наук Н. М. Лапчук.

Author:

Thi Thanh Binh Nguyen, postgraduate student at the department of semiconductors and nanoelectronics, faculty of physics. nguyentbinh125@gmail.com

Электронная парамагнитная резонансная (ЭПР) спектроскопия – единственный метод прямого детектирования неспаренных электронов. Другие методики, например флуоресцентная спектроскопия, могут косвенным образом регистрировать свободные радикалы, но лишь ЭПР дает неопровержимые доказательства их присутствия. Кроме того, ЭПР позволяет идентифицировать парамагнитные частицы, состояние которых чувствительно к локальному окружению, поэтому спектры ЭПР несут информацию также и о молекулярной структуре вблизи неспаренного электрона. Иногда в спектрах ЭПР наблюдаются существенные изменения формы линий, что позволяет судить о протекании динамических процессов, таких как молекулярное движение, текучесть, электропроводность в СВЧ-диапазоне [1, с. 77].

Поскольку в спектрах ЭПР порошков детонационного наноалмаза (ДНА) регистрируется линия, интенсивность которой соответствует очень большой концентрации парамагнитных центров [2, с. 273; 3, с. 054418-8], то интерес представляет установление места локализации такого огромного числа неспаренных электронов – на поверхности частицы (оболочке), в нанокристалле, между оболочкой и нанокристаллом – или неспаренные электроны распределены равномерно по всему объему ДНА. С этой целью проводились следующие эксперименты: 1) откачка воздуха из ампулы с ДНА с последующим нагнетанием воздуха в ампулу; 2) обработка ДНА поверхностно-активным веществом (ПАВ); 3) нагрев ДНА в печи от комнатной температуры до 600 °С в течение 5 ч (из них 30 мин – при 600 °С); 4) облучение порошков ДНА ультрафиолетовым излучением (длина волны – 254 нм) с накоплением дозы. При этом контролировались основные параметры спектров ЭПР и оценивалась форма контура линии для высокополевого и низкополевого крыльев спектра.

Спектры ЭПР образцов ДНА регистрировались на спектрометре RadioPan SE/X-2543 (Польша) с резонатором H_{102} в X -диапазоне при комнатной температуре. Частота модуляции магнитного поля составляла 100 кГц, амплитуда – 0,01 мТл. Частота СВЧ-излучения ~9,3 ГГц, в резонаторе она контролировалась частотомером, а поляризующее магнитное поле – датчиком ядерного магнитного резонанса. Для контроля изменения добротности резонатора на его стенке стационарно закреплен ориентированный монокристаллик рубина ($Al_2O_3 : Cr$). По изменению амплитуды сигнала рубина контролировалось нерезонансное поглощение энергии в резонаторе образцами ДНА, полученными по методике [4, с. 219–220].

Рентгеновская дифракция показала чистую кубическую алмазную фазу и размер области когерентного рассеяния, равный 4–5 нм, без сигнала от аморфного углерода. На спектре рамановского рассеяния образцов проявляются полосы от алмазной фазы и sp^2 -углерода и полосы в диапазоне 2500–3000 cm^{-1} с подавленной интенсивностью.

Влияние откачки воздуха. Эксперимент по откачке воздуха из ампулы с образцом показал слабый «кислородный эффект» в исследуемых образцах ДНА. В частности, ширина линии ЭПР и интенсивность сигнала при откачке мало меняются. На рис. 1, а, представлены спектры образца ДНА до откачки и при откачке кислорода в ампуле. Нагнетание воздуха в ампулу восстанавливает исходный сигнал (спектр не показан).

Видно, что откачка приводит к увеличению амплитуды сигнала не более чем на 10 %. Когда говорят о «кислородном эффекте», то подразумевают, что амплитуда сигнала резко возрастает на несколько порядков с синхронным уменьшением ширины линии, и в случае кислорода взаимодействие носит обратимый характер. Это явление хорошо изучено, например, в каменном угле [5, с. 155]. В нашем эксперименте с ДНА показано, что откачка влияет на незначительную часть парамагнитных центров, находящихся в непосредственном контакте с кислородом. На рис. 1, б, представлены оценки формы контура линии ЭПР исследуемых образцов (до откачки воздуха и при его откачке) в сравнении с теоретическими гауссовой и лоренцевой формами. Согласно [2, с. 278] форма контура экспериментальной линии (см. рис. 1, б, кривая 1) подобна лоренцевой. Наблюдается незначительное отклонение от теоретически лоренцевой линии на крыльях. Откачка воздуха приводит к стремлению экспериментальной линии к лоренцевой форме.

Влияние поверхностно-активного вещества. Известно, что поверхностно-активные вещества характеризуются ярко выраженной способностью адсорбироваться на поверхностях и межфазных границах [6, с. 29, 169; 7]. Термин «межфазная граница» принято относить к границе между двумя несмешивающимися фазами, термин «поверхность» указывает на то, что одной из фаз является газ, как правило воздух. Стремление ПАВ аккумулироваться на межфазных границах является их фундаментальным свойством. Степень концентрирования ПАВ на поверхности зависит от строения их молекул и природы контактирующих фаз. Поэтому не существует универсального эффективного ПАВ, пригодного для любых систем [7]. Выбор ПАВ определяется функциями, которые оно должно выполнять в данной системе. Поскольку нам необходимо было зафиксировать взаимодействие ПАВ со свободными радикалами, использовался неонол АФ9-10. Это высокоэффективное неионогенное ПАВ – оксиэтилированный моноалкилфенол ($C_9H_{19}C_6H_4O(C_2H_4O)_{10}H$) на основе тримеров пропилена.

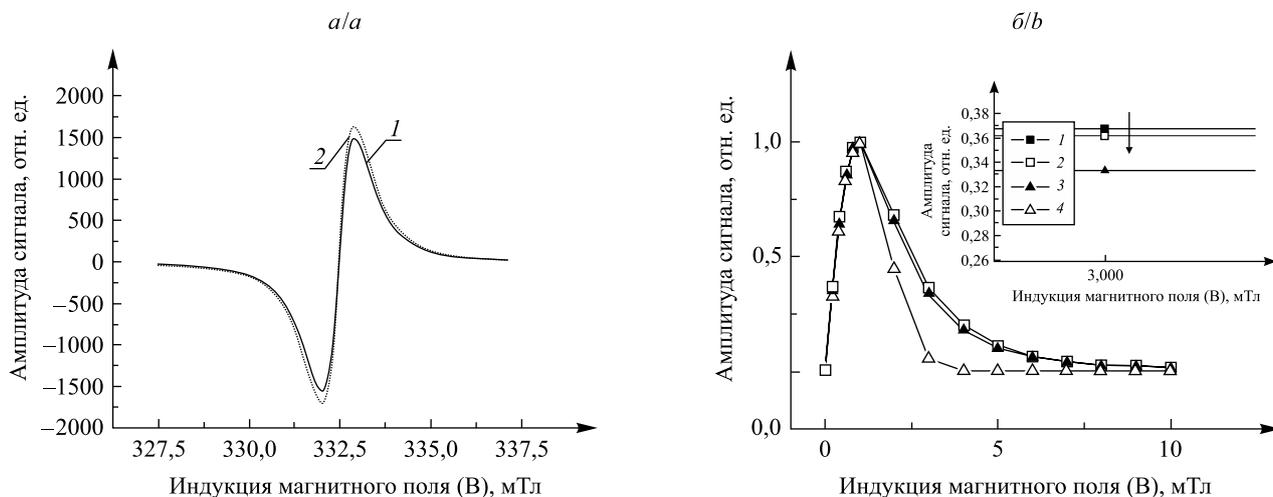


Рис. 1. Спектры ЭПР порошков ДНА до откачки (1), при откачке (2) (а). Форма контура линии, оцененная для компоненты высокого поля спектра ЭПР порошка ДНА: 1 – экспериментальная форма до откачки, 2 – экспериментальная форма при откачке, 3 – лоренцева форма, 4 – гауссова форма; стрелка на вставке указывает направление сдвига формы ЭПР-спектров, стремящихся к лоренцевой форме (б)

Fig. 1. EPR spectra of DND powders before evacuation (1), during evacuation (2) (a). The shapes of the line contour estimated for the high-field component of the EPR spectrum of DND powder: 1 – experimental shape before evacuation, 2 – experimental shape for evacuation, 3 – Lorentz shape, 4 – Gaussian shape; the arrow in the insert indicates the direction of a shift in the EPR spectra whose shape is tending to the Lorentzian one (b)

После записи сигнала ЭПР от исходного порошка ДНА в ампулу с порошком было введено ПАВ и производилась запись спектров через определенные интервалы времени в течение 48 ч.

Обнаружено, что воздействие ПАВ приводит к незначительному уширению линии ЭПР – от 0,89 до 0,90 мТл ($\pm 0,003$ мТл). Одинаковые процедуры экспериментов проводились сразу после введения ПАВ и через 48 ч после него. Результаты показывают, что амплитуда сигнала, нормированная в соответствии с амплитудой эталонного образца рубина, и сама амплитуда рубина претерпевают циклическое изменение в течение времени воздействия ПАВ на исследуемый образец. Это обнаружено нами также в исходных порошках. Отметим, что через 48 ч взаимодействия с ПАВ величина g -фактора порошков ДНА незначительно уменьшилась – от 2,002 50 до 2,002 48 ($\pm 0,000 05$). На рис. 2, а, показана зависимость амплитуды сигнала, нормированной на амплитуду эталонного образца рубина, от времени воздействия ПАВ. Видно, что нормированная амплитуда сигнала изменялась, уменьшаясь в $\sim 0,4$ раза, только через 28 мин воздействия ПАВ, затем ее значение восстановилось приблизительно до прежнего значения и существенно не изменялось в дальнейшем. Анализ формы контура линии ЭПР (рис. 2, б) показал, что линия остается подобной лоренцевой. При этом с увеличением времени воздействия ПАВ наблюдается незначительное приближение формы контура линии к лоренцевой форме. Такая тенденция оказывается аналогичной поведению формы контура линии при откачке. Отметим, что порошок ДНА стал темно-серым, тогда как первоначально он имел светло-серый цвет.

Уменьшение интенсивности синфазного сигнала ЭПР в порошке ДНА в первые 28 мин эксперимента обусловлено пассивацией свободных радикалов поверхностно-активным веществом. Восстановление амплитуды сигнала ЭПР, возможно, обусловлено разбуханием образца, приводящим к разрыву химических связей, которые снова пассивируются под действием ПАВ.

Как видно из проведенного эксперимента по воздействию ПАВ на порошок ДНА, свободные радикалы остались в образце в недоступной для ПАВ области, экранируемой структурными элементами внешней части исследуемых образцов. Только очень незначительная часть свободных радикалов взаимодействовали с ПАВ таким образом, что не изменили его парамагнитных свойств. Такая защитная структура может быть фуллереноподобной оболочкой, окружающей ядро алмазного кристаллита, поскольку именно с помощью такой замкнутой структуры оболочки молекулы ПАВ не могут входить в ядро частицы ДНА, и, следовательно, они не взаимодействуют с неспаренными электронами в нем.

Влияние температурного отжига. Нами исследовалась температурная стабильность наблюдаемых парамагнитных центров в порошках ДНА при отжиге от 23 до 600 °С в течение 5 ч и дополнительно при 600 °С в течение 30 мин. При сравнении параметров спектров ЭПР порошков ДНА до отжига и после него было обнаружено следующее. Наблюдается увеличение нормированной амплитуды

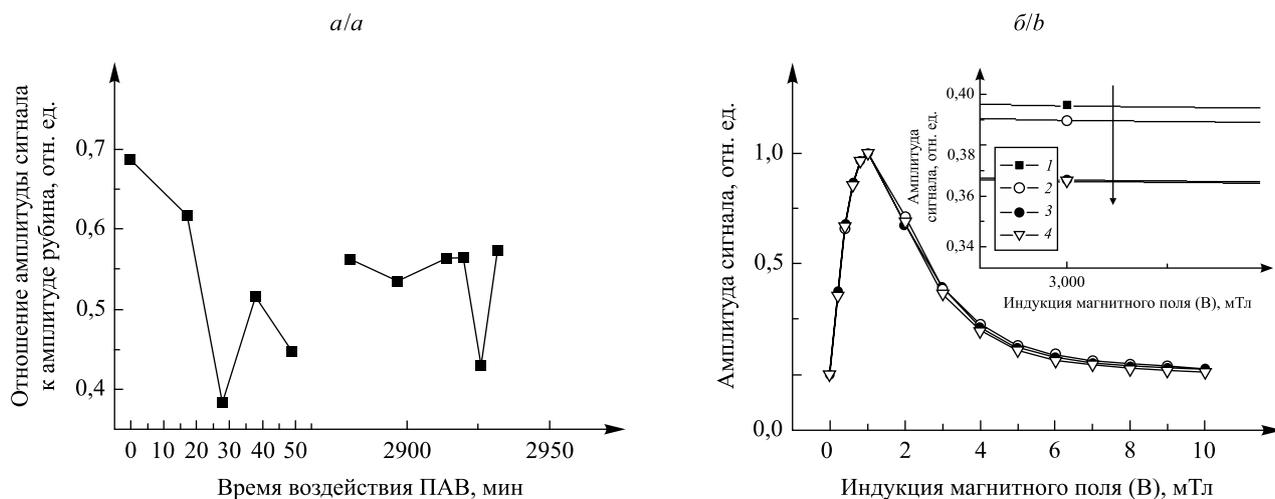


Рис. 2. Зависимость нормированной амплитуды сигнала ЭПР образца ДНА от времени воздействия на него ПАВ (а).

Формы контура экспериментальной линии со временем воздействия ПАВ (б):

- 1 – до воздействия ПАВ, 2 – 5 мин после воздействия ПАВ, 3 – 30 мин после воздействия ПАВ, 4 – 48 ч после воздействия ПАВ; стрелка на вставке указывает направление сдвига формы ЭПР-спектров, стремящихся к лоренцевой форме

Fig. 2. The EPR signal amplitude of the DND sample versus the surfactant exposure time (a).

The shapes of the experimental line contour depending on the exposure time of surfactants (b):

- 1 – before exposure to surfactants, 2 – 5 min after exposure to surfactants, 3 – 30 min after exposure to surfactants, 4 – 48 h after exposure to surfactants, the arrow in the insert indicates the direction of a shift in the EPR spectra whose shape is tending to the Lorentzian one

сигнала на величину амплитуды рубина одновременно с незначительным уменьшением ширины линии сигнала. g -Фактор практически не меняется в пределах его погрешности. Увеличение частоты резонансного поглощения говорит о снижении структурных напряжений (например, за счет дислокаций). Все это свидетельствует о стабильности парамагнитных центров (ПЦ) в исследуемых порошках ДНА при температуре 600 °С. Отметим, что в других экспериментах по отжигу образцов ДНА на стенках ампулы был обнаружен водяной конденсат. Такая вода выделяется после отжига в течение 20 мин при 105 °С и продолжает выделяться после дальнейшего отжига в течение 20 мин при 220 °С. Это может свидетельствовать о содержании в образцах ДНА связанной воды, которая при нагреве переходит в обычную воду и конденсируется на стенках ампулы. О наличии высокоорганизованных слоев воды в образцах ДНА сообщалось в работах [8, с. 905, 909; 9, с. 7333]. Анализ формы контура линии спектра (рис. 3, а) показал, что в результате такого отжига форма контура линии также остается лоренцевой, однако происходит незначительное отдаление формы линии после отжига от лоренцевой формы относительно формы линии до отжига. В частности, амплитуда линии медленнее уменьшается на крыльях. Такое изменение в форме линии ЭПР является противоположным изменению, наблюдаемому при откачке, и воздействию ПАВ.

Влияние ультрафиолетового излучения. Интерес также представляет изучение чувствительности порошков ДНА к воздействию ультрафиолетового (УФ) излучения. С этой целью образцы порошков ДНА облучались УФ-излучением с длиной волны 254 нм. После записи спектра образца исходного порошка облучение УФ-излучением этого образца проводилось в течение 15 мин с последующей записью спектра. Такая процедура повторялась пять раз по 15 мин каждая.

В процессе облучения УФ-излучением кварцевая ампула с порошком ДНА регулярно вращалась. Изменение параметров ЭПР спектров исследуемых порошков представлено в таблице.

Основные параметры спектров ЭПР – g -фактор и ширина линии – остаются такими же, как в исходных порошках. Число ПЦ снижается в результате облучения, что проявляется в уменьшении отношения амплитуды сигнала к амплитуде рубина. Интересно, что в исходном порошке нормированная амплитуда сигнала циклически меняется при многократном измерении спектров, такое поведение нормированной амплитуды сигнала также проявляется в экспериментах по облучению УФ-излучением. Наблюдаемая циклическая изменчивость нормированной амплитуды сигнала позволяет утверждать, что спиновая система в порошках ДНА имеет характер фрустрации, которая установлена во многих наносистемах [10, с. 456; 11, с. 125; 12, с. 8]. Форма контура линии остается лоренцевой (см. рис. 3, б). С увеличением времени воздействия УФ-излучения на исследуемый образец форма контура линии спектра ЭПР, как и в случае отжига, удаляется, хотя и незначительно, от лоренцевой формы.

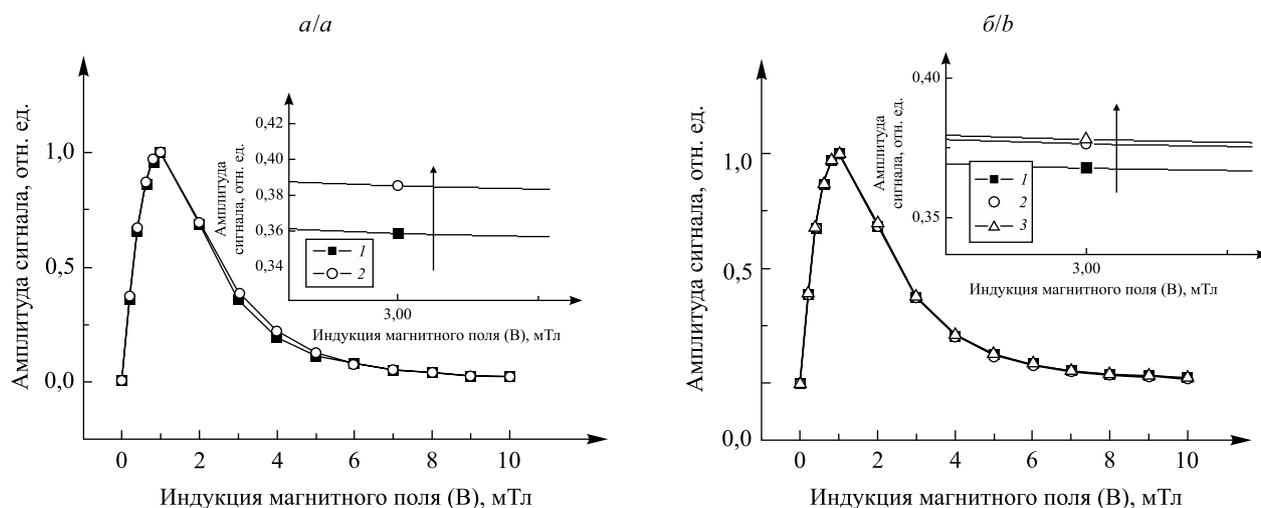


Рис. 3. Формы контура высокополевого компонента экспериментальной линии до отжига (1) и после отжига (2) при 600 °С в течение 30 мин (а). Формы контура высокополевого компонента линии ЭПР для порошков ДНА под воздействием ультрафиолетового излучения (длина волны – 254 нм) (б): 1 – до воздействия УФ-излучения; 2 – 15 мин накопленного облучения УФ; 3 – 75 мин накопленного облучения УФ. Стрелка на вставках указывает направление сдвига формы ЭПР-спектров, отдаляющихся от лоренцевой формы

Fig. 3. The shapes of the experimental line contour for the high-field component before annealing (1) and after (2) at 600 °C for 30 min (a). The shapes of the high-field component of the EPR line for DNA powders exposed to ultraviolet radiation (wavelength – 254 nm) (b): 1 – before UV exposure; 2 – 15 min of accumulated UV irradiation; 3 – 75 min of accumulated UV irradiation. The arrow in the inserts indicates the direction in which the EPR spectra are deviating from the Lorentzian shape

**Изменение параметров спектров ЭПР порошков ДНА
в зависимости от суммарного времени воздействия УФ-излучения**

**Variation of the EPR spectral parameters of DND powders
depending on the total UV-radiation exposure time**

Время, мин	Ширина линии, мТл	Амплитуда сигнала, отн. ед.	g-Фактор	Частота резонанса, ГГц	Амплитуда рубина, отн. ед.	Отношение амплитуды сигнала к амплитуде рубина, отн. ед.
0	0,889	2153	2,002 51	9,315 02	1567	1,374
15	0,898	1733	2,002 51	9,314 62	1864	0,929
30	0,890	2123	2,002 46	9,314 95	2074	1,024
45	0,888	1872	2,002 45	9,314 92	2448	0,765
60	0,889	2183	2,002 45	9,314 96	1900	1,149
75	0,884	1697	2,002 48	9,314 36	2302	0,737

В заключение необходимо отметить следующее: во-первых, природа измеренных парамагнитных центров не меняется при указанных воздействиях; во-вторых, откачка воздуха и воздействие ПАВ одинаково меняют форму линии. Отжиг и облучение УФ-излучением порошка ДНА также одинаково меняют форму линии, но эти изменения противоположны случаям с откачкой воздуха из ампулы с образцом и с воздействием ПАВ. Стремление формы к идеальной лоренцевой свидетельствует о более равномерном распределении ПЦ в исследуемых порошках, а удаление формы линии от идеальной лоренцевой, наоборот, говорит о повышении неравномерности распределения ПЦ [13, с. 829–830]. Как показано выше, откачка воздуха и молекулы ПАВ воздействует на ПЦ, находящиеся только на поверхности фуллереноподобной оболочки. Откачка может вырвать кислород с поверхности и, следовательно, создает дополнительные ПЦ [14, с. 228, 230]. Оказывается, с учетом этих ПЦ распределение ПЦ в порошках ДНА в целом стало более равномерным. Пассивирование парамагнитных центров на поверхности оболочки молекулами ПАВ приводит к равномерному распределению ПЦ в целом, а это свидетельствует о равномерном распределении ПЦ в ядре частиц ДНА в порошках.

Термическая обработка нанодIAMанного порошка при 600 °С приводит к созданию в нем дополнительных ПЦ за счет отрыва газообразующих элементов с поверхности образца. Конечно, месторождение

новых ПЦ зависит от существования более слабых химических связей, которые разрываются при 600 °С. Поскольку ультрафиолетовое излучение приводит к циклическому изменению числа ПЦ, то распределение ПЦ в порошке в целом становится менее равномерным. Интересно, что при воздействии и термической обработки, и УФ-излучения на порошок ДНА амплитуда сигнала эталонного образца рубина увеличивается, что свидетельствует об уменьшении потерь, вносимых образцом в резонатор, а следовательно, и об уменьшении проводимости ДНА.

В результате выполненной работы можно сделать следующие выводы.

- Абсорбированные молекулы кислорода слабо влияют на g -фактор и ширину линии ЭПР. Только малая часть ПЦ (10 %) находятся на поверхности частицы ДНА под влиянием кислорода, а значительная часть ПЦ локализуется вблизи нанокристаллического ядра, т. е. под поверхностной оболочкой частицы.

- Проведенный эксперимент по воздействию ПАВ на порошок ДНА показал, что свободные радикалы остались в образце в недоступной для ПАВ области, экранируемой структурными элементами внешней части исследуемых образцов. Только очень незначительная часть свободных радикалов взаимодействовали с ПАВ таким образом, что не изменили его парамагнитных свойств.

- При нагреве образца ДНА в течение 5 ч от 23 до 600 °С (из них 30 мин – при 600 °С) его парамагнитные свойства не изменились. После отжига в течение 20 мин при 105 °С и последующего отжига в течение 20 мин при 220 °С на стенках ампулы был обнаружен водяной конденсат, что может свидетельствовать о содержании в образцах ДНА связанной воды, которая при нагреве переходит в обычную воду и конденсируется на стенках ампулы.

- Облучение порошков ДНА УФ-излучением приводит только к циклическому изменению числа регистрируемых ПЦ. Циклическое изменение нормированной амплитуды сигнала относительно амплитуды эталонного образца рубина наблюдается также в исходных порошках и порошках, подвергавшихся разным внешним воздействиям, что демонстрирует свойство фрустрации порошков ДНА.

- Изменения формы контура линии ЭПР в результате разных воздействий на исследуемые порошки нанодIAMONDS свидетельствуют о том, что откачка воздуха и молекулы ПАВ оказывают влияние только на ПЦ, локализуемые на поверхности оболочки частицы ДНА, а термическая обработка и облучение УФ-излучением воздействуют на все ПЦ, существующие в порошках ДНА.

- Экспериментально установлено наличие замкнутой фуллереноподобной оболочки, окружающей кристаллическое ядро частицы ДНА, к которому, возможно, примыкает наноразмерный слой структурированной (связанной) воды.

Библиографические ссылки

1. Блюменфельд Л. А., Воеводский В. В., Семёнов А. Г. Применение ЭПР в химии. Новосибирск, 1962.
2. Shames A. I., Panich A. M., Kempinski W., et al. Magnetic resonance study of nanodiamonds / ed. by D. M. Gruen [et al.] // *Synth., Prop. Appl. Ultrananocrystalline Diam. NATO Sci. Ser. II.* 2005. Vol. 192.
3. Levin E. M., Fang X. W., Bud'ko S. L., et al. Magnetization and ¹³C NMR spin-lattice relaxation of nanodiamond powder // *Phys. Rev. B.* 2008. Vol. 77, № 5.
4. Dolmatov V. Yu., Lapchuk N. M., Lapchuk T. M., et al. A Study of defects and impurities in doped detonation nanodiamonds by EPR, Raman scattering, and XRD methods // *JSM.* 2016. Vol. 38, № 4.
5. Валах М. Я., Кончиц А. А., Янчук И. Б. и др. Спектроскопические исследования ископаемых углей с разной степенью метаморфизма // *Физика и техника высоких давлений.* 2011. Т. 21, № 4.
6. Ланге К. Р. Поверхностно-активные вещества: синтез, свойства, анализ, применение : пер. с англ. СПб., 2004.
7. Поверхностно-активные вещества : справочник / под ред. А. А. Абрамзона, Г. М. Паевого. Л., 1979.
8. Osawa E., Ho Dean, Huang Houjin, et al. Consequences of strong and diverse electrostatic potential fields on the surface of detonation nanodiamond particles // *Diam. Relat. Mat.* 2009. Vol. 18.
9. Korobov M. V., Avramenko N. V., Bogachev A. G., et al. Nanophase of water in nanodiamond gel // *J. Phys. Chem. C.* 2007. Vol. 111.
10. Муртазаев А. К., Рамазанов М. К., Бадиев М. К. Малые магнитные частицы с фрустрациями // *Изв. РАН. Сер. физ.* 2014. Т. 78, № 4.
11. Кинцель В. Спиновые стекла как модельные системы для нейронных сетей // *УФН.* 1987. Т. 152.
12. Гинзбург С. Л. Необратимые явления и неэргодичность спиновых стекол. М., 1989.
13. Тихомирова Н. Н., Воеводский В. В. Метод анализа формы линий электронного парамагнитного резонанса // *Оптика и спектроскопия.* 1959. Т. 7, № 6.
14. Stelmakh V., Strygutski L., Shpilevsky E., et al. Oxygen influence on EPR spectra of carbon materials // *Pol. J. Appl. Chem.* 2000. Vol. XLIV, № 4.

References

1. Blumenfeld L. A., Voevodsky V. V., Semenov A. G. [EPR application in chemistry]. Novosibirsk, 1962 (in Russ.).
2. Shames A. I., Panich A. M., Kempinski W., et al. Magnetic resonance study of nanodiamonds. *Synth., Prop. Appl. Ultrananocrystalline Diam. NATO Sci. Ser. II.* 2005. Vol. 192.

3. Levin E. M., Fang X. W., Bud'ko S. L., et al. Magnetization and ^{13}C NMR spin-lattice relaxation of nanodiamond powder. *Phys. Rev. B*. 2008. Vol. 77, No. 5.
4. Dolmatov V. Yu., Lapchuk N. M., Lapchuk T. M., et al. A Study of defects and impurities in doped detonation nanodiamonds by EPR, Raman scattering, and XRD methods. *JSM*. 2016. Vol. 38, No. 4.
5. Valah M. Ja., Konchits A. A., Yanchuk I. B., et al. [Spectroscopic studies of fossil coals with different degrees of metamorphism]. *Fiz. tekh. vysokikh davl.* 2011. Vol. 21, No. 4 (in Russ.).
6. Lange K. R. [Surface-active substances: synthesis, properties, analysis, application]. Saint Petersburg, 2004 (in Russ.).
7. Abramzon A. A., Paevoi G. M. (eds.). [Surface-active substances] : handbook. Leningrad, 1979 (in Russ.).
8. Osawa E., Ho Dean, Huang Houjin, et al. Consequences of strong and diverse electrostatic potential fields on the surface of detonation nanodiamond particles. *Diam. Relat. Mat.* 2009. Vol. 18.
9. Korobov M. V., Avramenko N. V., Bogachev A. G., et al. Nanophase of water in nanodiamond gel. *J. Phys. Chem. C*. 2007. Vol. 111.
10. Murtazaev A. K., Ramazanov M. K., Badiev M. K. [Small magnetic particles with frustrations]. *Izv. RAN. Ser. phys.* 2014. Vol. 78, No. 4 (in Russ.).
11. Kincel V. [Spin glasses as model systems for neural networks]. *Usp. fiz. nauk*. 1987. Vol. 152 (in Russ.).
12. Ginzburg S. L. [Irreversible phenomena and nonergodicity of spin glasses]. Moscow, 1989 (in Russ.).
13. Tikhomirova N. N., Voevodsky V. V. [Method of analyzing the shape of electron paramagnetic resonance lines]. *Opt. spektrosk.* [Opt. spectrosc.]. 1959. Vol. 7, No. 6 (in Russ.).
14. Stelmakh V., Strygutski L., Shpilevsky E., et al. Oxygen influence on EPR spectra of carbon materials. *Pol. J. Appl. Chem.* 2000. Vol. XLIV, No. 4.

Статья поступила в редколлегию 27.06.2017.
Received by editorial board 27.06.2017.

УДК 621.375.826

АНАЛИЗ ФУНКЦИЙ, РЕАЛИЗУЮЩИХ КОРРЕЛЯЦИОННУЮ ОБРАБОТКУ ДЛЯ ИЗМЕРЕНИЯ ДАЛЬНОСТИ ПО ЦИФРОВЫМ ИЗОБРАЖЕНИЯМ

В. Л. КОЗЛОВ¹⁾

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

Отмечено, что корреляционная обработка изображений является одним из наиболее широко применяемых и перспективных инструментов для поиска, идентификации, локализации и слежения за объектами относительно сложных форм. Решается задача анализа возможностей и областей применения функций, реализующих корреляционную обработку цифровых оптических изображений, в случае наличия искажений на изображениях. Исследования проводились для следующих функций: нормированной кросс-корреляционной функции; суммы абсолютных значений разностей; суммы квадратов разностей; нормированной суммы квадратов разностей; RANK-преобразования. Приводится алгоритм уменьшения времени вычисления нормированной кросс-корреляционной функции, обеспечивающий время анализа, сравнимое со временем анализа функций суммы квадратов разностей и суммы абсолютных значений разностей, не использующих нормализацию.

Ключевые слова: корреляционный анализ; цифровое изображение; стереоизображение; измерение расстояний; карта глубины.

Образец цитирования:

Козлов В. Л. Анализ функций, реализующих корреляционную обработку для измерения дальности по цифровым изображениям // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2017. № 3. С. 102–110.

For citation:

Kozlov V. L. Analysis of the functions realizing the correlation processing for the range measuring from digital images. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2017. No. 3. P. 102–110 (in Russ.).

Автор:

Владимир Леонидович Козлов – доктор технических наук, доцент; профессор кафедры квантовой радиоп физики и оптоэлектроники факультета радиоп физики и компьютерных технологий.

Author:

Vladimir Kozlov, doctor of science (technical), docent; professor at the department of quantum radiophysics and optoelectronics, faculty of radiophysics and computer technologies. kozlovvl@bsu.by

ANALYSIS OF THE FUNCTIONS REALIZING THE CORRELATION PROCESSING FOR THE RANGE MEASURING FROM DIGITAL IMAGES

V. L. KOZLOV^a

^aBelarusian State University, Niezaliežnasci Avenue, 4, 220030, Minsk, Belarus

Correlation processing of images is one of the most widely used and promising tools for searching, identifying, localizing, and tracking objects of relatively complex shapes. In the literary sources we have found no information about the possibilities to use various functions implementing image correlation processing to solve problems of measuring distances, dimensional parameters of objects, and constructing a depth map when one of the stereopair images is subjected to noise or monotonic amplitude shift. In this paper we solve the problem of analyzing the possibilities and applications of the functions realizing the correlation processing of digital optical images in the case of image distortions. The studies have been performed for the following functions: normalized cross-correlation function (NCC); the sum of absolute differences (SAD); the sum of squared differences (SSD); the normalized sum of squared difference (NSSD); RANK-conversion. An algorithm is proposed to reduce computational time of the normalized cross-correlation function NCC. It provides an analysis time comparable to that of SSD and SAD functions, where normalization is not used.

Key words: correlation analysis; digital image; stereo image; measurement of distances; depth map.

Развитие теории и методов восстановления трехмерной картины пространства по двумерным цифровым изображениям значительно активизировалось в последнее десятилетие. Это обусловлено востребованностью данных методик в области строительства и архитектуры, зрения мобильных роботов, в геодезии и картографии, а также в криминалистике для повышения оперативности и качества фиксации следов совершенного преступления, в целях решения военных задач, в метеорологии и т. д. [1; 2]. Корреляционная обработка изображений является одним из наиболее широко применяемых и перспективных инструментов для поиска, идентификации, локализации и слежения за объектами относительно сложных форм. В основе любой системы обработки стереоизображений лежат две задачи: получение дальнометрических данных (на основе двух камер путем сопоставления изображений сцены) и построение трехмерных моделей по множеству точек. Для измерения дальности до объектов сцены необходима последовательная реализация следующих этапов [3] обработки изображений:

- калибровка стереокамеры в общей системе координат и получение матриц проекции для каждой из камер;
- захват и ректификация изображений по эпиполярным линиям, построенным на основе матриц преобразований;
- обработка изображений стереопары, триангуляция точек, построение дальнометрических изображений и карт глубины;
- построение и использование в том или ином виде трехмерного облака точек, лежащих на поверхности сканируемого объекта.

Стереосопоставление, или построение карты диспаратетов, – ядро системы стереозрения. Диспаратетом является разница в значении абсциссы пикселя на левом и правом изображениях. При построении карты диспаратетов для каждой точки на одном изображении выполняется поиск парной ей точки на втором изображении. От точности работы данных алгоритмов в значительной степени зависит возможность применения системы в целом [4].

Для решения задачи поиска указанного объекта на втором изображении применяются корреляционные методы анализа сходства фрагментов, которые заключаются в нахождении пиксельных соответствий путем сравнения профилей яркости в окрестности потенциально соответствующих точек разных изображений объекта. Обработка оптических изображений осуществляется с помощью следующих функций, реализующих корреляционный анализ: нормированной кросс-корреляционной функции (Normalized Cross Correlation, NCC) [5]; суммы абсолютных значений разностей (Sum of Absolute Differences, SAD) [6]; суммы квадратов разностей (Sum of Squared Differences, SSD) [7]; нормированной суммы квадратов разностей (Normalized SSD, NSSD) [5]. Функции, реализующие корреляционную обработку, – ZSAD и ZSSD [7] – являются модификациями функций SAD и SSD, при этом в вычислениях учитываются средние интенсивности опорных областей правого и левого изображений. Такая модификация позволяет учитывать разную яркость правого и левого изображений, что в итоге

увеличивает точность найденных соответствий. Функция ранговой оценки (RANK) подобна функции SAD, однако вместо сравнения значений цветовой интенсивности производится сравнение порядковых номеров интенсивности пикселей [8]. Функция Census также осуществляет попиксельное сравнение опорных областей и оперирует относительным порядком значений интенсивности. Значение функции увеличивается на единицу, если разность значений интенсивности сравниваемых пикселей и установленных медиан имеет разный знак [5].

Однако в литературных источниках отсутствуют сведения о возможностях применения различных функций, реализующих корреляционную обработку изображений, для решения задачи измерения расстояний до объектов и их размеров, если одно из изображений стереопары подвергается влиянию шумов или монотонному амплитудному сдвигу. В реальных ситуациях это возможно в случае, если стереоизображение реализуется с помощью двух камер, при этом один из объективов камер подвергается внешнему воздействию пыли, грязи и т. п. В настоящей работе решается задача анализа возможностей и областей применения функций, обеспечивающих корреляционную обработку цифровых оптических изображений, в случае наличия искажений на изображениях. Исследование проводилось для следующих функций.

NCC хорошо показывает себя при перепадах яркости и смещении цвета на фрагментах поиска и определяется выражением

$$K(d) = \frac{\sum_{u,v} (I_1(u,v) - \bar{I}_1) \cdot (I_2(u+d,v) - \bar{I}_2)}{\sqrt{\sum_{u,v} (I_1(u,v) - \bar{I}_1)^2 \cdot (I_2(u+d,v) - \bar{I}_2)^2}}, \quad (1)$$

где I_1, I_2 – интенсивность точек первого и второго изображения соответственно; \bar{I}_1, \bar{I}_2 – средняя интенсивность точек первого и второго изображений внутри окон сканирования соответственно; u, v – координаты объекта на фотоприемной матрице вдоль строк и столбцов соответственно; d – сдвиг между окнами сканирования.

SSD – более простая с математической точки зрения функция:

$$K(d) = \sum_{u,v} (I_1(u,v) - I_2(u+d,v))^2. \quad (2)$$

NSSD – нормированная SSD, вычисляется в соответствии с выражением

$$K(d) = \sum_{u,v} \left[\frac{I_1(u,v) - \bar{I}_1}{\sum_{u,v} (I_1(u,v) - \bar{I}_1)^2} - \frac{I_2(u+d,v) - \bar{I}_2}{\sum_{u,v} (I_2(u+d,v) - \bar{I}_2)^2} \right]^2. \quad (3)$$

SAD – аналог SSD, часто используется для снижения вычислительных затрат и определяется выражением

$$K(d) = \sum_{u,v} |I_1(u,v) - I_2(u+d,v)|. \quad (4)$$

Метод, предложенный в [8], использует локальное непараметрическое преобразование изображения перед поиском соответствия (RANK-преобразование). Его сущность заключается в подсчете количества пикселей в окрестности текущего, интенсивность которых меньше, чем интенсивность текущего (центрального) пикселя. Пример RANK-преобразования представлен на рис. 1. Для устранения влияния фоновой засветки и шумов изображения результаты обработки сравниваются областями. В качестве функции соответствия обработанных областей используется функция SAD

$$K(d) = \sum_{u,v} |I'_1(u,v) - I'_2(u+d,v)|, \quad (5)$$

$$I'_1(u,v) = \sum_{m,n} I_k(m,n) < I_k(u,v). \quad (6)$$

77 41 12
84 50 39 ⇒ 3
90 72 55

Рис. 1. Пример RANK-преобразования

Fig. 1. Example of RANK-conversion

Для проведения исследований при измерении расстояния до дискретных объектов было разработано программное приложение на языке программирования *Java*, реализующее корреляционную обработку изображений, интерфейс которого имеет два синхронизированных рабочих окна, предназначенных для ввода исследуемого стереоизображения. Приложение обеспечивает выполнение следующих пользовательских операций: изменение размера изображений, выбор вида корреляционной функции (КФ), реализующей корреляционную обработку изображений; определение спектрального диапазона анализа. Выбор спектрального диапазона анализа позволяет получать значение КФ отдельно в красном, зеленом, синем участках спектра, а также в их суммарном диапазоне. Для реализации корреляционного анализа на первом изображении задается окно сканирования, содержащее участок исследуемого объекта. Окно с такими же координатами автоматически формируется и на втором снимке. Каждую итерацию окно сдвигается на 1 пк как вдоль оси x , так и вдоль оси y в системе координат изображения, затем вычисляется значение корреляционной функции. На интерфейс выводится график зависимости КФ от разности координат и максимальное (или минимальное) значение корреляционной функции с указанием координат точки совпадения и разности координат между положением рассматриваемой точки на первом и втором снимках. Программное приложение обеспечивает построение трехмерного графика корреляционной функции для всех точек изображения, пример которого представлен на рис. 2. На графике четко выделяется точка наилучшего совпадения выделенного фрагмента изображения на снимках стереопары. По вертикальной оси представлено значение корреляционной функции, а по горизонтальной – координаты точек на фотоприемной матрице в пикселях. Программа осуществляет автоматическое деление заданной области анализа на целое число координатных линий, поэтому координаты линий на графике могут иметь дробные значения.

Были проведены исследования зависимости значения КФ от отношения сигнал – шум на изображении для функций (1)–(4). На исходное изображение добавлялся гауссов шум с помощью стандартных редакторов. Результаты показали, что для функции NCC даже при отношении сигнал – шум, равном 1, значение КФ близко к 0,9, а при отношении сигнал – шум, равном 0,11, составляет 0,3. При этом система во всех случаях правильно обнаруживает анализируемый объект на зашумленном изображении и определяет его координаты. Результаты исследования для функций SSD и SAD показали, что с уменьшением отношения сигнал – шум значение КФ ухудшается гораздо быстрее, в этом случае при отношении

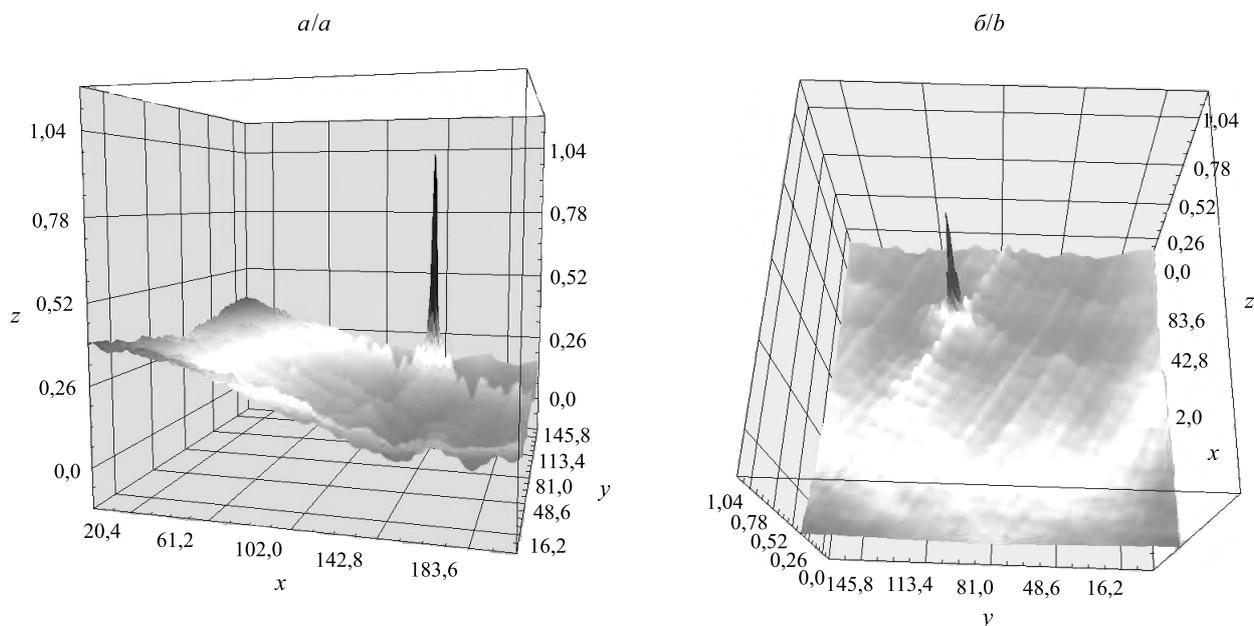


Рис. 2. Трехмерный график корреляционной функции: a – вид сбоку; b – вид сверху

Fig. 2. Three-dimensional graph of the correlation function: a – side view; b – top view

сигнал – шум, составляющем $\leq 0,3$, объект не распознается на зашумленном изображении. Результаты для функции NSSD показали, что с уменьшением отношения сигнал – шум значение для этой функции ухудшается значительно быстрее, чем для функции NCC. При этом система во всех случаях правильно определяет координаты анализируемого объекта на зашумленном изображении. Кроме того, были проведены исследования зависимости значения корреляционной функции NCC от яркости и контрастности изображения. Определено, что при изменении яркости и контрастности одного изображения на 50 % значение корреляционной функции изменяется незначительно (в пределах 0,02), но при изменении яркости и контрастности на 80 % и более выделенный объект не распознается на исследуемом изображении.

Вторая часть проведенных исследований связана с анализом возможностей и быстродействия функций, реализующих корреляционную обработку (1)–(4), и RANK-метода (5), (6) для построения карты глубины по дальности заданной области пространства. Выбор корреляционной функции осуществлялся на основании анализа зависимостей числа ошибок и времени вычисления корреляционных функций при разных размерах окна сканирования с учетом возможности искажения одного из изображений стереопары. Перечисленные функции применялись к тестовым изображениям базы Middlebury [9], содержащей ректифицированные снимки стереопары и эталонную карту диспаратета. Функция RANK использует два окна, размеры которых могут отличаться: окно предобработки в формуле (6) и окно постобработки в выражении (5). Исследование проводилось для трех размеров окна предобработки: 3×3 , 5×5 , 7×7 пк в легенде графиков RANK 3, RANK 5 и RANK 7 соответственно. Окна сканирования (окна постобработки для RANK) выбирались квадратными со стороной от 3 до 25 пк и шагом 2 пк. Графики, показывающие соотношение времени обработки стереоизображения и процента ошибок исследуемых функций для разных размеров окна сканирования (от 3×3 до 25×25 пк) при построении карты глубины для исходных изображений, представлены на рис. 3.

В данном случае процент ошибок измерений определялся как отношение ошибочных измерений дальности к общему числу измерений. Очевидно, что с ростом размера окна сканирования будет уменьшаться число ошибок и увеличиваться время обработки для всех функций. В связи с этим на графике, приведенном на рис. 3 (а также на рис. 4, 5 и 6), представлено соотношение числа ошибок и времени обработки для различных окон сканирования, при этом размер окон сканирования явно не указывается. Из графика на рис. 3 следует, что лучшими параметрами для построения карты глубины обладают RANK-преобразования с размерами окна предобработки 5×5 и 7×7 пк, при этом все функции, не использующие нормализацию, требуют меньше вычислительных затрат и не уступают в точности NCC. Ухудшение результатов некоторых функций с ростом размеров окна сканирования происходит из-за накопления ошибок на границах объектов на изображении.

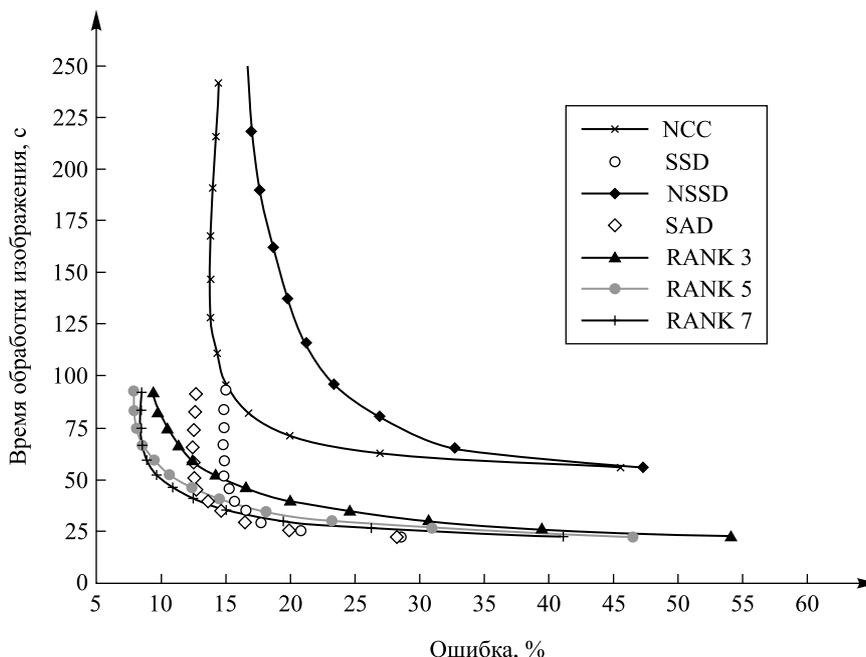


Рис. 3. Время обработки и процент ошибок корреляционных методов для разных размеров окна сканирования (от 3×3 до 25×25 пк)

Fig. 3. Processing time and error percent of the correlation methods for different sizes of scan window (from 3×3 to 25×25 pixels)

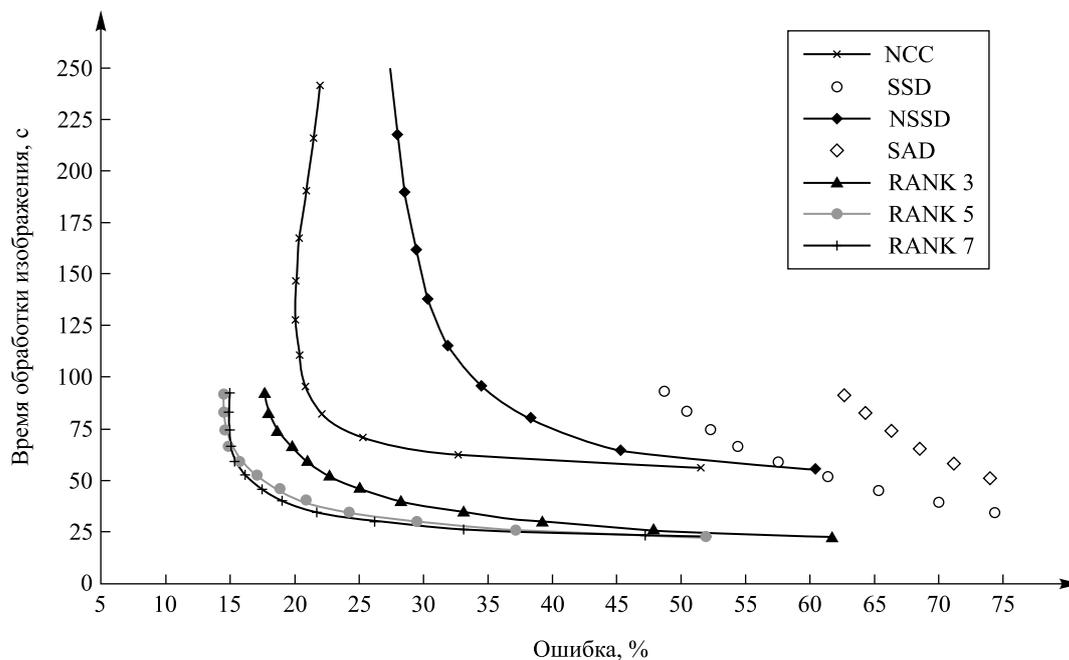


Рис. 4. Время обработки и процент ошибок корреляционных методов при искажении одного из изображений стереопары (монотонный амплитудный сдвиг)

Fig. 4. Processing time and error percent of the correlation methods in the case of distortion of one of the stereopair images (monotonic amplitude shift)

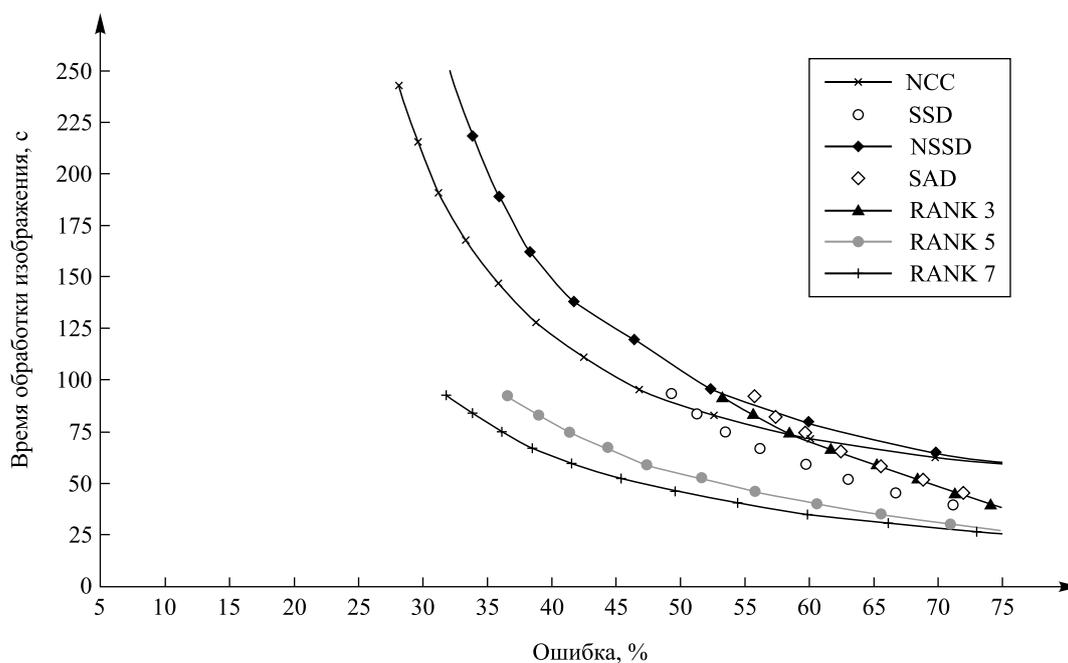


Рис. 5. Время обработки и процент ошибок корреляционных методов при искажении одного из изображений стереопары (гауссов шум и монотонный амплитудный сдвиг)

Fig. 5. Processing time and error percent of the correlation methods with distortion of one of the stereopair images (Gaussian noise and monotonic amplitude shift)

Графики, представленные на рис. 4 и 5, показывают соотношение времени обработки стереоизображения и процента ошибок исследуемых функций при построении карты глубины для случая, когда одно из изображений зашумлено (монотонное изменение яркости на 60 % на рис. 4 и монотонное изменение яркости на 60 % и аддитивный гауссов шум на рис. 5 при отношении сигнал – шум, равном 0,5).

Изменение яркости (на 60 %) одного из изображений (см. рис. 4) приводит к ухудшению точности обнаружения для всех функций. Хуже всего с таким типом искажений справляются функции SSD и SAD. Наибольшей устойчивостью к изменениям яркости обладает функция NCC – у нее наблюдается наименьший рост числа ошибок. По абсолютным значениям точности и скорости для данного случая лучшими показателями обладает RANK-методика с окнами 5×5 и 7×7 пк.

Добавление на одно из изображений не только монотонного амплитудного сдвига, но и шума по Гауссу (отношение сигнал – шум равно 0,5) приводит к дальнейшему ухудшению точности обнаружения для всех функций (см. рис. 5). Такой характер помех существенно снижает точность RANK-метода. В этом случае лучшие результаты по точности показывает функция NCC.

Необходимо отметить, что значительный процент ошибок корреляционных методов (в некоторых случаях 20–30 %) определяется следующими причинами:

- карта глубины строится путем измерения дальности до всех объектов на изображении первого снимка стереопары. Поскольку снимки стереопары делаются из разных точек пространства, то часть объектов, присутствующих на первом снимке, будут отсутствовать на втором снимке, что делает невозможным измерение дальности до них;
- часть объектов на втором снимке могут быть заслонены другими объектами, что также делает невозможным измерение дальности до них;
- добавление на одно из изображений шума и изменение яркости на нем приводят к тому, что выделенный объект с помощью некоторых функций не распознается на втором изображении стереопары.

При построении карты глубины заданной области пространства определяющим фактором является минимальное время анализа для обеспечения работы системы в реальном масштабе времени (например, в робототехнических системах), в то время как при дискретных измерениях дальности необходимо обеспечить высокую точность и достоверность измерений расстояний до выделенных объектов. Таким образом, в результате проведенных исследований установлено, что наиболее эффективной для практического применения в системах измерения расстояний и построения карты глубины по цифровому стереоизображению является функция NCC как наиболее надежная и устойчивая к воздействию шумов и искажений.

Из полученных результатов также следует, что по времени измерений NCC несколько уступает функциям, не использующим нормализацию, – SSD и SAD. В связи с этим был разработан алгоритм уменьшения времени вычисления нормированной кросс-корреляционной функции NCC, основанный на уменьшении числа вычислительных процедур [10]. Алгоритм заключается в следующем. Путем тождественных преобразований формула (1) может быть приведена к виду

$$R(\Delta u, \Delta v) = \frac{\sum_{x,y} I_1(x, y) I_2(x + \Delta u, y + \Delta v) - \frac{\sum_{x,y} I_1(x, y) \sum_{x,y} I_2(x + \Delta u, y + \Delta v)}{\Delta x \cdot \Delta y}}{\sqrt{\left[\sum_{x,y} I_1^2(x, y) - \frac{\left(\sum_{x,y} I_1(x, y) \right)^2}{\Delta x \cdot \Delta y} \right] \left[\sum_{x,y} I_2^2(x + \Delta u, y + \Delta v) - \frac{\left(\sum_{x,y} I_2(x + \Delta u, y + \Delta v) \right)^2}{\Delta x \cdot \Delta y} \right]}}. \quad (7)$$

Для сигнала I_1 в процессе сканирования суммы не меняются, так как не зависят от $\Delta u, \Delta v$. Значения суммы I_2 , входящие в (7), можно преобразовать таким образом, что часть из них будут представлять суммы, вычисленные на предыдущей итерации. Использование результатов предыдущей итерации обеспечивает уменьшение числа вычислительных процедур, а следовательно, уменьшение времени измерений. Практический выигрыш по времени при вычислении с помощью корреляционной функции NCC выделенных изображений с использованием формулы (7), в сравнении с формулой прототипа (1), демонстрирует рис. 6.

Из полученных данных следует, что при размере окна сканирования 11×11 пк выигрыш составляет 2,5 раза, при размере окна 31×31 пк – 5,12 раза, а при размере окна 60×60 пк – 10 раз, что имеет

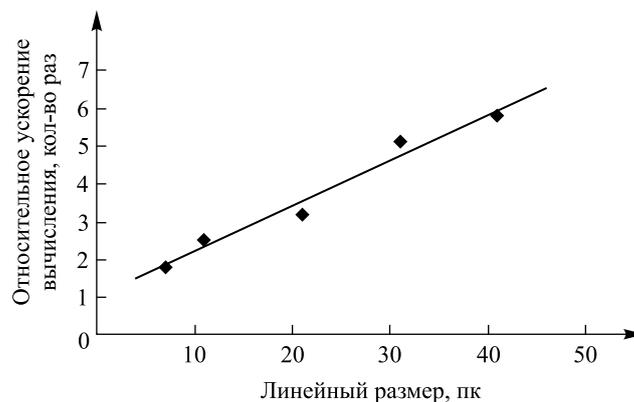


Рис. 6. Зависимость увеличения скорости вычисления корреляционной функции от размеров окна сканирования

Fig. 6. Increase in the calculation rate of the correlation function versus size of the scanning window

существенное значение при работе системы в реальном масштабе времени. Таким образом, за счет использования результатов предыдущей итерации обеспечивается значительный выигрыш по времени в зависимости от размеров окна сканирования, при этом в случае размера окна сканирования 15×15 пк время анализа корреляционной функции NCC сравнимо со временем анализа функций SSD и SAD, не использующих нормализацию.

Таким образом, разработано программное приложение для корреляционной обработки оптических изображений, позволяющее проанализировать возможности применения различных функций, реализующих корреляционную обработку цифровых оптических изображений, в целях решения задач измерения расстояний по стереоизображению и построения карты глубины заданной области пространства. Установлено, что наилучшими параметрами для решения указанной задачи на основе корреляционного анализа стереоизображения обладают функции NCC и NSSD, которые наиболее устойчивы к воздействию шумов и искажений и обеспечивают правильное обнаружение объекта вплоть до отношения сигнал – шум, составляющего приблизительно 1 : 10. При этом более предпочтительной является функция NCC, время измерений которой при размере окна сканирования 15×15 пк сравнимо со временем анализа функций SSD и SAD, не использующих нормализацию.

Библиографические ссылки

1. Hartley R., Zisserman A. Multiple view geometry in computer vision. Cambridge, 2004.
2. Mamaev N., Lukin A., Yurin D. HeNLM-3D: A 3D computer tomography image denoising algorithm // Pattern Recognition and Information Processing (PRIP'2014) : proc. of the XII Intern. conf. (Minsk, 28–30 May, 2014) / ed. by A. Tuzikov, V. Kovalev. Minsk, 2014. P. 176–180.
3. Кургалин С. Д., Крыловецкий А. А., Божок А. О. Методы и алгоритмы построения трехмерных моделей в системах компьютерного зрения // Телематика'2014 : тр. XXI Всерос. науч.-метод. конф. (Санкт-Петербург, 23–26 июня 2014 г.) / под ред. А. О. Сергеева. СПб., 2014. С. 123–124.
4. Szeliski R. Computer vision: algorithms and applications. Berlin, 2011.
5. Brown M. Z. Advances in computational stereo // IEEE trans. PAMI. 2003. Vol. 25, № 8. P. 993–1008.
6. Чумаченко А. В. Оптимизация вычисления SAD для задачи восстановления рельефа по изображениям стереопар в высокопроизводительных системах стереозрения // Изв. ЮФУ. Техн. науки. 2013. № 3 (140). С. 89–96.
7. Гузик В. Ф., Чумаченко А. В. Статистический метод оптимизации локальных алгоритмов установления пиксельных соответствий на стереопарах // Изв. высш. учеб. заведений. Сев.-Кавк. регион. Сер.: Техн. науки. 2011. № 4. С. 20–25.
8. Zabih R., Woodfill J. Non-parametric local transforms for computing visual correspondence // Computer Vision – ECCV'94 : proc. of Third Eur. conf. on computer vision (Stockholm, 2–6 May, 1994). Stockholm, 1994. P. 150–158.
9. Middlebury stereo datasets [Electronic resource]. 2011. URL: <http://vision.middlebury.edu/stereo/data> (date of access: 14.09.2013).
10. Способ определения расстояния до объекта посредством цифровой фотокамеры : пат. 17809 Респ. Беларусь, МКИ G 01 C 3/00 / В. Л. Козлов, А. С. Васильчук ; заявитель Белорус. гос. ун-т. № а 20111773 ; заявл. 20.12.11 ; опубл. 09.09.13 // Афіцыйны бюл. / Нац. цэнтр інтэлектуал. уласнасці. 2013. № 5. С. 143.

References

1. Hartley R., Zisserman A. Multiple view geometry in computer vision. Cambridge, 2004.
2. Mamaev N., Lukin A., Yurin D. HeNLM-3D: A 3D computer tomography image denoising algorithm. *Pattern Recognition and Information Processing (PRIP'2014)* : proc. of the XII Intern. conf. (Minsk, 28–30 May, 2014) / ed. by A. Tuzikov, V. Kovalev. Minsk, 2014. P. 176–180.

3. Kurgalin S. D., Krylovetsky A. A., Bozhok A. O. [Methods and algorithms for constructing three-dimensional models in computer vision systems]. *Telematika'2014* : proc. of the XXI All-Russian sci. and method. conf. (Saint Petersburg, 23–26 June, 2014). Saint Petersburg, 2014. P. 123–124 (in Russ.).
4. Szeliski R. *Computer vision: algorithms and applications*. Berlin, 2011.
5. Brown M. Z. Advances in computational stereo. *IEEE trans. PAMI*. 2003. Vol. 25, No. 8 P. 993–1008.
6. Chumachenko A. V. [Optimization of SAD calculation for the problem of relief reconstruction from stereopairs images in high-performance stereovision systems]. *Izv. Yuzhnogo federal'nogo univ. Tekh. nauki*. 2013. No. 3 (140). P. 89–96 (in Russ.).
7. Guzik V. F., Chumachenko A. V. [Statistical method of optimization of local algorithms for establishing pixel correspondences on stereopairs]. *Izv. vyssh. uchebn. zaved. Sev.-Kavk. reg. Ser.: Tekh. nauki*. 2011. No. 4. P. 20–25 (in Russ.).
8. Zabih R., Woodfill J. Non-parametric local transforms for computing visual correspondence. *Computer Vision – ECCV'94* : proc. of Third Eur. conf. on computer vision (Stockholm, 2–6 May, 1994). Stockholm, 1994. P. 150–158.
9. Middlebury stereo datasets [Electronic resource]. 2011. URL: <http://vision.middlebury.edu/stereo/data> (date of access: 14.09.2013).
10. [Method for determining the distance to the object through a digital camera] : pat. 17809 Rep. Belarus, MKI G 01 C 3/00 / V. L. Kozlov, A. S. Vasilchuk ; declarer Belarus. state univ. No. a 20111773 ; declar. 20.12.11 ; publ. 09.09.13. *Off. newsl.* 2013. No. 5. P. 143 (in Russ.).

Статья поступила в редколлегию 05.07.2017.
Received by editorial board 05.07.2017.

УДК 537.31

ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ НА ПЕРЕМЕННОМ ТОКЕ ГИБРИДНЫХ ПЛЕНОК ИЗ УГЛЕРОДНЫХ И WS₂-НАНОТРУБОК

**В. К. КСЕНЕВИЧ¹⁾, Н. И. ГОРБАЧУК¹⁾, ХО ВЬЕТ¹⁾,
М. В. ШУБА²⁾, О. Г. ПОДДУБСКАЯ²⁾, Д. И. ЮКО²⁾**

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

²⁾НИУ «Институт ядерных проблем» БГУ, ул. Бобруйская, 11, 220030, г. Минск, Беларусь

Исследована электропроводность на переменном токе гибридных пленок из однослойных углеродных нанотрубок и неорганических нанотрубок дисульфида вольфрама с различным соотношением между органической и неорганической компонентами в частотном диапазоне 100 Гц – 1 МГц при значениях температуры, равных 4,2; 77; 300 К. Установлено, что при температурах 77 и 300 К активная (резистивная) часть импеданса гибридных

Образец цитирования:

Ксеневиц В. К., Горбачук Н. И., Хо Вьет, Шуба М. В., Поддубская О. Г., Юко Д. И. Электропроводность на переменном токе гибридных пленок из углеродных и WS₂-нанотрубок // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2017. № 3. С. 111–119.

For citation:

Ksenevich V. K., Gorbachuk N. I., Ho Viet, Shuba M. V., Paddubskaya A. G., Yuko D. I. AC-conductivity of carbon nanotubes / WS₂ nanotubes hybrid films. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2017. No. 3. P. 111–119 (in Russ.).

Авторы:

Виталий Казимирович Ксеневиц – кандидат физико-математических наук; заведующий научно-исследовательской лабораторией физики электронных материалов кафедры физики полупроводников и нанoeлектроники физического факультета.

Николай Иванович Горбачук – кандидат физико-математических наук, доцент; доцент кафедры физики полупроводников и нанoeлектроники физического факультета.

Хо Вьет – аспирант кафедры физики полупроводников и нанoeлектроники физического факультета. Научный руководитель – В. К. Ксеневиц.

Михаил Владимирович Шуба – кандидат физико-математических наук; ведущий научный сотрудник лаборатории нанoeлектромагнетизма.

Олеся Германовна Поддубская – научный сотрудник лаборатории нанoeлектромагнетизма.

Дмитрий Иванович Юко – младший научный сотрудник лаборатории нанoeлектромагнетизма.

Authors:

Vitaly Ksenevich, PhD (physics and mathematics); head of the research laboratory of physics of electronic materials, department of semiconductor physics and nanoelectronics, faculty of physics.

ksenevich@bsu.by

Nikolay Gorbachuk, PhD (physics and mathematics), docent; associate professor at the department of semiconductor physics and nanoelectronics, faculty of physics.

gorbachuk@bsu.by

Ho Viet, postgraduate student at the department of semiconductor physics and nanoelectronics, faculty of physics.

hviet@bsu.by

Mikhail Shuba, PhD (physics and mathematics); leading researcher at the laboratory of nanoelectromagnetism.

mikhail.shuba@gmail.com

Alesia Paddubskaya, researcher at the laboratory of nanoelectromagnetism.

paddubskaya@gmail.com

Dzmitry Yuko, junior researcher at the laboratory of nanoelectromagnetism.

d.yuko@gmail.com

пленок существенно превышала реактивную. При температуре 4,2 К обнаружено возрастание вклада реактивной составляющей (емкостного типа) в импеданс гибридных пленок, которое наблюдается при росте частоты и содержания нанотрубок WS₂. Предложена эквивалентная схема замещения, характеризующая низкотемпературную электропроводность гибридных пленок на переменном токе, которая учитывает влияние контактных барьеров между углеродными нанотрубками.

Ключевые слова: гибридные пленки; углеродные нанотрубки; нанотрубки дисульфида вольфрама; электропроводность; импедансная спектроскопия.

Благодарность. Авторы выражают благодарность Р. Тенне (факультет материалов и поверхностей Научного института имени Вейцмана, г. Реховот, Израиль) и А. Зак (факультет науки Холонского института технологий, г. Холон, Израиль) за изготовление нанотрубок дисульфида вольфрама, а также А. Д. Вику (факультет физики и астрономии Бохумского Рурского университета, г. Бохум, Германия) за предоставление возможности проведения низкотемпературных измерений импеданса.

AC-CONDUCTIVITY OF CARBON NANOTUBES / WS₂ NANOTUBES HYBRID FILMS

V. K. KSENEVICH^a, N. I. GORBACHUK^a, HO VIET^a,
M. V. SHUBA^b, A. G. PADDUBSKAYA^b, D. I. YUKO^b

^aBelarusian State University, Niezaliežnasci Avenue, 4, 220030, Minsk, Belarus

^bResearch Institute for Nuclear Problems, Belarusian State University,
Babrujskaja Street, 11, 220030, Minsk, Belarus

Corresponding author: V. K. Ksenevich (ksenevich@bsu.by)

AC-conductivity of hybrid films consisting of carbon nanotubes and inorganic tungsten disulfide nanotubes with different ratios of the organic and inorganic components has been investigated over the frequency range 100 Hz – 1 MHz at temperatures 4.2; 77; 300 K. It has been found that an active (resistive) part of the impedance of these hybrid films is significantly greater than the reactive part at 77 and 300 K. The increasing contribution of a reactive (capacitive type) part of the impedance is observed at 4.2 K and is more obvious in the high frequency range and at the increasing content of WS₂ nanotubes in the hybrid films. The equivalent circuit characterizing low-temperature conductivity of hybrid films with regard to the influence of contact barriers between low-ohmic carbon nanotubes is suggested.

Key words: hybrid films; carbon nanotubes; tungsten disulfide nanotubes; electrical conductivity; impedance spectroscopy.

Acknowledgements. Authors would like to acknowledge R. Tenne (Department of Materials and Interfaces, Weizmann Institute of Science, Rehovot, Israel) and A. Zak (Department of Sciences, Holon Institute of Technology, Holon, Israel) for fabrication of tungsten disulfide nanotubes and A. D. Wieck (Department of Physics and Astronomy, Bochum Ruhr-University, Bochum, Germany) for possibility of implementation of low temperature impedance measurements.

Введение

Вскоре после открытия углеродных нанотрубок (УНТ) были синтезированы неорганические многослойные нанотрубки (НТ) и фуллереноподобные частицы дисульфида вольфрама [1]. Тем самым было продемонстрировано, что возможность образования нанотрубок и наночастиц не является уникальным свойством только лишь углерода. В настоящее время получены нанотрубки из большого количества неорганических материалов, таких как WS₂, MoS₂ [2], MoSe₂ [3], WSe₂ [3], GaN [4], и многих других. Для прогнозирования возможности получения новых неорганических наноструктур используются методы компьютерного моделирования [5]. Как и для углеродных нанотрубок, электрические свойства неорганических НТ определяются их хиральной структурой [6]. В отличие от УНТ, которые могут проявлять как металлические, так и полупроводниковые свойства, многослойные неорганические НТ, например MoS₂-НТ и WS₂-НТ, состоят из чередующихся слоев атомов разных элементов, проявляют полупроводниковые свойства и в зависимости от индексов хиральности являются прямозонными либо непрямозонными полупроводниками с различной шириной запрещенной зоны [7; 8]. Исследование электрических свойств индивидуальных неорганических нанотрубок, в частности WS₂-НТ, также показало, что

они проявляют полупроводниковые свойства, которые зависят от внешних условий, например от содержания паров воды и кислорода в атмосфере [9]. Показана возможность создания полевого транзистора на основе одиночных нанотрубок дисульфида вольфрама [10]. Исследованы электрические свойства композитов на основе эпоксидной смолы, в которых наполнителем служили WS_2 -НТ [11]. Однако композиты с углеродными нанотрубками в качестве наполнителя и массивы углеродных нанотрубок характеризуются более высокой электропроводностью по сравнению со структурами из неорганических нанотрубок в силу наличия в их составе металлических нанотрубок. Ранее нами был предложен метод получения гибридных пленок из одностенных углеродных нанотрубок (ОУНТ) и нанотрубок либо фуллереноподобных наночастиц дисульфида вольфрама [12]. Создание гибридных материалов, состоящих из характеризующихся высокой электропроводностью УНТ и неорганических НТ, обладающих высоким электрическим сопротивлением, позволяет управлять их электрическими и электромагнитными параметрами, изменяя соотношение между органической и неорганической компонентами.

Цель настоящей работы – характеристика электрических свойств гибридных пленок из углеродных и WS_2 -нанотрубок с различным соотношением в них органической и неорганической компонент в широком интервале температур методом импедансной спектроскопии в диапазоне частот 100 Гц – 1 МГц.

Методика эксперимента

Для изготовления гибридных пленок использовался метод фильтрации через пористые мембранные фильтры (Millipore), размер пор которых составляет 0,22 мкм. Процедура получения гибридных пленок описана в работе [12]. В качестве органической компоненты пленок использовались ОУНТ диаметром 0,8–1,2 нм и длиной 1 мкм в диапазоне 100 нм, неорганической – многостенные нанотрубки дисульфида вольфрама (WS_2 -НТ) диаметром 20–180 нм и длиной 1–30 мкм. Для получения образцов с различным соотношением между ОУНТ и WS_2 -НТ при фильтрации через пористые мембраны в фильтровальной ячейке смешивались их суспензии в 1 % водном растворе поверхностно-активного вещества додецилсульфата натрия, содержащего смеси ОУНТ и WS_2 -НТ в разных объемных соотношениях (1 мл ОУНТ : 10 мл WS_2 -НТ, 2 мл ОУНТ : 10 мл WS_2 -НТ, 5 мл ОУНТ : 10 мл WS_2 -НТ). В дальнейшем образцы гибридных пленок будем обозначать как ГП1-10, ГП2-10 и ГП5-10. Для получения однородного распределения нанотрубок по объему суспензии предварительно проводился процесс ультразвуковой обработки сосудов, содержащих оба типа нанотрубок, в течение 1 ч при частоте ультразвука 44 кГц. Для удаления оставшихся агломератов ОУНТ, пучков ОУНТ и каталитических частиц полученная суспензия центрифугировалась в течение 10 мин при ускорении 12 000 g.

После фильтрации пленки переносились на изолирующие подложки поликристаллического Al_2O_3 . Контакты к пленкам формировались нанесением электропроводящего лака на основе серебра. Исследование электропроводности гибридных пленок на переменном токе проводилось с использованием измерителя импеданса Agilent 4284A (США). Измерение комплексного сопротивления пленок $Z = Z' + iZ''$ проведено в диапазоне частот от 100 Гц до 1 МГц при значениях температуры (T) 4,2; 77 и 300 К. Амплитуда синусоидального сигнала составляла 40 мВ. Аппроксимация экспериментальных данных и определение параметров эквивалентных схем замещения осуществлялись с использованием программы *EIS Spectrum Analyser 1.0*.

Результаты эксперимента и их обсуждение

Для установления влияния неорганических нанотрубок на электропроводность гибридных пленок предварительно были измерены зависимости действительной Z' и мнимой Z'' частей импеданса пленок из ОУНТ от частоты f переменного тока и напряжения U_b постоянного смещения. Обнаружено, что пленки из ОУНТ характеризуются импедансом резистивного типа во всем диапазоне частот и при всех температурах. Импеданс пленок, полученных только из неорганических нанотрубок WS_2 , превышал пределы измерения прибора Agilent 4284A, и детального их исследования не проводилось. Данные результаты позволяют сделать вывод о том, что импеданс пленок из неорганических НТ на много порядков превышает импеданс пленок из ОУНТ в силу следующих основных факторов: 1) электропроводность металлических ОУНТ значительно больше электропроводности нанотрубок WS_2 ; 2) контактное сопротивление между полупроводниковыми неорганическими нанотрубками может существенно превышать контактное сопротивление между металлическими ОУНТ. В результате в гибридных пленках перенос заряда в основном происходит по углеродным нанотрубкам. Соответственно, по мере уменьшения содержания ОУНТ следует ожидать снижения эффективной электропроводности гибридных пленок.

Типичные значения действительной и мнимой частей импеданса пленок ОУНТ и гибридных пленок при различных температурах и частотах представлены в таблице.

Значения угла сдвига фаз между напряжением и током, а также значения действительной и мнимой частей импеданса образцов
Phase-shift angles between voltage and current, real and imaginary parts of the impedance for the samples under study

Частота (f), кГц	Образцы											
	ОУНТ			ОУНТ – 1 млл WS ₂ -НТ (ГП1-10)			ОУНТ – 2 млл WS ₂ -НТ (ГП2-10)			ОУНТ – 5 млл WS ₂ -НТ (ГП5-10)		
	φ, град	Z', Ом	-Z'', Ом	φ, град	Z', кОм	-Z'', Ом	φ, град	Z', кОм	-Z'', Ом	φ, град	Z', кОм	-Z'', Ом
$T = 4,2 \text{ K}$												
0,1	-0,005	38 544	3	-	-	-	13 730	15	-0,01	907	0,2	
1	-0,002	38 433	1	-	-	-	13 788	209	-0,1	907	1,3	
10	-0,05	38 423	33	-83	7630	66 353	13 429	2557	-11	908	15	
100	-0,5	38 441	332	-89,995	545	6255	2494	5512	-66	883	158	
1000	-5,2	38 570	3489	-89,999	0,0007	605	21	655	-88	212	389	
$T = 77 \text{ K}$												
0,1	-0,016	757,2	0,21	-0,01	330,7	0,05	46,27	0,009	-0,011	6,79	0,0017	
1	-0,010	757,0	0,13	-0,03	330,7	0,15	46,27	0,005	-0,007	6,79	0,0009	
10	-0,013	757,8	0,18	-0,3	330,8	1,7	46,28	0,033	-0,041	6,79	0,0019	
100	-0,021	758,1	0,28	-3,2	330,3	19	46,30	0,33	-0,4	6,79	0,0099	
1000	-0,241	767,8	3,23	-30,7	249,6	148	46,68	3,63	-4,5	6,89	0,1100	
$T = 300 \text{ K}$												
0,1	-0,011	324,94	0,06	-0,01	75,2	0,016	14,47	0,004	-0,014	2,48	0,0008	
1	-0,007	324,88	0,04	-0,02	74,9	0,02	14,45	0,002	-0,007	2,47	0,0004	
10	-0,010	324,77	0,06	-0,10	74,7	0,1	14,43	0,005	-0,021	2,47	0,0006	
100	-0,009	324,78	0,05	-0,89	74,3	1	14,41	0,04	-0,160	2,47	0,0018	
1000	-0,155	328,52	0,89	-8,67	72,9	11	14,54	0,41	-1,622	2,50	0,0194	

По итогам проведенных исследований и анализа экспериментальных результатов было установлено, что при комнатной температуре величина активной части импеданса гибридных пленок значительно превышала величину реактивной части. Например, даже для образца ГП1-10, обладающего наибольшим электрическим сопротивлением, полученного из раствора, который состоял из 1 мл ОУНТ и 10 мл WS₂-НТ, при $T = 300$ К на частоте 1 МГц $Z' = 72,9$ кОм, $-Z'' = 11$ кОм, а величина угла сдвига фаз между током и напряжением (φ) составляла всего $-8,7^\circ$. При этом в отличие от пленок из ОУНТ, в которых величина реактивной части импеданса $Z''(f)$ была незначительной по сравнению с активной его частью $Z'(f)$ во всем диапазоне частот (100 Гц – 1 МГц) и при всех температурах, в гибридных пленках наблюдалось возрастание вклада реактивной части импеданса в области высоких частот, а также при уменьшении температуры.

Измеренные при температуре 4,2 К зависимости $Z'(f)$ и $Z''(f)$, а также годографы импеданса для гибридных пленок показаны на рис. 1–3 соответственно. Отметим, что величина реактивного импеданса гибридных пленок существенно возрастает при низких температурах.

При уменьшении содержания углеродных нанотрубок в гибридных пленках, как видно из таблицы, наблюдается увеличение активной и реактивной частей их комплексного сопротивления, а также величины отрицательного угла сдвига фаз между прикладываемым к образцам переменным напряжением и протекающим через них током. Однако, несмотря на разницу в величинах Z' и Z'' для гибридных пленок с различным содержанием в них ОУНТ, было установлено, что при температуре 4,2 К комплексный импеданс гибридных пленок ОУНТ – WS₂-НТ аппроксимируется при помощи показанной на вставках на рис. 1–3 одинаковой эквивалентной схемы замещения, состоящей из двух последовательно соединенных контуров. Первый из этих контуров состоит из параллельно соединенных резистора R и конденсатора C_1 , а второй – из параллельно соединенных конденсатора C_2 и элемента постоянной фазы CPE (constant phase element). Элемент CPE не имеет строго определенного физического смысла и используется для моделирования различных систем как с сосредоточенными, так и с распределенными параметрами [13]. Импеданс этого элемента определяется следующим образом:

$$Z_{CPE} = \frac{1}{Q(i\omega)^n},$$

где Q – фактор пропорциональности; n – показатель степени, определяющий характер частотной зависимости ($-1 \leq n \leq 1$); i – мнимая единица [13]. Для целых значений $n = 1, 0, -1$ элемент CPE вырождается до классических элементов – конденсатора, резистора и индуктивности с сосредоточенными параметрами C, R и L соответственно [14].

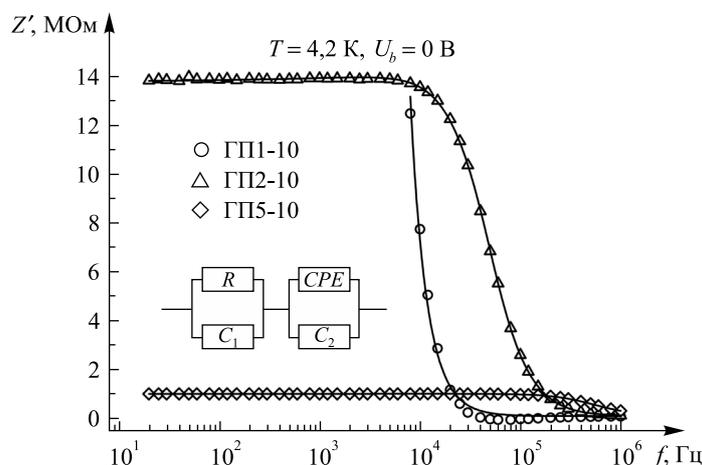


Рис. 1. Зависимости $Z'(f)$ гибридных пленок, полученных из суспензий, содержащих смеси ОУНТ и WS₂-НТ в различных соотношениях (1 мл ОУНТ : 10 мл WS₂-НТ, 2 мл ОУНТ : 10 мл WS₂-НТ, 5 мл ОУНТ : 10 мл WS₂-НТ).

Сплошные линии – аппроксимация экспериментальных результатов показанной на вставке эквивалентной схемой замещения. Измерения выполнены при температуре 4,2 К

Fig. 1. $Z'(f)$ dependences of the hybrid films fabricated from suspensions which consist of the mixture of SWCNT and WS₂-NT in different ratios (1 ml SWCNT : 10 ml WS₂-NT, 2 ml SWCNT : 10 ml WS₂-NT, 5 ml SWCNT : 10 ml WS₂-NT).

Solid lines – approximation of the experimental results by the equivalent circuit diagram (see inset in the figure). Measurements are carried out at 4.2 K

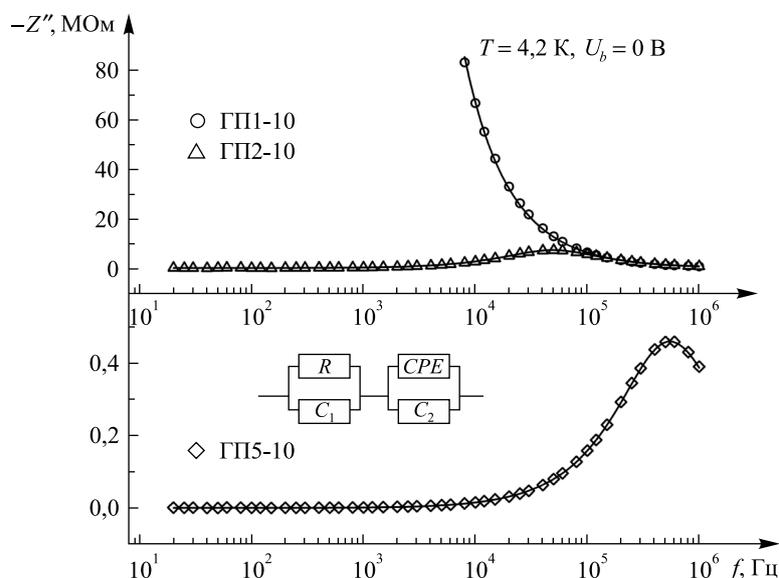


Рис. 2. Зависимости $Z''(f)$ гибридных пленок, полученных из суспензий, содержащих смеси ОУНТ и WS_2 -НТ в различных соотношениях (1 мл ОУНТ : 10 мл WS_2 -НТ, 2 мл ОУНТ : 10 мл WS_2 -НТ, 5 мл ОУНТ : 10 мл WS_2 -НТ).

Сплошные линии – аппроксимация экспериментальных результатов показанной на вставке эквивалентной схемой замещения. Измерения выполнены при температуре 4,2 К

Fig. 2. $Z''(f)$ dependences of the hybrid films fabricated from suspensions which consist of the mixture of SWCNT and WS_2 -NT in different ratios (1 ml SWCNT : 10 ml WS_2 -NT, 2 ml SWCNT : 10 ml WS_2 -NT, 5 ml SWCNT : 10 ml WS_2 -NT).

Solid lines – approximation of the experimental results by the equivalent circuit diagram (see inset in the figure). Measurements are carried out at 4.2 K

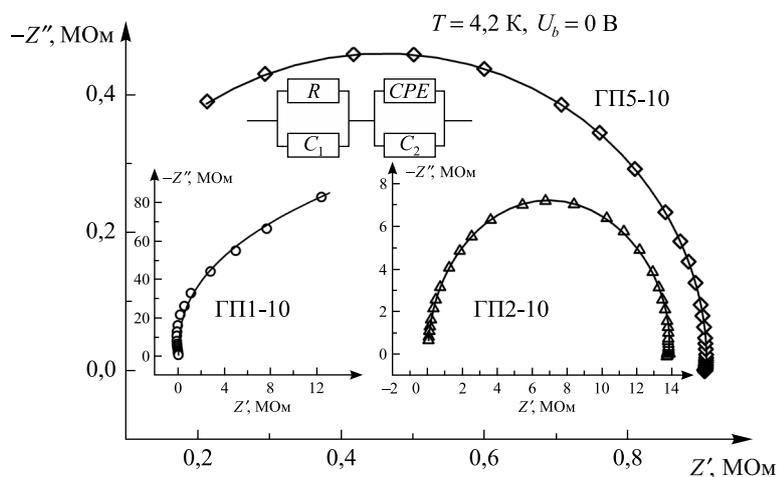


Рис. 3. Годографы импеданса гибридных пленок, полученных из суспензий, содержащих смеси ОУНТ и WS_2 -НТ в различных соотношениях (1 мл ОУНТ : 10 мл WS_2 -НТ, 2 мл ОУНТ : 10 мл WS_2 -НТ, 5 мл ОУНТ : 10 мл WS_2 -НТ).

Сплошные линии – аппроксимация экспериментальных результатов показанной на вставке эквивалентной схемой замещения. Измерения выполнены при температуре 4,2 К

Fig. 3. Impedance diagrams of the hybrid films fabricated from suspensions which consist of the mixture of SWCNT and WS_2 -NT in different ratios (1 ml SWCNT : 10 ml WS_2 -NT, 2 ml SWCNT : 10 ml WS_2 -NT, 5 ml SWCNT : 10 ml WS_2 -NT).

Solid lines – approximation of the experimental results by the equivalent circuit diagram (see inset in the figure). Measurements are carried out at 4.2 K

В результате расчетов были получены значения параметра n , близкие к нулю, для пленок ГП5-10 и значения параметра n в диапазоне от $-0,27$ до $-0,46$ для пленок ГП1-10 и ГП2-10 (в зависимости от приложенного напряжения постоянного смещения). Таким образом, для пленок ГП5-10 элемент CPE проявляет свойства резистора, а для пленок ГП1-10 и ГП2-10 наряду с резистивными свойствами наблюдается реактивный вклад индуктивного типа.

Приложение напряжения постоянного смещения в диапазоне от 1 до 5 В приводит к существенному уменьшению величины импеданса пленок при температуре 4,2 К, а также к уменьшению полученного в результате моделирования значения сопротивления резистора R . Годографы импеданса, построенные из измеренных при различных напряжениях постоянного смещения при температуре 4,2 К зависимостей $Z'(f)$ и $Z''(f)$ для образцов ГП1-10, ГП2-10 и ГП5-10, показаны на рис. 4–6 соответственно. Из рис. 4–6 видно, что приложение напряжения постоянного смещения приводит к снижению как действительной, так и мнимой части импеданса пленок в области низких частот в силу уменьшения высоты контактных барьеров между проводящими углеродными нанотрубками [15]. Эффект сильнее проявляется для образцов ГП1-10 с наименьшим содержанием ОУНТ. Имеющие нелинейный вид зависимости электропроводности гибридных пленок от напряжения постоянного смещения $G(U_b)$ будут представлены и обсуждены в последующей работе.

Таким образом, можно сделать вывод о том, что резистор R и конденсатор C_1 моделируют эффективные значения сопротивления и емкости контактных барьеров между проводящими углеродными нанотрубками, а параллельно соединенные конденсатор C_2 и элемент постоянной фазы CPE – емкость и электропроводность самих ОУНТ. При этом использование элемента постоянной фазы CPE позволяет учесть дисперсию в значениях активной и реактивной (индуктивной) частей импеданса нанотрубок. Индуктивный импеданс пленок может быть связан с так называемым явлением кинетической индуктивности, характерным для бездефектных ОУНТ [16], присутствие которых возможно в исследованных образцах.

Следует отметить, что для образцов с наименьшим содержанием углеродных нанотрубок при температуре 4,2 К в области низких частот (меньше ~ 10 кГц) значения комплексного сопротивления превышали допустимый предел измерений импеданса прибора Agilent 4284А. Можно предположить, что включение нанотрубок WS_2 с низкой проводимостью в матрицу, состоящую из высокопроводящих ОУНТ, приводит к сильному возрастанию роли контактных барьеров между отдельными одностенными углеродными нанотрубками внутри пленки.

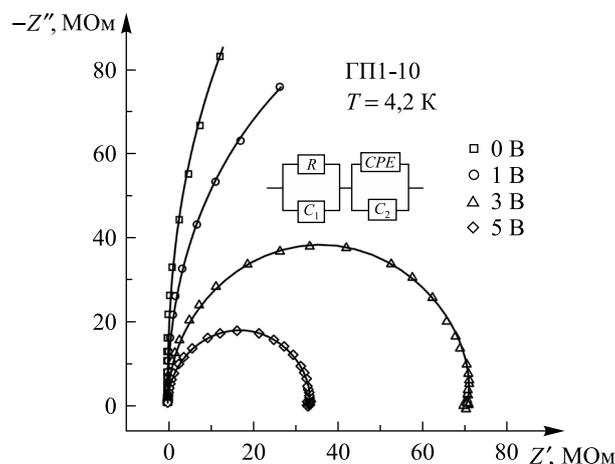


Рис. 4. Годографы импеданса гибридных пленок, построенные по результатам измерений зависимостей $Z'(f)$ и $Z''(f)$, выполненных при различных значениях постоянного напряжения смещения (указаны на рисунке). Сплошные линии – аппроксимация экспериментальных результатов показанной на вставке эквивалентной схемой замещения. Пленки получены из суспензий, содержащих смеси ОУНТ и WS_2 -НТ в соотношении 1 мл ОУНТ : 10 мл WS_2 -НТ. Измерения выполнены при температуре 4,2 К

Fig. 4. Impedance diagrams of hybrid films constructed on the basis of the measuring results for $Z'(f)$ and $Z''(f)$ dependences at different bias voltages (indicated in the figure). Solid lines – approximation of the experimental results by the equivalent circuit diagram (see inset in the figure). Films are fabricated from suspensions consisting of the mixture of SWCNT and WS_2 -NT in the ratios 1 ml SWCNT : 10 ml WS_2 -NT. Measurements are carried out at 4.2 K

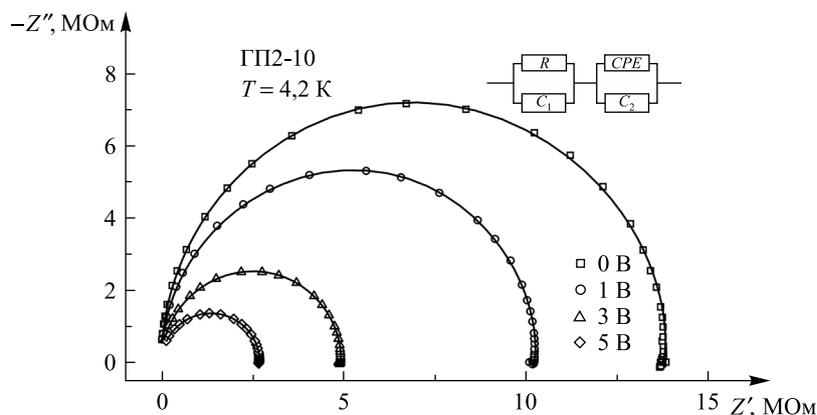


Рис. 5. Годографы импеданса гибридных пленок, построенные по результатам измерений зависимостей $Z'(f)$ и $Z''(f)$, выполненных при различных значениях постоянного напряжения смещения (указаны на рисунке). Сплошные линии – аппроксимация экспериментальных результатов показанной на вставке эквивалентной схемой замещения. Пленки получены из суспензий, содержащих смеси ОУНТ и WS_2 -НТ в соотношении 2 мл ОУНТ : 10 мл WS_2 -НТ.

Измерения выполнены при температуре 4,2 К

Fig. 5. Impedance diagrams of hybrid films constructed from the measuring results for $Z'(f)$ and $Z''(f)$ dependences at different bias voltages (indicated in the figure). Solid lines – approximation of the experimental results by the equivalent circuit diagram (see inset in the figure). Films are fabricated from suspensions consisting of the mixture of SWCNT and WS_2 -NT in the ratios 2 ml SWCNT : 10 ml WS_2 -NT. Measurements are carried out at 4.2 K

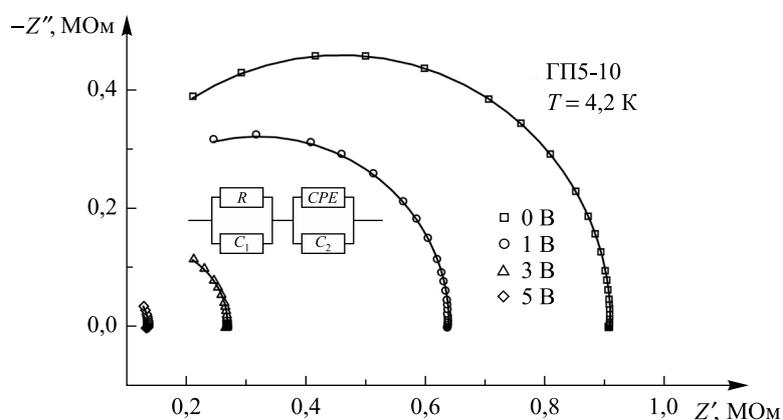


Рис. 6. Годографы импеданса гибридных пленок, построенные по результатам измерений зависимостей $Z'(f)$ и $Z''(f)$, выполненных при различных значениях постоянного напряжения смещения (указаны на рисунке). Сплошные линии – аппроксимация экспериментальных результатов показанной на вставке эквивалентной схемой замещения. Пленки получены из суспензий, содержащих смеси ОУНТ и WS_2 -НТ в соотношении 5 мл ОУНТ : 10 мл WS_2 -НТ.

Измерения выполнены при температуре 4,2 К

Fig. 6. Impedance diagrams of hybrid films constructed from the measuring results for $Z'(f)$ and $Z''(f)$ dependences at different bias voltages (indicated in the figure). Solid lines – approximation of the experimental results by the equivalent circuit diagram (see inset in the figure). Films are fabricated from suspensions consisting of the mixture of SWCNT and WS_2 -NT in the ratios 5 ml SWCNT : 10 ml WS_2 -NT. Measurements are carried out at 4.2 K

Заключение

В работе представлены результаты исследований электропроводности на переменном токе (в диапазоне частот 100 Гц – 1 МГц) гибридных пленок из однослойных углеродных нанотрубок и многослойных нанотрубок дисульфида вольфрама в широком температурном интервале (4,2; 77 и 300 К). Установлено, что при значениях T , равных 77 и 300 К, пленки проявляют резистивные свойства (активная часть импеданса существенно превышает реактивную). Увеличение концентрации неорганических

нанотрубок в гибридных пленках приводит к повышению роли контактных барьеров между углеродными нанотрубками, характеризующимися высокой электропроводностью. Показано, что при низких температурах импеданс пленок определяется емкостью и сопротивлением барьеров между углеродными нанотрубками, а также электрическими свойствами самих нанотрубок.

Библиографические ссылки

1. Tenne R., Margulis L., Genut M., et al. Polyhedral and cylindrical structures of tungsten disulfide // *Lett. Nat.* 1992. Vol. 360, № 6403. P. 444–446.
2. Feldman Y., Wasserman E., Srolovitz D. J., et al. High-Rate, Gas-Phase Growth of MoS₂ Nested Inorganic Fullerenes and Nanotubes // *Science*. 1995. Vol. 267, № 5195. P. 222–225.
3. Nath M., Rao C. N. M. MoSe₂ and WSe₂ nanotubes and related structures // *Chem. Commun.* 2001. № 21. P. 2236–2237.
4. Li J. Y., Chen X. L., Qiao Z. Y., et al. Synthesis of GaN nanotubes // *J. Mater. Sci. Lett.* 2001. Vol. 20, № 21. P. 1987–1988.
5. Ивановская В. В., Ивановский А. Л. О некоторых направлениях компьютерного моделирования неорганических наноструктур // *Наноструктуры. Матем. физика и моделирование*. 2009. Т. 1, № 1. С. 7–24.
6. Deniz H., Qin L.-C. Determination of the chiral indices of tungsten disulfide (WS₂) nanotubes by electron diffraction // *Chem. Phys. Lett.* 2012. Vol. 552. P. 92–96.
7. Seifert G., Terrones H., Terrones M., et al. Structure and Electronic Properties of MoS₂ Nanotubes // *Phys. Rev. Lett.* 2000. Vol. 85, № 1. P. 146–149.
8. Seifert G., Terrones H., Terrones M., et al. On the electronic Properties of WS₂ Nanotubes // *Solid State Comm.* 2000. Vol. 114, № 5. P. 245–248.
9. Zhang C., Ning Z., Liu Y., et al. Electrical transport properties on water and oxygen absorption // *Appl. Phys. Lett.* 2012. Vol. 101, № 11. P. 113112-1–113112-5.
10. Levi R., Bitton O., Leitus G., et al. Field-effect transistors based on WS₂ nanotubes with high current-carrying capacity // *Nano Lett.* 2013. Vol. 13, № 8. P. 3736–3741.
11. Sedova A., Khodorov S., Ehre D., et al. Dielectric and Electrical Properties of WS₂ Nanotubes/Epoxy Composites and Their Use for Stress Monitoring of Structures // *J. Nanomaterials*. 2017. Vol. 2017. Article ID 4838095. P. 1–13.
12. Ksenevich V. K., Gorbachuk N. I., Viet H., et al. Electrical properties of carbon nanotubes / WS₂ nanotubes (nanoparticles) hybrid films // *Nanosystems: Phys., Chem., Mathem.* 2016. Vol. 7, № 3. P. 37–43.
13. Barsoukov E., Macdonald J. R. Impedance Spectroscopy: Theory, Experiment, and Applications. Hoboken, 2005. P. 37.
14. Буйанова Е. С., Емельянова Ю. В. Импедансная спектроскопия электролитических материалов [Электронный ресурс]. 2008. URL: <http://elar.urfu.ru/handle/10995/1542> (дата обращения: 12.06.2017).
15. Зи С. М. Физика полупроводниковых приборов : в 2 ч. М., 1984. Ч. 1. С. 283.
16. Burke P. J. An RF Circuit Model for Carbon Nanotubes // *IEEE Trans. Nanotechnol.* 2003. Vol. 2, № 1. P. 55–58.

References

1. Tenne R., Margulis L., Genut M., et al. Polyhedral and cylindrical structures of tungsten disulfide. *Lett. Nat.* 1992. Vol. 360, No. 6403. P. 444–446. DOI: 10.1038/360444a0.
2. Feldman Y., Wasserman E., Srolovitz D. J., et al. High-Rate, Gas-Phase Growth of MoS₂ Nested Inorganic Fullerenes and Nanotubes. *Science*. 1995. Vol. 267, No. 5195. P. 222–225. DOI: 10.1126/science.267.5195.222.
3. Nath M., Rao C. N. M. MoSe₂ and WSe₂ nanotubes and related structures. *Chem. Commun.* 2001. No. 21. P. 2236–2237. DOI: 10.1039/B107296J.
4. Li J. Y., Chen X. L., Qiao Z. Y., et al. Synthesis of GaN nanotubes. *J. Mater. Sci. Lett.* 2001. Vol. 20, No. 21. P. 1987–1988. DOI: 10.1023/A:1013155323435.
5. Ivanovskaya V. V., Ivanovsky A. L. [On some directions of computer modeling of inorganic nanostructures]. *Nanostruktury. Matem. fiz. modelirovanie*. 2009. Vol. 1, No. 1. P. 7–24 (in Russ.).
6. Deniz H., Qin L.-C. Determination of the chiral indices of tungsten disulfide (WS₂) nanotubes by electron diffraction. *Chem. Phys. Lett.* 2012. Vol. 552. P. 92–96. DOI: 10.1016/j.cplett.2012.09.041.
7. Seifert G., Terrones H., Terrones M., et al. Structure and Electronic Properties of MoS₂ Nanotubes. *Phys. Rev. Lett.* 2000. Vol. 85, No. 1. P. 146–149. DOI: 10.1103/PhysRevLett.85.146.
8. Seifert G., Terrones H., Terrones M., et al. On the electronic Properties of WS₂ Nanotubes. *Solid State Comm.* 2000. Vol. 114, No. 5. P. 245–248. DOI: 10.1016/S0038-1098(00)00047-8.
9. Zhang C., Ning Z., Liu Y., et al. Electrical transport properties on water and oxygen absorption. *Appl. Phys. Lett.* 2012. Vol. 101, No. 11. P. 113112-1–113112-5. DOI: 10.1063/1.4752440.
10. Levi R., Bitton O., Leitus G., et al. Field-effect transistors based on WS₂ nanotubes with high current-carrying capacity. *Nano Lett.* 2013. Vol. 13, No. 8. P. 3736–3741. DOI: 10.1021/nl401675k.
11. Sedova A., Khodorov S., Ehre D., et al. Dielectric and Electrical Properties of WS₂ Nanotubes/Epoxy Composites and Their Use for Stress Monitoring of Structures. *J. Nanomaterials*. 2017. Vol. 2017. Article ID 4838095. P. 1–13. DOI: 10.1155/2017/4838095.
12. Ksenevich V. K., Gorbachuk N. I., Viet H., et al. Electrical properties of carbon nanotubes / WS₂ nanotubes (nanoparticles) hybrid films. *Nanosystems: Phys., Chem., Mathem.* 2016. Vol. 7, No. 3. P. 37–43. DOI: 10.17586/2220-8054-2016-7-1-37-43.
13. Barsoukov E., Macdonald J. R. Impedance Spectroscopy: Theory, Experiment, and Applications. Hoboken, 2005. P. 37.
14. Buyanova E. S., Emelyanova Yu. V. [Impedance spectroscopy of electrolytic materials]. 2008. URL: <http://elar.urfu.ru/handle/10995/1542> (date of access: 12.06.2017) (in Russ.).
15. Zi S. M. [Physics of semiconductor devices] : in 2 parts. Moscow, 1984. Part 1. P. 283 (in Russ.).
16. Burke P. J. An RF Circuit Model for Carbon Nanotubes. *IEEE Trans. Nanotechnol.* 2003. Vol. 2, No. 1. P. 55–58. DOI: 10.1109/TNANO.2003.808503.

ВЫДАЮЩИЕСЯ УЧЕНЫЕ БЕЛАРУСИ

OUTSTANDING SCIENTISTS OF BELARUS



Леонид Иванович
КИСЕЛЕВСКИЙ
(1927–1991)

Leonid Ivanovich
KISELEVSKII
(1927–1991)

Исполнилось 90 лет со дня рождения академика, профессора, доктора физико-математических наук, лауреата государственных премий БССР (1974) и СССР (1991), заслуженного деятеля науки БССР, автора более 320 научных работ ректора Белорусского государственного университета (1983–1990) Леонида Ивановича Киселевского.

Л. И. Киселевский родился 12 апреля 1927 г. в г. Минске. После окончания в 1952 г. физического факультета Белорусского государственного университета Леонид Иванович в течение трех лет преподавал физику в одной из минских средних школ. В 1955 г. поступил в аспирантуру Минского государственного педагогического института имени А. М. Горького, где читал лекции для студентов по общей физике и теоретической механике.

После окончания аспирантуры Леонид Иванович был принят на работу в Институт физики АН БССР в лабораторию спектроскопии (руководитель – академик Б. И. Степанов). В этот период Л. И. Киселевский выполнил ряд исследований по созданию методов спектрального анализа электролитов, разработал экспрессный метод определения малых концентраций примесных элементов, проводил занятия на курсах повышения квалификации работников спектральных лабораторий заводов республики.

В 1960 г. Леонид Иванович успешно защитил кандидатскую диссертацию, посвященную изучению влияния полярности электродов дугового разряда на эффективность спектрального анализа.

Интенсивные исследования в области физики плазмы в Беларуси были начаты в 1950–60-х гг. в связи с необходимостью создания космической техники. Институт физики АН БССР совместно с другими организациями участвовал в исследованиях по разработке космической аппаратуры и решению проблемы развития экспериментальных методов изучения входа летательных аппаратов в плотные слои атмосферы. Эти эксперименты в значительной степени определили дальнейшую судьбу Леонида Ивановича. В конце 1961 г. по предложению академика М. А. Ельяшевича он перешел во вновь созданную лабораторию высокотемпературной оптики (ЛВТО) на должность старшего научного сотрудника и через некоторое время был назначен заместителем заведующего лабораторией. С этого времени начинается его плодотворная научная деятельность в области исследований четвертого состояния материи.

В 1965 г. в Институте физики АН БССР был создан спутниковый спектрограф, который обусловил успешное проведение экспериментальных исследований эмиссионных спектров плазменных оболочек, возникающих при вхождении аппаратов в плотные слои атмосферы, что впоследствии позволило полностью смоделировать и рассчитать гиперзвуковое движение космических аппаратов в атмосфере.

Кроме того, Л. И. Киселевский продолжал исследования по тематике, которой занимался ранее, – спектральному анализу, использовал в аналитической практике результаты, полученные им

и его коллегами при изучении физики плазмы, а также читал лекции студентам в высших учебных заведениях республики.

После научной стажировки в Великобритании (1966–1967) Леонид Инанович начал развивать в лаборатории ЛВТО исследования свойств чистой плазмы. Его научные интересы охватывали широкий круг проблем в области спектроскопии, физики плазмы, лазерной физики и электрических разрядов. Под руководством Л. И. Киселевского разработаны способы получения высокостабильной электроразрядной плазмы, включающей широкий диапазон термодинамических параметров, что позволило измерить ряд важных спектроскопических констант устойчивых двухатомных молекул, атомов и ионов разной зарядности, необходимых для диагностики плазмы и расчетов процессов лучистого переноса энергии в ней. Значителен вклад ученого в изучение сильноточных разрядов в газах при атмосферном давлении. Были получены экспериментальные данные, которые позволили доказать наличие нормального тлеющего разряда при атмосферном давлении, что значительно расширило представление об условиях существования газоразрядной плазмы.

Большое значение имеют труды Леонида Ивановича по изучению волновых процессов в плазме. Исследования линейных и нелинейных волновых процессов в плазме стимулировались работами по проблемам лазерного термоядерного синтеза и высокочастотного нагрева в установках типа Токамак.

На основе исследований процессов взаимодействия плазмы с различными материалами под руководством Л. И. Киселевского разработаны способы обработки материалов (резка, плавление, напыление, декоративная обработка) и создана аппаратура для контроля процессов обработки материалов.

Начиная с 1968 г. в течение 15 лет Леонид Иванович заведовал лабораторией спектроскопии низкотемпературной плазмы (ЛСНТП), будучи одновременно заместителем директора по научной работе Института физики АН БССР (1970–1978), главным ученым секретарем Президиума АН БССР (1978–1983). В 1970 г. ему присуждена ученая степень доктора физико-математических наук по специальности «Оптика», ученое звание профессора присвоено в 1971 г., в 1972 г. он избран член-корреспондентом, в 1980 г. – академиком АН БССР.

Не прерывались творческие связи Леонида Ивановича с созданным в Институте физики АН БССР научным коллективом и в период его работы ректором БГУ, где он развивал исследования в области атомной физики и физической информатики.

Впервые проведенные с борта космического корабля спектроскопические исследования свойств плазмы, возникающей при вхождении в плотные слои атмосферы, дали непосредственные сведения о плазме, спектре ее излучения, условиях, в которых эксплуатируются теплозащитные покрытия, уточнили параметры, необходимые для проведения

расчетов тепловых потоков на поверхности спускаемых аппаратов.

На основе работ по изучению процесса входа космических аппаратов в плотные слои атмосферы Земли в 1968 г. в ЛСНТП Института физики АН БССР по инициативе Л. И. Киселевского были начаты исследования из космоса оптико-спектроскопических свойств Земли и окружающей ее атмосферы.

Проведение этих исследований обусловило создание крупной научной школы, которая начала свое существование в стенах Института физики АН БССР и получила дальнейшее развитие в научно-исследовательском учреждении «Институт прикладных физических проблем имени А. Н. Севченко» БГУ. В ходе исследований и разработок по этой тематике было опубликовано более 450 научных работ, защищено 16 кандидатских и 6 докторских диссертаций. Результаты совместных исследований вошли в кандидатскую диссертацию нашего земляка летчика-космонавта В. В. Коваленка, в докторские диссертации летчиков-космонавтов Г. М. Гречко и В. П. Савиных.

В 1991 г. Л. И. Киселевский, А. Ф. Чернявский и Б. И. Беляев с соавторами были удостоены Государственной премии СССР в области науки и техники.

В 1983 г. Л. И. Киселевский возглавил Белорусский ордена Трудового Красного Знамени государственный университет имени В. И. Ленина – флагман высшей школы республики, входивший в число 25 ведущих вузов СССР. С 1984 г. Леонид Иванович исполнял также обязанности председателя совета ректоров вузов г. Минска. За время работы на посту ректора БГУ ярко раскрылись организаторские способности Л. И. Киселевского, не только являвшегося крупным ученым-физиком, высококвалифицированным педагогом, но и ставшего истинным лидером университета и высшей школы республики.

С приходом Леонида Ивановича в БГУ существенно активизировалась научная деятельность. При его содействии в БГУ был открыт Научно-исследовательский институт ядерных проблем. Университет тесно сотрудничал с институтами Академии наук БССР, научными центрами СССР и зарубежных стран.

Л. И. Киселевский активно участвовал в общественно-политической жизни республики. Он был кандидатом, а затем членом Центрального комитета Компартии Белоруссии, членом бюро горкома КПБ, членом бюро парткома БГУ, входил в состав Белсовпрофа, а с 1984 г. являлся депутатом Верховного Совета БССР.

Семь лет работы Леонида Ивановича Киселевского в БГУ являются ярким примером высокопрофессионального, самоотверженного служения обществу, выполнения одной из важнейших задач – обучения и воспитания молодежи.

Коллеги и ученики

СОДЕРЖАНИЕ

ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ

<i>Гулис И. М., Купреев А. Г., Демидов И. Д., Воронай Е. С.</i> Многоцелевой спектрометр с дифракционной решеткой для спектроскопии с пространственным разрешением	4
<i>Безрученко В. С., Мозильный В. В., Станкевич А. И., Муравский Ал. Ан., Муравский Ан. Ал., Кухто И. Н.</i> Формирование centrosymmetric распределений световой интенсивности для экспонирования фоточувствительных ориентирующих слоев жидкокристаллических линз	12
<i>Меняйлова Д. Н., Шундалов М. Б.</i> Поверхность потенциальной энергии основного триплетного состояния молекулы триоксида урана UO_3	20

ФИЗИКА БИОСТРУКТУР

<i>Драпеза А. И., Лобан В. А., Хмельницкий А. И., Скороход Г. А., Сысов В. А.</i> Электрофизический метод ускоренного обнаружения и дифференциации микроорганизмов на основе пленочных биоструктур и планарно-емкостных чип-форматов.....	26
---	----

ФИЗИКА ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ЯВЛЕНИЙ

<i>Высоцкая В. А., Шапочкина И. В., Розенбаум В. М., Трахтенберг Л. И.</i> Диффузия броуновских частиц в пространственно-периодическом потенциале с конечным временем жизни.....	33
<i>Новицкий А. В., Родригес Р. Х. Альварес, Галынский В. М.</i> Рассеяние электромагнитных волн неоднородными цилиндрически-симметричными бианизотропными объектами	41

ФИЗИКА ЯДРА И ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ

<i>Лэ Тхи Зиеу Хьен, Хрущинский А. А., Кутень С. А.</i> Распределение амплитуд импульсов ионизации ионизационной камеры деления вследствие разброса фрагментов деления по величинам их заряда, массы и энергии.....	50
---	----

ФИЗИКА И ТЕХНИКА ПОЛУПРОВОДНИКОВ

<i>Карих Е. Д.</i> Определение параметров микровибраций слабоотражающих объектов по кепстру сигнала самосмешения в полупроводниковом лазере	57
---	----

ФИЗИКА СВЧ-ИЗЛУЧЕНИЯ

<i>Заерко Д. В., Гайда Л. С., Свистун А. Ч., Калоша Л. А.</i> Использование высокочастотного резонанса сегнетоэлектрических материалов для управления характеристиками рассеяния СВЧ-излучения.....	65
---	----

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

<i>Доросинец В. А., Хо Вьет.</i> Влияние электрического поля на квантовые поправки к электропроводности углеродных материалов	73
<i>Гончаров В. К., Пузырев М. В., Ступакевич В. Ю.</i> Физические процессы в лазерном источнике ионов алюминия с управляемой энергией для нанесения нанопленок	79
<i>Оджаев В. Б., Плебанович В. И., Тарасик М. И., Челябинский А. Р.</i> О влиянии упругих напряжений на диффузию бора в кремнии	88
<i>Нгуен Тхи Тхань Бинь.</i> Влияние вакуумирования, поверхностно-активного вещества, длительного теплового нагрева и облучения ультрафиолетовым излучением на свободные радикалы в порошках детонационных наноалмазов.....	95

ФИЗИКА ДАЛЬНОМЕТРИИ

<i>Козлов В. Л.</i> Анализ функций, реализующих корреляционную обработку для измерения дальности по цифровым изображениям.....	102
--	-----

ФИЗИКА НАНОСТРУКТУР

<i>Ксеневиц В. К., Горбачук Н. И., Хо Вьет, Шуба М. В., Поддубская О. Г., Юко Д. И.</i> Электропроводность на переменном токе гибридных пленок из углеродных и WS_2 -нанотрубок	111
---	-----

ВЫДАЮЩИЕСЯ УЧЕНЫЕ БЕЛАРУСИ

Леонид Иванович Киселевский (1927–1991).....	120
--	-----

CONTENTS

OPTICS AND SPECTROSCOPY

<i>Gulis I. M., Kupreyeu A. G., Demidov I. D., Voropay E. S.</i> Multislit diffraction grating spectrometer for imaging spectroscopy.....	4
<i>Bezruchenko V. S., Mahilny U. V., Stankevich A. I., Muravsky Al. An., Muravsky An. Al., Kukhta I. N.</i> The formation of the centrosymmetric distributions of light intensity for exposure of photosensitive alignment layers of LC lenses	12
<i>Meniailava D. N., Shundalau M. B.</i> The potential energy surface of the triplet ground state of a uranium trioxide molecule	20

PHYSICS OF BIOSTRUCTURES

<i>Drapeza A. I., Loban V. A., Khmelnskiy A. I., Skorokhod G. A., Sysov V. A.</i> Electrophysical method for accelerated detection and differentiation of microorganisms based on film biostructures and planar-capacitive chip-formats	26
---	----

PHYSICS OF ELECTROMAGNETIC PHENOMENA

<i>Vysotskaya U. A., Shapochkina I. V., Rozenbaum V. M., Trakhtenberg L. I.</i> Diffusion of Brownian particles in a spatially periodic potential with a finite life-time	33
<i>Novitsky A. V., Rodriguez R. J. Alvarez, Galynsky V. M.</i> Electromagnetic wave scattering by inhomogeneous cylindrically symmetric bianisotropic objects	41

ATOMIC NUCLEUS AND ELEMENTARY PARTICLE PHYSICS

<i>Le Thi Dieu Hien, Khrutchinsky A. A., Kuten S. A.</i> The distribution of the ionization pulse amplitudes in ionization fission chamber due to the fission fragments spread in terms of their charge, mass, and energy	50
---	----

SEMICONDUCTOR PHYSICS AND ENGINEERING

<i>Karikh E. D.</i> Determination of the parameters of low-reflecting object microvibrations by cepstrum of self-mixing signal in semiconductor laser	57
---	----

MICROWAVE RADIATION PHYSICS

<i>Zaerko D. V., Gaida L. S., Svistun A. C., Kalosha L. A.</i> Using high-frequency resonance of ferroelectric materials to control the characteristics of microwave-radiation scattering	65
---	----

CONDENSED STATE PHYSICS

<i>Dorosinets V. A., Ho Viet.</i> Electric-field effect on quantum corrections to electric conductivity in carbon materials.....	73
<i>Goncharov V. K., Puzyrev M. V., Stupakevich V. Y.</i> Physical processes in a laser source of aluminum ions with the controlled energy for nanofilm deposition	79
<i>Odzaev V. B., Plebanovich V. I., Tarasik M. I., Chelyadinskii A. R.</i> About the influence of elastic stresses on the implanted boron diffusion in silicon	88
<i>Nguyen Thi Thanh Binh.</i> The effect of evacuation, surfactant, prolonged thermal heating and irradiation with ultraviolet radiation on free radicals in detonation nanodiamond powders	95

RANGING PHYSICS

<i>Kozlov V. L.</i> Analysis of the functions realizing the correlation processing for the range measuring from digital images	102
--	-----

PHYSICS OF NANOSTRUCTURES

<i>Ksenevich V. K., Gorbachuk N. I., Ho Viet, Shuba M. V., Paddubskaya A. G., Yuko D. I.</i> AC-conductivity of carbon nanotubes / WS ₂ nanotubes hybrid films.....	111
--	-----

OUTSTANDING SCIENTISTS OF BELARUS

Leonid Ivanovich Kiselevskii (1927–1991).....	120
---	-----

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.
№ 3. 2017**

Учредитель:
Белорусский государственный университет

Юридический адрес: пр. Независимости, 4,
220030, г. Минск.

Почтовый адрес: ул. Кальварийская, 9, каб. 636, 637,
220004, г. Минск.

Тел. (017) 259-70-74, (017) 259-70-75.

E-mail: vestnikbsu@mail.ru
vestnikbsu@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 02.10.2017.
Тираж 130 экз. Заказ 582.

Республиканское унитарное предприятие
«Издательский центр Белорусского
государственного университета».
ЛП № 02330/117 от 14.04.2014.
Ул. Красноармейская, 6, 220030, г. Минск.

© БГУ, 2017

**Journal
of the Belarusian State University. Physics.
No. 3. 2017**

Founder:
Belarusian State University

Registered address: Niezaliežnasci Ave., 4,
220030, Minsk.

Correspondence address: Kal'variiskaya Str., 9, office 636, 637,
220004, Minsk.

Tel. (017) 259-70-74, (017) 259-70-75.

E-mail: vestnikbsu@mail.ru
vestnikbsu@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 02.10.2017.
Edition 130 copies. Order number 582.

Publishing Center of BSU.
License for publishing No. 02330/117, 14 April, 2014.
Krasnoarmeiskaya Str., 6, 220030, Minsk.

© BSU, 2017