



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

2023

МИНСК
БГУ

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

Главный редактор	ВОРОПАЙ Е. С. – доктор физико-математических наук, профессор; профессор кафедры лазерной физики и спектроскопии физического факультета Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь. E-mail: voropay@bsu.by
Заместитель главного редактора	ТИВАНОВ М. С. – кандидат физико-математических наук, доцент; декан физического факультета Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь. E-mail: tivanov@bsu.by
Ответственный секретарь	КАБАНОВА О. С. – кандидат физико-математических наук; доцент кафедры высшей математики и математической физики физического факультета Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь. E-mail: kabanovaos@bsu.by

<i>Анищик В. М.</i>	Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь.
<i>Бондаренко Г. Г.</i>	Московский институт электроники и математики Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики», Москва, Россия.
<i>Жуковский П. В.</i>	Люблинский технический университет, Люблин, Польша.
<i>Кислицин С. Б.</i>	Институт ядерной физики Министерства энергетики Республики Казахстан, Алма-Ата, Казахстан.
<i>Козлов С. А.</i>	Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики, Санкт-Петербург, Россия.
<i>Кучинский П. В.</i>	НИУ «Институт прикладных физических проблем им. А. Н. Севченко» Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь.
<i>Максименко С. А.</i>	НИУ «Институт ядерных проблем» Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь.
<i>Маскевич С. А.</i>	Международный государственный экологический институт им. А. Д. Сахарова Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь.
<i>Машлан М.</i>	Оломоуцкий университет им. Палацкого, Оломоуц, Чехия.
<i>Патрин А. А.</i>	Кошалинский технический университет, Кошалин, Польша.
<i>Погребняк А. Д.</i>	Сумский государственный университет, Сумы, Украина.
<i>Рамакришна Редди К. Т.</i>	Университет Шри Венкатесвара, Тирупати, Индия.
<i>Ремнев Г. Е.</i>	Томский политехнический университет, Томск, Россия.
<i>Толстик А. Л.</i>	Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь.
<i>Туроверов К. К.</i>	Институт цитологии Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия.
<i>Ушаков Д. В.</i>	Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь.
<i>Хайнцманн Р.</i>	Институт физической химии Йенского университета, Йена, Германия.
<i>Чалов В. Н.</i>	Имперский колледж Лондона, Лондон, Великобритания.
<i>Шандаров С. М.</i>	Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, Томск, Россия.

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ

<i>Ануфрик С. С.</i>	Гродненский государственный университет им. Янки Купалы, Гродно, Беларусь.
<i>Гусев О. К.</i>	Белорусский национальный технический университет, Минск, Беларусь.
<i>Казак Н. С.</i>	Государственное научно-производственное объединение «Оптика, оптоэлектроника и лазерная техника» Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь.
<i>Килин С. Я.</i>	Национальная академия наук Беларуси, Минск, Беларусь.
<i>Кононов В. А.</i>	СП «ЛОТИС ТИИ», Минск, Беларусь.
<i>Малыревич А. М.</i>	Белорусский национальный технический университет, Минск, Беларусь.
<i>Пенязьков О. Г.</i>	Институт тепло- и массообмена им. А. В. Лыкова Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь.
<i>Пилипенко В. А.</i>	Государственный центр «Белмикрoанализ» филиала НТЦ «Белмикросистемы» ОАО «Интеграл» – управляющей компании холдинга «Интеграл», Минск, Беларусь.
<i>Плетюхов В. А.</i>	Брестский государственный университет им. А. С. Пушкина, Брест, Беларусь.
<i>Семченко И. В.</i>	Государственное научно-производственное объединение «Оптика, оптоэлектроника и лазерная техника» Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь.
<i>Федосюк В. М.</i>	ГНПО «Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению», Минск, Беларусь.
<i>Шкадаревич А. П.</i>	Научно-производственное унитарное предприятие «Научно-технический центр “ЛЭМТ” БелОМО», Минск, Беларусь.

EDITORIAL BOARD

Editor-in-chief	VOROPAY E. S. , doctor of science (physics and mathematics), full professor; professor at the department of laser physics and spectroscopy, faculty of physics, Belarusian State University, Minsk, Belarus. E-mail: voropay@bsu.by
Deputy editor-in-chief	TIVANOV M. S. , PhD (physics and mathematics), docent; dean of the faculty of physics, Belarusian State University, Minsk, Belarus. E-mail: tivanov@bsu.by
Executive secretary	KABANOVA O. S. , PhD (physics and mathematics); associate professor at the department of higher mathematics and mathematical physics, faculty of physics, Belarusian State University, Minsk, Belarus. E-mail: kabanovaos@bsu.by

- Anishchik V. M.* Belarusian State University, Minsk, Belarus.
- Bondarenko G. G.* Moscow Institute of Electronics and Mathematics of the National Research University «Higher School of Economics», Moscow, Russia.
- Chalov V. N.* Imperial College London, London, United Kingdom.
- Heintzmann R.* Institute of Physical Chemistry of the Jena University, Jena, Germany.
- Kislitsin S. B.* Institute of Nuclear Physics of the Ministry of Energy of the Republic of Kazakhstan, Almaty, Kazakhstan.
- Kozlov S. A.* Saint Petersburg National Research University of Information Technologies, Mechanics and Optics, Saint Petersburg, Russia.
- Kuchinski P. V.* A. N. Sevchenko Institute of Applied Physical Problems of the Belarusian State University, Minsk, Belarus.
- Maksimenco S. A.* Institute for Nuclear Problems of the Belarusian State 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.
- Pogrebnyak A. D.* Sumy State University, Sumy, Ukraine.
- Ramakrishna Reddy K. T.* Sri Venkateswara University, Tirupati, India.
- Remnev G. E.* Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russia.
- Shandarov S. M.* Tomsk State University of Control Systems and Radioelectronics, Tomsk, Russia.
- Tolstik A. L.* Belarusian State University, Minsk, Belarus.
- Turoverov K. K.* Institute of Cytology, Russian Academy of Sciences, Saint Petersburg, Russia.
- Ushakov D. V.* Belarusian State University, Minsk, Belarus.
- Zhukowski P. V.* Lublin University of Technology, Lublin, Poland.

EDITORIAL COUNCIL

- Anufrik S. S.* Yanka Kupala State University of Grodno, Grodno, Belarus.
- Fedosyuk V. M.* State Scientific and Production Association «Scientific and Practical Materials Research Centre of NAS of Belarus», Minsk, Belarus.
- Gusev O. K.* Belarusian National Technical University, Minsk, Belarus.
- Kazak N. S.* State Scientific and Production Association «Optics, Optoelectronics and Laser Technology» of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus.
- Kilin S. Y.* National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus.
- Kononov V. A.* «LOTIS TII», Minsk, Belarus.
- Malyarevich A. M.* Belarusian National Technical University, Minsk, Belarus.
- 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.
- Semchenko I. V.* State Scientific and Production Association «Optics, Optoelectronics and Laser Technology» of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus.
- Shkadarevich A. P.* Unitary Enterprise «STC “LEMT” of the BelOMO», Minsk, Belarus.

УДК 535.3; 548.4

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ ТЕПЛОПЕРЕНОСА В ТОНКОЙ ПОГЛОЩАЮЩЕЙ ПЛЕНКЕ НА ПОДЛОЖКЕ МЕТОДОМ ДИНАМИЧЕСКИХ РЕШЕТОК

Е. В. ИВАКИН¹⁾, А. Л. ТОЛСТИК¹⁾

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

Продемонстрированы преимущества использования метода динамических решеток для бесконтактного изучения тонкопленочных материалов. Рассмотрены тонкие (микронные) пленки алмазоподобного углерода и термоэлектрические материалы на основе теллурида свинца. Установлено, что при поверхностном поглощении лазерного импульсного излучения наносекундной длительности в тонкопленочном материале формируется динамическая решетка, время релаксации которой позволяет определить параметры теплопереноса и рассчитать коэффициенты температуропроводности. Увеличение периода динамической решетки сопровождается переходом от измерения температуропроводности тонкой пленки к установлению эффективного значения температуропроводности, в которую начинает вносить вклад подложка, и при большом периоде решетки можно определять температуропроводность самой подложки. Особый интерес вызывает эффект возбуждения акустической волны в приповерхностном слое воздуха, который ранее рассматривался как фактор, искажающий динамику дифрагированного сигнала. Показано, что в этом случае появляется возможность измерить температуру пленки при ее нагреве лазерным импульсом.

Ключевые слова: голография; динамическая решетка; теплоперенос; температуропроводность; алмазоподобный углерод; теллурид свинца; термоэлектрик; акустическая волна.

Образец цитирования:

Ивакин ЕВ, Толстик АЛ. Определение параметров теплопереноса в тонкой поглощающей пленке на подложке методом динамических решеток. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика*. 2023;3:4–9 (на англ.). EDN: YNRJBU

For citation:

Ivakin EV, Tolstik AL. Determination of heat transfer parameters in absorbing thin films on substrate by the transient grating method. *Journal of the Belarusian State University. Physics*. 2023; 3:4–9. EDN: YNRJBU

Авторы:

Евгений Васильевич Ивакин – доктор физико-математических наук; главный научный сотрудник кафедры лазерной физики и спектроскопии физического факультета.
Алексей Леонидович Толстик – доктор физико-математических наук, профессор; заведующий кафедрой лазерной физики и спектроскопии физического факультета.

Authors:

Evgeniy V. Ivakin, doctor of science (physics and mathematics); chief researcher at the department of laser physics and spectroscopy, faculty of physics.
ivakin41@tut.by
Alexei L. Tolstik, doctor of science (physics and mathematics), full professor; head of the department of laser physics and spectroscopy, faculty of physics.
tolstik@bsu.by
<https://orcid.org/0000-0003-4953-4890>

DETERMINATION OF HEAT TRANSFER PARAMETERS IN ABSORBING THIN FILMS ON SUBSTRATE BY THE TRANSIENT GRATING METHOD

E. V. IVAKIN^a, A. L. TOLSTIK^a

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

Corresponding author: A. L. Tolstik (tolstik@bsu.by)

Advantages of the transient grating method for contactless study of thin-film materials have been demonstrated. Thin films of diamond-like carbon and thermoelectric lead telluride have been studied. Transient gratings are formed on a surface of film due to absorption of nanosecond pulsed laser radiation. The diffracted signal character enables the heat transfer parameters and thermal diffusivity determination. The transient grating period increase leads to transfer from thermal diffusivity of thin film measurements to its effective value determination, with a contribution made by the substrate. At large period of the grating one can realise measurements of thermal diffusivity of the substrate itself. Acoustic wave excitation in the near-surface thin layer of the air, which earlier has been considered as a factor distorting the diffracted signal dynamics is of special interest. In this case there is a possibility to temperature measurement of the film when it is heated by a laser pulse.

Keywords: holography; transient grating; heat transfer; thermal diffusivity; diamond-like carbon; lead telluride; thermoelectric; acoustic wave.

Introduction

Studies of the features of heat transfer in thin films are of topical importance in the field of micro- and nano-electronics, material science. Examination of materials and measurements of the heat transfer characteristics are conducted with the use of different physical methods, among which contactless procedures using optical radiation are the most attractive approaches [1–6].

The paper presents optical studies of thermal properties of diamond-like carbon and lead telluride based thermoelectric. These materials are synthesised to find numerous applications in various branches of science and technology including the formation of protective films, manufacturing of heat-conducting coatings, development of solar power engineering, etc. Consideration is given to a thin film that is in a double sided thermal contact with the air and the substrate.

According to the method used, two coherent light beams of a pulsed laser are interfering on the surface of a sample under study. Heating of the excitation area results in the formation of a surface-relief grating. First-order diffraction of a light beam from the continuous-wave laser by the created grating is observed. The diffraction signal intensity is photometrically measured by a detector of high temporal resolution. The lifetime of a transient grating depends on its spatial period and thermal diffusivity of film under study.

When the thermal grating lifetime is measured, one can have information about physical processes proceeding in the material under study. In particular one can measure relaxation time of thermal grating and the thermal diffusivity of film studied. All the experiments have been performed with the use of a system, shown in a series of works [7–9].

Influence of the thermal contact between substrate and film on the in-plane heat transfer

Free standing thin films growth and their subsequent usage is rarely realised in practice because of range of technological problems. In this paper the heat transfer is studied in films that are in thermal and mechanical contacts with substrate. Pulsed heating of the film is of essentially surface character and the initial penetration depth of exciting radiation should be much less than film thickness. Heat transfer takes place in the directions of the thermal gradient formed, i. e. parallel and normal to sample surface.

In the process of the in-plane thermal diffusivity χ_x measuring, the depth of heat penetration L_{th} into a film of thick h in the direction normal to the sample surface during relaxation of the transient grating is a parameter of great importance. For reliability of the measurements of χ_x , it is necessary that the condition $L_{th} < h$ is well satisfied. We have $L_{th} = \sqrt{4\chi_z\tau_x}$ [10–12], where χ_z – thermal diffusivity in the direction normal to the film surface,

τ_x – relaxation time, $\tau_x = \frac{\Lambda^2}{4\pi^2\chi_x}$, Λ – grating period. Most commonly $\chi_z = \chi_x$ (thermal isotropy) and in this case

the influence of substrate on kinetics of thermal relaxation is insignificant if the thermal grating period $\Lambda < \pi h$.

As heat penetrates deeper into the sample, amplitude of the thermal profile is lowered due to thermal diffusion in the in-plane direction x . Naturally, relaxation kinetics in the case, when a film with high thermal diffusivity is formed on the substrate with a relatively low thermal diffusivity, is mainly determined by the in-plane heat transfer in film.

When the period Λ of a thermal grating, and hence its life time τ_x , are large enough and when during the period of the diffracted signal observation heat has a chance to reach the substrate and to exert its thermal effect, we measure the effective value averaged over the heat penetration depth instead of a real thermal diffusivity of film. In this case kinetics of thermal relaxation is weakly dependent on the film properties and in fact is determined by thermal parameters of the substrate itself.

A transformation the effective thermal diffusivity (χ_{eff}) of the film under study to its actual value is illustrated in fig. 1, showing the result of excitation of thermal transient gratings with different periods in a film of diamond-like carbon (DLC). The grating is excited by laser pulses of width 10 ns at the wave length 532 nm. The radiation absorption factor μ of the film in this spectral range is $\approx 10^5 \text{ cm}^{-1}$.

It is well seen that when the grating period Λ decreases from 20 to 2 μm , the in-plane thermal diffusivity χ_x is varying from thermal diffusivity of the glass substrate to the same parameter of diamond-like carbon film [13]. If $\Lambda \gg h$, there is practically no heat transfer in direction parallel to sample surface, whereas the decay of a grating is mainly determined by heat transfer in the substrate.

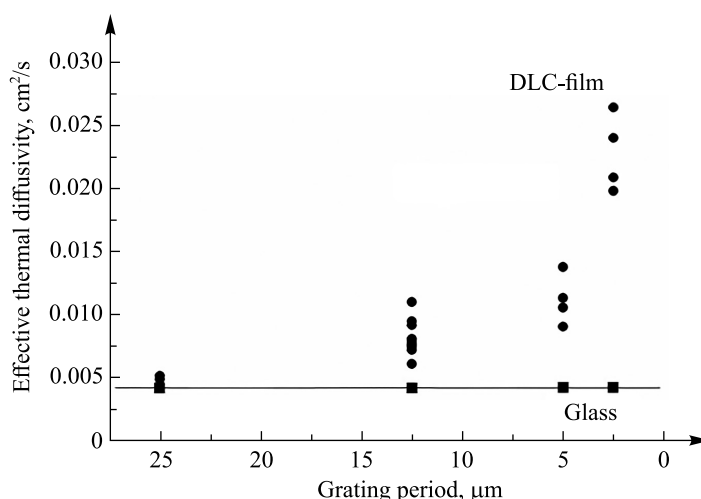


Fig. 1. Effective thermal diffusivity of the system *diamond-like carbon film – glass* as a function of the period of a thermal transient grating formed on surface of the absorbing film of thick 2 μm

Role of the air in relaxation kinetics formation of transient surface grating lead telluride film

Lead telluride (PbTe) based thermoelectrics are now actively studying because this narrow-band semiconductor shows promise for the technologies of renewable energy engineering. Recently the attention has been attracted to lead telluride doped with indium or bismuth that reveals advantageous functional qualities. Some portion of thermal energy stored by the absorbing surface of a PbTe film is transferred to the adjacent air layer and acoustic grating is excited in thin layer.

To estimate a contribution of the air into kinetics of the diffraction signal attenuation, one should take into consideration that, according to the data from [14] obtained by the photorefraction method, thermal diffusivity of the air on normal atmospheric pressure comes to 0.2–0.4 cm^2/s depending on its temperature. The same parameter for the tested film is within the range 0.015–0.025 cm^2/s [15]. Consequently, the life time of a thermal grating in air is one-tenth as long as the grating in film under study. Thus, to exclude the influence of a thermal grating in the air on the measurement results during experimental studies of heat transfer in samples based on PbTe, the initial point of the analysed kinetics should be shifted by lifetime of air grating after the moment when the diffraction signal arises.

As it seen in fig. 2, *a*, at the initial part of the kinetics curve one can observe an acoustic attenuating component of diffraction. Ultrasonic oscillations period is about 0.12 μs .

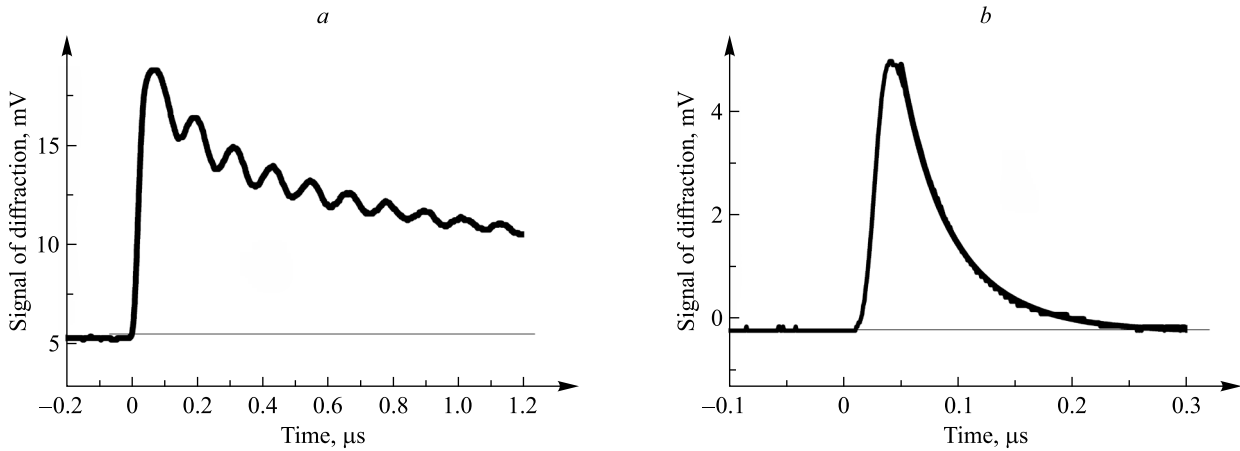


Fig. 2. Diffraction kinetics of a probe beam for the film of PbTe : Bi thick 2 μm on glass. The grating periods are 41.7 μm (a) and 2.5 μm (b)

It has been found experimentally that when the spatial grating period is below 5 μm , no acoustic oscillations are observed due to not enough temporal resolution of a recording system (fig. 2, b). Indeed, for $\Lambda = 2.5 \mu\text{m}$, the period of acoustic oscillations in the air is 9 ns which is much less than temporal resolution of the detection system used. Figure 2, b, shows that relaxation time of a dynamic grating comes to 0.13 μs . Then, for the grating period 2.5 μm , thermal diffusivity of the film comes to $0.93 \cdot 10^{-2} \text{ cm}^2/\text{s}$.

Ultrasonic estimation of PbTe : Bi film temperature

The possibility to measure frequency of an ultrasonic wave as excited by of the transient grating method offers estimation of the speed of sound in a near-surface layer of the air. Considering that the ultrasound propagation speed in the air is linearly growing with temperature over the range up to 500 K [16], the proposed method may be used for estimation of the film temperature at the initial moment of dynamic grating recording. It is assumed that temperature of a thin near-boundary layer of the air in intimate contact with the heated surface of the film is close to temperature of the film surface.

Frequency of the diffracted signal acoustic oscillations has been found by means of the fast Fourier transformation (fig. 3, a), and the propagation speed of ultrasound in air $V = \Lambda f = 347 \text{ m/s}$ has been calculated. By using the graph in fig. 3, b, it has been found that the film temperature at $V = 347 \text{ m/s}$ is approximately 310 K. This value should be taken as an average over the probing spot.

As the energy of laser pulses which record the grating grows by a factor of 1.5, the propagation speed of ultrasound increases up to 368 m/s. According to fig. 3, b, of the near-boundary layer temperature of the air and hence of the film increases to 330 K.

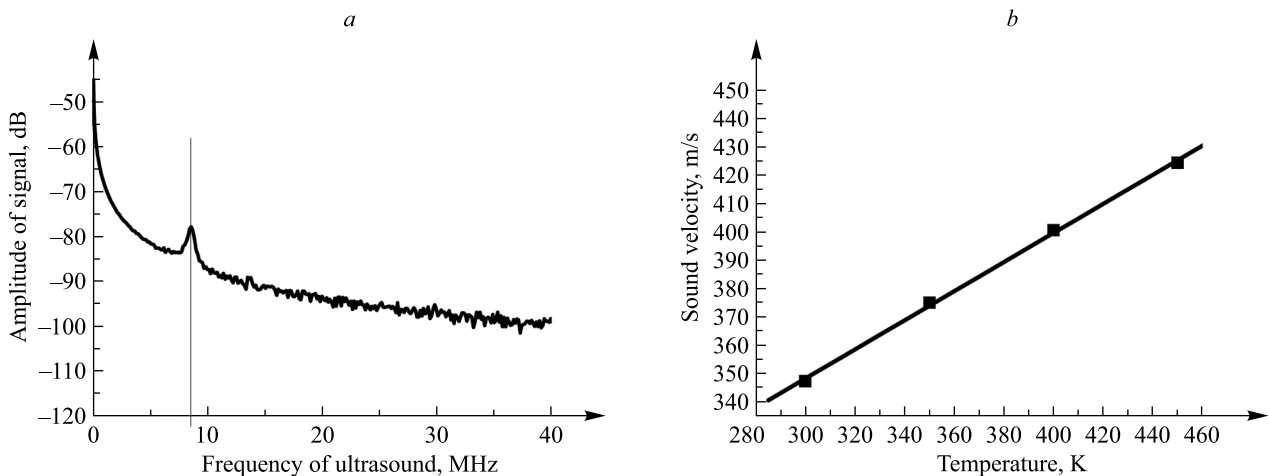


Fig. 3. PbTe : Bi film: Fourier spectrum of the diffracted signal for PbTe : Bi film (vertical line denotes the component of acoustic oscillations in air at frequency 8.32 MHz) (a) and temperature dependence of the ultrasonic speed in air (■ is reference points [16]) (b)

To improve reliability of the results obtained during the conducted measurements, the film temperature has been also estimated with regard to the fact that the diffraction efficiency η of grating is determined by the amplitude of the formed surface thermal relief. For the 100 % contrast of interference pattern in the film under study, this amplitude is completely determined by all the absorbed energy of laser radiation. This excitation mode allows for calibration of the diffraction efficiency of a relief transient grating and for its evaluation.

As it is demonstrated by the experiments, in a linear mode of the dynamic grating recording its initial amplitude indicated on the oscilloscope screen should not to exceed 7–8 mV. To find which diffraction efficiency of the grating is associated with this amplitude, the probe beam was calibrated with the use of a set of neutral optical filters, preliminary certified for transmission. The number of filters was selected so that the signal amplitude on the oscilloscope screen was the same as the diffraction-signal amplitude recorded. The overall transmission was found to be 10^{-5} . The diffraction efficiency of the relief-reflection type grating for diffraction efficiency $\eta \ll 1$ is given by the well-known relation [17]:

$$\eta = \left(\frac{\pi \Delta h}{\lambda} \right)^2. \quad (1)$$

Here $\Delta h = l \Delta T \beta$, where Δh surface relief height, l – heated layer depth taken equal to the film thickness $2 \mu\text{m}$, $\beta = 20 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ – thermal linear-expansion coefficient of lead telluride, λ – wavelength of probe radiation. According to (1), for $\eta \sim 10^{-5}$ and the probe-radiation wave length 635 nm, the thermal relief height comes to $\Delta h \sim 0.7 \text{ nm}$. Then, accordingly to the equation (1), the temperature increase of the film due to absorption of pulsed laser radiation above the room temperature ΔT , averaged over the depth and the excitation spot, is about 30–40 °C. This is in a good agreement with the result obtained through ultrasonic application.

Conclusions

In this way the experiments with thin films of diamond-like carbon and PbTe based thermoelectric have demonstrated the potentialities for application of the transient grating method in contact-free testing of heat transfer in thin-film materials. It has been shown that with surface radiation absorption and with the grating period Λ less than film thickness, relaxation time of a transient grating is determined by thermal diffusivity of film in the direction along the film surface. Rising up the value of Λ is accompanied by transition to the effective value of thermal diffusivity of the system film substrate. If the period Λ much greater than the film thickness we can go to measurements of thermal diffusivity of the substrate. Of particular interest is the acoustic wave identification in the near-surface layer of the air. It offers a unique possibility to measure the frequency and speed of ultrasound, enabling one to film temperature estimation at the moment of it heating by a laser beam radiation.

Библиографические ссылки

1. Jackson WB, Amer NM, Boccaro AC, Fournier D. Photothermal deflection spectroscopy and detection. *Applied Optics*. 1981; 20(8):1333–1344. DOI: 10.1364/AO.20.001333.
2. Rosencwaig A, Opsal J, Smith WL, Willenborg DL. Detection of thermal waves through optical reflectance. *Applied Physics Letters*. 1985;46(11):1013–1015. DOI: 10.1063/1.95794.
3. Miklos A, Lorincz A. Determination of thermal transport properties of thin metal films from pulsed thermoreflectance measurements in the picosecond regime. *Applied Physics B*. 1989;48(3):261–267. DOI: 10.1007/BF00694357.
4. Маргунов АН. *Лазерная термометрия твердых тел*. Москва: Физматлит; 2002. 222 с.
5. Tolstik AL, Dadenkov IG, Stankevich AA. Spatial modulation spectroscopy of semiconductors using dynamic gratings. *Journal of Optical Technology*. 2022;89(5):250–254. DOI: 10.1364/JOT.89.000250.
6. Толстик АЛ, Ивакин ЕВ, Даденков ИГ. Преобразование световых пучков и диагностика материалов методами динамической голографии. *Журнал прикладной спектроскопии*. 2023;90(2):316–323. DOI: 10.47612/0514-7506-2023-90-2-316-323.
7. Ivakin EV. Laser diffraction relaxmeter for studying photoexcitation kinetics in condensed media. *Journal of Optical Technology*. 2000;67(11):951–954. DOI: 10.1364/JOT.67.000951.
8. Ivakin EV, Kisialiou IG, Antipov OL. Laser ceramics $\text{Tm} : \text{Lu}_2\text{O}_3$. Thermal, thermo-optical, and spectroscopic properties. *Optical Materials*. 2013;35(3):499–503. DOI: 10.1016/j.optmat.2012.10.002.
9. Ivakin EV, Tolstik AL, Gorbach DV, Stankevich AA. Investigation of heat transfer of bulk and thin-film PbInTe samples by the method of dynamic gratings. *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*. 2022;95(4):1026–1030. DOI: 10.1007/s10891-022-02568-x.
10. Kading OW, Skurk H, Matthias E. Thermal diffusivities of thin films measured by transient thermal gratings. *Journal de Physique IV*. 1994;4:619–622. DOI: 10.1051/jp4:19947146.
11. Rogers JA, Yang Y, Nelson KA. Elastic modulus and in-plane thermal diffusivity measurements in thin polyimide films using symmetry-selective real-time impulsive stimulated thermal scattering. *Applied Physics A*. 1994;58(5):532–534. DOI: 10.1007/BF00332448.
12. Kading OW, Skurk H, Mazhev AA, Matthias E. Transient thermal gratings at surfaces for thermal characterization of bulk materials and thin films. *Applied Physics A*. 1995;61(3):253–261. DOI: 10.1007/BF01538190.
13. Shamsa M, Liu WL, Balandin AA, Casiraghi C, Milne WI, Ferrari AC. Thermal conductivity of diamond-like carbon films. *Applied Physics Letters*. 2006;89(16):161921. DOI: 10.1063/1.2362601.

14. Yun SI, Oh K-D, Ryu K-S, Kim C-G, Park HL, Seo HJ, et al. Photothermal probe beam deflection measurement of thermal diffusivity of atmospheric air. *Applied Physics B*. 1986;40(2):95–98. DOI: 10.1007/BF00694781.
15. Parashchuk T, Dashevsky Z, Wojciechowski K. Feasibility of a high stable PbTe : In semiconductor for thermoelectric energy applications. *Journal of Applied Physics*. 2019;125(24):245103. DOI: 10.1063/1.5106422.
16. Варгафтик НБ. *Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей*. Москва: Государственное издательство физико-математической литературы; 1963. 707 с.
17. Collier RJ, Burckhardt CB, Lin LH. *Optical holography*. New York: Academic Press; 1971. 605 p.

References

1. Jackson WB, Amer NM, Boccara AC, Fournier D. Photothermal deflection spectroscopy and detection. *Applied Optics*. 1981;20(8):1333–1344. DOI: 10.1364/AO.20.001333.
2. Rosencwaig A, Opsal J, Smith WL, Willenborg DL. Detection of thermal waves through optical reflectance. *Applied Physics Letters*. 1985;46(11):1013–1015. DOI: 10.1063/1.95794.
3. Miklos A, Lorincz A. Determination of thermal transport properties of thin metal films from pulsed thermoreflectance measurements in the picosecond regime. *Applied Physics B*. 1989;48(3):261–267. DOI: 10.1007/BF00694357.
4. Magunov AN. *Lazernaya termometriya tverdykh tel* [Laser thermometry of solids]. Moscow: Fizmatlit; 2002. 222 p. Russian.
5. Tolstik AL, Dadenkov IG, Stankevich AA. Spatial modulation spectroscopy of semiconductors using dynamic gratings. *Journal of Optical Technology*. 2022;89(5):250–254. DOI: 10.1364/JOT.89.000250.
6. Tolstik AL, Ivakin EV, Dadenkov IG. Light beam transformation and material diagnostics by dynamic holography method. *Zhurnal prikladnoi spektroskopii*. 2023;90(2):316–323. DOI: 10.47612/0514-7506-2023-90-2-316-323. Russian.
7. Ivakin EV. Laser diffraction relaxometer for studying photoexcitation kinetics in condensed media. *Journal of Optical Technology*. 2000;67(11):951–954. DOI: 10.1364/JOT.67.000951.
8. Ivakin EV, Kisialiou IG, Antipov OL. Laser ceramics Tm : Lu₂O₃. Thermal, thermo-optical, and spectroscopic properties. *Optical Materials*. 2013;35(3):499–503. DOI: 10.1016/j.optmat.2012.10.002.
9. Ivakin EV, Tolstik AL, Gorbach DV, Stankevich AA. Investigation of heat transfer of bulk and thin-film PbInTe samples by the method of dynamic gratings. *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*. 2022;95(4):1026–1030. DOI: 10.1007/s10891-022-02568-x.
10. Kading OW, Skurk H, Matthias E. Thermal diffusivities of thin films measured by transient thermal gratings. *Journal de Physique IV*. 1994;4:619–622. DOI: 10.1051/jp4:19947146.
11. Rogers JA, Yang Y, Nelson KA. Elastic modulus and in-plane thermal diffusivity measurements in thin polyimide films using symmetry-selective real-time impulsive stimulated thermal scattering. *Applied Physics A*. 1994;58(5):532–534. DOI: 10.1007/BF00332448.
12. Kading OW, Skurk H, Mazhev AA, Matthias E. Transient thermal gratings at surfaces for thermal characterization of bulk materials and thin films. *Applied Physics A*. 1995;61(3):253–261. DOI: 10.1007/BF01538190.
13. Shamsa M, Liu WL, Balandin AA, Casiraghi C, Milne WI, Ferrari AC. Thermal conductivity of diamond-like carbon films. *Applied Physics Letters*. 2006;89(16):161921. DOI: 10.1063/1.2362601.
14. Yun SI, Oh K-D, Ryu K-S, Kim C-G, Park HL, Seo HJ, et al. Photothermal probe beam deflection measurement of thermal diffusivity of atmospheric air. *Applied Physics B*. 1986;40(2):95–98. DOI: 10.1007/BF00694781.
15. Parashchuk T, Dashevsky Z, Wojciechowski K. Feasibility of a high stable PbTe : In semiconductor for thermoelectric energy applications. *Journal of Applied Physics*. 2019;125(24):245103. DOI: 10.1063/1.5106422.
16. Vargaftik NB. *Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей* [Handbook on thermophysical properties of gases and liquids]. Moscow: Gosudarstvennoe izdatel'stvo fiziko-matematicheskoi literatury; 1963. 707 p. Russian.
17. Collier RJ, Burckhardt CB, Lin LH. *Optical holography*. New York: Academic Press; 1971. 605 p.

Received 02.04.2023 / revised 05.05.2023 / accepted 11.05.2023.

УДК 53.087:543.27:544:621.37:681.2:541.49

ОПТИЧЕСКИЕ ХИМИЧЕСКИЕ СЕНСОРЫ НА ОСНОВЕ КОМПЛЕКСНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

Е. Ю. ШАЧНЕВА¹⁾

¹⁾Независимый исследователь, г. Астрахань, Россия

Систематизирован материал, описывающий различные виды оптических химических сенсоров (датчиков, анализаторов) на основе комплексных соединений. Дана характеристика химических сенсоров. Представлена классификация и изложены основные принципы работы датчиков, перечислены области их применения. Рассмотрены примеры комплексных соединений, которые используются в качестве термочувствительных пигментов, выпускаемых в разных странах, с указанием температуры изменения окраски. Приведены структуры эффективных излучающих комплексов лантаноидов с органическими лигандами, работающих в качестве эмиттеров. Подчеркнуты возможности применения анализаторов в различных отраслях промышленности.

Ключевые слова: сенсоры; оптические химические сенсоры; комплексные соединения; термочувствительные пигменты.

OPTICAL CHEMICAL SENSORS BASED ON COMPLEX COMPOUNDS

E. Yu. SHACHNEVA^a

^aIndependent researcher, Astrakhan, Russia

The material describing various types of optical chemical sensors (detectors, analysers) based on complex compounds is systematised. The characteristics of chemical sensors are given. The classification is presented, the basic principles of operation of the sensors in question and their applications are described. Examples of complex compounds used as thermosensitive pigments produced in different countries with indication of the temperature of colour change are considered. The structures of effective radiating complexes of lanthanides with organic ligands working as emitters are given. The possibilities of using analysers in various industries are emphasised.

Keywords: sensors; optical chemical sensors; complex compounds; thermosensitive pigments.

Введение

В связи с постоянным загрязнением водных систем и атмосферного воздуха промышленными стоками и газообразными продуктами возникла необходимость отслеживания и совершенствования чувствительных методов контроля состояния окружающей среды. Это обусловлено влиянием токсикантов на здоровье и безопасность человека и других живых организмов. Важное значение имеет возможность определения

Образец цитирования:

Шачнева ЕЮ. Оптические химические сенсоры на основе комплексных соединений. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2023;3:10–21.
EDN: EITFPP

For citation:

Shachneva EYu. Optical chemical sensors based on complex compounds. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2023;3:10–21. Russian.
EDN: EITFPP

Автор:

Евгения Юрьевна Шачнева – кандидат химических наук, профессор РАЕ; независимый исследователь.

Author:

Evgeniya Yu. Shachneva, PhD (chemistry), professor of the Russian Academy of Natural History; independent researcher.
evgshachneva@yandex.ru

содержания основных компонентов (токсикантов) и примесей в разных средах. Развитие различных отраслей промышленности, переработка ресурсов (нефть, газ, уголь и др.) требуют совершенствования методов анализа сырья и готовых продуктов. Для управления технологическими процессами необходимы методы анализа, позволяющие контролировать ход процессов. Следствием такой потребности в мониторинге является разработка достаточно интеллектуальных и портативных сенсоров широкого спектра действия. Создание новых и усовершенствование существующих анализаторов – это сложный междисциплинарный процесс, в который вовлечены различные специалисты [1; 2].

Основная часть

Сенсоры (датчики, анализаторы) представляют собой чувствительные элементы достаточно небольших размеров, позволяющие генерировать аналитический сигнал, интенсивность которого зависит от концентрации определяемого вещества в объекте. Они дают возможность собрать, зафиксировать, обработать и представить информацию о состоянии определяемой системы (химический состав, форма, строение и т. д.).

Можно выделить разнообразные виды датчиков. Принцип их действия основан на определенных явлениях (физических или химических) и свойствах [3–12]. Существуют три типа сенсоров – химические сенсоры, физические сенсоры и биосенсоры.

Основным отличием химических сенсоров и биосенсоров является наличие рецептора, который принимает участие в химических, биохимических или биологических процессах, протекающих при контакте сенсора с определяемым компонентом объекта. Кроме того, они позволяют преобразовать энергию анализируемых процессов в сигнал, который обрабатывается и подается на дисплей.

Рецептором химических сенсоров может быть реагент, изменяющий свои параметры (характеристики) при химическом взаимодействии, изменении кислотности среды и др. Химические сенсоры позволяют получить информацию о составе рассматриваемой среды без отбора пробы и предварительной подготовки.

В качестве основных рецепторов биосенсоров применяются биологические мембраны, ферменты, микроорганизмы и т. д. Содержание определяемого компонента (вещества) устанавливают по концентрации продуктов биохимической реакции. Основным преимуществом биосенсоров перед другими типами анализаторов является высокая чувствительность определений. Однако у них имеются и недостатки, такие как низкая стабильность, трудность получения материала постоянного состава.

В физических сенсорах, в отличие от вышеописанных типов анализаторов, не происходят химические реакции. Однако под воздействием определяемого компонента наблюдается изменение тепловых, магнитных, электрических и спектральных характеристик.

Исходя из способа регистрации аналитического сигнала, сенсоры можно классифицировать на электрические, электрохимические, оптические, чувствительные к изменению массы и т. д.

Электрические сенсоры представляют собой полупроводниковые устройства с электронной проводимостью на основе оксидов цинка, олова, кадмия, хрома, титана и других металлов, а также органических полупроводников и полевых транзисторов. Они позволяют определить такие величины, как проводимость, заряд, емкость, разность потенциалов и т. д.

В электрохимических сенсорах процесс химического превращения и генерации сигнала происходит в электрохимической ячейке, которая играет роль ионоселективного электрода с жидкой или твердой мембраной. Наиболее распространены потенциметрические и амперометрические сенсоры, мембраны которых могут содержать как химические, так и биохимические компоненты. С их помощью можно определить ионные и нейтральные соединения органической и неорганической природы, газы и биологически активные вещества в широком диапазоне концентраций.

Оптические сенсоры дают возможность установить степень поглощения и отражения падающего светового потока, а также степень люминесценции или теплового эффекта, сопровождающих поглощение света рецептором. Диапазон оптических анализаторов довольно широк. Они позволяют определять ионы металлов, кислотность среды, некоторые органические соединения в различных объектах окружающей среды.

Практически все рассматриваемые сенсоры достаточно активно применяются в различных областях промышленности, медицине, энергетике, сельском хозяйстве, экологии, а также транспортных средствах. Успешное использование описываемых анализаторов в таких областях, как лазерная физика, физика твердого тела, микроэлектроника, микропроцессорная техника, материаловедение, квантовая электроника, интегральная оптика, приводит к постоянному усовершенствованию существующих и созданию новых устройств [7].

Необходимо отметить, что в литературе представлены и другие классификации детекторов [3–12]. Например, исходя из энергетических свойств входных величин, сенсоры подразделяют на активные

и пассивные. В первом случае входные величины имеют энергетическую природу, во втором случае они носят неэнергетический характер.

В зависимости от числа воспринимаемых и преобразуемых величин выделяют одномерные (оперируют одной величиной) и многомерные (воспринимают несколько входных величин) датчики, а в зависимости от числа измерительных функций – однофункциональные и многофункциональные датчики.

По числу преобразований энергии и вещества анализаторы классифицируют как одноступенчатые и многоступенчатые.

В зависимости от технологии изготовления различают сенсоры элементного типа, изготавливаемые из набора отдельных элементов, и сенсоры интегрального типа, в которых составные элементы изготовлены по интегральной технологии.

С учетом процесса взаимодействия с источниками информации сенсоры подразделяют на бесконтактные (дистанционные) и контактные. По виду измерительных сигналов выделяют аналоговые и цифровые анализаторы.

В конечном итоге сенсоры должны соответствовать ряду критериев, основными из которых являются:

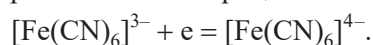
- получение точной информации о происхождении объектов контроля;
- разнообразный дизайн и отсутствие существенных ограничений по функциональным возможностям;
- анализ большого числа компонентов;
- достаточно легкая интерпретация полученных результатов.

Исходя из вышесказанного, можно заключить, что исследования в области создания наиболее совершенных термочувствительных сенсоров весьма актуальны. Преимуществом данного вида сенсоров является комбинация оптического эффекта с внешним температурным фактором. К числу наиболее перспективных видов химических сенсоров можно отнести оптические химические сенсоры [7], описываемые в данном материале. Особенно интересны для исследования анализаторы на основе комплексных соединений.

Следует отметить, что процессы комплексообразования весьма широко распространены в промышленности. В частности, они используются в металло- и гальванопроизводстве (получение материалов, обладающих электрическими, магнитными и оптическими свойствами), при изготовлении полупроводниковых и сверхпроводящих материалов, красителей, стабилизаторов полимеров. Комплексные соединения нашли применение в лазерной технике, а также в качестве химических сенсоров. Особые свойства таких соединений, связанные со спецификой электронного строения, позволяют использовать их для изготовления различных датчиков.

Процессом комплексообразования сопровождаются электрохимические реакции, происходящие на межфазной границе электрод – раствор, что оказывает влияние на массо- и теплообмен [13–22]. На основе этого с использованием макрогетероциклических комплексных соединений меди созданы термоэлементы, удельные энергетические показатели которых зависят от типа комплексообразующего лиганда и достигают высоких значений при увеличении числа кратных связей в молекуле лиганда и степени окисления центрального координирующего иона металла. Достижению высоких значений удельных энергетических показателей также способствует отсутствие алифатических заместителей в боковых цепях.

При достаточно прочной координационной связи в подобных инертных электродах возможно использование недорогих цветных металлов. Термоэлектрические свойства редокс-пар в достаточной мере изучены для тетраазомакроциклических, фенантролиновых и дипиридилных комплексов меди. Для таких гальванических термоэлементов рабочий диапазон температур составляет 280–370 К. В публикации [13] были оценены тепловые эффекты для термоэлемента на основе водного раствора ферроцианида калия при прохождении тока через платиновый электрод. Предполагалось, что при этом возникает эффект Пельтье и имеет место теплота электрохимического процесса:



Для техники особое значение приобретают термочувствительные пигменты, изменяющие окраску при определенной температуре. Такие пигменты, нанесенные на различные части технологического оборудования, сигнализируют о перегреве технических поверхностей. Изменение окраски может быть связано с потерей молекул воды или перестройкой кристаллической структуры.

К термочувствительным пигментам относятся многочисленные комплексные соединения. Известны комплексные соединения, изменяющие цвет при двух температурах. Например, комплексное соединение хрома(III) с лигандами $\text{C}_1\Gamma$ и этилендиамином при температуре 119 °С меняет окраску с желтой на красную, а при температуре 270 °С – с красной на черную [14]. Некоторые комплексные соединения изменяют цвет в интервале температур.

В табл. 1 приведены примеры комплексных соединений, которые используются в качестве термочувствительных пигментов, выпускаемых в разных странах, с указанием температуры изменения окраски.

Таблица 1

Наиболее распространенные термочувствительные пигменты
и их основные характеристики

Table 1

The most common thermosensitive pigment and their main characteristics

Пигмент	Начальный цвет	Конечный цвет	Температура перехода, °С
$\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{C}_6\text{H}_{12}\text{N}_4 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$	Розовый	Синий	35
$\text{CoBr}_2 \cdot 2\text{C}_6\text{H}_{12}\text{N}_4 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$	Розовый	Синий	40
$\text{CoI}_2 \cdot 2\text{C}_6\text{H}_{12}\text{N}_4 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$	Розовый	Зеленый	50
$\text{Co}(\text{CNS})_2 \cdot 2\text{C}_6\text{H}_{12}\text{N}_4 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$	Розовый	Синий	60
$\text{CoSO}_4 \cdot \text{C}_6\text{H}_{12}\text{N}_4 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$	Розовый	Фиолетовый	60
$\text{NiBr}_2 \cdot 2\text{C}_6\text{H}_{12}\text{N}_4 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$	Зеленый	Синий	60
$\text{NiCl}_2 \cdot 2\text{C}_6\text{H}_{12}\text{N}_4 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$	Зеленый	Желтый	60
	Желтый	Фиолетовый	100
$\text{Co}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2\text{C}_6\text{H}_{12}\text{N}_4 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$	Розовый	Пурпурный	75
$(\text{NH}_4)_3\text{H}_4[\text{Fe}(\text{MoO}_4)_6] \cdot 7\text{H}_2\text{O}$	Желтый	Белый	80
$\text{PO}_4(\text{NH}_4)\text{Ni} \cdot 6\text{H}_2\text{O}$	Светло-зеленый	Серый	120
$\text{Cu}(\text{пиридин})_2(\text{CNS})_4$	Зеленый	Желтый	135
	Желтый	Черный	220
$\text{Ni}(\text{пиридин})_4(\text{CNS})_2$	Синий	Зеленый	135
	Зеленый	Желтый	210
	Желтый	Коричневый	340
$\text{PO}_4(\text{NH}_4)\text{Co}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	Пурпурный	Коричневый	140
$[\text{Cr}(\text{NH}_3)_6]_4(\text{P}_2\text{O}_7)_3$	Желтый	Фиолетовый	140–150
$\text{PO}_4(\text{NH}_4)_3\text{12MoO}_3$	Желтый	Черный	140–150
$[\text{Ni}(\text{MoO}_4)_6]_{12}(\text{NH}_4) \cdot 8\text{H}_2\text{O}$	Серый	Синий	180
$[\text{Co}(\text{NH}_3)_5\text{Cl}]\text{SiF}_6$	Пурпурный	Серый	200
$\text{PO}_4[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]$	Желтый	Фиолетовый	220
	Фиолетовый	Коричневый	270
	Коричневый	Черный	350
$[\text{Fe}(\text{MoO}_4)_6]\text{H}_4(\text{NH}_4)_3 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$	Черный	Желтый	220
$[\text{Cr}(\text{NH}_3)_6]_4(\text{P}_2\text{O}_7)_3$	Фиолетовый	Синий	230
	Синий	Коричневый	280
$[\text{Cr}(\text{NH}_3)_5\text{Cl}]\text{SiF}_6$	Синий	Коричневый	250
$[\text{Cr}(\text{NH}_3)_5\text{Cl}]\text{C}_2\text{O}_4$	Синий	Коричневый	260
$\text{P}_2\text{O}_7\text{H}[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]$	Желтый	Серо-синий	280
	Серо-синий	Фиолетовый	400
$[\text{Fe}(\text{MoO}_4)_6](\text{NH}_4)_3 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$	Желтый	Белый	80
$\text{Cr}[\text{Co}(\text{NH}_2)_2]_6 \cdot \text{Cr}(\text{CN})_6$	Зеленый	Желто-коричневатый	140
$[\text{Ni}(\text{MoO}_4)_6]\text{H}_6(\text{NH}_4)_4 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$	Серый	Белый	180–210
$[\text{Co}(\text{NH}_3)_5\text{Cl}]\text{Cl}_2$	Пурпурный	Голубой	190
$[\text{Cr}(\text{NH}_3)_5\text{Cl}]\text{SiF}_6$	Черно-красный	Желто-коричневый	250

Окончание табл. 1
Ending of the table 1

Пигмент	Начальный цвет	Конечный цвет	Температура перехода, °С
$P_2O_7[Co(NH_3)_6]$	Серый	Серо-голубой	280
$[Cr(NH_3)_6]_4(P_2O_7)_3$	Желтый	Фиолетовый	140–150
$PO_4[Co(NH_3)_6]$	Желтый	Фиолетовый	210–220
		Светло-голубой	220–230
		Коричневый	250–270
		Черный	320–350
$CoCl_2 \cdot 6H_2O$	Розовый	Бледно-голубой	35
$Ag_2[HgI_4]$	Желтый	Оранжево-красный	50
$Cu[HgI_4]$	Темно-красный	Темно-желтый	70
$CoCl_2 \cdot 2[(CH_2)_6N_4] \cdot 10H_2O$	Розовый	Бледно-коричневый	105
$Co(NO_3)_2 \cdot 2[(CH_2)_6N_4] \cdot 10H_2O$	Розовый	Темно-голубой	90–95
$CoSO_4 \cdot 2[(CH_2)_6N_4] \cdot 9H_2O$	Темно-розовый	Синий	110
		Фиолетовый	140
$Co(CNS)_2 \cdot 2[(CH_2)_6N_4] \cdot 10H_2O$	Красный	Голубой	130
$HgI_2 \cdot 10H_2O$	Оранжево-красный	Желтый	150
$NiSO_4 \cdot 7H_2O$	Светло-зеленый	Желтый	155
$NiCl_2 \cdot 2[(CH_2)_6N_4] \cdot 10H_2O$	Светло-зеленый	Фиолетовый	160
$NiBr_2 \cdot 2[(CH_2)_6N_4] \cdot 10H_2O$	Светло-зеленый	Бледно-коричневый	175
$NiCl_2 \cdot 6H_2O$	Белый	Желтый	200
$Cu(NO_3)_2 \cdot 3H_2O$	Светло-голубой	Черный	250
$CuSO_4 \cdot Cu(OH)_2$	Зеленый	Черный	265
$CoCl_2 \cdot 2C_6H_{12}N_4 \cdot 10H_2O$	Розовый	Синий	45
$CoI_2 \cdot 2C_6H_{12}N_4 \cdot 10H_2O$	Розовый	Зеленый	60
$Co(NO_3)_2 \cdot 2C_6H_{12}N_4 \cdot 10H_2O$	Розовый	Голубой	100
$CoSO_4 \cdot 2C_6H_{12}N_4 \cdot 10H_2O$	Розовый	Синий	120
$[Ni(MoO_4)_6H_6]_{12}(NH_4)_3 \cdot 8H_2O$	Серый	Синий	190
$[Co(NH_3)_6]_2(C_2O_4)_3$	Розовый	Черный	220
$[Co(NH_3)_5Cl]Cl_2$	Пурпурный	Черный	235
$[Fe(MoO_4)_6]H_6(NH_4)_3 \cdot 7H_2O$	Черный	Желтый	285

Примечание. Составлено по [14].

Как следует из табл. 1, температура изменения окраски комплексных соединений варьируется в широких пределах, что важно с практической точки зрения.

Описывая применение комплексных соединений в качестве химических сенсоров, нельзя не отметить роль органических электролюминесцентных диодов (*organic light emitting diodes*, OLED). В настоящее время им уделяется огромное внимание. На базе органических электролюминесцентных диодов могут быть созданы плоские и гибкие цветные информационные экраны, дисплеи и экономичные источники света. Основу таких диодов составляют сэндвичевые структуры толщиной ~100 нм, преобразующие электрическую энергию в световую. Излучающая способность органических электролюминесцентных диодов значительно превосходит излучающую способность ламп накаливания, а их срок службы в 50 раз превышает срок службы ламп накаливания [15]. Для изготовления подобных диодов используются комплексные соединения лантаноидов с органическими лигандами. На рис. 1 приведены формулы основных комплексных соединений, используемых в органических электролюминесцентных диодах.

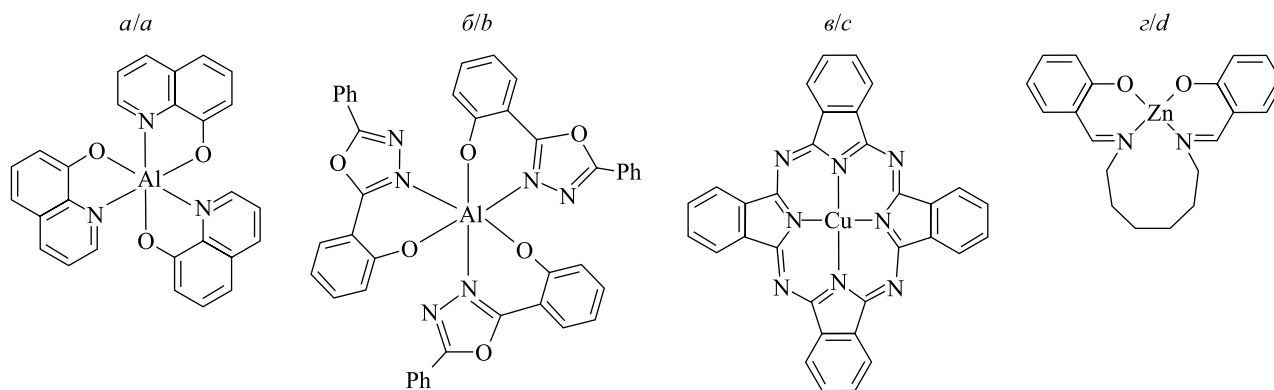


Рис. 1. Формулы комплексов, используемых в органических электролюминесцентных диодах:

a – Alq₃; *б* – Al(pop)₃; *в* – CuPc; *г* – AZM-Hex.

Источник: [15]

Fig. 1. Formulas of complexes used in organic light emitting diodes:

a – Alq₃; *b* – Al(pop)₃; *c* – CuPc; *d* – AZM-Hex.

Source: [15]

В табл. 2 представлены формулы и структуры наиболее эффективных излучающих комплексов лантаноидов с органическими лигандами, работающих в качестве эмиттеров.

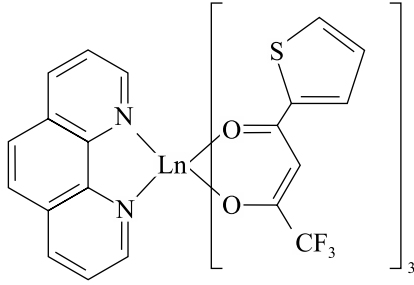
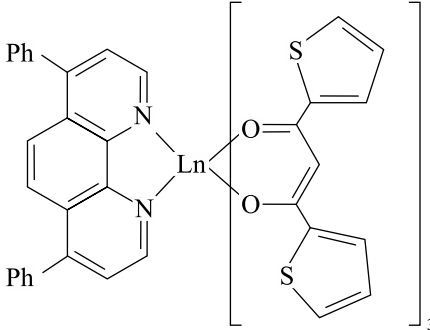
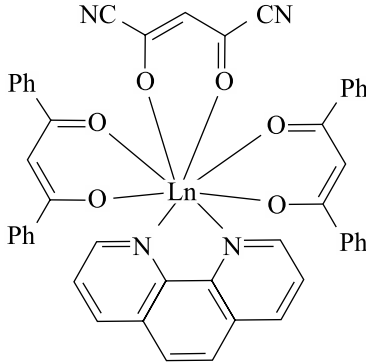
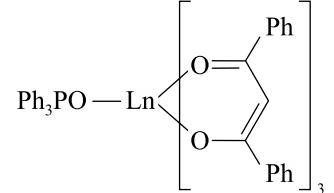
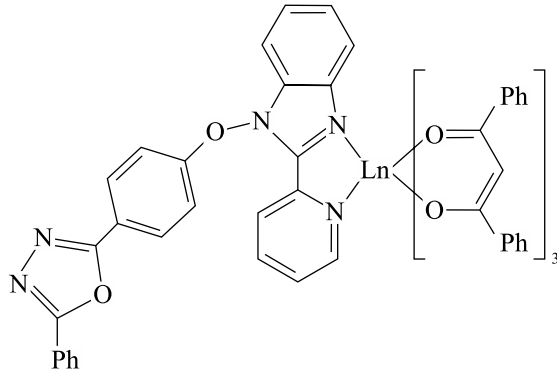
Таблица 2

Наиболее эффективные излучающие комплексы лантаноидов с органическими лигандами

Table 2

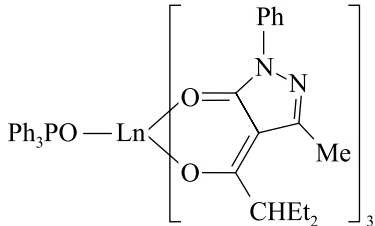
The most effective radiating complexes of lanthanides with organic ligands

Формула	Структура	Максимальная яркость, кд · м ⁻²
Ln(acac-OXD) ₃		550 (при 20 В)
Ln(dbm) ₃ (bath)		820 (при 18 В)
Ln(dbm) ₃ (phen)		460 (при 16 В)

Формула	Структура	Максимальная яркость, кд · м ⁻²
Ln(tta) ₃ (phen)		500 (при 100 мА · см ⁻²)
Ln(dtp) ₃ (bath)		450 (при 15 В)
Ln(dbm) ₂ (danac)(phen)		924 (при 380 мА · см ⁻²)
Ln(dbm) ₃ (TPPO)		320 (при 14,5 В)
Ln(dbm) ₃ (pybm-OXD)		322 (при 21 В)

Продолжение табл.2
Continuation of the table 2

Формула	Структура	Максимальная яркость, кд · м ⁻²
$\text{Ln}(\text{dbm})_3(\text{tpip})$		1305 (при 16 В)
$\text{Ln}(\text{dbm})_3(\text{cpip})$		1460 (при 14 В)
$\text{Ln}(\text{pmip})_3(\text{TPPO})_2$		920 (при 18 В)
$\text{Ln}(\text{tbmpm})_3(\text{TPPO})$		2200 (при 14 В)
$\text{Ln}(\text{pmip})_3(\text{phen})$		779 (при 17 В)
$\text{Ln}(\text{pmip})_3(\text{bipy})$		1010 (при 16 В)

Формула	Структура	Максимальная яркость, кд · м ⁻²
$\text{Ln}(\text{ebpmp})_3(\text{TPPO})$		20 000 (при 20 В)

Примечание. Составлено по [15].

Хорошие результаты работы органических электролюминесцентных диодов были получены для комплексов редкоземельных элементов с пиразолоновыми лигандами и лигандами на основе производных хинолина [15]. На рис. 2 приведены структуры таких комплексов. Первый комплекс (см. рис. 2, а) содержит 8-гидроксихинолиновые лиганды и катион аммония. Во втором комплексе (см. рис. 2, б) металл связан с двумя молекулами воды.

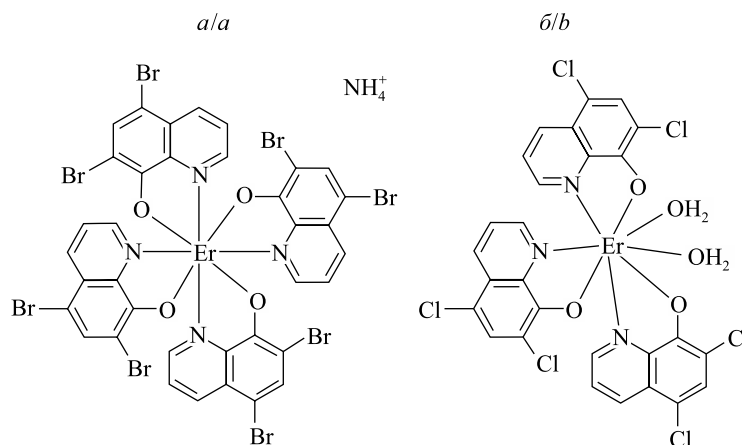


Рис. 2. Формулы комплексов на основе производных хинолина.

Источник: [15]

Fig. 2. Formulas of complexes based on quinoline derivatives.

Source: [15]

Повышенный интерес исследователей вызывают координационные соединения лантаноидов с карбоновыми кислотами, которые характеризуются высокой интенсивностью люминесценции, фото- и термостабильностью [16]. В качестве новых эмиссионных материалов для светодиодов белого свечения предложены координационные соединения редкоземельных металлов [17].

Систематизируя имеющуюся информацию о функциональных материалах электроники, в качестве примера можно привести материалы на основе комплексных соединений германия, позволяющие при комнатной температуре получать из водных растворов прозрачные пленки толщиной 0,5–20,0 мкм с интересными физико-химическими и электрофизическими характеристиками [18]. Пленки толщиной до 1 мкм имеют мелкозернистую структуру с оптически гладкой поверхностью. Их физико-химические и оптические свойства могут претерпеть изменения за счет образования солей с ионами других металлов и органическими катионами. Диэлектрическая проницаемость пленок лежит в пределах 3–8. Это обстоятельство позволяет использовать их в приборах СВЧ-диапазона.

Известен также датчик газообразного аммиака [19], в котором используется диэлектрическая ситалловая подложка с хромовыми электродами. На электроды нанесен слой газочувствительного вещества, в качестве которого выступают металлокомплексы порфиринов различного строения. Металлокомплексы тетрафенилпорфирина содержат поливалентные ионы VIII группы. Для повышения чувствительности датчика в 1,5–3,0 раза в состав молекул порфирина введены электроотрицательные заместители. Металлокомплексы порфиринов не растворимы в воде. Это обстоятельство улучшает эксплуатационные свойства датчика и делает возможным проведение измерений в условиях повышенной влажности.

Выделяют также электрохимические сенсоры угарного газа и окислов азота. Описываемые системы основаны на процессе термоллиза комплексных соединений $[\text{Ru}_3\text{O}_2(\text{NH}_3)_{14}]\text{Cl}_6 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ и $[\text{Ru}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}_2$ и изготовлены на керамике из диоксида циркония. Подобные покрытия были использованы для создания электродов электрохимического сенсора $\text{Ru}/\text{ZrO}_2/\text{Ru}$, позволяющего определять NO_x и CO [20]. Это особенно важно, если учесть, что угарный газ не имеет запаха и представляет серьезную опасность для человека и животных.

На рис. 3 приводится схема взаимодействия комплекса кобальта(II) с оксидом азота. В составе лиганда имеются две дансильные группы, содержащие нафталиновое ядро. По этой причине проявляются свойства люминофора.

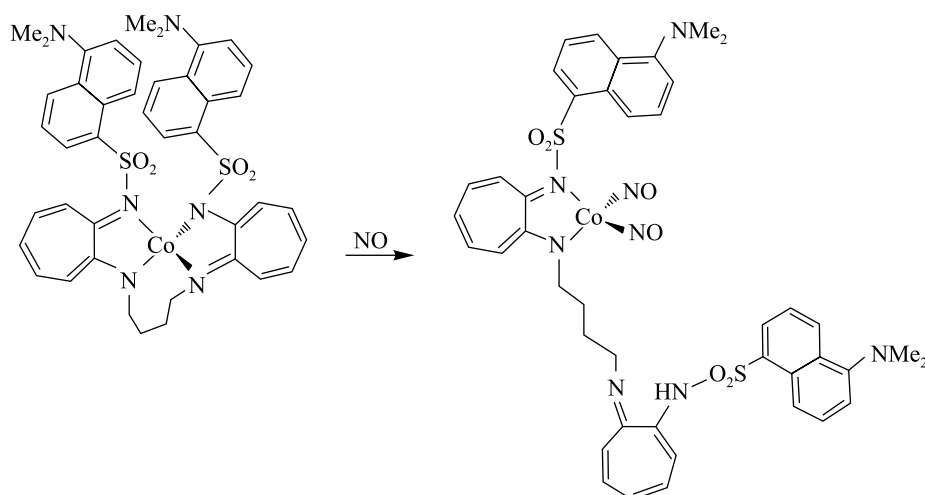


Рис. 3. Схема взаимодействия комплекса кобальта(II) с оксидом азота.
Источник: [21]

Fig. 3. Scheme of interaction of the cobalt(II) complex with nitrogen oxide.
Source: [21]

При образовании связей кобальта с атомами азота происходит тушение люминесценции. После присоединения двух молекул NO к комплексу люминесценция вновь появляется. В работе [21] приводятся и другие примеры, представляющие интерес для технологии изготовления сенсорных приборов.

Заключение

Электронная спектроскопия занимает особое место среди методов анализа, базирующихся на физических свойствах вещества. Полученные данные позволяют охарактеризовать применение комплексных соединений в качестве сенсоров, поэтому описание представленных процессов и явлений, несомненно, актуально и важно для промышленного производства и обеспечения экологической безопасности.

Библиографические ссылки

1. Алов НВ, Барбалат ЮА, Гармаш АВ, Дорохова ЕН, Долманова ИФ, Золотов ЮА и др. *Основы аналитической химии. Книга 2, Методы химического анализа*. 2-е издание. Золотов ЮА, редактор. Москва: Высшая школа; 1999. 494 с.
2. Юрьева АВ. *Физико-химические методы анализа*. Омск: Омский государственный технический университет; 2005. 44 с.
3. Серов АВ, Тимченко ВП, Арефьева ЛП, Ясная МА. *Химические сенсоры*. Ставрополь: Северо-Кавказский федеральный университет; 2017. 17 с.
4. Егоров АА, Егоров МА, Царева ЮИ. Химические сенсоры: классификация, принципы работы, области применения. *Физико-химическая кинетика в газовой динамике* [Интернет]. 2008 [процитировано 21 марта 2023 г.]; 6. Доступно по: <http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2008-01-14-001.pdf>.
5. Каттралл РВ. *Химические сенсоры*. Максименко ОО, переводчик; Петрухина ОМ, редактор. Москва: Научный мир; 2000. 144 с.
6. Janata J. Centennial retrospective on chemical sensors. *Analytical Chemistry*. 2001;73(5):151A–153A. DOI: 10.1021/ac012402a.
7. Шмидт Д, Шварц В. *Оптоэлектронные сенсорные системы*. Гельман ММ, переводчик. Москва: Мир; 1991. 95 с.
8. Эггинс Б. *Химические и биологические сенсоры*. Слинкин МА, Зимина ТМ, Лучинин ВВ, переводчики. Москва: Техносфера; 2005. 336 с. (Мир электроники).
9. Seeboth A, Löttsch D, editors. *Thermochromic and thermotropic materials*. [S. l.]: Pan Stanford Publishing; 2013. 228 p.

10. Fernandes LC, Correia DM, García-Astrain C, Pereira N, Tariq M, Esperança JMSS, et al. Ionic-liquid-based printable materials for thermochromic and thermoresistive applications. *ACS Applied Materials & Interfaces*. 2019;11(22):20316–20324. DOI: 10.1021/acsami.9b00645.
11. Zhu Dandan, Wang Hongyu. Hexafluorophosphate intercalation into graphite electrode from propylene carbonate/methyl acetate solutions. *Electrochimica Acta*. 2021;379:138108. DOI: 10.1016/j.electacta.2021.138108.
12. Yu Hongtao, Li Yunchao, Li Xiaohong, Fan Louzhen, Yang Shihe. Electrochemical preparation of N-doped cobalt oxide nanoparticles with high electrocatalytic activity for the oxygen-reduction reaction. *Chemistry – A European Journal*. 2014;20(12):3457–3462. DOI: 10.1002/chem.201303814.
13. Ларин ВИ, Самойлов ЕА, Шаповалов СА. Исследование энергетико-кинетических процессов окисления-восстановления частиц в электрохимических системах. *Вестник Харьковского национального университета имени В. Н. Каразина. Химия*. 2010;19:101–111.
14. Абрамович БГ. Термоиндикаторы и их применение. *Химия и химик* [Интернет]. 2008 [процитировано 21 марта 2023 г.]; 5:19–64. Доступно по: <http://chemistry-chemists.com/N5/19-64.pdf>.
15. Каткова МА, Витухновский АГ, Бочкарев МН. Координационные соединения редкоземельных металлов с органическими лигандами для электролюминесцентных диодов. *Успехи химии*. 2005;74(12):1193–1215.
16. Колечко ДВ. *Синтез и физико-химические свойства комплексных соединений лантаноидов с производными арилоксиуксусной кислоты* [диссертация]. Краснодар: [б. и.]; 2008. 129 с.
17. Ильичев ВА. *Комплексы редкоземельных металлов с гетероциклическими лигандами для органических светоизлучающих диодов* [диссертация]. Нижний Новгород: [б. и.]; 2011. 118 с.
18. Лепих Я, Смытына ВА. Функциональные материалы на основе комплексных соединений германия. *Письма в ЖТФ*. 2000;26(4):72–76.
19. Маслов ЛП, Румянцева ВД, Миронов АФ, авторы; Московская государственная академия тонкой химической технологии имени М. В. Ломоносова, патентообладатель. *Датчик газообразного аммиака и способ его изготовления с использованием металлокомплексов порфиринов*. Патент Российской Федерации RU 2172486C2. 20 августа 2001 г.
20. Гребнев ВВ, Мальчиков ГД, Голубев ОН, Фесик ЕВ, авторы; Гребнев ВВ, Мальчиков ГД, патентообладатели. *Способ изготовления рутениевых электродов электрохимического датчика с твердым электролитом*. Патент Российской Федерации RU 2342652C2. 27 декабря 2008 г.
21. Скопенко ВВ, Цивадзе АЮ, Савранский ЛИ, Гарновский АД. *Координационная химия*. Москва: Академкнига; 2007. 487 с.
22. Хентов ВЯ, Семченко ВВ, Шачнева ЕЮ. *Процессы комплексообразования природного и техногенного происхождения*. Москва: Русайнс; 2017. 266 с.

References

1. Alov NV, Barbalat YuA, Garmash AV, Dorokhova EN, Dolmanova IF, Zolotov YuA, et al. *Osnovy analiticheskoi khimii. Kniga 2, Metody khimicheskogo analiza* [Fundamentals of analytical chemistry. Book 2, Methods of chemical analysis]. 2nd edition. Zolotov YuA, editor. Moscow: Vysshaya shkola; 1999. 494 p. Russian.
2. Yur'eva AV. *Fiziko-khimicheskie metody analiza* [Physico-chemical methods of analysis]. Omsk: Omsk State Technical University; 2005. 44 p. Russian.
3. Serov AV, Timchenko VP, Aref'eva LP, Yasnaya MA. *Khimicheskie sensory* [Chemical sensors]. Stavropol: North-Caucasus Federal University; 2017. 17 p. Russian.
4. Egorov AA, Egorov MA, Tsareva YuI. Chemical sensors: classification, principles of work, area of application. *Physical-chemical Kinetics in Gas Dynamics* [Internet]. 2008 [cited 2023 March 21];6. Available from: <http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2008-01-14-001.pdf>. Russian.
5. Cattrall RW. *Chemical sensors*. Oxford: Oxford University Press; 1997. 74 p.
Russian edition: Cattrall RW. *Khimicheskie sensory*. Maksimenko OO, translator; Petrukhina OM, editor. Moscow: Nauchnyi mir; 2000. 144 p.
6. Janata J. Centennial retrospective on chemical sensors. *Analytical Chemistry*. 2001;73(5):151A–153A. DOI: 10.1021/ac012402a.
7. Schmidt D, Schwarz W. *Optoelektronische Sensorsysteme*. Berlin: Verlag Technik; 1988. 80 S. (Reihe Automatisierungstechnik; Band 231).
Russian edition: Schmidt D, Schwarz W. *Optoelektronnye sensorye sistemy*. Gel'man MM, translator. Moscow: Mir; 1991. 95 p.
8. Eggins BR. *Chemical sensors and biosensors*. Chichester: John Wiley & Sons; 2002. 300 p. (Analytical techniques in the sciences).
Russian edition: Eggins B. *Khimicheskie i biologicheskie sensory*. Slinkin MA, Zimina TM, Luchinin VV, translators. Moscow: Tekhnosfera; 2005. 336 p. (Mir elektroniki).
9. Seeboth A, Löttsch D, editors. *Thermochromic and thermotropic materials*. [S. l.]: Pan Stanford Publishing; 2013. 228 p.
10. Fernandes LC, Correia DM, García-Astrain C, Pereira N, Tariq M, Esperança JMSS, et al. Ionic-liquid-based printable materials for thermochromic and thermoresistive applications. *ACS Applied Materials & Interfaces*. 2019;11(22):20316–20324. DOI: 10.1021/acsami.9b00645.
11. Zhu Dandan, Wang Hongyu. Hexafluorophosphate intercalation into graphite electrode from propylene carbonate/methyl acetate solutions. *Electrochimica Acta*. 2021;379:138108. DOI: 10.1016/j.electacta.2021.138108.
12. Yu Hongtao, Li Yunchao, Li Xiaohong, Fan Louzhen, Yang Shihe. Electrochemical preparation of N-doped cobalt oxide nanoparticles with high electrocatalytic activity for the oxygen-reduction reaction. *Chemistry – A European Journal*. 2014;20(12):3457–3462. DOI: 10.1002/chem.201303814.
13. Ларин ВИ, Самойлов ЕА, Шаповалов СА. Investigation of energetics of redox particles processes in electrochemical systems. *Kharkov University Bulletin. Chemical Series*. 2010;19:101–111. Russian.
14. Абрамович БГ. [Thermal indicators and their application]. *Khimiya i khimiki* [Internet]. 2008 [cited 2023 March 21];5:19–64. Available from: <http://chemistry-chemists.com/N5/19-64.pdf>. Russian.
15. Каткова МА, Витухновский АГ, Бочкарев МН. Coordination compounds of rare-earth metals with organic ligands for electro-luminescent diodes. *Uspekhi khimii*. 2005;74(12):1193–1215. Russian.

16. Kolechko DV. *Sintez i fiziko-khimicheskie svoystva kompleksnykh soedinenii lantanoidov s proizvodnymi ariloksiuksusnoi kisloty* [Synthesis and physico-chemical properties of complex compounds of lanthanides with derivatives of aryloxyacetic acid] [dissertation]. Krasnodar: [s. n.]; 2008. 129 p. Russian.
17. Il'ichev VA. *Kompleksy redkozemel'nykh metallov s geterotsiklicheskimi ligandami dlya organicheskikh svetoizluchayushchikh diodov* [Complexes of rare-earth metals with heterocyclic ligands for organic light-emitting diodes] [dissertation]. Nizhny Novgorod: [s. n.]; 2011. 118 p. Russian.
18. Lepikh Ya, Smytyna VA. [Functional materials based on complex compounds of germanium]. *Pis'ma v ZhTF*. 2000;26(4): 72–76. Russian.
19. Maslov LP, Rumyantseva VD, Mironov AF, inventors; Lomonosov Moscow State Academy of Fine Chemical Technology, assignee. *Datchik gazoobraznogo ammiaka i sposob ego izgotovleniya s ispol'zovaniem metallokompleksov porfirinov* [The sensor of gaseous ammonia and the method of its manufacture using porphyrin metal complexes]. Russian Federation patent RU 2172486C2. 2001 August 20. Russian.
20. Grebnev VV, Mal'chikov GD, Golubev ON, Fesik EV, inventors; Grebnev VV, Mal'chikov GD, assignee. *Sposob izgotovleniya rutenievyykh elektrodov elektrokhimicheskogo datchika s tverdyim elektrolitom* [Method of manufacturing ruthenium electrodes of an electrochemical sensor with a solid electrolyte]. Russian Federation patent RU 2342652C2. 2008 December 27. Russian.
21. Skopenko VV, Tsivadze AYu, Savranskii LI, Garnovskii AD. *Koordinatsionnaya khimiya* [Coordination chemistry]. Moscow: Akademkniga; 2007. 487 p. Russian.
22. Khentov VYa, Semchenko VV, Shachneva EYu. *Protsessy kompleksoobrazovaniya prirodnogo i tekhnogennogo proiskhozhdeniya* [Processes of complex formation of natural and technogenic origin]. Moscow: Rusains; 2017. 266 p. Russian.

Получена 27.07.2023 / принята 28.08.2023.
Received 27.07.2023 / accepted 28.08.2023.

МАССИВЫ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ЛИНЗ НА ОСНОВЕ ФОТОЧУВСТВИТЕЛЬНОГО ПОЛИМЕРНОГО ОРИЕНТАНТА

**В. Ю. СТАНЕВИЧ¹⁾, Д. С. ЧЕПЕЛЕВА¹⁾,
А. Д. КУРИЛОВ²⁾, В. С. БЕЗРУЧЕНКО³⁾, А. А. МУРАВСКИЙ¹⁾**

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

²⁾Государственный университет просвещения,
ул. Веры Волошиной, 24, 141014, г. Мытищи, Московская обл., Россия

³⁾Morroy NV, ул. Фрида Сайсстраат, 1, 9052, г. Гент, Бельгия

Разработаны новые подходы к созданию жидкокристаллических устройств, управляющих угловым распределением света. Синтезирован ориентирующий материал, с помощью которого формируется распределение директора жидкого кристалла на поверхности подложек, позволяющее при прохождении света через жидкокристаллическую ячейку получить волновой фронт, аналогичный обычной линзе. Данный материал представляет собой сополимер (BVS) бутилметакрилата (BMA), ванилилметакрилата (VMA) и стеарилметакрилата (SMA). Изготовлены жидкокристаллические ячейки с различными упаковками массива линз (квадратной и гексагональной). Показано, что для реализации наиболее эффективного рассеяния управляемой рефрактивно-рассеивающей структуры плотность линз в упаковке должна быть максимально возможной. Установлено, что оптимальной является гексагональная упаковка массива линз, поскольку в этом случае занимаемая линзами площадь на 5 % больше, чем в случае квадратной упаковки. Выполнен расчет фокусного расстояния массива жидкокристаллических линз в поляризованном свете. Выявлено, что наименьшее фокусное расстояние характерно для синего диапазона длин волн, а наибольшее – для красного. Исследована зависимость фокусного расстояния от радиуса жидкокристаллической линзы, толщины жидкокристаллического слоя, двулучепреломления жидкокристаллических материалов. Разработанный сополимер (BVS) позволяет изготовить массив линз на пластиковой подложке благодаря низкотемпературной обработке ($\leq 70^\circ\text{C}$), что обуславливает перспективы применения данного материала в области создания современных устройств и систем управления световыми пучками.

Ключевые слова: жидкий кристалл; сополимер; ориентирующие материалы; жидкокристаллические линзы; массив линз.

Образец цитирования:

Станевич ВЮ, Чепелева ДС, Курилов АД, Безрученко ВС, Муравский АА. Массивы жидкокристаллических линз на основе фоточувствительного полимерного ориентанта. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2023;3:22–30.
EDN: ACQATL

For citation:

Stanevich VYu, Chepeleva DS, Kurilov AD, Bezruchenko VS, Murauski AA. Arrays of liquid crystal lenses based on photo-sensitive polymer orientant. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2023;3:22–30. Russian.
EDN: ACQATL

Авторы:

Вероника Юрьевна Станевич – младший научный сотрудник лаборатории материалов и технологий ЖК-устройств.
Доминика Сергеевна Чепелева – младший научный сотрудник лаборатории материалов и технологий ЖК-устройств.
Александр Дмитриевич Курилов – кандидат физико-математических наук; заведующий учебно-научной лабораторией теоретической и прикладной нанотехнологии.
Вероника Сергеевна Безрученко – кандидат физико-математических наук; инженер-материаловед.
Анатолий Александрович Муравский – кандидат физико-математических наук; ведущий научный сотрудник лаборатории материалов и технологий ЖК-устройств.

Authors:

Veranika Yu. Stanevich, junior researcher at the laboratory of materials and technologies of LC devices.
veronika.stanevich@gmail.com
Daminika S. Chepeleva, junior researcher at the laboratory of materials and technologies of LC devices.
dominika.chepeleva@mail.ru
Alexander D. Kurilov, PhD (physics and mathematics); head of the laboratory of theoretical and applied nanotechnology.
ad.kurilov@gmail.com
Veronika S. Bezruchenko, PhD (physics and mathematics); material engineer.
veronika_sudas@mail.ru
Anatoli A. Murauski, PhD (physics and mathematics); leading researcher at the laboratory of materials and technologies of LC devices.
anatoli_murauski@yahoo.com

ARRAYS OF LIQUID CRYSTAL LENSES
BASED ON PHOTSENSITIVE POLYMER ORIENTANT

V. Yu. STANEVICH^a, D. S. CHEPELEVA^a,
A. D. KURILOV^b, V. S. BEZRUCHENKO^c, A. A. MURAUSKI^a

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

^bState University of Education, 24 Very Voloshinoi Street, Mytishchi 141014, Moscow Region, Russia

^cMorrow NV, 1 Frieda Seisstraat Street, Ghent 9052, Belgium

Corresponding author: V. Yu. Stanevich (veronika.stanevich@gmail.com)

New approaches have been developed for creating liquid crystal devices that control the angular distribution of light. An alignment material has been synthesised, with help of which the distribution of the liquid crystal director on the surface of the substrates is formed. When light passes through the liquid crystal cell, distribution makes possible to obtain a wave front similar to a conventional lens. This material is a copolymer (BVS) of butyl methacrylate (BMA), vanillyl methacrylate (VMA) and stearyl methacrylate (SMA). Liquid crystal cells with different lens array packages (square and hexagonal) are manufactured. It is shown that in order to realise the maximum scattering of a controlled refractive-scattering structure, the lens density in the packing should be as high as possible. It has been established that the hexagonal packing of the lens array is optimal, since in this case the area occupied by the lenses is 5 % larger than in the case of square packing. The focal length of an array of liquid crystal lenses in polarised light is calculated. It has been established that the smallest focal length is typical for the blue wavelength range, and the largest for the red one. The dependence of the focal length on the radius of the liquid crystal lens, the thickness of the liquid crystal layer and the birefringence of liquid crystal materials is studied. The developed copolymer (BVS) makes it possible to manufacture an array of lenses on a plastic substrate due to low-temperature processing ($\leq 70^\circ\text{C}$), which leads to the prospects for using this material in the field of creating modern devices and systems for controlling light beams.

Keywords: liquid crystal; copolymer; aligning materials; liquid crystal lenses; lens array.

Введение

На данный момент огромный интерес представляет разработка плоскопараллельных переключаемых оптических структур. Одним из перспективных способов создания такого рода элементов является использование жидких кристаллов (ЖК) в качестве функциональных материалов [1]. Ориентация ЖК в ячейке определяется взаимодействиями твердой поверхности ориентирующего слоя и молекул ЖК. Благодаря этим взаимодействиям директор ЖК может принимать гомеотропную, наклонную или планарную ориентацию по отношению к плоскости подложки, с которой он контактирует. Ненулевые значения углов преднаклона директора ЖК позволяют создать множество переключаемых фотонных устройств, в том числе ЖК-линзы, способные эффективно изменять фокусное расстояние с помощью низких управляющих напряжений [2].

На сегодняшний день массивы адаптивных ЖК-линз могут быть использованы в дисплеях, микроскопах светового поля (например, для формирования автостереоскопического 3D-эффекта), органических микролазерах, устройствах ввода излучения в волновод, осветительных приборах и др.

В настоящей работе предложен современный подход к созданию ЖК-устройств на основе массива микролинз, обеспечивающих управление угловым распределением света. Отработана технология нанесения тонких пленок ориентирующего материала (BVS), что позволило реализовать заданное распределение ориентации директора ЖК на поверхности подложек с пространственным разрешением, составляющим единицы микрон [3; 4]. Проанализированы оптические свойства и возможности дальнейшего применения предлагаемых ЖК-структур.

Дизайн управляемой ЖК-линзы

Для создания адаптивной ЖК-линзы была выбрана структура типа «сэндвич» (рис. 1), представляющая собой нематическую гибридно-ориентированную ЖК-ячейку (HAN-ячейку). Ключевым компонентом для данной структуры является ориентирующий материал, тонкие пленки которого способны локально изменять углы преднаклона ЖК под действием оптического облучения [2].

Специальное распределение директора ЖК в ячейке, формирующее линзоподобную структуру, предполагает плавное изменение угла преднаклона директора ЖК от 90° до 0° при переходе от периферии линзы к ее центру (см. рис. 1, а), вне границ линзы ориентация ЖК остается гомеотропной. Плавное изменение ориентации директора ЖК в ячейке позволяет получить градиент показателя преломления

ЖК-среды для линейно-поляризованного света, ориентированного в направлении директора ЖК в случае рассматриваемой геометрии. При подключении к электродам ячейки низкочастотного напряжения молекулы ЖК ориентируются своими длинными осями вдоль вектора напряженности электрического поля. При достаточно большой амплитуде управляющего напряжения ориентация ЖК в ячейке становится однородной гомеотропной, что сопровождается увеличением фокусного расстояния ЖК-линзы [2].

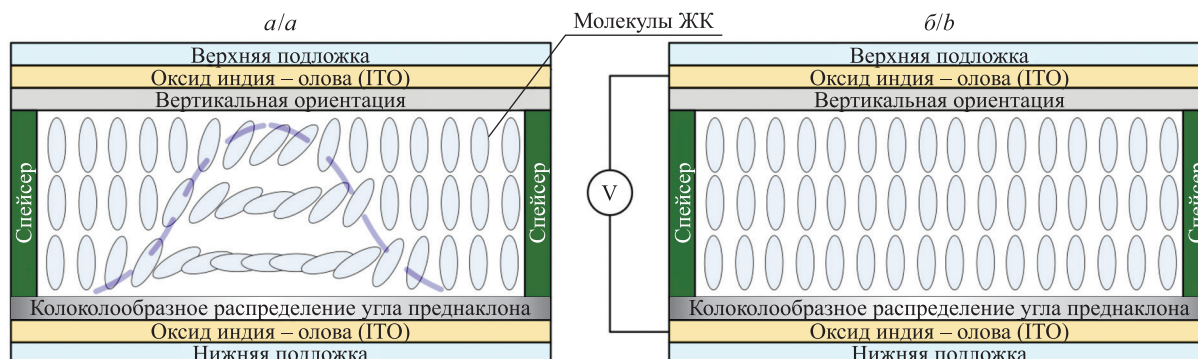


Рис. 1. Схема управляемой ЖК-линзы в плоской ячейке:
а – без приложенного напряжения; б – с приложенным напряжением.
Источник: [5]

Fig. 1. Liquid crystal (LC) lens structure: a – no voltage; b – on-state.
Source: [5]

Нижний (градиентный) ориентирующий слой должен обеспечивать заданное распределение углов преднаклона директора ЖК, зависящее от дозы УФ-облучения. Так как полярная и азимутальная энергии сцепления ориентирующих слоев с ЖК-материалом увеличиваются с ростом дозы УФ-облучения, то для создания плавного колоколообразного профиля распределения углов преднаклона директора ЖК интенсивность УФ-излучения должна быть максимальной в центре освещенного круга и спадать по направлению к периферии. Тогда при выбранном времени экспонирования будет получено соответствующее распределение экспозиционных доз. Если диапазоны изменения интенсивности УФ-излучения соответствуют участку уменьшения углов преднаклона директора ЖК, то будет получено требуемое распределение последних по площади линзы. Формирование распределения углов преднаклона директора ЖК в ячейке предполагает создание кругового поля экспонирования с радиальной симметрией освещенности. Воспроизводимость углов преднаклона директора ЖК должна достигаться путем точного контроля дозы УФ-облучения ориентирующего слоя [2].

Технология изготовления ЖК-линз

Для изготовления ЖК-линзы обычно используется ячейка типа «сэндвич» (см. рис. 1), состоящая из двух подложек, покрытых тонкими слоями градиентного полимерного материала. Ориентирующие слои подвергаются непродолжительному однородному УФ-экспонированию, сохраняющему величину угла преднаклона 90° , но предотвращающему изменение условий исходной гомеотропной ориентации под действием ЖК [6]. Далее производится однородное натирание ориентирующих слоев, после чего нижняя подложка подвергается локальному УФ-экспонированию световым полем с круговой геометрией (рис. 2) [2].

В ходе выполнения работы изготовлены массивы линз с квадратной и гексагональной упаковкой. Для упрощения анализа свойств линз выбраны следующие размеры: диаметр линз – 0,8 мм, расстояние между центрами линз – 2,5 мм. Массивы линз формировались в ЖК-ячейках типа «сэндвич». Для изготовления ячеек был отработан технологический процесс. На тщательно очищенные стеклянные подложки толщиной 0,7 мм с проводящим подслоем оксида индия – олова (ITO) жидкостным способом (методом род-коутинга) наносился ориентирующий слой из 1 % раствора фоточувствительного полимера (BVS). Затем производилась сушка подложек на термоплите при температуре 70°C в течение 5 мин для удаления следов растворителя. Далее подложки натирались механическим способом с помощью автоматизированной натирающей машины, оснащенной хлопковой щеткой с длиной ворса 2 мм. Направление натирания подложек выбиралось таким образом, чтобы получить в ЖК-ячейке антипараллельную ориентацию ЖК. Оба натертых слоя верхней и нижней подложек предварительно облучались неполяризованным излучением люминесцентной лампы с длиной волны 320 нм и интенсивностью 3 мВт/см^2 в течение 60 с. После натирания ориентирующих слоев производилось экспонирование нижней подложки: выполнялась запись массива линз светодиодом с длиной волны излучения 310 нм и максимальной интенсивностью в центре пучка света около 30 мВт/см^2 . Впоследствии обе подложки склеивались эпоксидным двухкомпонентным

клеем для формирования корпуса ячейки. Величина воздушного зазора в ячейке задавалась с помощью волоконных спейсеров диаметром 20 мкм. Подготовленная ячейка заправлялась нематическим кристаллом ЖК-1285 (НИОПИК, Россия) в условиях изотропной фазы.

Запись в ячейке массива линз с гексагональной и квадратной упаковкой производилась с помощью микроскопа (рис. 3), оснащенного передвижным столиком.

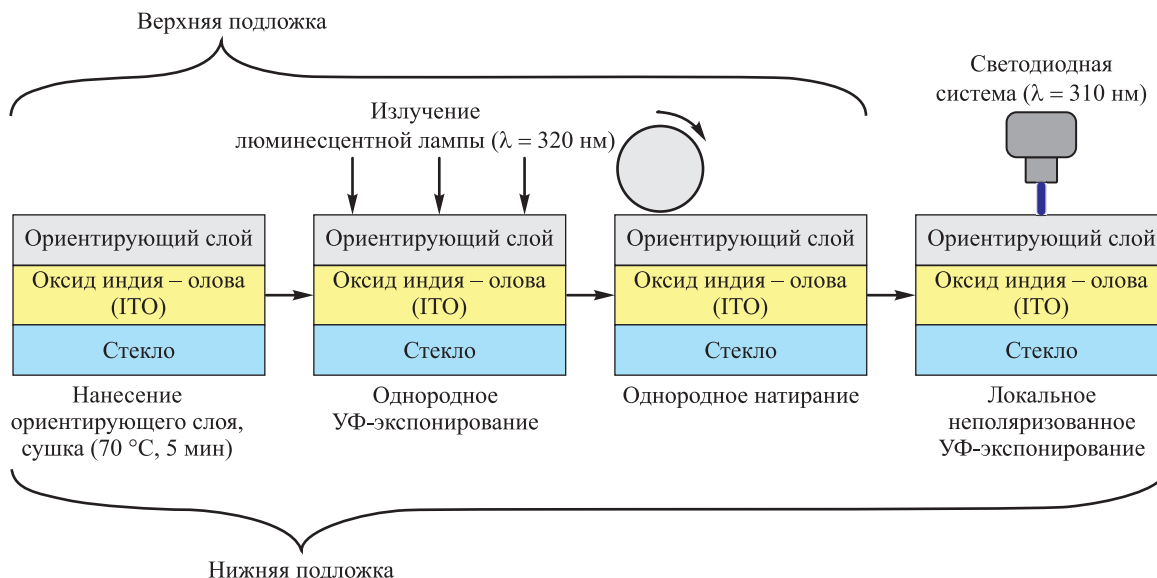


Рис. 2. Схема технологии изготовления ЖК-ячейки для формирования ЖК-линзы методом фотостимулированной ориентации с использованием светодиодной системы ($\lambda = 310$ нм)

Fig. 2. Process flow of alignment layers fabrication for LC lens by method of photostimulated alignment using a LED system ($\lambda = 310$ nm)

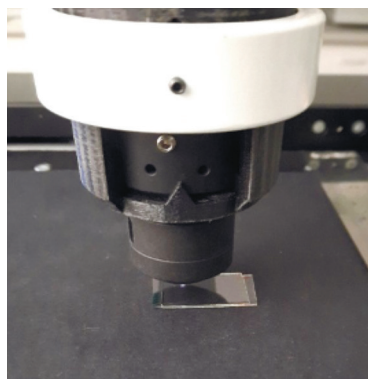


Рис. 3. Микроскоп для экспонирования массива линз разной упаковки

Fig. 3. Microscope for exposing an lens array with different packages

Управление движением столика микроскопа осуществлялось с применением специальной программы (разработка лаборатории материалов и технологий ЖК-устройств Института химии новых материалов НАН Беларуси), для которой рассчитывались координаты квадратной (рис. 4, а) и гексагональной (рис. 4, б) упаковки массива линз с шагом 2,5 мм.

Для определения оптимального времени экспонирования для записи линз была проведена тестовая засветка одной из подложек светодиодом с длиной волны излучения 310 нм при времени экспонирования в диапазоне 70–275 с. Исходя из полученных экспериментальных данных (рис. 5), при экспонировании в течение 75 с в слое нематического ЖК формируется вертикальная ориентация, при экспонировании в течение 105 с начинает формироваться планарная ориентация (образуются шивки), при экспонировании в течение 140 с происходит полный переход в планарную ориентацию, а при экспонировании в течение 275 с наблюдается обратный переход в вертикальную ориентацию предположительно в связи с процессом деструкции (разрушения полимерной матрицы).

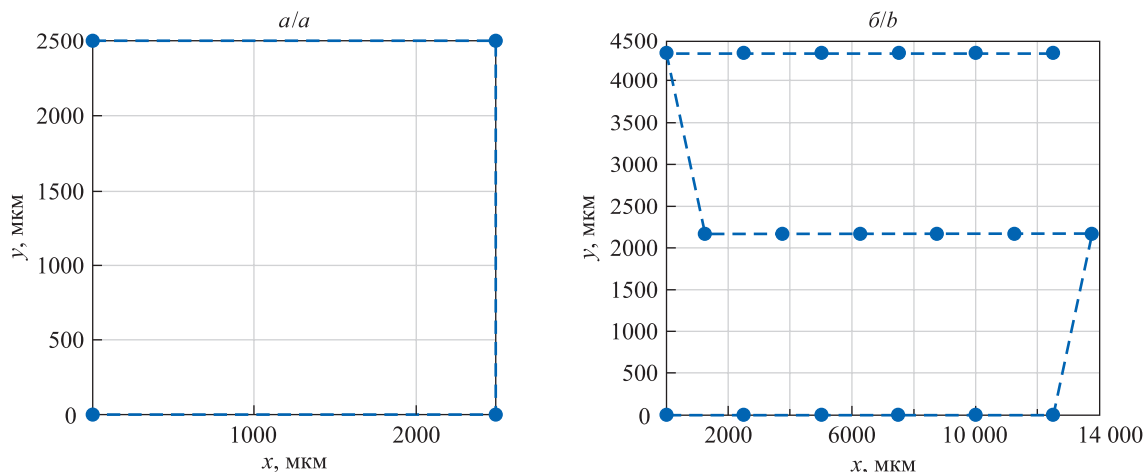


Рис. 4. Координаты экспонирования квадратной (а) и гексагональной (б) упаковки массива линз
 Fig. 4. Exposure coordinates for square (a) and hexagonal (b) packages of lens array

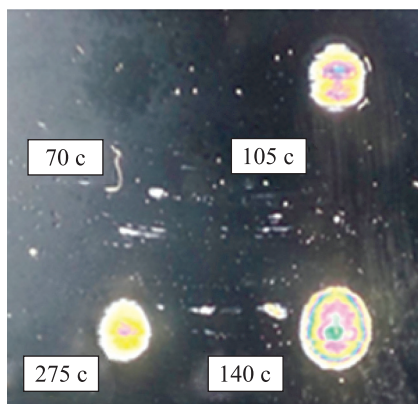


Рис. 5. Микрофотография ориентации ЖК в ячейке при разном времени экспонирования (плоскость ячейки расположена под углом 45° в скрещенных поляризаторах)
 Fig. 5. Microphotograph of the alignment of LC at different exposure times (the cell plane located at an angle of 45° in crossed polarisers)

Для изменения фокусного расстояния ЖК-линз к изготовленным ячейкам (рис. 6, а, б) прикладывалось низкочастотное электрическое напряжение ($U = 0$ В, $U = 1$ В, $U = 5$ В, $U = 10$ В). Молекулы ЖК ориентируются своими длинными осями вдоль вектора напряженности электрического поля, постепенно переходя из планарной ориентации в гомеотропное состояние с увеличением амплитуды приложенного напряжения (рис. 7 и 8). Переориентация молекул ЖК во внешнем электрическом поле сопровождается увеличением фокусного расстояния ЖК-линзы [7].

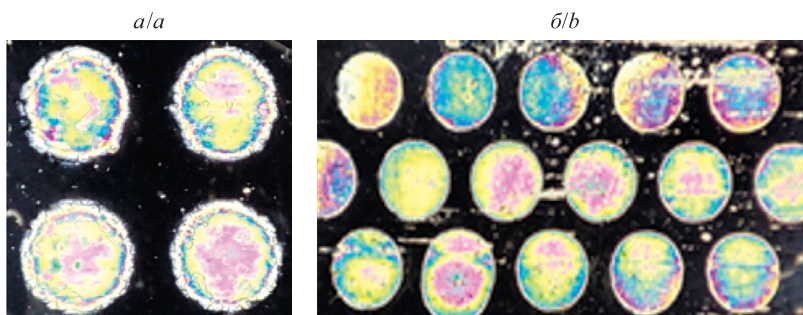


Рис. 6. Микрофотографии ориентации ЖК в ячейке с квадратной (а) и гексагональной (б) упаковкой массива линз (плоскость ячейки расположена под углом 45° в скрещенных поляризаторах)
 Fig. 6. Microphotographs of the alignment of LC in a cell with square (a) and hexagonal (b) packages of lens array (the cell plane located at an angle of 45° in crossed polarisers)

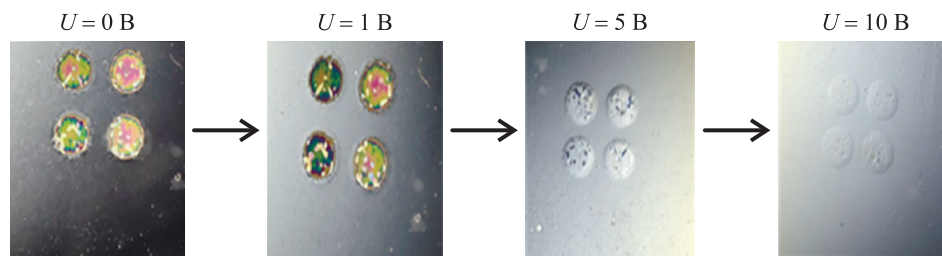


Рис. 7. Микрофотографии ориентации ЖК в ячейке с квадратной упаковкой массива линз при приложенном напряжении ($U = 0$ В, $U = 1$ В, $U = 5$ В, $U = 10$ В) (плоскость ячейки расположена под углом 45° в скрещенных поляризаторах)

Fig. 7. Microphotographs of the alignment of LC in a cell with square package of lens array at an applied voltage ($U = 0$ V, $U = 1$ V, $U = 5$ V, $U = 10$ V) (the cell plane located at an angle of 45° in crossed polarisers)

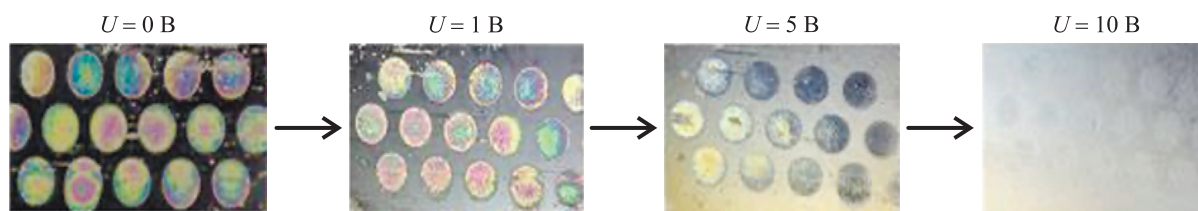


Рис. 8. Микрофотографии ориентации ЖК в ячейке с гексагональной упаковкой массива линз при приложенном напряжении ($U = 0$ В, $U = 1$ В, $U = 5$ В, $U = 10$ В) (плоскость ячейки расположена под углом 45° в скрещенных поляризаторах)

Fig. 8. Microphotographs of the alignment of LC in a cell with hexagonal package of lens array at an applied voltage ($U = 0$ V, $U = 1$ V, $U = 5$ V, $U = 10$ V) (the cell plane located at an angle of 45° in crossed polarisers)

Для полученных ячеек с квадратной (см. рис. 7) и гексагональной (см. рис. 8) упаковкой ЖК-линз был рассчитан процент занимаемой линзами площади. Так как для наиболее эффективного рассеяния проходящего через массив света необходима максимально плотная упаковка линз, то можно сделать вывод, что оптимальной является гексагональная упаковка (в этом случае занимаемая линзами площадь на 5 % больше, чем в случае квадратной упаковки) [8; 9].

Оптические характеристики массива ЖК-линз

Для расчета величины двулучепреломления применялся поляризационный микроскоп и многоканальный спектрометр. С их помощью были измерены спектры пропускания T линзы в поляризованном свете (видимый диапазон длин волн) (рис. 9) в равноотстоящих друг от друга точках линзы.

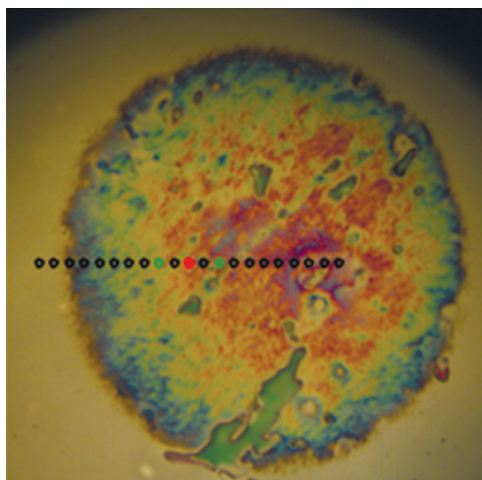


Рис. 9. Микрофотография ориентации ЖК в поляризованном свете (плоскость ячейки расположена под углом 45° в параллельных поляризаторах)

Fig. 9. Microphotograph of the alignment of LC in polarised light (the cell plane located at an angle of 45° in parallel polarisers)

Для определения величины фазовой задержки использовалась зависимость пропускания двулучепреломляющей пластинки от длины волны света:

$$T = \sin^2\left(\pi \frac{\Delta nd}{\lambda}\right).$$

Величина фазовой задержки $\Psi = \Delta nd$ для длин волн $\lambda = 450$ нм (синий диапазон), $\lambda = 550$ нм (зеленый диапазон) и $\lambda = 650$ нм (красный диапазон) рассчитывалась на основе спектров, измеренных в различных точках ЖК-линзы (см. рис. 9), путем подгонки величины показателя двулучепреломления, спектральная зависимость которого аппроксимировалась по формуле Коши

$$\Delta n = A + \frac{B}{\lambda^2} + \frac{C}{\lambda^4}.$$

Для используемого материала (ЖК-1285) коэффициенты формулы Коши составляли следующие величины: $A = 0,139\,665$; $B = 0,006\,867$; $C = 0,000\,551$.

Ячейка собиралась из двух подложек с разной ориентацией сополимера BVS: одна из них имела постоянную гомеотропную ориентацию, а другая – ориентацию с переменным углом подвеса. Зазор ячейки задавался спейсерами диаметром 20 мкм. Собранный таким образом ячейка позволяет уменьшить количество дефектов. Экспонирование двух подложек ячейки (наведение гомеотропной ориентации на обеих подложках) позволило бы увеличить эффективное двулучепреломление Δn в 2 раза относительно такового изготовленной нами ячейки. Однако в этом случае возникли бы сложности при сборке из-за необходимости точно совместить «области линзы».

Для расчета фокусного расстояния ЖК-линзы экспериментальный фазовый профиль (рис. 10) аппроксимировался параболическими кривыми, на основе которых оценивалось фокусное расстояние для трех длин волн по формуле

$$F = \frac{2}{a},$$

где a – старший коэффициент квадратного уравнения параболы. Фокусные расстояния в зависимости от длины волны приведены в табл. 1.

Сокращения фокусного расстояния можно добиться за счет уменьшения радиуса R ЖК-линзы, увеличения толщины d ЖК-слоя (табл. 2), а также использования ЖК-материалов с большим двулучепреломлением Δn .

Фокусное расстояние линзы также можно рассчитать по формуле

$$F = \frac{R^2 - (\Delta nd)^2}{2\Delta nd},$$

где Δnd – разность набега фаз.

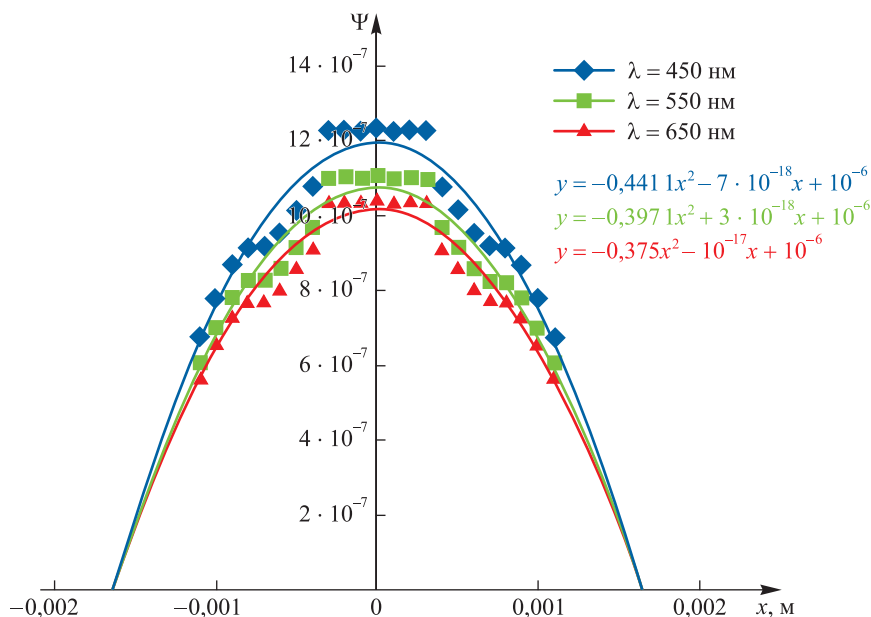


Рис. 10. Фазовый профиль ЖК-линзы
 Fig. 10. Phase profile of an LC lens

Таблица 1
Дисперсия фокусного расстояния

Table 1

Focal length dispersion

λ , нм	F , м
450	4,53
550	5,04
650	5,33

Таблица 2

Изменение фокусного расстояния при разной толщине ЖК-слоя
для линз с радиусом $R = 1,65$ мм, $R = 3,30$ мм и $R = 0,83$ мм

Table 2

Changing the focal length with different thicknesses
of the LC layer for lenses with a radius $R = 1.65$ mm, $R = 3.30$ mm and $R = 0.83$ mm

d , мкм	F , м		
	$\lambda = 450$ нм	$\lambda = 550$ нм	$\lambda = 650$ нм
$R = 1,65$ мм			
5	18,14	20,15	21,33
10	9,07	10,08	10,67
50	1,81	2,02	2,13
100	0,91	1,01	1,07
$R = 3,30$ мм			
5	72,55	80,60	85,33
10	36,27	40,30	42,67
50	7,25	8,06	8,53
100	3,63	4,03	4,27
$R = 0,83$ мм			
5	4,53	5,04	5,33
10	2,27	2,52	2,67
50	0,45	0,50	0,53
100	0,23	0,25	0,27

Исходя из приведенных в табл. 2 значений, наблюдается уменьшение фокусного расстояния F линз при увеличении толщины d ЖК-слоя для каждой из рассматриваемых длин волн ($\lambda = 450$ нм, $\lambda = 550$ нм, $\lambda = 650$ нм). Уменьшение радиуса R линзы в 2 раза приводит к уменьшению фокусного расстояния F в 4 раза, а увеличение радиуса R линзы в 2 раза приводит к увеличению фокусного расстояния F в 4 раза.

Заключение

В ходе изучения и разработки современных подходов к созданию ЖК-устройств для управления угловым распределением света были изготовлены массивы ЖК-микролинз. В качестве ориентирующего материала, формирующего заданное («линзоподобное») распределение директора ЖК, был синтезирован специальный сополимер (BVS). Полученное распределение директора в объеме ЖК-слоя может быть изменено под действием электрического поля, что позволяет управлять угловым распределением излучения и рассеяния света осветительных светодиодных систем. Отработан метод нанесения пленок сополимера BVS и создания ЖК-микролинз, а также массивов ЖК-микролинз. Для формирования ЖК-линзы производилось экспонирование УФ-излучением, имеющим параболический профиль. Изготовлены ЖК-ячейки с различными упаковками массива линз (квадратной и гексагональной). В случае гексагональной упаковки занимаемая линзами площадь на 5 % больше, чем в случае квадратной упаковки, что

соответствует теоретическому представлению о наиболее эффективном рассеянии проходящего света. Оценка фокусного расстояния ЖК-линз в поляризованном свете (видимом (синем, зеленом, красном) диапазоне длин волн) показала, что наименьшее фокусное расстояние ($F = 4,53$ м) характерно для синего диапазона длин волн, для зеленого диапазона длин волн оно составляет величину $F = 5,04$ м, а для красного диапазона возрастает до значения $F = 5,33$ м. Обнаружена зависимость радиуса ЖК-линзы от толщины ЖК-слоя и двулучепреломления ЖК-материалов. Изучены возможности формирования массивов ЖК-линз с различным фокусным расстоянием и показаны пути улучшения их параметров (уменьшения фокусного расстояния). Результаты работы способствуют совершенствованию устройств, для которых необходимо перестраивать фокусное расстояние. Синтезированный сополимер (BVS) позволяет изготавливать массив ЖК-линз на пластиковых подложках благодаря низкотемпературной обработке (≤ 70 °C), что является важным технологическим преимуществом.

Библиографические ссылки

1. Rushnova II, Melnikova EA, Kabanova OS, Tolstik AL, Muravsky AA. Fringe field-tunable LC refractive index interface for in-plane beam steering applications. *Applied Optics*. 2020;59(34):10695–10699. DOI: 10.1364/AO.409688.
2. Безрученко ВС. *Фотоиндуцированные изменения угла преднаклона жидкого кристалла на поверхности слоев бензальдегидсодержащих полимеров для формирования адаптивных линз* [диссертация]. Минск: [б. и.]; 2022. 137 с.
3. Bezruchenko VS, Muravsky AA, Murauski AA, Stankevich AI, Mahilny UV. Gradient pretilt angle alignment materials with different photosensitivity for tunable polarization-independent self-aligned liquid crystal lens. *Journal of the Society for Information Display*. 2021;29(11):825–832. DOI: 10.1002/jsid.990.
4. Dai HT, Liu YJ, Sun XW, Luo D. A negative-positive tunable liquid-crystal microlens array by printing. *Optics Express*. 2009;17(6):4317–4323. DOI: 10.1364/OE.17.004317.
5. Bezruchenko VS, Muravsky AA, Murauski AA, Stankevich AI, Mahilny UV. Tunable liquid crystal lens based on pretilt angle gradient alignment. *Molecular Crystals and Liquid Crystals*. 2016;626:222–228. DOI: 10.1080/15421406.2015.1106890.
6. Безрученко ВС, Могильный ВВ, Станкевич АИ, Муравский АлАн, Муравский АнАл, Кухто ИН. Формирование центрально-симметричных распределений световой интенсивности для экспонирования фоточувствительных ориентирующих слоев жидкокристаллических линз. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика*. 2017;3:12–19.
7. Algorri JF, Zografopoulos DC, Urruchi V, Sánchez-Pena JM. Recent advances in adaptive liquid crystal lenses. *Crystals*. 2019;9(5):272. DOI: 10.3390/cryst9050272.
8. Тот ЛФ. *Расположения на плоскости, на сфере и в пространстве*. Макарова НМ, переводчик; Яглом ИМ, редактор. Москва: Государственное издательство физико-математической литературы; 1958. 363 с.
9. Fan F, Srivastava AK, Du T, Tseng MC, Chigrinov V, Kwok HS. Low voltage tunable liquid crystal lens. *Optics Letters*. 2013;38(20):4116–4119. DOI: 10.1364/OL.38.004116.

References

1. Rushnova II, Melnikova EA, Kabanova OS, Tolstik AL, Muravsky AA. Fringe field-tunable LC refractive index interface for in-plane beam steering applications. *Applied Optics*. 2020;59(34):10695–10699. DOI: 10.1364/AO.409688.
2. Bezruchenko VS. *Fotoinducirovannye izmeneniya ugla prednaklona zhidkogo kristalla na poverhnosti sloev benzal'degidsoderzhashih polimerov dlja formirovaniya adaptivnyh linz* [Photoinduced changes in the pretilt angle of a liquid crystal on the surface of layers of benzaldehyde-containing polymers for the formation of adaptive lenses] [dissertation]. Minsk: [s. n.]; 2022. 137 p. Russian.
3. Bezruchenko VS, Muravsky AA, Murauski AA, Stankevich AI, Mahilny UV. Gradient pretilt angle alignment materials with different photosensitivity for tunable polarization-independent self-aligned liquid crystal lens. *Journal of the Society for Information Display*. 2021;29(11):825–832. DOI: 10.1002/jsid.990.
4. Dai HT, Liu YJ, Sun XW, Luo D. A negative-positive tunable liquid-crystal microlens array by printing. *Optics Express*. 2009;17(6):4317–4323. DOI: 10.1364/OE.17.004317.
5. Bezruchenko VS, Muravsky AA, Murauski AA, Stankevich AI, Mahilny UV. Tunable liquid crystal lens based on pretilt angle gradient alignment. *Molecular Crystals and Liquid Crystals*. 2016;626:222–228. DOI: 10.1080/15421406.2015.1106890.
6. Bezruchenko VS, Mahilny UV, Stankevich AI, Muravsky AlAn, Muravsky AnAl, Kukhta IN. The formation of the centrosymmetric distributions of light intensity for exposure of photosensitive alignment layers of LC lenses. *Journal of the Belarusian State University. Physics*. 2017;3:12–19. Russian.
7. Algorri JF, Zografopoulos DC, Urruchi V, Sánchez-Pena JM. Recent advances in adaptive liquid crystal lenses. *Crystals*. 2019;9(5):272. DOI: 10.3390/cryst9050272.
8. Tóth LF. *Lagerungen in der Ebene auf der Kugel und im Raum*. Berlin: Springer-Verlag; 1953. 197 S. (Die Grundlehren der mathematischen Wissenschaften in Einzeldarstellungen; Band 65).
Russian edition: Tóth LF. *Raspolozheniya na ploskosti, na sfere i v prostranstve*. Makarova NM, translator; Yaglom IM, editor. Moscow: Gosudarstvennoe izdatel'stvo fiziko-matematicheskoi literatury; 1958. 363 p.
9. Fan F, Srivastava AK, Du T, Tseng MC, Chigrinov V, Kwok HS. Low voltage tunable liquid crystal lens. *Optics Letters*. 2013;38(20):4116–4119. DOI: 10.1364/OL.38.004116.

УДК 530.122, 531.011

ИНТЕГРАЛЫ ФИНИТНОГО ДВИЖЕНИЯ В ПОЛЕ ТЯГОТЕНИЯ ШВАРЦШИЛЬДА С ТОЧНОСТЬЮ ДО ЧЛЕНОВ ПОРЯДКА c^{-2}

А. Н. ФУРС¹⁾

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

С точностью до членов, содержащих c^{-2} , выведены простые аналитические зависимости, описывающие финитное движение пробной частицы в геометрии Шварцшильда. Подобное движение рассматривается как поправочное к невозмущенному кеплерову движению при условии малости отношения радиуса Шварцшильда к радиальной координате. В указанном приближении также найдены сохраняющиеся интегралы, характеризующие орбитальное движение частицы. Для этого уравнения движения представлены в гамильтоновой форме и произведен ряд канонических преобразований обобщенных координат и импульсов, позволяющих проинтегрировать эти уравнения. Выведены периодические и вековые вклады для оскулирующих элементов орбиты пробной частицы – средней аномалии, аргумента перигея и большой полуоси. Предложен алгоритм расчета положения частицы в приближении c^{-2} , по вычислительной сложности сравнимый с алгоритмом решения стандартной задачи Кеплера. Произведена оценка погрешности полученных приближенных решений, и указаны границы их применимости.

Ключевые слова: метрика Шварцшильда; интегралы движения; оскулирующие элементы орбиты; кеплерова задача; гамильтонов формализм.

Образец цитирования:

Фурс АН. Интегралы финитного движения в поле тяготения Шварцшильда с точностью до членов порядка c^{-2} . *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2023; 3:31–43.
EDN: NINXVP

For citation:

Furs AN. Integrals of finite motion in the Schwarzschild gravitational field up to terms of order c^{-2} . *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2023;3:31–43. Russian.
EDN: NINXVP

Автор:

Александр Николаевич Фурс – доктор физико-математических наук, профессор; заведующий кафедрой теоретической физики и астрофизики физического факультета.

Author:

Alexander N. Furs, doctor of science (physics and mathematics), full professor; head of the department of theoretical physics and astrophysics, faculty of physics.
fursan@bsu.by

INTEGRALS OF FINITE MOTION IN THE SCHWARZSCHILD GRAVITATIONAL FIELD UP TO TERMS OF ORDER c^{-2}

A. N. FURS^a

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

Up to terms containing c^{-2} , simple analytical dependences are derived that describe the finite motion of a test particle in the Schwarzschild geometry. Such a motion is considered as a correction to the unperturbed Keplerian motion under the condition that the ratio of the Schwarzschild radius to the radial coordinate is small. In this approximation, conserved integrals are also found that characterise the orbital motion of the particle. For this, the equations of motion are presented in the Hamiltonian form, and a number of canonical transformations of the generalised coordinates and momenta are made, which make it possible to integrate these equations. Periodic and secular contributions are derived for the osculating elements of the test particle orbit: the mean anomaly, the periastron argument, and the semi-major axis. An algorithm for calculating the position of a particle in the c^{-2} approximation is proposed, which is comparable in computational complexity to the algorithm for solving the standard Kepler problem. An estimate of the error of the obtained approximate solutions is made and the limits of their applicability are indicated.

Keywords: Schwarzschild metric; integrals of motion; osculating elements of the orbit; Kepler problem; Hamiltonian formalism.

Метрика Шварцшильда, являющаяся точным решением уравнений Эйнштейна и описывающая гравитационное поле уединенного невращающегося сферически симметричного массивного тела, имеет вид

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

где $r_g = \frac{2\mu}{c^2}$ – радиус Шварцшильда; $\mu = kM$ – гравитационный параметр; k – гравитационная постоянная; M – масса тела; c – скорость света в вакууме. Задача движения пробной частицы с массой $m \ll M$ в центрально-симметричном гравитационном поле в геометрии Шварцшильда наряду с задачей распространения света в таком поле хорошо изучена в научной и учебной литературе (см., например, [1–3]). Эффекты смещения перигелия орбит планет Солнечной системы и гравитационного отклонения света вблизи Солнца, теоретически следующие из решения этих задач, явились одними из первых экспериментальных подтверждений общей теории относительности.

Математический формализм для точного описания движения пробных частиц в метрике Шварцшильда сложен и основан, в частности, на использовании свойств эллиптических функций (наиболее обстоятельно этот вопрос рассмотрен в [4]). В то же время во многих практически важных случаях орбитального движения отношение радиуса Шварцшильда r_g к радиальной координате r мало. Например, в перигелии Меркурия оно составляет $6,4 \cdot 10^{-8}$. Это позволяет воспользоваться формальными разложениями входящих в уравнения движения величин в ряды по обратным степеням параметра c^2 и рассматривать члены, содержащие этот параметр, как поправочные к ведущим членам, определяющим невозмущенное кеплерово движение. При этом появляется возможность применения мощного аналитического аппарата теории возмущений, хорошо зарекомендовавшего себя в небесной механике [5].

В настоящей работе поставлена цель проинтегрировать уравнения финитного движения пробной частицы в геометрии Шварцшильда в первом приближении, содержащем параметр c^{-2} , так, чтобы аналитические зависимости r и φ от координатного времени t не содержали каких-либо специальных функций. Для этого используется гамильтонова форма представления уравнений и выполняется ряд канонических преобразований обобщенных переменных, позволяющих достигнуть указанной цели. При этом в явном виде находятся четыре интеграла движения, целиком определяющие орбитальное движение в данном приближении. Полученные решения содержат как периодические, так и вековые возмущающие члены для оскулирующих кеплеровых элементов орбит, таких как средняя аномалия, аргумент перигелия и большая полуось. Эксцентриситет орбит предполагается произвольным, и никаких разложений в ряды по этому параметру не производится. В окончательное решение входят лишь элементарные функции, что позволяет существенно снизить вычислительные затраты при расчетах движения пробных частиц. Аналитическое представление оскулирующих кеплеровых элементов орбит пробных частиц в геометрии Шварцшильда в виде разложений в ряды по степеням параметра c^{-2} ранее в литературе не встречалось. Рассматриваемая в работе задача имеет также методический интерес.

Для оценки точности приближенных решений производится их сравнение (при одних и тех же начальных условиях) с численными решениями точных дифференциальных уравнений движения, выводимых из метрики (1), и обсуждается область применимости указанного приближения.

Уравнения Гамильтона и канонические преобразования

В силу центральной симметрии поля положение в пространстве плоскости орбиты пробной частицы не изменяется, и в выражении (1) принимаем $\theta = \frac{\pi}{2}$ и $d\theta = 0$. Известно (см., например, [2]), что для расчета движения частицы можно использовать уравнение Гамильтона – Якоби

$$g^{ik} \frac{\partial S}{\partial x^i} \frac{\partial S}{\partial x^k} - m^2 c^2 = 0, \quad (2)$$

где S – действие, а компоненты метрического тензора согласно (1) имеют вид

$$g^{00} = \frac{1}{1 - \frac{r_g}{r}}, \quad g^{11} = -\left(1 - \frac{r_g}{r}\right), \quad g^{22} = -\frac{1}{r^2}, \quad g^{33} = -\frac{1}{r^2 \sin^2 \theta}, \quad g^{ik} = 0 \quad (i \neq k). \quad (3)$$

Из решения этого уравнения находится траектория частицы, определяемая соотношениями

$$t = \pm \frac{E}{c^2} \int \frac{dr}{\left(1 - \frac{r_g}{r}\right) \sqrt{\frac{E^2}{c^2} - \left(1 - \frac{r_g}{r}\right) \left(\frac{G^2}{r^2} + m^2 c^2\right)}}, \quad (4)$$

$$\varphi - \varphi_0 = \pm G \int \frac{dr}{r^2 \sqrt{\frac{E^2}{c^2} - \left(1 - \frac{r_g}{r}\right) \left(\frac{G^2}{r^2} + m^2 c^2\right)}},$$

где энергия E и момент импульса G являются интегралами движения.

Уравнения движения частицы могут быть также представлены в лагранжевой форме, исходя из экстремальности действия

$$S = -mc \int ds = \int \mathcal{L} dt \quad (5)$$

вдоль геодезической. При этом функция Лагранжа согласно (1) и (5) имеет вид

$$\mathcal{L} = -mc^2 \sqrt{1 - \frac{2\mu}{c^2 r} - \frac{\dot{r}^2}{c^2 \left(1 - \frac{2\mu}{c^2 r}\right)} - \frac{r^2 \dot{\varphi}^2}{c^2}}, \quad (6)$$

где \dot{r} и $\dot{\varphi}$ – обобщенные скорости. Координата φ является циклической, и уравнения Лагранжа записываются в виде

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}} \right) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial r}, \quad \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\varphi}} \right) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi} = 0. \quad (7)$$

Отметим, что уравнения (2) и (3), с одной стороны, и уравнения (7) с функцией Лагранжа (6), с другой стороны, полностью эквивалентны.

Предполагаем теперь, что радиус Шварцшильда $r_g = \frac{2\mu}{c^2}$ много меньше радиальной координаты r .

Разлагая квадратный корень в (6) в ряд по степеням c^{-2} и оставляя при этом члены вплоть до c^{-4} включительно, получаем

$$\mathcal{L} = -mc^2 + \frac{m}{2} (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\varphi}^2) + \frac{m\mu}{r} + \frac{m}{c^2} \left[\frac{\mu}{r} \dot{r}^2 + \frac{1}{8} \left(\dot{r}^2 + r^2 \dot{\varphi}^2 + \frac{2\mu}{r} \right)^2 \right] + O(c^{-4}). \quad (8)$$

Первое слагаемое в (8), представляющее энергию покоя частицы с отрицательным знаком, может быть отброшено как постоянное. Сумма второго и третьего слагаемых соответствует функции Лагранжа классической кеплеровой задачи, а четвертое слагаемое является релятивистской поправкой к этой функции. Не теряя общности, далее во всех выражениях полагаем, что $m = 1$.

Более удобно вместо (7) использовать уравнения Гамильтона, в которые наряду с координатами r и φ равноправно входят обобщенные импульсы

$$p_r = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}} = \dot{r} + \frac{\dot{r}}{c^2} \left[\frac{3\mu}{r} + \frac{1}{2} (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\phi}^2) \right], \quad p_\phi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} = r^2 \dot{\phi} + \frac{r^2 \dot{\phi}}{2c^2} \left(\dot{r}^2 + r^2 \dot{\phi}^2 + \frac{2\mu}{r} \right) = \text{const.} \quad (9)$$

Последний из них в рассматриваемом приближении является интегралом движения и представляет собой момент импульса частицы. Из (9) находятся обобщенные скорости

$$\dot{r} = p_r - \frac{p_r}{c^2} \left[\frac{3\mu}{r} + \frac{1}{2} \left(p_r^2 + \frac{p_\phi^2}{r^2} \right) \right] + O(c^{-4}), \quad \dot{\phi} = \frac{p_\phi}{r^2} - \frac{p_\phi}{2c^2} \left(p_r^2 + \frac{p_\phi^2}{r^2} + \frac{2\mu}{r} \right) + O(c^{-4}).$$

В результате функция Гамильтона $\mathcal{H} = \dot{r}p_r + \dot{\phi}p_\phi - \mathcal{L}$ принимает вид

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1, \quad \mathcal{H}_0 = \frac{p_r^2}{2} + \frac{p_\phi^2}{2r^2} - \frac{\mu}{r}, \\ \mathcal{H}_1 &= -\frac{1}{c^2} \left[\frac{\mu p_r^2}{r} + \frac{1}{8} \left(p_r^2 + \frac{p_\phi^2}{r^2} + \frac{2\mu}{r} \right)^2 \right] + O(c^{-4}), \end{aligned} \quad (10)$$

а уравнения движения принимают вид

$$\dot{r} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_r}, \quad \dot{p}_r = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial r}, \quad \dot{\phi} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_\phi}, \quad \dot{p}_\phi = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \phi} = 0. \quad (11)$$

Непосредственное интегрирование уравнений (11) затруднительно. Поэтому далее выполним ряд канонических преобразований переменных, которые позволят максимально упростить интегрирование гамильтоновых уравнений.

Вначале исключим из функции Гамильтона ведущий член \mathcal{H}_0 . Выберем следующую производящую функцию канонического преобразования:

$$\mathcal{F}(\mathcal{E}, G, r, \phi, t) = -\mathcal{E}t + G\phi + \mathcal{F}_r(r), \quad (12)$$

где \mathcal{E} и G – новые обобщенные импульсы; $\mathcal{F}_r(r)$ – радиальная часть функции, подлежащая определению. Тогда импульс G будет совпадать со старым импульсом p_ϕ , так как $p_\phi = \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \phi} = G$, а $p_r = \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial r} = \frac{d\mathcal{F}_r}{dr}$.

Новая функция Гамильтона имеет вид $\mathcal{H}' = \mathcal{H} + \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial t} = \mathcal{H}_0 - \mathcal{E} + \mathcal{H}_1$. Потребуем, чтобы $\mathcal{E} = \mathcal{H}_0$ (т. е. $\mathcal{H}' = \mathcal{H}_1$). Тогда

$$\frac{1}{2} \left(\frac{d\mathcal{F}_r}{dr} \right)^2 + \frac{G^2}{2r^2} - \frac{\mu}{r} = \mathcal{E}, \quad \mathcal{F}_r = \int dr \sqrt{2\mathcal{E} + \frac{2\mu}{r} - \frac{G^2}{r^2}}. \quad (13)$$

Обобщенные координаты, сопряженные с импульсами G и \mathcal{E} , обозначим как g и $-t_\pi$ соответственно:

$$g = \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial G} = \phi - G \int \frac{dr}{r^2 \sqrt{2\mathcal{E} + \frac{2\mu}{r} - \frac{G^2}{r^2}}}, \quad -t_\pi = \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathcal{E}} = -t + \int \frac{dr}{\sqrt{2\mathcal{E} + \frac{2\mu}{r} - \frac{G^2}{r^2}}} \quad (14)$$

(см. (12) и (13)).

Соотношения (14) получаются из решения кеплеровой задачи при отсутствии возмущений. При этом G – момент импульса частицы, \mathcal{E} – полная энергия, g – аргумент перицентра орбиты, а t_π – время прохождения через перицентр. В кеплеровой задаче перечисленные величины являются интегралами движения, в рассматриваемом же здесь случае эти параметры не сохраняются (за исключением G) и относятся к оскулирующей орбите.

Перечислим известные формулы для кеплерова движения, следующие из (14). Уравнение орбиты получается из первого соотношения:

$$r = \frac{p}{1 + e \cos f}, \quad p = \frac{G^2}{\mu}, \quad e = \sqrt{1 + \frac{2\mathcal{E}G^2}{\mu^2}}, \quad (15)$$

где p – фокальный параметр; e – эксцентриситет; $f = \phi - g$ – истинная аномалия (см., например, [5]). Так как рассматривается финитное движение, то предполагается, что $e < 1$ (т. е. оскулирующая орбита

представляет собой эллипс) и, соответственно, $\mathcal{E} < 0$. При преобразовании второго соотношения из (14) удобно ввести параметр $a = -\frac{\mu}{2\mathcal{E}}$ – большую полуось оскулирующей орбиты, при этом $p = a(1 - e^2)$.

Тогда

$$r = a(1 - e \cos E), \quad E - e \sin E = l, \quad l = \sqrt{\frac{\mu}{a^3}}(t - t_\pi), \quad (16)$$

где l – средняя аномалия, а E – эксцентрическая аномалия, которая находится как решение второго уравнения из (16), являющегося трансцендентным и называющегося уравнением Кеплера.

Взаимосвязь истинной и эксцентрической аномалий устанавливается в случае приравнивания выражений для r из (15) и (16):

$$\cos f = \frac{\cos E - e}{1 - e \cos E}, \quad \sin f = \frac{\sqrt{1 - e^2} \sin E}{1 - e \cos E}, \quad \operatorname{tg} \frac{f}{2} = \sqrt{\frac{1 + e}{1 - e}} \operatorname{tg} \frac{E}{2}. \quad (17)$$

Уравнения Гамильтона принимают вид

$$\dot{g} = \frac{\partial \mathcal{H}'}{\partial G}, \quad \dot{G} = -\frac{\partial \mathcal{H}'}{\partial g} = 0, \quad -\dot{t}_\pi = \frac{\partial \mathcal{H}'}{\partial \mathcal{E}}, \quad \dot{\mathcal{E}} = -\frac{\partial \mathcal{H}'}{\partial(-t_\pi)}$$

с функцией

$$\mathcal{H}' = -\frac{1}{c^2} \left(\frac{1}{2} \mathcal{E}^2 + \frac{4\mathcal{E}\mu}{r} + \frac{4\mu^2}{r^2} - \frac{G^2\mu}{r^3} \right) + O(c^{-4}) \quad (18)$$

(см. третье соотношение из (10)). Величина r , входящая в (18), в соответствии с (16) должна рассматриваться как функция переменных G , \mathcal{E} и t_π . Следовательно, функция Гамильтона не зависит от переменной g , и G является интегралом движения.

При следующем каноническом преобразовании с производящей функцией

$$F(L, G, -t_\pi, g, t) = -\frac{\mu^2}{2L^2}(t - t_\pi) + Gg$$

вместо импульса \mathcal{E} вводится новый импульс L , а пара сопряженных переменных G и g остается той же.

Имеем $\mathcal{E} = \frac{\partial F}{\partial(-t_\pi)} = \frac{-\mu^2}{2L^2}$, откуда $L = \frac{\mu}{\sqrt{-2\mathcal{E}}}$ или $L = \sqrt{\mu a}$. В то же время $G = \sqrt{\mu p} = \sqrt{\mu a(1 - e^2)}$. Обобщенная координата l , сопряженная с импульсом L , совпадает со средней аномалией. Действительно,

$$l = \frac{\partial F}{\partial L} = \frac{\mu^2}{L^3}(t - t_\pi) = \sqrt{\frac{\mu}{a^3}}(t - t_\pi)$$

(сравни с (16)). Переменные l , L , g и G называются переменными Делоне [5]. В этих переменных уравнения движения записываются так:

$$\dot{g} = \frac{\partial H}{\partial G}, \quad \dot{G} = -\frac{\partial H}{\partial g} = 0, \quad \dot{l} = \frac{\partial H}{\partial L}, \quad \dot{L} = -\frac{\partial H}{\partial l},$$

при этом функция Гамильтона $H = \mathcal{H}' + \frac{\partial F}{\partial t} = \frac{-\mu^2}{2L^2} + \mathcal{H}'$ или

$$H = H_0 + \frac{1}{c^2} H_1 + O(c^{-4}), \quad H_0 = -\frac{\mu^2}{2L^2}, \quad H_1 = -\left(\frac{\mu^4}{8L^4} - \frac{2\mu^3}{L^2 r} + \frac{4\mu^2}{r^2} - \frac{G^2\mu}{r^3} \right) \quad (19)$$

(см. выражение (18)). Координата r является функцией переменных G , L и l .

Выполняя заключительное каноническое преобразование, переходим к переменным l' , L' , g' и G' , которые отличаются от l , L , g и G лишь поправочными членами, содержащими параметр c^{-2} (преобразование такого типа рассматривалось в работе [6]). Для этого используем производящую функцию

$$\Phi(L', G', l, g) = L'l + G'g + \frac{1}{c^2} \Phi_1 + O(c^{-4}), \quad (20)$$

не зависящую явно от времени, а новую функцию Гамильтона H' , как и старую H , представляем в виде разложения

$$H' = H'_0 + \frac{1}{c^2} H'_1 + O(c^{-4}). \quad (21)$$

Кроме того, выбираем $H'_0 = \frac{-\mu^2}{2L'^2}$. Имеем

$$L = \frac{\partial \Phi}{\partial l} = L' + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \Phi_1}{\partial l} + O(c^{-4}), \quad H_0 - H'_0 = -\frac{\mu^2}{2L'^2} + \frac{\mu^2}{2L'^2} \approx \frac{\mu^2}{L'^3} (L - L') = \frac{\mu^2}{c^2 L'^3} \frac{\partial \Phi_1}{\partial l}. \quad (22)$$

Подставляя (19) и (21) в соотношение $H' = H$, с учетом (22) в рассматриваемом приближении получаем

$$\frac{\mu^2}{L'^3} \frac{\partial \Phi_1}{\partial l} - \left(\frac{\mu^4}{8L'^4} - \frac{2\mu^3}{L'^2 r} + \frac{4\mu^2}{r^2} - \frac{G'^2 \mu}{r^3} \right) = H'_1. \quad (23)$$

От средней аномалии l в круглых скобках не зависит лишь первое слагаемое, и оно может быть отнесено к H'_1 . Остальные слагаемые зависят от l (через r) и относятся к $\frac{\partial \Phi_1}{\partial l}$. Таким образом, выражения (20) и (21) принимают вид

$$\Phi = L'l + G'g + \frac{1}{c^2} \int dl \left(-\frac{2L'\mu}{r} + \frac{4L'^3}{r^2} - \frac{L'^3 G'^2}{\mu r^3} \right) + O(c^{-4}), \quad (24)$$

$$H' = -\frac{\mu^2}{2L'^2} - \frac{\mu^4}{8c^2 L'^4} + O(c^{-4}).$$

Примечательно, что функция Гамильтона H' зависит только от переменной L' . Это означает, что L' , g' и G' – интегралы движения. Для l' имеем

$$i' = \frac{\partial H'}{\partial L'} = \frac{\mu^2}{L'^3} + \frac{\mu^4}{2c^2 L'^5}, \quad l' = l'_0 + \left(\frac{\mu^2}{L'^3} + \frac{\mu^4}{2c^2 L'^5} \right) t, \quad (25)$$

где l'_0 – постоянная интегрирования (значение l' в нулевой момент времени), которая является еще одним интегралом движения. Гамильтоновы уравнения движения проинтегрированы полностью.

Остается найти взаимосвязи величин l' , L' , g' и G' с переменными Делоне, используя производящую функцию Φ (см. (24)). Рассчитывая интеграл $\int \frac{dl}{r}$ в (24), удобно заменить переменную l на эксцентриситетскую аномалию E , записав $dl = (1 - e \cos E) dE$. В интегралах же $\int \frac{dl}{r^2}$ и $\int \frac{dl}{r^3}$ переходим к дифференциалу истинной аномалии f :

$$dl = \frac{(1 - e \cos E)^2}{\sqrt{1 - e^2}} df = \frac{r^2}{a^2 \sqrt{1 - e^2}} df = \frac{L}{G} \frac{r^2}{a^2} df = \frac{\mu^2}{GL^3} r^2 df.$$

Тогда

$$\int \frac{dl}{r} = \frac{E}{a} = \frac{\mu}{L^2} E, \quad \int \frac{dl}{r^2} = \frac{\mu^2}{GL^3} f, \quad \int \frac{dl}{r^3} = \frac{\mu^3}{G^3 L^3} (f + e \sin f),$$

и с учетом того, что $L = L' + O(c^{-2})$ и $G = G' + O(c^{-2})$, производящая функция принимает вид

$$\Phi = L'l + G'g + \frac{\mu^2}{c^2} \left(-\frac{2E}{L'} + \frac{3f}{G'} - \frac{e}{G'} \sin f \right) + O(c^{-4}). \quad (26)$$

Обобщенные координаты l' и g' получаются при дифференцировании Φ по обобщенным импульсам L' и G' соответственно. При нахождении производных следует учитывать, что от переменных L и G зависят аномалии E и f , которые выражаются через эти переменные посредством эксцентриситета

$e = \sqrt{1 - \frac{G^2}{L^2}}$. Очевидно, что $\frac{\partial e}{\partial L} = \frac{G^2}{eL^3}$ и $\frac{\partial e}{\partial G} = \frac{-G}{eL^2}$. В то же время из уравнений (16) и (17) несложно установить, что

$$\frac{\partial E}{\partial e} = \frac{\sin f}{\sqrt{1 - e^2}} = \frac{L}{G} \sin f, \quad \frac{\partial f}{\partial e} = \frac{2 + e \cos f}{1 - e^2} \sin f = \frac{L^2}{G^2} (2 + e \cos f) \sin f.$$

Тогда

$$\begin{aligned}\frac{\partial E}{\partial L} &= \frac{\partial E}{\partial e} \frac{\partial e}{\partial L} = \frac{G}{eL^2} \sin f, & \frac{\partial E}{\partial G} &= \frac{\partial E}{\partial e} \frac{\partial e}{\partial G} = -\frac{1}{eL} \sin f, \\ \frac{\partial f}{\partial L} &= \frac{\partial f}{\partial e} \frac{\partial e}{\partial L} = \frac{1}{eL} (2 + e \cos f) \sin f, & \frac{\partial f}{\partial G} &= \frac{\partial f}{\partial e} \frac{\partial e}{\partial G} = -\frac{1}{eG} (2 + e \cos f) \sin f.\end{aligned}\quad (27)$$

Дифференцируя Φ из (26) по L' , имеем

$$l' = \frac{\partial \Phi}{\partial L'} = l + \frac{\mu^2}{c^2} \left(\frac{2E}{L'^2} - \frac{2}{L'} \frac{\partial E}{\partial L'} + \frac{3}{G'} \frac{\partial f}{\partial L'} - \frac{1}{G'} \frac{\partial e}{\partial L'} \sin f - \frac{e}{G'} \frac{\partial f}{\partial L'} \cos f \right) + O(c^{-4}).$$

Принимая во внимание уравнение Кеплера в виде $E = l + \frac{\mu e r \sin f}{GL}$ и то, что $\frac{\partial \{e, E, f\}}{\partial L'} = \frac{\partial \{e, E, f\}}{\partial L} + O(c^{-2})$, с учетом формул (25) и (27) получаем выражение для средней аномалии:

$$\begin{aligned}l &= l_0'' + \frac{\mu^2}{L'^3} \left(1 - \frac{3\mu^2}{2c^2 L'^2} \right) t - \\ &- \frac{\mu^2}{c^2 G' L'} \left[\left(\frac{3}{e} + \frac{3}{e} \left(1 - \frac{G'^2}{L'^2} \right) - \frac{e}{4} + \frac{2\mu}{L'^2} e r \right) \sin f + \frac{1}{2} \sin 2f - \frac{e}{4} \sin 3f \right] + O(c^{-4}),\end{aligned}\quad (28)$$

где вместо постоянной l_0' введена постоянная $l_0'' = l_0' \left(1 - \frac{2\mu^2}{c^2 L'^2} \right)$. Дифференцирование Φ из (26) по G' с учетом $g' = \frac{\partial \Phi}{\partial G'}$ дает следующий результат для оскулирующего аргумента перицентра:

$$g = g' + \frac{\mu^2}{c^2 G'^2} \left[3f + \left(\frac{3}{e} + \frac{3}{e} \left(1 - \frac{G'^2}{L'^2} \right) - \frac{5e}{4} \right) \sin f + \frac{1}{2} \sin 2f - \frac{e}{4} \sin 3f \right] + O(c^{-4}).\quad (29)$$

Далее, так как $L = \frac{\partial \Phi}{\partial l}$, то

$$L = L' + \frac{1}{c^2} \left(-\frac{2L'\mu}{r} + \frac{4L'^3}{r^2} - \frac{L'^3 G'^2}{\mu r^3} \right) + O(c^{-4})\quad (30)$$

(см. (24)). Наконец, ни одно из заключенных в круглые скобки слагаемых в выражении (26) не зависит от g , поэтому $G = \frac{\partial \Phi}{\partial g} = G'$.

Отметим, что в формулах (28) и (29) можно воспользоваться заменой $\frac{3 \left(1 - \frac{G'^2}{L'^2} \right)}{e} = 3e + O(c^{-2})$. Кроме того, наличие слагаемых $\frac{3}{e}$ в этих формулах, казалось бы, указывает на их неприменимость для круговых орбит с нулевыми эксцентриситетами. Однако для таких орбит различие между средней, эксцентриситетской и истинной аномалиями исчезает, и в выражении для угловой переменной $\varphi = f + g = l + g$ соответствующие расходимости при $e \rightarrow 0$ сокращаются.

Обсудим полученные результаты. В отличие от кеплеровой задачи средняя аномалия согласно (28) не только линейно зависит от времени, но и испытывает периодические изменения, определяемые тригонометрическими функциями от истинной аномалии f . Для аргумента перицентра характерны как периодические изменения, так и вековой уход, связанный с наличием в выражении (29) линейного по f члена. За один оборот истинная аномалия увеличивается на $\Delta f = 2\pi$, поэтому для смещения перицентра получаем хорошо известную формулу

$$\Delta g = \frac{3\mu^2}{c^2 G'^2} \Delta f = \frac{6\pi\mu^2}{c^2 G^2} = \frac{6\pi\mu}{c^2 p} = \frac{6\pi k M}{c^2 a (1 - e^2)}$$

(см. [1–3]). Элемент орбиты $L = \sqrt{\mu a}$ и связанный с ним размер большой полуоси a в соответствии с (30) подвержены только периодическим изменениям из-за зависимости от периодически изменяющейся координаты r . Наконец, элемент орбиты $G = \sqrt{\mu p}$ и связанный с ним фокальный параметр p в рассматриваемом приближении остаются неизменными.

Расчетная схема движения пробной частицы

Основываясь на полученных результатах, изложим схему расчета положения пробной частицы $r = r(t)$, $\varphi = \varphi(t)$ в произвольный момент времени в приближении c^{-2} при начальных условиях

$$r(0) = r_0, \quad \varphi(0) = \varphi_0, \quad \dot{r}(0) = \dot{r}_0, \quad \dot{\varphi}(0) = \dot{\varphi}_0. \quad (31)$$

Она будет состоять в нахождении оскулирующих кеплеровых элементов в начальный момент времени, в определении интегралов движения l_0'' , L' , g' и G' , в построении итерационных приближений кеплеровых элементов для момента времени t и в обратном переходе к переменным r и φ .

Интеграл движения G' рассчитывается сразу же согласно (9):

$$G' = G = p_\varphi = r_0^2 \dot{\varphi}_0 + \frac{r_0^2 \dot{\varphi}_0}{2c^2} \left(\dot{r}_0^2 + r_0^2 \dot{\varphi}_0^2 + \frac{2\mu}{r_0} \right). \quad (32)$$

Тогда фокальный параметр $p = \frac{G^2}{\mu}$, и для начального момента времени имеем

$$p_{r0} = \dot{r}_0 + \frac{\dot{r}_0}{c^2} \left[\frac{3\mu}{r_0} + \frac{1}{2} (\dot{r}_0^2 + r_0^2 \dot{\varphi}_0^2) \right], \quad \mathcal{E}_0 = \frac{p_{r0}^2}{2} + \frac{G^2}{2r_0^2} - \frac{\mu}{r_0}, \quad a_0 = -\frac{\mu}{2\mathcal{E}_0}, \quad e_0 = \sqrt{1 - \frac{p}{a_0}}. \quad (33)$$

По эксцентрической аномалии

$$E_0 = \operatorname{sgn} \dot{r}_0 \arccos \left[\frac{1}{e_0} \left(1 - \frac{r_0}{a_0} \right) \right], \quad (34)$$

где $\operatorname{sgn} \dot{r}_0$ – знак величины \dot{r}_0 , находятся начальные значения средней и истинной аномалий, а также аргумента перигелла:

$$l_0 = E_0 - e_0 \sin E_0, \quad f_0 = 2 \operatorname{arctg} \left(\sqrt{\frac{1+e_0}{1-e_0}} \operatorname{tg} \frac{E_0}{2} \right), \quad g_0 = \varphi_0 - f_0. \quad (35)$$

В соответствии с (28)–(30) рассчитываем оставшиеся интегралы движения, при этом вместо интеграла L' удобнее использовать $a' = \frac{L'^2}{\mu}$:

$$l_0'' = l_0 + \frac{\mu}{c^2 a_0 \sqrt{1-e_0^2}} \left[\left(\frac{3}{e_0} + \frac{11e_0}{4} + \frac{2e_0 r_0}{a_0} \right) \sin f_0 + \frac{1}{2} \sin 2f_0 - \frac{e_0}{4} \sin 3f_0 \right],$$

$$g' = g_0 - \frac{\mu}{c^2 a_0 (1-e_0^2)} \left[3f_0 + \left(\frac{3}{e_0} + \frac{7e_0}{4} \right) \sin f_0 + \frac{1}{2} \sin 2f_0 - \frac{e_0}{4} \sin 3f_0 \right], \quad (36)$$

$$a' = a_0 + \frac{2\mu}{c^2} \left(\frac{2a_0}{r_0} - \frac{4a_0^2}{r_0^2} + \frac{a_0^3 (1-e_0^2)}{r_0^3} \right).$$

Переходим к определению местоположения пробной частицы в произвольный момент времени t . К этому моменту согласно (28) средняя аномалия получает линейную по времени часть приращения

$$\Delta l = \sqrt{\frac{\mu}{a'^3}} \left(1 - \frac{3}{2c^2} \frac{\mu}{a'} \right) t. \quad (37)$$

Решив уравнение Кеплера $l^{(0)} = l_0 + \Delta l = E^{(0)} - e_0 \sin E^{(0)}$ относительно $E^{(0)}$, вычисляем затравочные значения радиальной координаты и истинной аномалии к моменту t :

$$r^{(0)} = a_0 \left(1 - e_0 \cos E^{(0)} \right), \quad f^{(0)} = 2 \operatorname{arctg} \left(\sqrt{\frac{1+e_0}{1-e_0}} \operatorname{tg} \frac{E^{(0)}}{2} \right). \quad (38)$$

Далее эти значения уточняются согласно итерационной процедуре ($j = 0, 1, 2, \dots, n - 1$, где n – номер конечной итерации):

$$l^{(j+1)} = l_0'' + \Delta l - \frac{\mu}{c^2 a^{(j)} \sqrt{1 - e^{(j)2}}} \left[\left(\frac{3}{e^{(j)}} + \frac{11e^{(j)}}{4} + \frac{2e^{(j)} r^{(j)}}{a^{(j)}} \right) \sin f^{(j)} + \frac{1}{2} \sin 2f^{(j)} - \frac{e^{(j)}}{4} \sin 3f^{(j)} \right],$$

$$a^{(j+1)} = a' - \frac{2\mu}{c^2} \left(\frac{2a^{(j)}}{r^{(j)}} - \frac{4a^{(j)2}}{r^{(j)2}} + \frac{a^{(j)3} (1 - e^{(j)2})}{r^{(j)3}} \right), \quad e^{(j+1)} = \sqrt{1 - \frac{P}{a^{(j+1)}}}, \quad (39)$$

$$r^{(j+1)} = a^{(j+1)} (1 - e^{(j+1)} \cos E^{(j+1)}), \quad f^{(j+1)} = 2 \operatorname{arctg} \left(\sqrt{\frac{1 + e^{(j+1)}}{1 - e^{(j+1)}}} \operatorname{tg} \frac{E^{(j+1)}}{2} \right).$$

Здесь $E^{(j+1)}$ – решение уравнения $l^{(j+1)} = E^{(j+1)} - e^{(j+1)} \sin E^{(j+1)}$, а $a^{(0)} = a_0$ и $e^{(0)} = e_0$. После n итераций переходим к вычислению аргумента перигея:

$$g^{(n)} = g' + \frac{\mu}{c^2 a^{(n)} (1 - e^{(n)2})} \times$$

$$\times \left[3(f^{(n)} + 2\pi q) + \left(\frac{3}{e^{(n)}} + \frac{7e^{(n)}}{4} \right) \sin f^{(n)} + \frac{1}{2} \sin 2f^{(n)} - \frac{e^{(n)}}{4} \sin 3f^{(n)} \right]. \quad (40)$$

Здесь q – целая часть величины $\frac{\Delta l}{2\pi}$, т. е. количество полных циклов по 2π радиан в приращении средней аномалии.

В качестве вычисленных значений радиальной и угловой координат можно принять $r = r(t) \approx r^{(n)}$ и $\varphi = \varphi(t) \approx \varphi^{(n)} = f^{(n)} + g^{(n)}$. Приведенная вычислительная схема немногим сложнее точного решения стандартной кеплеровой задачи, которое будет получаться в предельном случае $c \rightarrow \infty$. Кеплерово решение следует из формул (32)–(35), а также из формул (37) и (38) при $a' = a_0$, при этом $r = r(t) = r^{(0)}$ и $\varphi = \varphi(t) = f^{(0)} + g_0$.

Сравнение с точными решениями

Оценим погрешность найденных решений, сравнивая их с точными решениями, полученными из уравнений (4) (при $m = 1$). При этом для численного решения вместо (4) далее удобно использовать эквивалентную систему дифференциальных уравнений

$$\dot{r} = \pm c \left(1 - \frac{2\mu}{c^2 r} \right) \sqrt{1 - \frac{c^4}{E^2} \left(1 - \frac{2\mu}{c^2 r} \right) \left(1 + \frac{G^2}{c^2 r^2} \right)}, \quad \dot{\varphi} = \frac{c^2 G}{E r^2} \left(1 - \frac{2\mu}{c^2 r} \right). \quad (41)$$

Принимая во внимание начальные условия (31), можно получить следующие выражения для G и E :

$$G = r_0^2 \dot{\varphi}_0 \left[1 - \frac{2\mu}{c^2 r_0} - \frac{r_0^2 \dot{\varphi}_0^2}{c^2} - \frac{c^{-2} \dot{r}_0^2}{1 - 2\mu c^{-2} r_0^{-1}} \right]^{\frac{1}{2}},$$

$$\frac{E}{c^2} = \left(1 - \frac{2\mu}{c^2 r_0} \right) \left[1 - \frac{2\mu}{c^2 r_0} - \frac{r_0^2 \dot{\varphi}_0^2}{c^2} - \frac{c^{-2} \dot{r}_0^2}{1 - 2\mu c^{-2} r_0^{-1}} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (42)$$

Легко убедиться в том, что ранее рассматривавшийся момент импульса G (см. (32)) с точностью до членов, содержащих c^{-2} , совпадает с G в (42).

Для того чтобы устранить неоднозначность, связанную с выбором знака в первом дифференциальном уравнении из (41), проинтегрируем обе части этого уравнения по t . После несложных выкладок получаем окончательную систему уравнений

$$\ddot{r} = \frac{1}{r^2} \left(1 - \frac{2\mu}{c^2 r} \right) \left\{ -\mu \left(\frac{3c^4}{E^2} - 2 \right) + \frac{c^4}{E^2} \left[\left(G^2 + \frac{6\mu^2}{c^2} \right) \frac{1}{r} - \frac{7G^2\mu}{c^2 r^2} + \frac{10G^2\mu^2}{c^4 r^3} \right] \right\},$$

$$\dot{\phi} = \frac{c^2 G}{E r^2} \left(1 - \frac{2\mu}{c^2 r} \right),$$
(43)

где G и E рассчитываются по формулам (42), первое уравнение следует дополнить начальными условиями $r(0) = r_0$ и $\dot{r}(0) = \dot{r}_0$, а второе – начальным условием $\phi(0) = \phi_0$. При переходе к ньютонову пределу $c \rightarrow \infty$ и $\frac{E}{c^2} \rightarrow 1$, и уравнения принимают вид $\ddot{r} = \frac{-\mu}{r^2} + \frac{G^2}{r^3}$, $\dot{\phi} = \frac{G}{r^2}$, где $G = r_0^2 \dot{\phi}_0$.

При численном решении системы (43) будем использовать безразмерные переменные, выражая расстояния в единицах r_0 , а время – в единицах $\sqrt{\frac{r_0^3}{\mu}}$. Тогда в (42) и (43) можно принять $\mu = 1$, а также $c^{-2} = \frac{r_g}{2}$. Кроме начального условия $r(0) = r_0 = 1$, не теряя общности, возьмем $\phi(0) = \phi_0 = 0$ и $\dot{r}(0) = \dot{r}_0 = 0$ (в начальный момент радиальная скорость нулевая). Наконец, значение $\dot{\phi}_0$ выбираем в интервале от 1 до $\sqrt{2}$, что в ньютоновом пределе означает изменение эксцентриситета $e = |\dot{\phi}_0^2 - 1|$ от 0 до 1, а большой полуоси $a = \frac{1}{2 - \dot{\phi}_0^2}$ от 1 до ∞ .

На рис. 1 показана орбита пробной частицы, найденная в результате численного решения точных уравнений (43) при $r_g = 2 \cdot 10^{-3}$ и $\dot{\phi}_0 = 1,180$ (что соответствует эксцентриситету 0,40) и изменении t в промежутке от 0 до 670. За указанный промежуток времени частица совершает 50 полных оборотов вокруг тяготеющего центра. При тех же начальных условиях получено также приближенное решение по формулам (32)–(40), причем для его сходимости оказалось достаточно одной итерации согласно (39). Соответствующий этому решению график не приводится, поскольку он визуально неотличим от изображенного на рис. 1. Наглядное представление о зависимости оскулирующих элементов орбиты – большой полуоси a и аргумента перигея g – от времени можно получить из рис. 2 и 3 соответственно. Фокальный параметр, как отмечалось ранее, остается постоянным, а его значение (p) в данном случае составляет 1,397.

Эксцентриситет $e = \sqrt{1 - \frac{p}{a}}$ при этом периодически изменяется от 0,393 до 0,397.

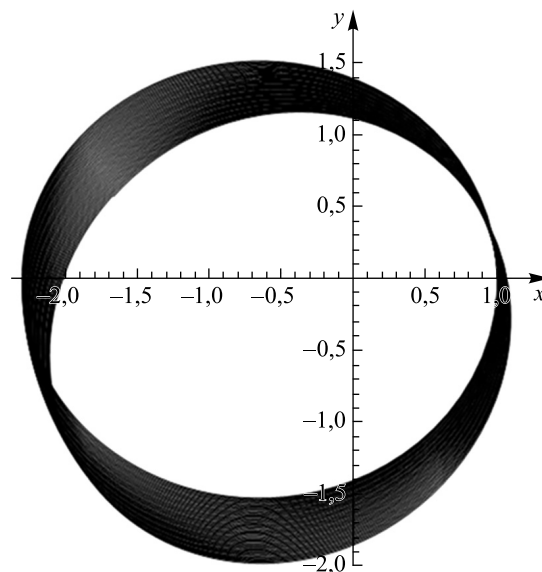


Рис. 1. Орбита частицы при $r_g = 0,002$ и эксцентриситете $e = 0,40$, рассчитанная точно по формулам (43) и приближенно по формулам (32)–(40)
 Fig. 1. Particle orbit at $r_g = 0,002$ and eccentricity $e = 0,40$ calculated exactly by formulas (43) and approximately by formulas (32)–(40)

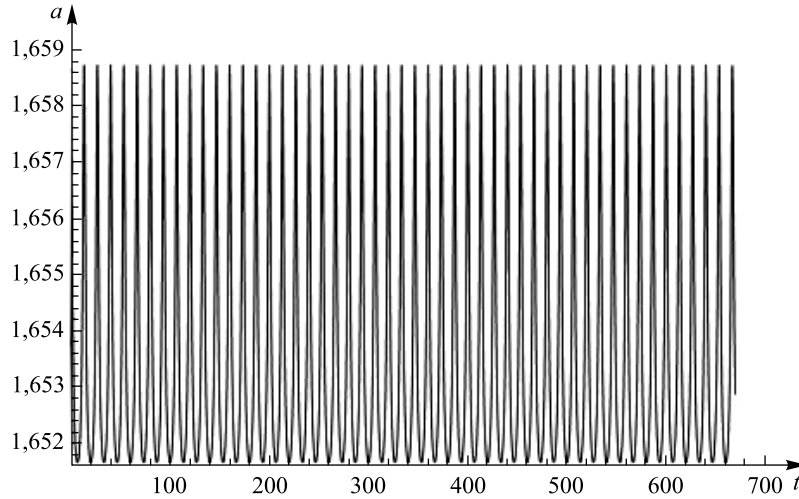


Рис. 2. Зависимость большой полуоси орбиты от времени
Fig. 2. Time dependence of the semi-major axis of the orbit

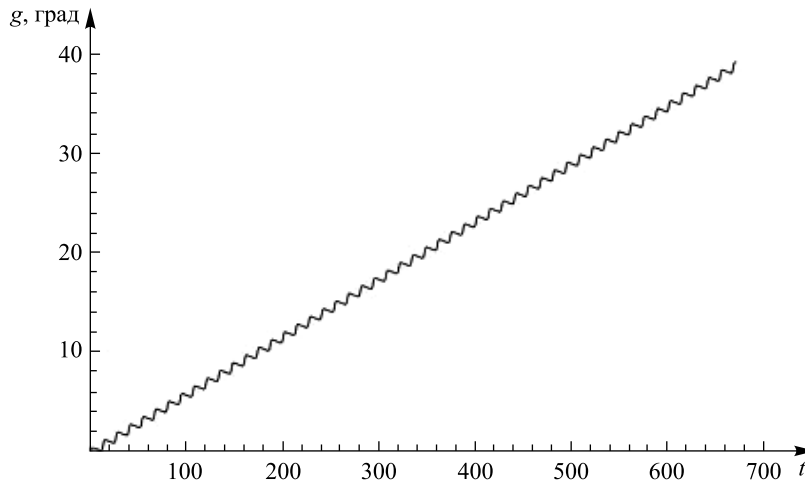


Рис. 3. Зависимость аргумента перигея орбиты от времени
Fig. 3. Time dependence of the argument of the periastron of the orbit

В качестве меры различия приближенного и точного решений рассматривается погрешность определения положения частицы

$$d(t) = \sqrt{\left[r(t) \cos \varphi(t) - r^{(1)}(t) \cos \varphi^{(1)}(t) \right]^2 + \left[r(t) \sin \varphi(t) - r^{(1)}(t) \sin \varphi^{(1)}(t) \right]^2} \quad (44)$$

(рис. 4). Погрешность имеет как вековой уход, так и периодические изменения и достигает значения 0,048. При этом локальные максимумы d соответствуют прохождению частицы через перигей.

При других значениях радиуса Шварцшильда вид кривой для d не претерпевает существенных изменений. Однако при $r_g = 2 \cdot 10^{-4}$ погрешность достигает величины $4,5 \cdot 10^{-4}$, а при $r_g = 2 \cdot 10^{-5}$ – всего лишь $4,5 \cdot 10^{-6}$. Таким образом, она прямо пропорциональна квадрату радиуса Шварцшильда. Это означает то, что расхождение приближенного и точного решений практически целиком обусловлено неучтенными поправками порядка c^{-4} (см. формулу (8) и далее).

При фиксированном r_g точность приближенных решений существенно зависит от эксцентриситета и снижается при его увеличении. Если $r_g = 2 \cdot 10^{-4}$, то при $e = 0,40$ погрешность, как указывалось выше, достигает значения $4,5 \cdot 10^{-4}$. В то же время при $e = 0,10$ ($\dot{\varphi}_0 = 1,049$) в промежутке $t \in (0, 670)$ имеем максимальную погрешность $7 \cdot 10^{-5}$, при $e = 0,60$ ($\dot{\varphi}_0 = 1,265$) – $1,2 \cdot 10^{-3}$, а при $e = 0,80$ ($\dot{\varphi}_0 = 1,342$) – $5,4 \cdot 10^{-3}$.

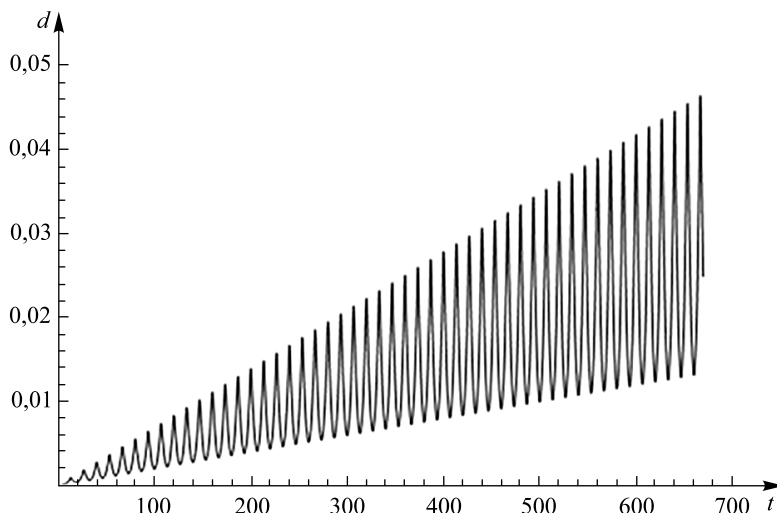


Рис. 4. Погрешность определения положения частицы (см. формулу (44))
 Fig. 4. Error in determining the position of the particle (see formula (44))

Используя решения точных уравнений (43), можно установить максимальные значения радиуса Шварцшильда, при которых достигается заданная погрешность приближенных решений в (32)–(40). В таблице приведены соответствующие результаты для r_g в случае, когда погрешность не должна превышать 0,01 для первых 50 оборотов пробной частицы. При выборе другой погрешности представленные значения легко пересчитываются с учетом ее квадратичной зависимости от r_g .

Значения радиуса Шварцшильда r_g , при которых погрешность решений в (32)–(40) не превышает 0,01 для первых 50 оборотов пробной частицы

Values of the Schwarzschild radius r_g at which the error of solutions in (32)–(40) does not exceed 0.01 for the first 50 rotations of the test particle

Эксцентриситет e	Максимальное значение r_g	Эксцентриситет e	Максимальное значение r_g
0,1	$3,0 \cdot 10^{-3}$	0,6	$4,1 \cdot 10^{-4}$
0,2	$1,9 \cdot 10^{-3}$	0,7	$2,4 \cdot 10^{-4}$
0,3	$1,3 \cdot 10^{-3}$	0,8	$1,2 \cdot 10^{-4}$
0,4	$9,3 \cdot 10^{-4}$	0,9	$3,4 \cdot 10^{-5}$
0,5	$6,3 \cdot 10^{-4}$		

В заключение отметим, что полученные в работе аналитические соотношения, определяющие финитное движение пробной частицы в метрике Шварцшильда с точностью до членов порядка c^{-2} , сравнительно просты. Расчеты по ним, касающиеся определения положения частицы в конкретный момент времени, могут быть выполнены с помощью простейшей вычислительной техники. В расчетной схеме, представленной формулами (32)–(40), как правило, достаточно использовать одну итерацию в соответствии с уравнениями (39).

Дальнейшее уточнение приближенных решений связано с учетом поправок более высокого порядка c^{-4} . Для этого достаточно применения тех же приемов интегрирования уравнений движения, что рассматривались в настоящей работе.

Библиографические ссылки

1. Мизнер Ч, Торн К, Уилер Дж. *Гравитация. Том 2*. Полнарев АГ, переводчик. Москва: Мир; 1977. 527 с.
2. Ландау ЛД, Лифшиц ЕМ. *Теория поля*. Москва: Наука; 1973. 504 с.
3. Зельманов АЛ, Агаков ВГ. *Элементы общей теории относительности*. Москва: Наука; 1989. 240 с.
4. Hagihara Y. Theory of the relativistic trajectories in a gravitational field of Schwarzschild. *Japanese Journal of Astronomy and Geophysics*. 1931;8:67–176.
5. Дубошин ГН. *Небесная механика. Основные задачи и методы*. 2-е издание. Москва: Наука; 1968. 800 с.
6. Brouwer D. Solution of the problem of artificial satellite theory without drag. *Astronomical Journal*. 1959;64(1274):378–396.

References

1. Misner CW, Thorne KS, Wheeler JA. *Gravitation. Volume 2*. San Francisco: W. H. Freeman and Company; 1973. 1278 p. Russian edition: Misner C, Thorne K, Wheeler J. *Gravitatsiya. Tom 2*. Polnarev AG, translator. Moscow: Mir; 1977. 527 p.
2. Landau LD, Lifshits EM. *Teoriya polya* [The classical theory of fields]. Moscow: Nauka; 1973. 504 p. Russian.
3. Zel'manov AL, Agakov VG. *Elementy obshchei teorii otositel'nosti* [Elements of general theory of relativity]. Moscow: Nauka; 1989. 240 p. Russian.
4. Hagihara Y. Theory of the relativistic trajectories in a gravitational field of Schwarzschild. *Japanese Journal of Astronomy and Geophysics*. 1931;8:67–176.
5. Duboshin GN. *Nebesnaya mekhanika. Osnovnye zadachi i metody* [Celestial mechanics. Basic problems and methods]. 2nd edition. Moscow: Nauka; 1968. 800 p. Russian.
6. Brouwer D. Solution of the problem of artificial satellite theory without drag. *Astronomical Journal*. 1959;64(1274):378–396.

Получена 07.05.2023 / исправлена 30.06.2023 / принята 20.07.2023.
Received 07.05.2023 / revised 30.06.2023 / accepted 20.07.2023.

УДК 538.9+539.23

ЭФФЕКТ ВЛИЯНИЯ УГЛЕРОДА НА СТРУКТУРНО-ФАЗОВОЕ СОСТОЯНИЕ И ТРИБОМЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ПОКРЫТИЙ TiAlCN

**С. В. КОНСТАНТИНОВ¹⁾, Ф. Ф. КОМАРОВ¹⁾,
И. В. ЧИЖОВ²⁾, В. А. ЗАЙКОВ²⁾, В. В. ПИЛЬКО¹⁾**

¹⁾Институт прикладных физических проблем им. А. Н. Севченко БГУ,
ул. Курчатова, 7, 220045, г. Минск, Беларусь

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

Образец цитирования:

Константинов СВ, Комаров ФФ, Чижов ИВ, Зайков ВА, Пилько ВВ. Эффект влияния углерода на структурно-фазовое состояние и трибомеханические свойства наноструктурированных покрытий TiAlCN. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2023;3:44–56.
EDN: NSDKSD

For citation:

Konstantinov SV, Komarov FF, Chizhov IV, Zaikov VA, Pilko VV. The effect of carbon on the structural-phase state and tribomechanical properties of nanostructured TiAlCN coatings. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2023;3:44–56.
Russian.
EDN: NSDKSD

Авторы:

Станислав Валерьевич Константинов – кандидат физико-математических наук, доцент; старший научный сотрудник лаборатории элионики.

Фадей Фадеевич Комаров – доктор физико-математических наук, академик НАН Беларуси, профессор; заведующий лабораторией элионики.

Игорь Викторович Чижов – аспирант кафедры физической электроники и нанотехнологий факультета радиоп физики и компьютерных технологий. Научный руководитель – С. В. Константинов.

Валерий Александрович Зайков – старший научный сотрудник кафедры физической электроники и нанотехнологий факультета радиоп физики и компьютерных технологий.

Владимир Владимирович Пилько – научный сотрудник лаборатории элионики.

Authors:

Stanislav V. Konstantinov, PhD (physics and mathematics), doctent; senior researcher at the laboratory of elionics.

svkonstantinow@gmail.com
<https://orcid.org/0000-0002-4489-8751>

Fadei F. Komarov, doctor of science (physics and mathematics), academician of the National Academy of Sciences of Belarus, full professor; head of the laboratory of elionics.

komarovf@bsu.by
<https://orcid.org/0000-0001-8292-8942>

Igor V. Chizhov, postgraduate student at the department of physical electronics and nanotechnologies, faculty of radiophysics and computer technologies.

igorhizhovwork@gmail.com
<https://orcid.org/0000-0002-4455-2128>

Valery A. Zaikov, senior researcher at the department of physical electronics and nanotechnologies, faculty of radiophysics and computer technologies.

valery48@tut.by
Vladimir V. Pilko, researcher at the laboratory of elionics.
pilkow@mail.ru

Обозначены перспективы применения в современном машиностроении, атомной энергетике и космической технике стойких к ряду негативных воздействий покрытий на базе нитридов и карбонитридов переходных металлов, формируемых вакуумно-плазменными методами нанесения. Методом реактивного магнетронного распыления сформированы наноструктурированные покрытия TiAlCN с различной концентрацией азота и углерода. Определены структурно-фазовое состояние, элементный состав, морфология и толщины полученных покрытий. С использованием наноиндентирования по методике Оливера – Фарра, а также трибомеханических испытаний измерены твердость (H), модуль Юнга (E), показатель ударной вязкости (H/E^*) и коэффициент трения покрытий TiAlCN. Сформированные покрытия TiAlCN обладают однофазной структурой неупорядоченного твердого раствора (Ti, Al)(C, N) с гранцентрированной кубической решеткой. Средний размер кристаллитов (Ti, Al)(C, N) составил от (10 ± 5) до (60 ± 5) нм. Установлено, что концентрация углерода в покрытиях TiAlCN существенно влияет на изменение их механических свойств. При малой концентрации углерода, равной 7,3 ат. % ($P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 2 : 1$), покрытия TiAlCN обладают достаточно высокими твердостью (более 25 ГПа) и ударной вязкостью. Повышенная концентрация углерода, равная 30,3 ат. % ($P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 1 : 2$), обеспечивает получение покрытий TiAlCN с большей твердостью (свыше 32 ГПа), но при этом наблюдается снижение ударной вязкости (отношения H/E^*). Наименьший коэффициент трения (0,30–0,32) продемонстрировали покрытия TiAlCN, сформированные в режимах с соотношениями парциальных давлений реактивных газов (азота и ацетилена) $P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 2 : 1$ и $P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 1 : 2$.

Ключевые слова: реактивное магнетронное распыление; наноструктурированные покрытия TiAlCN; структурно-фазовое состояние; трибомеханические свойства; наноиндентирование; коэффициент трения.

THE EFFECT OF CARBON ON THE STRUCTURAL-PHASE STATE AND TRIBOMECHANICAL PROPERTIES OF NANOSTRUCTURED TiAlCN COATINGS

S. V. KONSTANTINOV^a, F. F. KOMAROV^a,
I. V. CHIZHOV^b, V. A. ZAIKOV^b, V. V. PILKO^a

^aA. N. Sevchenko Institute of Applied Physical Problems, Belarusian State University,
7 Kurchatava Street, Minsk 220045, Belarus

^bBelarusian State University, 4 Niezaliezhnasci Avenue, Minsk 220030, Belarus

Corresponding author: S. V. Konstantinov (svkonstantinow@gmail.com)

Prospects for the use in modern mechanical engineering, nuclear power engineering and space technology of coatings resistant to a number of negative influences based on transition metal nitrides and carbonitrides formed by vacuum-plasma deposition methods are outlined. Nanostructured TiAlCN coatings with different concentrations of nitrogen and carbon were formed by reactive magnetron sputtering. The structural-phase state, elemental composition, morphology, as well as thicknesses of the obtained coatings are determined. Hardness (H), Young's modulus (E), impact strength index (H/E^*) and friction coefficient of TiAlCN coatings were measured using nanoindentation according to the Oliver – Pharr method, as well as tribomechanical tests. The formed TiAlCN coatings have a single-phase structure of a disordered (Ti, Al)(C, N) solid solution with a face-centered cubic lattice. The average crystallite size of the (Ti, Al)(C, N) was in the range from (10 ± 5) to (60 ± 5) nm. The carbon concentration in TiAlCN coatings significantly affects the change in mechanical properties. At a low carbon concentration of 7.3 at. % ($P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 2 : 1$) TiAlCN coatings have sufficiently high hardness (more than 25 GPa) and impact strength. Increased carbon concentration of 30.3 at. % ($P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 1 : 2$) makes it possible to obtain TiAlCN coatings with higher hardness (above 32 GPa), at the same time, a decrease in impact strength (H/E^* ratio) is observed. The lowest friction coefficient (0.30–0.32) was demonstrated by TiAlCN coatings formed in regimes with nitrogen and acetylene reactive gases partial pressures ratios $P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 2 : 1$ and $P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 1 : 2$.

Keywords: reactive magnetron sputtering; nanostructured TiAlCN coatings; structural-phase state; tribomechanical properties; nanoindentation; friction coefficient.

Введение

Эффективное повышение эксплуатационных свойств поверхностей трущихся деталей узлов и механизмов возможно путем нанесения износостойких покрытий [1]. В качестве таковых могут использоваться керамические покрытия на базе нитрида титана с добавками, например TiAlN [2]. Свойства нитридных покрытий исследованы в значительной степени. Известно, что они обладают высокой твердостью, износостойкостью, а также стойкостью к окислению, в том числе высокотемпературному [3].

В то же время свойства карбонитридных покрытий изучены в существенно меньшей степени, однако сообщалось, что такие из них, как TiAlCN, могут обладать сверхтвёрдостью [4], низким коэффициентом трения [5]. Интерес представляет также применение их оптических свойств. Покрытия TiAlN, TiAlCN перспективны для солнечной энергетики, где они могут использоваться как поглощающие слои в солнечных коллекторах [6; 7]. Авторы публикации [8] сообщали о возможности применения покрытий TiAlN в качестве селективно-поглощающих покрытий для контроля температурного режима работы спутников, малых космических аппаратов. В настоящее время уже известно, что наноструктурированные керамические покрытия обладают повышенной радиационной стойкостью ввиду наличия большой интегральной протяженности интерфейсов, которые действуют как эффективные стоки для радиационно-индуцированных дефектов структуры [9–13].

Для надежного функционирования механических узлов космических аппаратов требуется применение износостойких покрытий, обладающих антифрикционными свойствами. Добавление углерода, меди и серебра в состав покрытий TiAlN позволяет уменьшить коэффициент трения и увеличить срок эксплуатации механического узла [1; 3]. Кроме того, в целях обеспечения стабильного функционирования космического аппарата в целом и его оборудования необходимо применять защитные покрытия и специальные функциональные радиационно стойкие материалы. В частности, для обеспечения надежного функционирования механических узлов и сочленений космического аппарата, исключая контактное залипание, целесообразно использовать нитридные и карбонитридные наноструктурированные покрытия на основе модифицированного добавками нитрида титана.

В связи с вышеизложенным актуальной задачей является выяснение механизмов и обнаружение закономерностей структурообразования карбонитридных покрытий TiAlCN, а также установление влияния концентрации углерода на их структурно-фазовое состояние и свойства, в частности трибомеханические.

Материалы и методы исследования

Для осаждения карбонитридных покрытий TiAlCN и определения их структурных и трибомеханических свойств использовались подложки из монокристаллического кремния Si (100), титана марки VT1-0 и нержавеющей стали марки 12X18H10T. Осаждение покрытий TiAlCN с адгезионным подслоем TiAl методом реактивного магнетронного распыления производилось на модернизированной установке УВН-2М (рис. 1), оснащенной магнетронным распылителем, ионным источником, системами нагрева подложек, подачи смещения на подложку и модульным комплексом управления расходом газов (МКУРГ) [1; 14]. Для формирования карбонитридных слоев использовалась комбинация реактивных газов – азота (N_2) и ацетилена (C_2H_2). Нанесение осуществлялось из композитной мишени TiAl. Аналогичная технология формирования была применена для нанесения слоев TiAlCuCN, TiAlSiCN [14; 15].

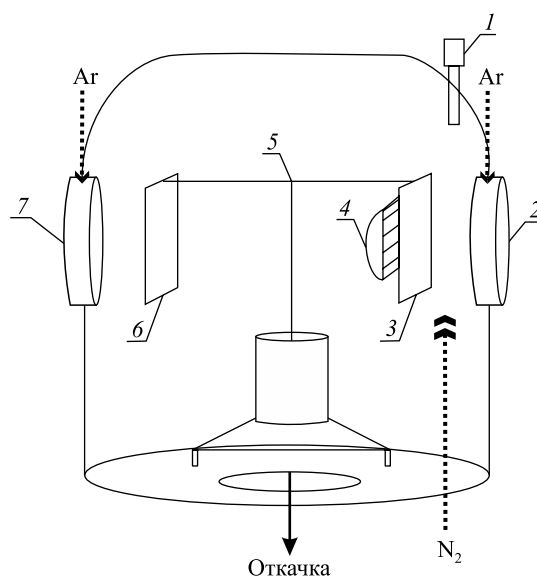


Рис. 1. Схема внутренней оснастки вакуумной камеры модернизированной установки УВН-2М:

1 – оптический датчик МКУРГ; 2 – магнетрон; 3 – подложкодержатель;
4 – ИК-нагреватель; 5 – система вращения; 6 – заслонка; 7 – ионный источник

Fig. 1. Scheme of the internal equipment of the vacuum chamber of the modernised UVN-2M facility:

1 – optical sensor of modular gas flow control complex; 2 – magnetron; 3 – substrate holder;
4 – IR heater; 5 – rotation system; 6 – damper; 7 – ion source

Нанесение покрытий TiAlCN проводилось в различных режимах с разной степенью реактивности [14]. Нумерация режимов и основные параметры осаждения покрытий представлены в табл. 1.

Таблица 1

Основные параметры осаждения покрытий TiAlCN в различных режимах

Table 1

Main parameters of TiAlCN coatings deposition in various regimes

Номер режима	α	I_p , А	U_p , В	P , Па	I_b , мА	U_b , В	T_s , °С	τ , мин	h , нм	V_{dep} , нм/с
1	0,46	1,51	450	0,72	68	-150	450	40	1380	0,58
2	0,55	1,51	470	0,72	65	-100	450	42	2520	1,00
3	0,55	1,51	465	0,72	64	-100	450	42	3350	1,33

Примечание. Символ α – степень реактивности; I_p – ток источника питания; U_p – напряжение источника питания; P – давление газов; I_b – ток смещения; U_b – напряжение смещения; T_s – температура подложки; τ – время нанесения покрытия; h – толщина покрытия; V_{dep} – скорость нанесения покрытия.

Для режима 1 соотношение парциальных давлений азота ($P_{N_2} = 0,045$ Па) и ацетилена ($P_{C_2H_2} = 0,045$ Па) составляло $P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 1 : 1$, для режима 2 соотношение парциальных давлений азота ($P_{N_2} = 0,084$ Па) и ацетилена ($P_{C_2H_2} = 0,042$ Па) было $P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 2 : 1$ (недостаток ацетилена в газовой смеси), а для режима 3 соотношение парциальных давлений азота ($P_{N_2} = 0,045$ Па) и ацетилена ($P_{C_2H_2} = 0,090$ Па) составляло $P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 1 : 2$ (избыток ацетилена в газовой смеси). Степень реактивности и режимы осаждения выбирались из условия достижения наилучших механических характеристик покрытий [1; 2; 9–15] (высокая нанотвердость и износостойкость), которые связаны с компонентным составом покрытий и их структурой. Значение степени реактивности $\alpha = 0,55$ соответствует покрытиям TiAlCN стехиометрического состава, а значение степени реактивности $\alpha = 0,46$ – покрытиям TiAlCN с небольшим дефицитом реактивного газа (азота и ацетилена).

Морфология и микроструктура исследуемых покрытий на кремниевых подложках изучались методом сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) с помощью электронного микроскопа Hitachi S-4800 (Япония). Ускоряющее напряжение электронного пучка варьировалось от 3 до 20 кВ. Микроскоп был оснащен датчиком рентгеновского излучения (энергодисперсионным спектрометром), позволяющим определять элементный состав исследуемых покрытий методом энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии (ЭДРС). Толщина покрытий измерялась с помощью СЭМ в геометрии поперечного сечения. Скорость осаждения рассчитывалась на основе полученных методом СЭМ значений толщины.

Рентгеноструктурный и фазовый анализ покрытий TiAlCN осуществлялся с использованием рентгеновского дифрактометра ADANI PowDiX 600/300 (ADANI Systems, Великобритания) с фокусировкой по Брэггу – Brentano. Длина волны излучения CoK_α составляла 1,7889 Å.

Измерения твердости покрытий производились методом наноиндентирования по методике Оливера – Фарра [16], при этом использовался прибор Nanohardness Tester (модель NHT2) (CSM Instruments, Швейцария) с алмазным индентором Берковича. Испытания и построения кривых нагрузки-разгрузки осуществлялись при максимальной нагрузке на индентор 0,05–0,10 Н.

Для исследования трибомеханических свойств наноструктурированных покрытий в Институте прикладных физических проблем имени А. Н. Севченко БГУ был разработан и адаптирован метод исследования износостойкости и коэффициента трения плоских образцов конструкционных материалов в паре диск – плоскость с нанесенными на их поверхность упрочняющими покрытиями [11]. Конструкция макета, реализующего эту методику, допускает проведение экспрессного контроля износостойкости покрытия путем простого измерения длины трека износа с помощью оптического микроскопа. Исследования износостойкости и коэффициента трения покрытий проводились при воздействии на них нагрузки 100 мН в течение 20 мин.

Результаты и их обсуждение

Установленные по результатам СЭМ толщина и скорость нанесения покрытий TiAlCN приведены в табл. 1. В табл. 2 представлен элементный состав полученных покрытий TiAlCN, осажденных из композитной мишени TiAl в различных режимах.

Выявлено, что повышение парциального давления ацетилена с $P_{C_2H_2} = 0,042$ Па в режиме 2 до $P_{C_2H_2} = 0,045$ Па в режиме 1 при уменьшении давления азота в 2 раза приводит к увеличению концентрации углерода в покрытии TiAlCN с 7,3 до 26,1 ат. % соответственно. При дальнейшем повышении

парциального давления ацетилена до $P_{C_2H_2} = 0,090$ Па концентрация углерода увеличивается до 30,3 ат. %. Изменение концентрации азота при этом пропорционально изменению концентрации углерода. Концентрации металлических компонентов (Ti и Al) во всех трех режимах примерно равны и соответствуют их концентрации в мишени. Наличие кислорода в покрытиях TiAlCN не обнаружено.

Таблица 2

Элементный состав покрытий TiAlCN

Table 2

Elemental composition of TiAlCN coatings

Номер режима	α	Концентрация, ат. %						
		Ti	Al	N	C	Si	Mg	Cu
1	0,46	30,5	30,8	10,9	26,1	0,6	0,4	0,7
2	0,55	36,9	27,8	26,8	7,3	0,2	0,4	0,6
3	0,55	28,7	25,1	14,5	30,3	0,3	0,5	0,6

На рис. 2 и 3 представлены рентгеновские дифрактограммы покрытий TiAlCN, сформированных в режимах 2 и 3 со степенью реактивности $\alpha = 0,55$ и соотношением парциальных давлений азота и ацетилена $P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 2 : 1$ и $P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 1 : 2$ соответственно.

Обнаружены пики дифракции от фазы аустенита γ -Fe (111), (200), (220), (311) подложки из нержавеющей стали марки 12X18Н10Т. Также обнаружены пики дифракции от фазы (Ti, Al)(C, N) (111), (200), (220), (311), (222), (400). Данная фаза представляет собой неупорядоченный твердый раствор замещения на базе гранцентрированной кубической (ГЦК) решетки типа NaCl нитрида титана (TiN). Установлено, что пики дифракции от покрытий TiAlCN смещены в область больших значений угла 2θ относительно пиков дифракции от чистого нитрида титана. Данный факт свидетельствует о замещении атомов титана атомами алюминия, обладающими меньшим атомным радиусом ($R_{Ti} = 1,47 \text{ \AA}$, $R_{Al} = 1,43 \text{ \AA}$) [14]. Формирование однофазной структуры характерно для покрытий TiN [2], TiAlN [12], TiCrN [3], а также некоторых других покрытий [4–8], наносимых вакуумно-плазменными методами.

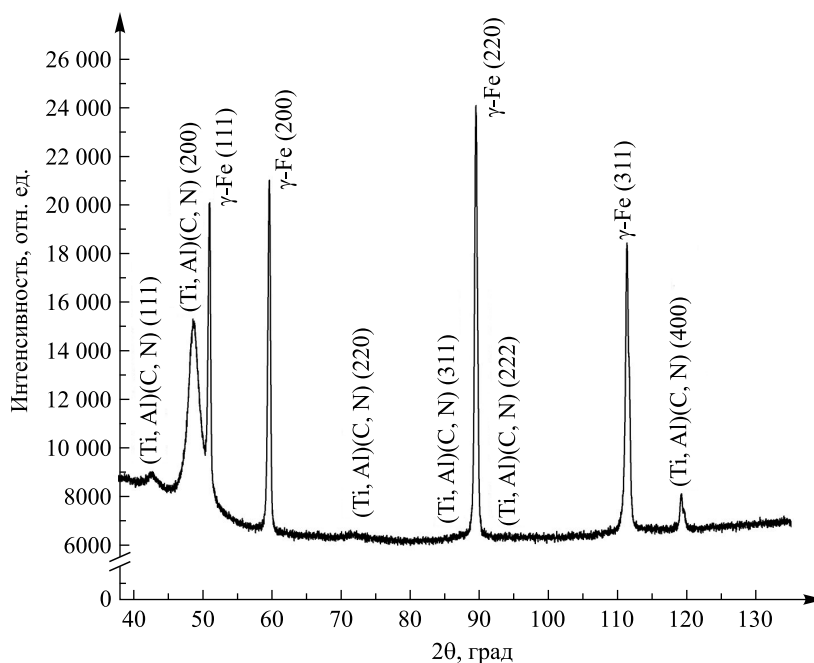


Рис. 2. Рентгеновская дифрактограмма покрытия TiAlCN, сформированного в режиме 2 со степенью реактивности $\alpha = 0,55$ и соотношением парциальных давлений азота и ацетилена $P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 2 : 1$

Fig. 2. X-ray diffraction pattern from the TiAlCN coating formed in regime 2 with the degree of reactivity $\alpha = 0,55$ and the ratio of partial pressures of nitrogen and acetylene $P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 2 : 1$

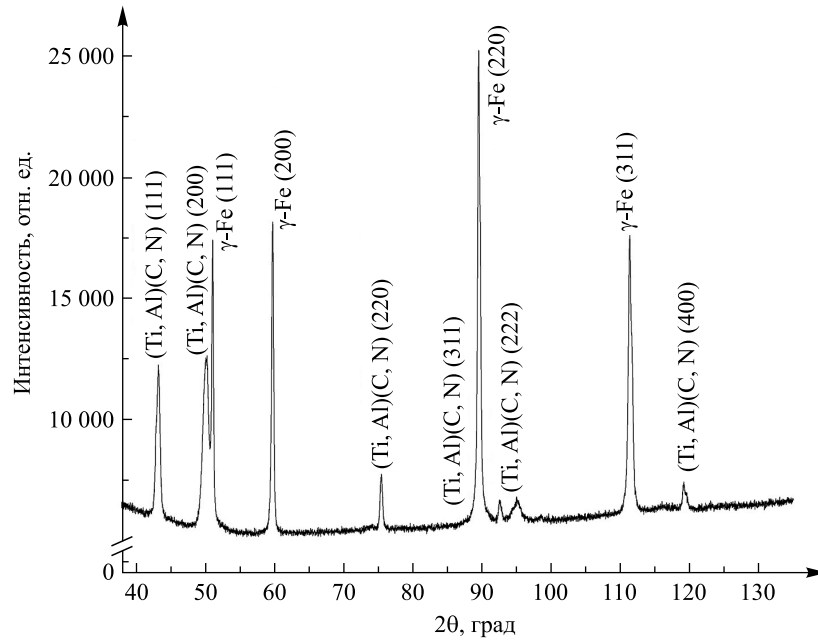


Рис. 3. Рентгеновская дифрактограмма покрытия TiAlCN, сформированного в режиме 3 со степенью реактивности $\alpha = 0,55$ и соотношением парциальных давлений азота и ацетилена $P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 1 : 2$

Fig. 3. X-ray diffraction pattern from the TiAlCN coating formed in regime 3 with the degree of reactivity $\alpha = 0.55$ and the ratio of partial pressures of nitrogen and acetylene $P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 1 : 2$

Не выявлено отдельных углеродсодержащих фаз, что свидетельствует о присутствии атомов углерода в составе фазы комплексного нитрида (Ti, Al)(C, N). Аналогичное фазовое состояние отмечалось для карбонитридных покрытий TiAlCuCN [1; 14], TiAlSiCN [15], где также было установлено формирование однофазной структуры твердого раствора с инкорпорированием атомов углерода в нитрид. В случае повышения концентрации углерода в режиме 3 наблюдается интенсификация пиков дифракции от фазы (Ti, Al)(C, N) (111), (220), (222). При этом можно отметить раздвоение пика (222), что в некоторой степени свидетельствует о сегрегации фазы (Ti, Al)(C, N) на Ti(C, N) и Al(C, N) при увеличении концентрации углерода свыше 30 ат. %.

Наличие диффузного уширения пиков дифракции от фазы (Ti, Al)(C, N) говорит о нанокристаллической природе полученных покрытий TiAlCN. Рассчитанный по формуле Селякова – Шеррера [14] средний размер кристаллитов фазы (Ti, Al)(C, N) покрытия TiAlCN варьируется в диапазоне от (10 ± 5) до (60 ± 5) нм.

На рис. 4–6 приведены СЭМ-микрофотографии поверхности и сколов покрытий TiAlCN, сформированных на кремниевых подложках в режимах 1–3 с различным соотношением парциальных давлений реактивных газов. Из представленных микрофотографий видно, что поверхность всех осажденных покрытий гладкая, без разрывов и пустот. Определенные методом СЭМ толщины полученных покрытий TiAlCN составили 1,3–3,4 мкм. Покрытия TiAlCN, осажденные в режиме 1, являются столбчатыми, с хорошо выраженными границами и диаметром столбцов от 50 до 150 нм. Структуры, сформированные в режиме 3, также имеют столбчатую морфологию со значительно меньшими столбцами диаметром до 50 нм. При нанесении в режиме 2 покрытия обладают равноосной глобулярной морфологией, столбцы роста не наблюдаются, что, как известно [3; 14], положительно сказывается на механических свойствах: способствует повышению твердости и ударной вязкости покрытий. Рассчитанный средний размер кристаллитов, составляющий от (10 ± 5) до (60 ± 5) нм, коррелирует с результатами рентгеноструктурного анализа. Из этого следует, что уменьшение концентрации углерода в покрытиях TiAlCN способствует формированию более мелкодисперсной наноструктуры глобулярной морфологии.

На рис. 7–9 представлены результаты наноиндентирования по методике Оливера – Фарра [16] покрытий TiAlCN, сформированных в режимах 1–3 с различным соотношением парциальных давлений азота и ацетилена. При измерениях коэффициент Пуассона в соответствии с литературными данными принимался равным величине $\nu = 0,3$ [3; 14].

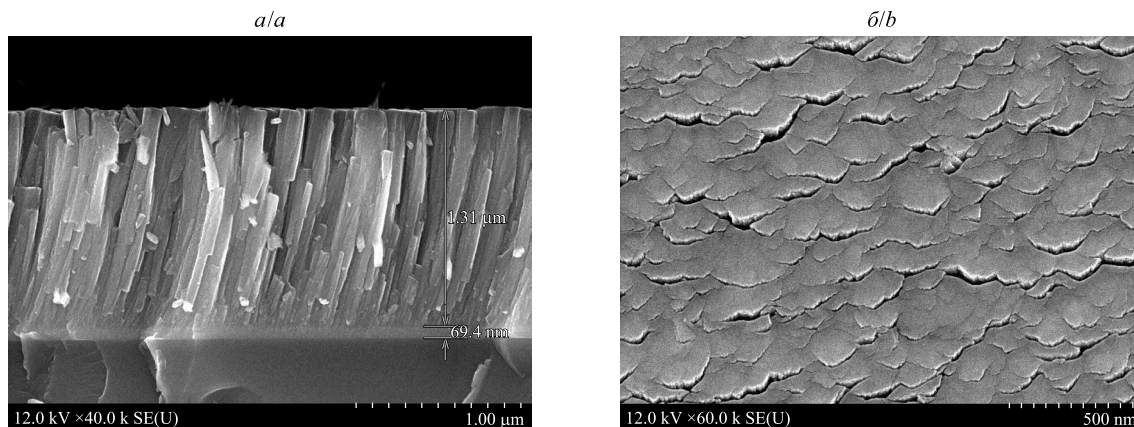


Рис. 4. СЭМ-микрофотографии поверхности (а) и скола (б) покрытия TiAlCN, сформированного на кремниевой подложке в режиме 1 с соотношением парциальных давлений азота и ацетилена $P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 1 : 1$
Fig. 4. SEM micrographs of the surface (a) and cleavage (b) of TiAlCN coating formed on silicon substrates in regime 1 with the ratio of partial pressures of nitrogen and acetylene $P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 1 : 1$

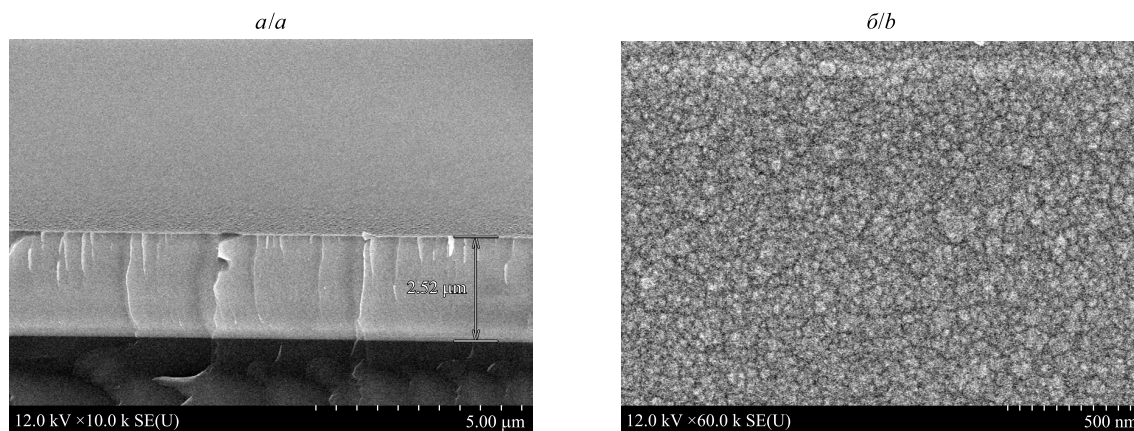


Рис. 5. СЭМ-микрофотографии поверхности (а) и скола (б) покрытия TiAlCN, сформированного на кремниевой подложке в режиме 2 с соотношением парциальных давлений азота и ацетилена $P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 2 : 1$
Fig. 5. SEM micrographs of the surface (a) and cleavage (b) of TiAlCN coating formed on silicon substrates in regime 2 with the ratio of partial pressures of nitrogen and acetylene $P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 2 : 1$

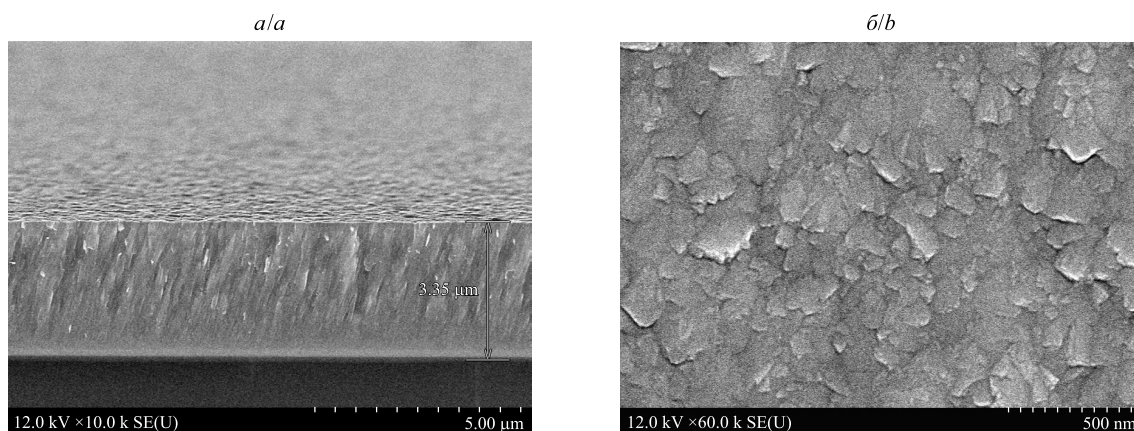


Рис. 6. СЭМ-микрофотографии поверхности (а) и скола (б) покрытия TiAlCN, сформированного на кремниевой подложке в режиме 3 с соотношением парциальных давлений азота и ацетилена $P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 1 : 2$
Fig. 6. SEM micrographs of the surface (a) and cleavage (b) of TiAlCN coating formed on silicon substrates in regime 3 with the ratio of partial pressures of nitrogen and acetylene $P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 1 : 2$

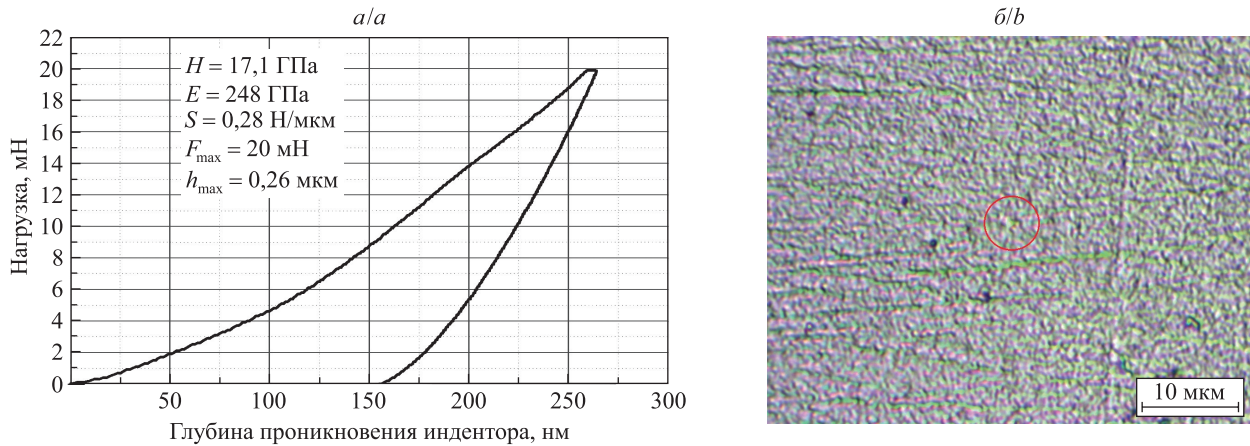


Рис. 7. Кривые нагрузки-разгрузки (а) и фотография отпечатка индентора (б) для покрытия TiAlCN, сформированного в режиме 1 с соотношением парциальных давлений азота и ацетилена $P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 1 : 1$ (H – нанотвердость; E – модуль Юнга; S – жесткость; F_{\max} – максимальная нагрузка; h_{\max} – максимальная глубина проникновения индентора)

Fig. 7. Load-unload curves (a) and a photograph of the indenter imprint (b) from the TiAlCN coating formed in regime 1 with the ratio of partial pressures of nitrogen and acetylene $P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 1 : 1$ (H – nanohardness; E – Young’s modulus; S – stiffness; F_{\max} – the maximum load on the indenter; h_{\max} – the maximal indenter penetration depth)

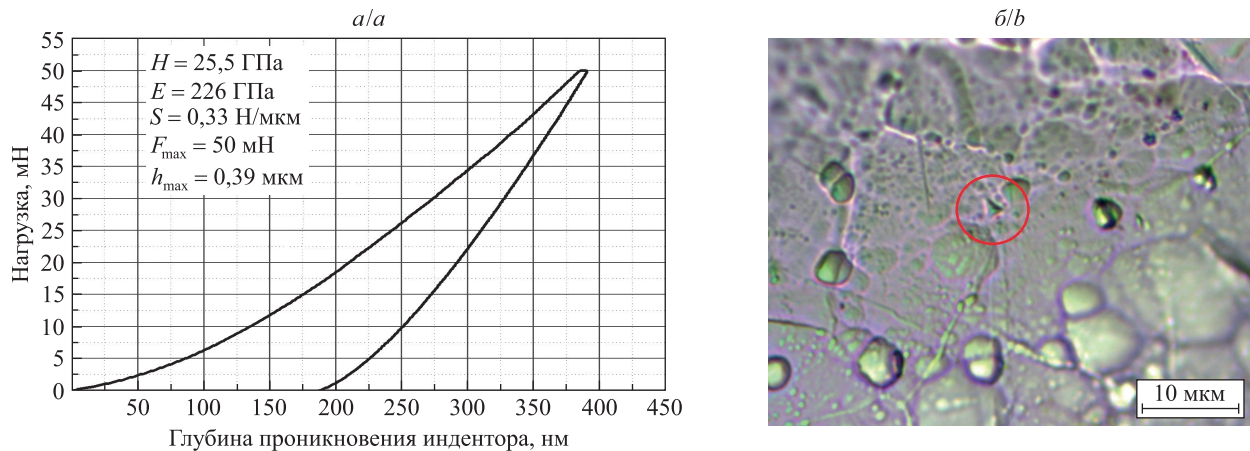


Рис. 8. Кривые нагрузки-разгрузки (а) и фотография отпечатка индентора (б) для покрытия TiAlCN, сформированного в режиме 2 с соотношением парциальных давлений азота и ацетилена $P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 2 : 1$ (H – нанотвердость; E – модуль Юнга; S – жесткость; F_{\max} – максимальная нагрузка; h_{\max} – максимальная глубина проникновения индентора)

Fig. 8. Load-unload curves (a) and a photograph of the indenter imprint (b) from the TiAlCN coating formed in regime 2 with the ratio of partial pressures of nitrogen and acetylene $P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 2 : 1$ (H – nanohardness; E – Young’s modulus; S – stiffness; F_{\max} – the maximum load on the indenter; h_{\max} – the maximal indenter penetration depth)

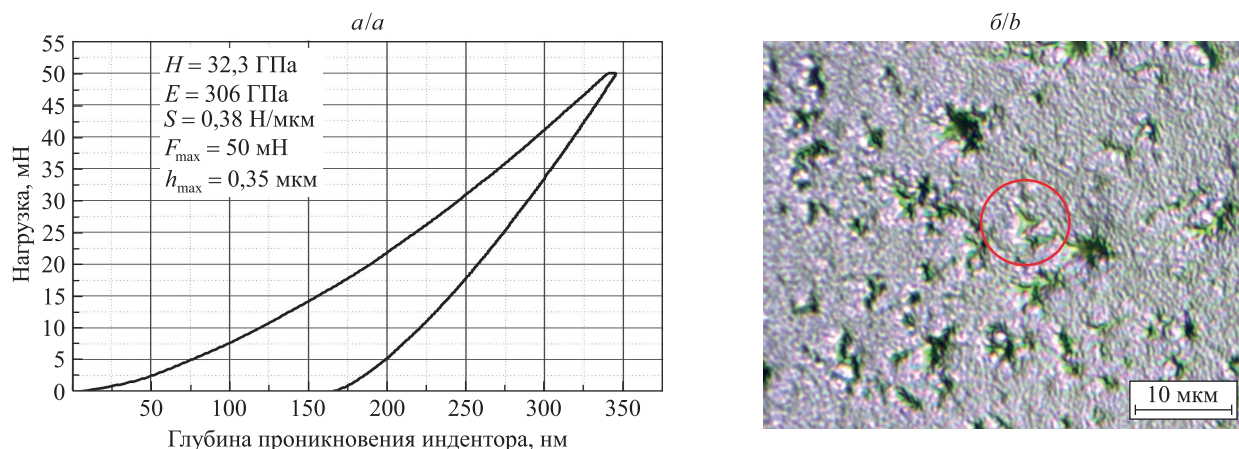


Рис. 9. Кривые нагрузки-разгрузки (а) и фотография отпечатка индентора (б) для покрытия TiAlCN, сформированного в режиме 3 с соотношением парциальных давлений азота и ацетилена $P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 1 : 2$ (H – нанотвердость; E – модуль Юнга; S – жесткость; F_{max} – максимальная нагрузка; h_{max} – максимальная глубина проникновения индентора)

Fig. 9. Load-unload curves (a) and a photograph of the indenter imprint (b) from the TiAlCN coating formed in regime 3 with the ratio of partial pressures of nitrogen and acetylene $P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 1 : 2$ (H – nanohardness; E – Young’s modulus; S – stiffness; F_{max} – the maximum load on the indenter; h_{max} – the maximal indenter penetration depth)

На рис. 10 представлены зависимости нанотвердости и модуля Юнга покрытий TiAlCN, сформированных в режимах с различным соотношением давлений реактивных газов в вакуумной камере.

По результатам измерения нанотвердости установлено, что покрытия TiAlCN, нанесенные во всех трех режимах, обладают достаточно высокой твердостью (более 17 ГПа) и подходят для применения в сферах машиностроения и космической техники. Варьирование концентрации углерода в покрытиях TiAlCN существенно влияет на изменение величины их твердости.

Обнаружено, что наибольшими твердостью ($H = 32,3$ ГПа) и модулем Юнга ($E = 306$ ГПа) обладают покрытия TiAlCN, сформированные на подложках из титана марки ВТ1-0 в режиме с соотношением парциальных давлений азота и ацетилена $P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 1 : 2$ (режим 3). Наименьшие твердость ($H = 17,1$ ГПа) и модуль Юнга ($E = 248$ ГПа) показало покрытие TiAlCN, нанесенное в режиме с соотношением парциальных давлений азота и ацетилена $P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 1 : 1$ (режим 1). Средний результат по величине твердости ($H = 25,5$ ГПа) и модулю Юнга ($E = 226$ ГПа) продемонстрировало покрытие, осажденное в режиме с соотношением парциальных давлений азота и ацетилена $P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 2 : 1$ (режим 2).

Как было показано в работах А. Лэйланда и А. Мэтьюса [17], Й. Мусила [3], ударная вязкость наноструктурированных покрытий определяется отношением H/E^* , где E^* – эффективный модуль Юнга, вычисляемый по формуле $E^* = \frac{E}{1-\nu^2}$ (ν – коэффициент Пуассона). Если отношение $H/E^* \geq 0,1$, то покрытия можно считать твердыми и одновременно достаточно пластичными, т. е. обладающими высокой ударной вязкостью разрушения [3; 14; 17].

Были рассчитаны отношения H/E^* для сформированных покрытий TiAlCN с различным содержанием углерода. Для покрытий TiAlCN, нанесенных в режиме 1, отношение H/E^* составило величину 0,06, для покрытий TiAlCN, сформированных в режиме 2, – величину $H/E^* = 0,103$, для покрытий TiAlCN, осажденных в режиме 3, – величину $H/E^* = 0,096$. Из полученных результатов следует, что наибольшей ударной вязкостью разрушения обладает покрытие TiAlCN, сформированное в режиме 2 с соотношением парциальных давлений азота и ацетилена $P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 2 : 1$. Наименьшую ударную вязкость разрушения имеет покрытие TiAlCN, нанесенное в режиме 1 с соотношением парциальных давлений азота и ацетилена $P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 1 : 1$.

Анализ фотографий отпечатков трехгранного алмазного индентора Берковича на поверхности исследуемых покрытий TiAlCN, сформированных во всех трех режимах нанесения, свидетельствует в пользу их высокой трещиностойкости и ударной вязкости. На поверхности покрытий не обнаружено трещин после индентирования. Гладкий характер кривых нагрузки-разгрузки также указывает на однородность покрытий по глубине и их высокую трещиностойкость.

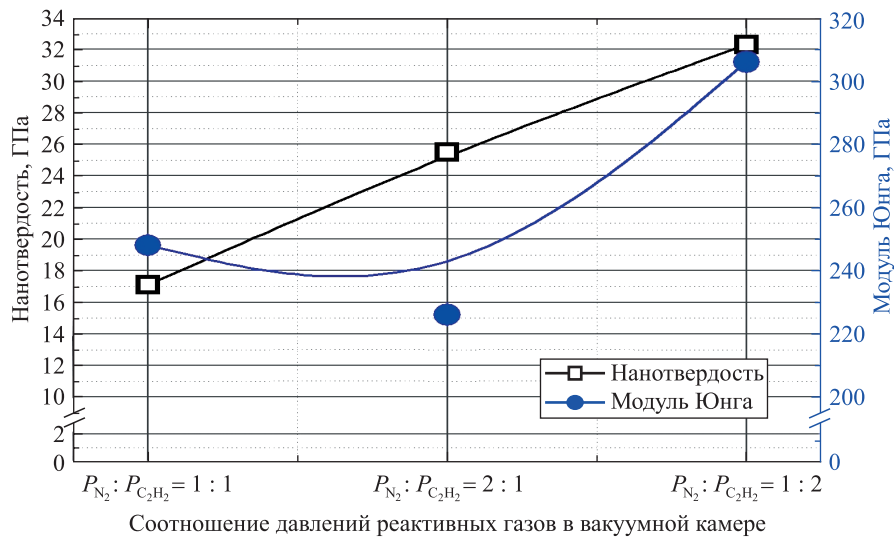


Рис. 10. Зависимости нанотвердости и модуля Юнга покрытий TiAlCN, сформированных с различным соотношением парциальных давлений азота и ацетилена

Fig. 10. Dependences of nanohardness and Young's modulus of TiAlCN coatings formed with different partial pressure ratios of nitrogen and acetylene

Из результатов наноиндентирования прослеживается нелинейная связь между концентрацией углерода в покрытиях TiAlCN и их твердостью.

Главным драйвером изменения твердости покрытий TiAlCN является изменение их структуры и морфологии при варьировании концентрации углерода. В режиме 1 при равных парциальных давлениях азота и ацетилена в покрытия TiAlCN формируется рыхлая морфология ростовых колонок с наибольшим средним размером зерен в них. Вследствие этого твердость покрытий TiAlCN, полученных в режиме 1, оказалась минимальной. При нанесении в режиме 2 с соотношением парциальных давлений азота и ацетилена $P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 2 : 1$ формируется структура с более плотной равноосной морфологией кристаллитов без выделенных колонок роста. Вследствие этого твердость покрытий TiAlCN значительно повышается с уменьшением концентрации углерода до 7,3 ат. % по результатам ЭДРС.

В режиме 3 с соотношением парциальных давлений азота и ацетилена $P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 1 : 2$ при увеличении концентрации углерода в покрытия TiAlCN до 30,3 ат. % твердость последнего существенно возрастает (до величин свыше 32 ГПа). В данном случае морфология покрытий слабо меняется по сравнению с таковой при нанесении в режиме 2. Однако фаза твердого раствора (Ti, Al)(C, N), из которой состоят покрытия TiAlCN, обедняется по азоту и обогащается по углероду, вследствие чего ее механические свойства становятся более близки к свойствам чистого карбида титана. Согласно литературным данным твердость карбида титана превосходит твердость нитрида титана и составляет примерно 30 ГПа [3]. В то же время, как известно [18], карбид титана не обладает достаточной ударной вязкостью по сравнению с таковой нитрида титана и склонен к хрупкому разрушению, что может быть критичным для многих сфер применения, в частности для космической техники.

Таким образом, по результатам наноиндентирования установлено, что концентрация углерода в покрытиях TiAlCN существенно влияет на изменение их механических свойств. Малая концентрация углерода ($P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 2 : 1$) обеспечивает получение покрытий TiAlCN с достаточно высокими твердостью (более 25 ГПа) и ударной вязкостью. Повышенная концентрация углерода ($P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 1 : 2$) позволяет получать покрытия TiAlCN с большей твердостью (свыше 32 ГПа), несколько жертвуя при этом ударной вязкостью (формируются более хрупкие пленки). Режим нанесения с одинаковыми парциальными давлениями азота и ацетилена ($P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 1 : 1$) является самым невыгодным как по твердости формируемых покрытий, так и по их ударной вязкости.

На рис. 11 представлены результаты трибомеханических испытаний исследуемых покрытий TiAlCN, сформированных с различным соотношением парциальных давлений реактивных газов.

Обнаружено, что коэффициент трения покрытий TiAlCN варьируется в довольно широком диапазоне (0,30–0,60). Небольшие колебания величины коэффициента трения покрытий в зависимости от времени испытаний свидетельствуют об однородности покрытий по глубине и адекватности метода исследования.

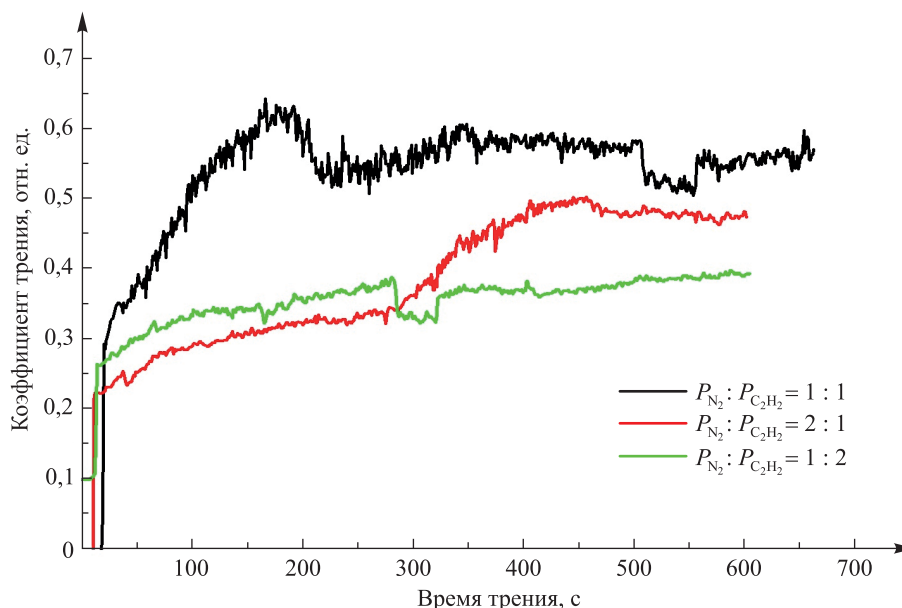


Рис. 11. Зависимости коэффициента трения покрытий TiAlCN, сформированных с различным соотношением парциальных давлений азота и ацетилена

Fig. 11. Dependences of the friction coefficient of TiAlCN coatings formed with different partial pressure ratios of nitrogen and acetylene

Установлено, что наибольшим коэффициентом трения (0,55–0,60) обладает покрытие TiAlCN, сформированное в режиме с соотношением парциальных давлений азота и ацетилена $P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 1 : 1$ (режим 1). Наименьший коэффициент трения (0,30–0,32) показали покрытия TiAlCN, нанесенные в режимах с соотношениями парциальных давлений азота и ацетилена $P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 2 : 1$ (режим 2) и $P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 1 : 2$ (режим 3). В режимах 2 и 3 покрытия демонстрируют примерно равные коэффициенты трения, однако в среднем коэффициент трения несколько меньше для покрытия TiAlCN, сформированного в режиме 2 с соотношением парциальных давлений азота и ацетилена $P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 2 : 1$.

Как следует из результатов трибомеханических испытаний, изменение концентрации углерода заметно влияет на изменение величины коэффициента трения покрытий TiAlCN.

За счет формирования столбчатой рыхлой морфологии роста покрытий TiAlCN в случае нанесения в режиме 1 коэффициент трения изменяется во времени в результате процесса изнашивания. Для покрытий TiAlCN, сформированных в режимах 2 и 3, такого явления не наблюдается вследствие значительно более плотной и однородной морфологии равноосных кристаллитов. Также и коэффициент трения ниже при формировании покрытий TiAlCN в режимах 2 и 3 при отсутствии в морфологии колонок роста и иных неоднородностей.

Таким образом, для обеспечения оптимальных трибомеханических свойств и минимализации коэффициента трения покрытий TiAlCN космического назначения целесообразным является получение ГЦК-структуры типа NaCl однофазного твердого раствора (Ti, Al)(C, N), обладающей равноосной глобулярной морфологией с подавлением столбцов роста, что достигается формированием в режимах с избытком (режим 2, $\alpha = 0,55$, $P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 2 : 1$) или недостатком (режим 3, $\alpha = 0,55$, $P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 1 : 2$) ацетилена в газовой смеси.

Заключение

Методом реактивного магнетронного распыления сформированы покрытия TiAlCN хорошего качества, представляющие собой сплошные пленки без разрывов, макропустот и включений. Определенные методом СЭМ толщины полученных покрытий TiAlCN составили 1,3–3,4 мкм. Выявлена различная концентрация углерода (7,3–30,3 ат. %) в зависимости от парциального давления ацетилена в процессе нанесения покрытий.

Установлено, что сформированные покрытия TiAlCN обладают однофазной структурой неупорядоченного твердого раствора (Ti, Al)(C, N) с ГЦК-решеткой на основе нитрида титана. Повышение концентрации углерода в покрытии с 7,3 до 30,3 ат. % приводит к раздвоению пиков дифракции, свидетельствующему о возможной сегрегации твердого раствора. Средний размер кристаллитов (Ti, Al)(C, N) составил от (10 ± 5) до (60 ± 5) нм.

По результатам наноиндентирования установлено, что концентрация углерода в покрытиях TiAlCN существенно влияет на изменение их механических свойств. Малая концентрация углерода ($P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 2 : 1$) обеспечивает получение покрытий TiAlCN с достаточно высокими твердостью (более 25 ГПа) и ударной вязкостью. Повышенная концентрация углерода ($P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 1 : 2$) позволяет получать покрытия TiAlCN с большей твердостью (свыше 32 ГПа), несколько жертвуя при этом ударной вязкостью. Обнаружено, что режим нанесения покрытий TiAlCN с одинаковыми парциальными давлениями азота и ацетилена ($P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 1 : 1$) является самым невыгодным и по твердости формируемых покрытий, и по их ударной вязкости. Для покрытий TiAlCN, нанесенных в режиме 1, отношение H/E^* составило величину $H/E^* = 0,06$, для покрытий TiAlCN, сформированных в режиме 2, – величину $H/E^* = 0,103$, а для покрытий TiAlCN, осажденных в режиме 3, – величину $H/E^* = 0,096$. Следовательно, наибольшей ударной вязкостью разрушения обладает покрытие TiAlCN, сформированное в режиме с соотношением парциальных давлений азота и ацетилена $P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 2 : 1$. Наименьшую ударную вязкость разрушения имеет покрытие TiAlCN, полученное в режиме с соотношением парциальных давлений азота и ацетилена $P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 1 : 1$.

Минимальный коэффициент трения (0,30–0,32) продемонстрировали покрытия TiAlCN, нанесенные в режимах с соотношениями парциальных давлений азота и ацетилена $P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 2 : 1$ (режим 2) и $P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 1 : 2$ (режим 3).

Таким образом, формирование покрытий TiAlCN ГЦК-структуры типа NaCl однофазного твердого раствора (Ti, Al)(C, N), обладающей равноосной глобулярной морфологией с подавлением столбцов роста, позволяет получить оптимальные трибомеханические свойства ($H = 25–32$ ГПа, $H/E^* \geq 0,1$) при минимальном коэффициенте трения (0,30–0,32), что достигается нанесением в режимах с избытком ($P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 2 : 1$) или недостатком ($P_{N_2} : P_{C_2H_2} = 1 : 2$) ацетилена в газовой смеси.

Библиографические ссылки

1. Константинов СВ, Комаров ФФ, Чижов ИВ, Зайков ВА. Структурно-фазовые состояния и микромеханические свойства наноструктурированных покрытий TiAlCuN. *Доклады Национальной академии наук Беларуси*. 2023;67(2):101–110. DOI: 10.29235/1561-8323-2023-67-2-101-110.
2. Комаров ФФ, Константинов СВ, Стрельницкий ВЕ. Радиационная стойкость наноструктурированных покрытий TiN, TiAlN, TiAlYn. *Доклады Национальной академии наук Беларуси*. 2014;58(6):22–27.
3. Musil J. Hard nanocomposite coatings: thermal stability, oxidation resistance and toughness. *Surface and Coatings Technology*. 2012;207:50–65. DOI: 10.1016/j.surfcoat.2012.05.073.
4. Zeng Yuqiao, Qiu Yuedong, Mao Xiangyang, Tan Shuyong, Tan Zhen, Zhang Xuhai, et al. Superhard TiAlCN coatings prepared by radio frequency magnetron sputtering. *Thin Solid Films*. 2015;584:283–288. DOI: 10.1016/j.tsf.2015.02.068.
5. Lackner JM, Waldhauser W, Ebner R, Bakker RJ, Schöberl T, Major B. Room temperature pulsed laser deposited (Ti, Al) C_xN_{1-x} coatings – chemical, structural, mechanical and tribological properties. *Thin Solid Films*. 2004;468(1–2):125–133. DOI: 10.1016/j.tsf.2004.05.089.
6. Jyothi J, Biswas A, Sarkar P, Soum-Glaude A, Nagaraja HS, Barshilia HC. Optical properties of TiAlC/TiAlCN/TiAlSiCN/TiAlSiCO/TiAlSiO tandem absorber coatings by phase-modulated spectroscopic ellipsometry. *Applied Physics A: Materials Science & Processing*. 2017;123(7):496. DOI: 10.1007/s00339-017-1103-2.
7. Rebouta L, Pitães A, Andritschky M, Capela P, Cerqueira MF, Matilainen A, et al. Optical characterization of TiAlN/TiAlON/SiO₂ absorber for solar selective applications. *Surface and Coatings Technology*. 2012;211:41–44. DOI: 10.1016/j.surfcoat.2011.09.003.
8. Brogren M, Harding GL, Karmhag R, Ribbing CG, Niklasson GA, Stenmark L. Titanium – aluminium – nitride coatings for satellite temperature control. *Thin Solid Films*. 2000;370(1–2):268–277. DOI: 10.1016/S0040-6090(00)00914-7.
9. Konstantinov SV, Komarov FF. Effects of nitrogen selective sputtering and flaking of nanostructured coatings TiN, TiAlN, TiAlYn, TiCrN, (TiHfZrVNb)N under helium ion irradiation. *Acta Physica Polonica A*. 2019;136(2):303–309. DOI: 10.12693/APhysPolA.136.303.
10. Konstantinov SV, Wendler E, Komarov FF, Zaikov VA. Radiation tolerance of nanostructured TiAlN coatings under Ar⁺ ion irradiation. *Surface and Coatings Technology*. 2020;386:125493. DOI: 10.1016/j.surfcoat.2020.125493.
11. Комаров ФФ, Константинов СВ, Зайков ВА, Пилько ВВ. Влияние протонного облучения на структурно-фазовое состояние наноструктурированных покрытий TiZrSiN и их механические свойства. *Инженерно-физический журнал*. 2021;94(6):1645–1654.
12. Константинов СВ, Комаров ФФ, Чижов ИВ, Жук Е, Зайков ВА. Воздействие высокотемпературного ионного облучения на наноструктурированные покрытия TiAlN. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика*. 2022;3:39–47. DOI: 10.33581/2520-2243-2022-3-39-47.
13. Komarov FF, Konstantinov SV, Zuk J, Drożdźiel A, Pysznik K, Chizhov IV, et al. Structure and mechanical properties of TiAlN coatings under high-temperature Ar⁺ ion irradiation. *Acta Physica Polonica A*. 2022;142(6):690–696. DOI: 10.12693/aphyspol.142.690.
14. Komarov FF, Konstantinov SV, Chizhov IV, Zaikov VA, Zubar TI, Trukhanov AV. Nanostructured TiAlCuN and TiAlCuCN coatings for spacecraft: effects of reactive magnetron deposition regimes and compositions. *RSC Advances*. 2023;13(27):18898–18907. DOI: 10.1039/D3RA02301J.
15. Константинов СВ, Комаров ФФ, Чижов ИВ, Зайков ВА. Влияние добавки кремния на элементный состав и структуру покрытий TiAlSiN, TiAlSiCN. В: Дудчик ЮИ, Цикман ИМ, Кольчевская ИН, редакторы. *Прикладные проблемы оптики*,

информатики, радиофизики и физики конденсированного состояния. Материалы VII Международной научно-практической конференции, посвященной 120-летию со дня рождения академика Антона Никифоровича Севченко; 18–19 мая 2023 г.; Минск, Беларусь. 2-е издание. Минск: [б. и.]; 2023. с. 328–330.

16. Oliver WC, Pharr GM. Measurement of hardness and elastic modulus by instrumented indentation: advances in understanding and refinements to methodology. *Journal of Materials Research*. 2004;19(1):3–20. DOI: 10.1557/jmr.2004.19.1.3.

17. Leyland A, Matthews A. Design criteria for wear-resistant nanostructured and glassy-metal coatings. *Surface and Coatings Technology*. 2004;177–178:317–324. DOI: 10.1016/j.surfcoat.2003.09.011.

18. Martínez-Martínez D, López-Cartes C, Fernández A, Sánchez-López JC. Influence of the microstructure on the mechanical and tribological behavior of TiC/a-C nanocomposite coatings. *Thin Solid Films*. 2009;517(5):1662–1671. DOI: 10.1016/j.tsf.2008.09.091.

References

1. Konstantinov SV, Komarov FF, Chizhov IV, Zaikov VA. Structural-phase states and micromechanical properties of nanostructured TiAlCuN coatings. *Doklady of the National Academy of Sciences of Belarus*. 2023;67(2):101–110. Russian. DOI: 10.29235/1561-8323-2023-67-2-101-110.

2. Komarov FF, Konstantinov SV, Strel'nitskij VE. Radiation resistance of nanostructured TiN, TiAlN, TiAlYN coatings. *Doklady of the National Academy of Sciences of Belarus*. 2014;58(6):22–27. Russian.

3. Musil J. Hard nanocomposite coatings: thermal stability, oxidation resistance and toughness. *Surface and Coatings Technology*. 2012;207:50–65. DOI: 10.1016/j.surfcoat.2012.05.073.

4. Zeng Yuqiao, Qiu Yuedong, Mao Xiangyang, Tan Shuyong, Tan Zhen, Zhang Xuhai, et al. Superhard TiAlCN coatings prepared by radio frequency magnetron sputtering. *Thin Solid Films*. 2015;584:283–288. DOI: 10.1016/j.tsf.2015.02.068.

5. Lackner JM, Waldhauser W, Ebner R, Bakker RJ, Schöberl T, Major B. Room temperature pulsed laser deposited (Ti, Al)_xN_{1-x} coatings – chemical, structural, mechanical and tribological properties. *Thin Solid Films*. 2004;468(1–2):125–133. DOI: 10.1016/j.tsf.2004.05.089.

6. Jyothi J, Biswas A, Sarkar P, Soum-Glaude A, Nagaraja HS, Barshilia HC. Optical properties of TiAlC/TiAlCN/TiAlSiCN/TiAlSiCO/TiAlSiO tandem absorber coatings by phase-modulated spectroscopic ellipsometry. *Applied Physics A: Materials Science & Processing*. 2017;123(7):496. DOI: 10.1007/s00339-017-1103-2.

7. Rebouta L, Pitães A, Andritschky M, Capela P, Cerqueira MF, Matilainen A, et al. Optical characterization of TiAlN/TiAlON/SiO₂ absorber for solar selective applications. *Surface and Coatings Technology*. 2012;211:41–44. DOI: 10.1016/j.surfcoat.2011.09.003.

8. Brogren M, Harding GL, Karmhag R, Ribbing CG, Niklasson GA, Stenmark L. Titanium – aluminium – nitride coatings for satellite temperature control. *Thin Solid Films*. 2000;370(1–2):268–277. DOI: 10.1016/S0040-6090(00)00914-7.

9. Konstantinov SV, Komarov FF. Effects of nitrogen selective sputtering and flaking of nanostructured coatings TiN, TiAlN, TiAlYN, TiCrN, (TiHfZrVnB)N under helium ion irradiation. *Acta Physica Polonica A*. 2019;136(2):303–309. DOI: 10.12693/APhysPolA.136.303.

10. Konstantinov SV, Wendler E, Komarov FF, Zaikov VA. Radiation tolerance of nanostructured TiAlN coatings under Ar⁺ ion irradiation. *Surface and Coatings Technology*. 2020;386:125493. DOI: 10.1016/j.surfcoat.2020.125493.

11. Komarov FF, Konstantinov SV, Zaikov VA, Pil'ko VV. [Effects of proton irradiation on the structural-phase state of nanostructured TiZrSiN coatings and their mechanical properties]. *Inzhenerno-fizicheskii zhurnal*. 2021;94(6):1645–1654. Russian.

12. Konstantinov SV, Komarov FF, Chizhov IV, Žuk J, Zaikov VA. Influence of high-temperature ion irradiation on nanostructured TiAlN coatings. *Journal of the Belarusian State University. Physics*. 2022;3:39–47. Russian. DOI: 10.33581/2520-2243-2022-3-39-47.

13. Komarov FF, Konstantinov SV, Žuk J, Drożdźiel A, Pysznik K, Chizhov IV, et al. Structure and mechanical properties of TiAlN coatings under high-temperature Ar⁺ ion irradiation. *Acta Physica Polonica A*. 2022;142(6):690–696. DOI: 10.12693/aphyspol.142.690.

14. Komarov FF, Konstantinov SV, Chizhov IV, Zaikov VA, Zubar TI, Trukhanov AV. Nanostructured TiAlCuN and TiAlCuCN coatings for spacecraft: effects of reactive magnetron deposition regimes and compositions. *RSC Advances*. 2023;13(27):18898–18907. DOI: 10.1039/D3RA02301J.

15. Konstantinov SV, Komarov FF, Chizhov IV, Zaikov VA. [Effect of silicon addition on elemental composition and structure of TiAlSiN, TiAlSiCN coatings]. In: Dudchik Yul, Tsikman IM, Kol'chevskaya IN, editors. *Prikladnye problemy optiki, informatiki, radiofiziki i fiziki kondensirovannogo sostoyaniya. Materialy VII Mezhdunarodnoi nauchno-prakticheskoi konferentsii, posvyashchenoi 120-letiyu so dnya rozhdeniya akademika Antona Nikiforovicha Sevchenko; 18–19 maya 2023 g.; Minsk, Belarus'* [Applied problems of optics, informatics, radiophysics and condensed matter physics. Proceedings of the 7th International scientific and practical conference dedicated to the 120th anniversary of the birth of academician Anton Nikiforovich Sevchenko; 2023 May 18–19; Minsk, Belarus]. 2nd edition. Minsk: [s. n.]; 2023. p. 328–330. Russian.

16. Oliver WC, Pharr GM. Measurement of hardness and elastic modulus by instrumented indentation: advances in understanding and refinements to methodology. *Journal of Materials Research*. 2004;19(1):3–20. DOI: 10.1557/jmr.2004.19.1.3.

17. Leyland A, Matthews A. Design criteria for wear-resistant nanostructured and glassy-metal coatings. *Surface and Coatings Technology*. 2004;177–178:317–324. DOI: 10.1016/j.surfcoat.2003.09.011.

18. Martínez-Martínez D, López-Cartes C, Fernández A, Sánchez-López JC. Influence of the microstructure on the mechanical and tribological behavior of TiC/a-C nanocomposite coatings. *Thin Solid Films*. 2009;517(5):1662–1671. DOI: 10.1016/j.tsf.2008.09.091.

Получена 27.07.2023 / исправлена 11.08.2023 / принята 14.08.2023.
Received 27.07.2023 / revised 11.08.2023 / accepted 14.08.2023.

ДВЕ СХЕМЫ ПОЛУЧЕНИЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ИОНОВ
НА ИЗОГНУТЫХ ЛИСТАХ ГРАФЕНАН. А. ПОКЛОНСКИЙ¹⁾, С. В. РАТКЕВИЧ¹⁾, С. А. ВЫРКО¹⁾, А. Т. ВЛАСОВ¹⁾¹⁾Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Беларусь

Приведен краткий обзор методов получения молекулярных ионов, на основе которого предложены две оригинальные схемы генерации потока отрицательно и положительно заряженных ионов из потока электрически нейтральных молекул, рассеивающихся на электропроводящих изогнутых листах графена. При изгибе листов графена происходит перераспределение плотностей π -электронов атомов углерода, и в направлении, перпендикулярном к изогнутой поверхности, появляется индуцированный деформацией электрический дипольный момент. Представленные схемы отличаются взаимным расположением изогнутых листов графена относительно потока молекул. На основе квантово-химических расчетов полуэмпирическим методом PM7 даны оценки сродства к электрону и энергии (потенциала) ионизации ряда молекул (C_{60} , O_2 , H_2O , CO_2 и др.), пригодных для получения из них молекулярных ионов по предложенным схемам. Если рассеяние молекулы происходит на отрицательно заряженной стороне графена, то за счет перехода электрона от графена к молекуле она приобретает отрицательный заряд. Если рассеяние молекулы происходит на положительно заряженной стороне графена, то за счет перехода электрона от молекулы к графену молекула приобретает положительный заряд. Для получения молекулярных ионов необходимо выбирать молекулы со значениями сродства к электрону (для получения отрицательных ионов) или энергии ионизации (для получения положительных ионов), близкими к величине работы выхода электрона из графена ($\approx 4,3$ эВ).

Ключевые слова: изогнутый лист графена; π -электроны; молекула; молекулярный ион; ионизация; сродство к электрону.

Благодарность. Работа выполнена при поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (грант № Ф23РНФ-049).

Образец цитирования:

Поклонский НА, Раткевич СВ, Вырко СА, Власов АТ. Две схемы получения молекулярных ионов на изогнутых листах графена. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2023;3:57–64 (на англ.). EDN: QHXOWT

For citation:

Poklonski NA, Ratkevich SV, Vyrko SA, Vlassov AT. Two schemes for producing molecular ions on a bent graphene layers. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2023;3:57–64. EDN: QHXOWT

Авторы:

Николай Александрович Поклонский – доктор физико-математических наук, член-корреспондент НАН Беларуси, профессор; профессор кафедры физики полупроводников и нанoeлектроники физического факультета.

Сергей Владимирович Раткевич – старший преподаватель кафедры физики и аэрокосмических технологий факультета радиофизики и компьютерных технологий.

Сергей Александрович Вырко – кандидат физико-математических наук; старший научный сотрудник научно-исследовательской лаборатории физики электронных материалов кафедры физики полупроводников и нанoeлектроники физического факультета.

Анатолий Тимофеевич Власов – кандидат физико-математических наук; ведущий научный сотрудник научно-исследовательской лаборатории физики электронных материалов кафедры физики полупроводников и нанoeлектроники физического факультета.

Authors:

Nikolai A. Poklonski, doctor of science (physics and mathematics), corresponding member of the National Academy of Sciences of Belarus, full professor; professor at the department of semiconductor physics and nanoelectronics, faculty of physics. poklonski@bsu.by

<http://orcid.org/0000-0002-0799-6950>

Sergey V. Ratkevich, senior lecturer at the department of physics and aerospace technologies, faculty of radiophysics and computer technologies.

ratkevich@bsu.by

<https://orcid.org/0000-0002-5161-5510>

Sergey A. Vyrko, PhD (physics and mathematics); senior researcher at the laboratory of physics of electronic materials, department of semiconductor physics and nanoelectronics, faculty of physics.

vyrko@bsu.by

<http://orcid.org/0000-0002-1145-1099>

Anatoli T. Vlassov, PhD (physics and mathematics); leading researcher at the laboratory of physics of electronic materials, department of semiconductor physics and nanoelectronics, faculty of physics.

vlassov_anatoli@mail.ru

TWO SCHEMES FOR PRODUCING MOLECULAR IONS ON A BENT GRAPHENE LAYERS

N. A. POKLONSKI^a, S. V. RATKEVICH^a, S. A. VYRKO^a, A. T. VLASSOV^a

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

Corresponding author: N. A. Poklonski (poklonski@bsu.by)

A brief review of methods for producing molecular ions is given, on the basis of which two original schemes for generation of a flow of negatively and positively charged ions from a flow of electrically neutral molecules scattered on electrically conductive bent graphene layers are proposed. When graphene layers are bent, the densities of π -electrons of carbon atoms are redistributed, and a deformation-induced electric dipole moment appears in the direction perpendicular to the bent surface. The presented schemes differ in the mutual arrangement of the bent graphene layers relative to the flow of molecules. Quantum chemical calculations using the PM7 semiempirical method provide estimates of the electron affinity and ionisation energy (potential) of a number of molecules (C_{60} , O_2 , H_2O , CO_2 , etc.) suitable for production of molecular ions from them according to the proposed schemes. If a molecule is scattered on a negatively charged graphene side, then due to the transfer of an electron from graphene to the molecule, the molecule acquires a negative charge. If a molecule is scattered on a positively charged graphene side, then due to the transfer of an electron from the molecule to graphene, the molecule acquires a positive charge. To obtain molecular ions, it is necessary to select molecules with values of electron affinity (to obtain negative ions) or ionisation energy (to obtain positive ions) close to the work function of graphene (≈ 4.3 eV).

Keywords: bent graphene layer; π -electrons; molecule; molecular ion; ionisation; electron affinity.

Acknowledgements. This work was supported by the Belarusian Republican Foundation for Fundamental Research (grant No. F23RNF-049).

Introduction

To solve a number of problems of high-energy ion implantation, mass spectrometry, diagnostics of the composition and topography of the surface of crystals, etc., sources of negative ions are required [1–3]. Let us note the known approaches to obtaining flows of molecular ions and electrically neutral radicals. Thus, a technique was proposed [4] for removing desorbed (from the engineering surfaces of accelerating devices) ions from the general flow using an ion filter, which passes only gas-phase ions from the source to the detector and retains the desorbed ions due to the difference in their kinetic energies. In this case, the interaction of the adsorbate (molecular ion) with the surface of the ion filter (for example, made of a crystalline semiconductor) is important, which leads to bending of single-electron bands of allowed energy values, and further to pinning of the Fermi level at surface energy levels of semiconductor defects [5]. In the case of active semiconductor-adsorbate interfaces, chemical bonds arise between them, which leads to equalisation of the energies of the valence electrons of the adsorbate and semiconductor.

Particles adsorbed on graphene affect the width of the energy band gap induced by them and the position of the Fermi level in graphene. In this case, the adsorbate-graphene binding energy non-linearly depends on the concentration of adsorbed particles [6]. The electric potential of the ion-solid interaction differs distinctly from the potential describing collisions of molecules in the gas phase [7], which is due to an increase in the electron density in the region between the incident particle and the scattering center. In particular, it was shown by calculation [8] that the ionisation energy of the hydrogen atom goes to zero when the distance between the proton and the atomically smooth metal surface becomes slightly less than the Bohr radius. The binding energy between water molecules in a cluster (up to six molecules) is also affected by the presence of a second graphene layer and the distance between the layers [9]. When the distance between the graphene layers becomes less than 0.6–0.8 nm, the intermolecular interaction in the cluster quickly decreases, which leads to a weakening of the adhesion between molecules in the «compressed» cluster.

Dielectric graphene layers and graphene ribbons, as well as soft lipid bilayer membranes, are capable, under certain conditions, of converting the effects of an electric field into mechanical deformation [10]. And vice versa, mechanical deformation can give rise to an electric field. The phenomenon of flexoelectricity is greatly enhanced at the nanoscale, so two-dimensional membranes of atomic thickness exhibit a strong relationship between their curvature (bending) and the external electric field. It has been shown theoretically [11] that the value of the electric polarisation vector normal to the surface of a graphene layer (in the form of an electric double layer) depends on the curvature of the layer, and the electronic charge of the π -bonds of carbon atoms mostly «flows» to the convex side of the layer.

The study of chemical reactions accompanied by the decomposition of water molecules on graphene layers is relevant for applications in biomedicine: the resulting electrically neutral hydroxyl groups OH can be used as a bactericidal agent. Thus, using the flexoelectric properties of graphene, in work [12] a model of an electrical «capacitor» made of graphene was proposed to generate a negatively charged and electrically neutral hydroxyl groups OH from a flow of water molecules. The «capacitor» consists of two graphene layers bent in one direction placed on copper substrate plates bent in the same way (see also [13]). The copper substrates are connected to an external source of electrical voltage: positive potential is applied to the upper concave substrate, negative potential is applied to the lower substrate bent towards the upper substrate. When the water vapor is pumped between the plates of such an electrical «capacitor», the water vapor at the exit from the «capacitor» is enriched with electrically neutral radicals $(\text{OH})^0$ and hydrogen molecules H_2 [12].

Photocatalytic decomposition of water on graphene could be an effective approach to produce hydrogen by converting solar energy into chemical energy [14; 15]. Biophysical methods are being developed for charge separation under the influence of light in the reaction centers of plant photosynthesis [16]. Using quantum chemical methods and thermochemical methods (by the Gibbs energy change), we studied possible chemical reactions involving molecules of water, fullerenes C_{20} and C_{60} , hydrogen and chlorine with the release of atomic or molecular hydrogen at room temperature and atmospheric pressure [17; 18].

The physical processes underlying the generation of ion beams with a high emission current density in electrohydrodynamic emitters operating on liquid metals and alloys, as well as with low-temperature ion liquids, are considered in work [19]. The factors that determine the stability of ion emission and their interaction with engineering surfaces are also analysed there. The results of the one-dimensional theory of a plasma emitter of positive ions are presented in publication [20].

The model of explosive electron emission [21] allows to describe emission processes during discharges at the points of contact of the metal wall with the plasma under magnetic confinement of the plasma. In works [22; 23] a description of models of field (cold) emission from various low-dimensional carbon systems is given.

Another mechanism for the formation of ions is one-electron charge exchange during the collision of fast ions such as H^+ and He^{2+} with a neutral hydrogen molecule. Thus, in paper [24], the cross sections for one-electron charge exchange in collisions of fast ions with an H_2 molecule in the ground state were calculated. Ion-molecular collisions are considered using the relationship between quantum mechanical and quasi-classical charge exchange amplitudes. For the collisions $\text{H}^+ + \text{H}_2 \rightarrow \text{H} + \text{H}_2^+$, the dependence of the differential charge exchange cross sections on the orientation of the symmetry axis of the H_2 molecule is considered. By numerical modelling the possibility of separating flows of electrically polarised macromolecules in non-uniform electric fields created by charged filaments is demonstrated [25].

The purpose of the work is to propose simple schemes for producing a flow of negatively and positively charged molecular ions from a flow of electrically neutral molecules interacting with two bent layers of electrically conductive graphene.

Schemes for generating molecular ions

In the proposed method, ionisation of molecules is carried out using bent graphene layers. When passing through a non-uniform stationary electric field, the molecules change their configuration and (or) break up into ions. To form a non-uniform electric field, the redistribution of π -electrons (asymmetrically elongated π -bonds) of carbon atoms on the surfaces of a bent graphene layer is used (fig. 1), creating a dipole moment (an electric double layer covering opposite sides of a single graphene layer). The direction of the dipole moment induced by graphene bending is determined by the density of π -electron states, which is greater on the convex side of the graphene layer [11; 26]. The redistribution of charge density that occurs on a graphene layer is determined by its curvature. It is quite natural to use several differently bent graphene layers on metal substrates, to which adjustable electric potentials are applied and between which the movement of ionised molecules and the removal of molecular ions along the surface of an electrically conductive grid are organised.

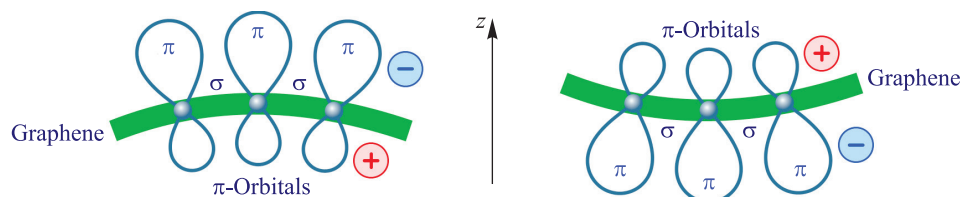


Fig. 1. Schemes of occurrence of a local electric dipole moment in a graphene layer due to the deformation of σ -bonds (determining the mechanical strength of graphene) and the redistribution of electron density for the π -orbitals of carbon atoms along the z axis (perpendicular to the graphene layer) when the layer is bent

Due to the bending on the convex side of the bent graphene surface, the electron density increases, and it is chemically reactive to combine with partially positively charged atoms (for example, hydrogen atoms in water molecules [12; 26]). In this case, in molecules, the lowest energy level E_{LUMO} unoccupied by electrons (measured relative to the vacuum level E_{vac}) should be located lower than the highest energy level ($E_{\text{F}} - e\varphi$) of electron-occupied π -states in bent graphene, which makes it possible for electrons to transfer from graphene to molecules, turning them into negative ions (fig. 2, *a*). Here E_{F} is the Fermi level of graphene in equilibrium, e is the elementary charge, φ is the electric potential of the external voltage source. This corresponds to the fact that the work function of graphene $\text{WF}(\varphi) = E_{\text{vac}} - (E_{\text{F}} - e\varphi)$ should be less than the electron affinity (EA) of the molecule ($\text{EA} \approx -E_{\text{LUMO}}$). The experimentally measured value of the work function of graphene monolayer is $\text{WF}(\varphi = 0) \approx 4.3$ eV [27]. Energy relations for electronic states in macromolecular and metal nanocontacts see in publications [28; 29].

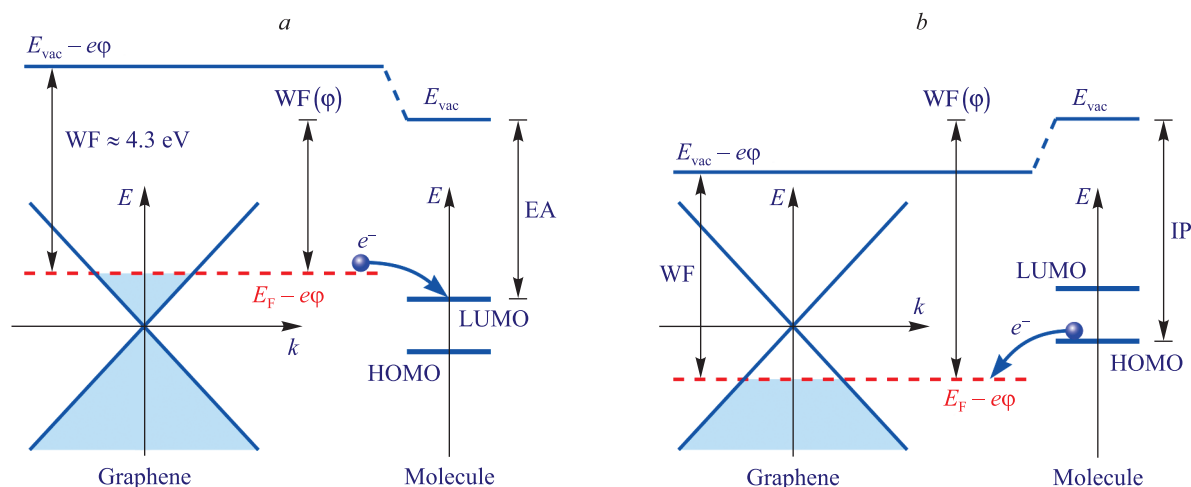


Fig. 2. Schemes of the transition of an electron (e^-) from the Fermi level of graphene ($E_{\text{F}} - e\varphi$) to the lowest unoccupied molecular orbital (LUMO) with the formation of a negative molecular ion (*a*) and the transition of an electron from the highest occupied molecular orbital (HOMO) to the Fermi level of graphene with the formation of a positive molecular ion (*b*). The dependences of the single-electron energy of graphene in one of the six equivalent points of the 1st Brillouin zone on the wave number k of π -electrons when an electric potential $\varphi < 0$ (*a*) or $\varphi > 0$ (*b*) is applied to the graphene are shown; EA is the electron affinity of the molecule, IP is the ionisation energy (potential) of the molecule

Let us consider a scheme for obtaining a flow of negatively charged molecular ions M^- from a flow of electrically neutral molecules M^0 when they interact with two electrically conductive graphene layers bent in opposite directions (fig. 3, *a*). Two bent graphene layers (placed with their convex sides facing each other, which leads to compression and then expansion of the flow, as in a Laval nozzle) are electromechanically attached at the edges to two flat substrates of a chemically inert metal (see also [12]). The substrates are connected to an external source of electrical voltage: a negative potential ($\varphi < 0$) is applied to two substrates (cathodes), and a positive potential is applied to the anode in the form of a metal grid located (perpendicular to the flow of molecular ions) far from the cathodes (see fig. 3, *a*). The intensity of ion formation depends on the flow density, the speed of molecules, the distance from the molecules to the graphene surface and other factors.

The transition of electrons from the convex side of the graphene surface to the lowest unoccupied molecular orbital (LUMO) of a molecule M^0 is initiated by the electric potential φ applied to the substrate from an external source. Potential φ can be either constant or variable. In the case of an alternating potential, the electric field acts on the electron with a certain frequency, this can lead to the coincidence of the electron energy with the energy level E_{LUMO} of the molecule. Varying the frequency of electric field oscillations makes it possible to increase the intensity of ion formation. There is an analogy here with the Sena effect [30; 31], in which, when a negative ion and an atom collide, an electron transfers from the ion to the atom without changing their trajectory (the so-called resonant charge exchange), that is equivalent to the scattering of the ion. The resonant charge exchange cross section replaces the elastic scattering cross section in the phenomena of ion transport in the intrinsic gas of atoms, when the transport of particles is associated with their elastic scattering.

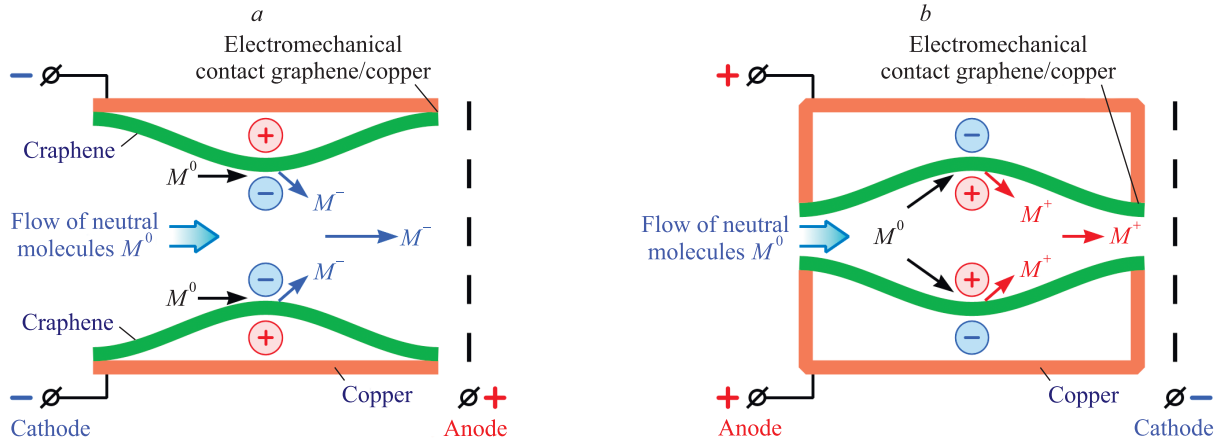


Fig. 3. Schemes for generation of a flow of molecular ions: *a* – scheme for generation of negative ions (M^-) between convex graphene surfaces on a copper substrate (analogy of a Laval nozzle), $WF(\varphi) < EA$; *b* – scheme for generation of positive ions (M^+) between concave graphene surfaces, $WF(\varphi) > IP$

Similarly, by changing the sign of the electric potential on copper substrates ($\varphi > 0$) (fig. 3, *b*), it is possible to realise transitions of electrons from the highest occupied molecular orbital (HOMO) of molecules to graphene, resulting in the formation of positively charged molecular ions in the flow. In this case, the energy level E_{HOMO} in molecules should be located higher than the energy level ($E_{\text{F}} - e\varphi$) of electron-filled π -states in bent graphene, which makes it possible for electrons to transit from a molecule to graphene, turning molecules into positive ions (see fig. 2, *b*). This corresponds to the fact that the work function of graphene $WF(\varphi) = E_{\text{vac}} - (E_{\text{F}} - e\varphi)$ should be greater than the ionisation energy of the molecule ($IP \approx -E_{\text{HOMO}}$).

The table shows the experimental values [32–34] of electron affinity and ionisation energy for molecules that can be used to obtain molecular ions. To compare with experimental values and evaluate data missing from the literature, we have calculated $EA \approx -E_{\text{LUMO}}$ and $IP \approx -E_{\text{HOMO}}$ using the PM7 semiempirical method [35], implemented in the *MOPAC2016* package.

Values of electron affinity (EA) and ionisation potential (IP) of neutral molecules and radicals

Molecule	EA, eV	IP, eV	Reference	Molecule	EA, eV	IP, eV	Reference
Hydrogen (H_2)	-0.72	–	[32]	Hydroxyl radical ($\cdot\text{OH}$)	2.17	–	[32]
	–	15.43	[33]		1.83	13.02	[33]
	-7.04	15.02	PM7		1.63	11.18	PM7
Oxygen (O_2)	0.87	–	[32]	Nitrogen dioxide ($\cdot\text{NO}_2$)	1.62	–	[32]
	0.45	12.06	[33]		2.27	9.59	[33]
	0.92	9.17	PM7		1.09	10.56	PM7
Nitrogen (N_2)	–	15.58	[33]	Nitrate radical ($\cdot\text{NO}_3$)	3.88	–	[32]
	0.13	13.66	PM7		3.94	12.57	[33]
Dicarbon (C_2)	3.27	11.41	[33]		Methyl radical ($\cdot\text{CH}_3$)	4.95	11.54
	2.15	11.74	PM7	1.08		–	[32]
Water (H_2O)	-0.8	–	[32]	Ammonia (NH_3)		0.08	9.84
	–	12.62	[33]		-0.54	9.97	PM7
	-4.05	12.12	PM7		–	10.07	[33]
Carbon dioxide (CO_2)	-0.59	13.78	[33]	Carbon monoxide (CO)	–	10.15	PM7
	-0.55	12.76	PM7		1.33	14.01	[33]
Anthracene ($\text{C}_{14}\text{H}_{10}$)	1.19	–	[32]	Adamantane ($\text{C}_{10}\text{H}_{16}$)	-1.60	12.33	PM7
	0.53	7.44	[33]		-0.3	–	[34]
	1.09	8.39	PM7		–	9.25	[33]
Fullerene (C_{60})	2.68	7.6	[33]	Fullerene (C_{70})	-4.07	10.20	PM7
	2.96	9.66	PM7		2.77	8	[33]
Fullerene + adduct ($\text{C}_{60} + [2(\text{COOH})]_3$)	2.88	9.75	PM7		Fullerene + adduct ($\text{C}_{70} + [2(\text{COOH})]_2$)	3.23	9.19
				3.54		9.45	PM7

To obtain negative molecular ions, it is necessary to select molecules with electron affinities close to the work function of graphene ($WF \approx 4.3$ eV). To obtain positive molecular ions, it is necessary to select molecules with an ionisation energy close to the work function of graphene. When a negative potential ($\varphi < 0$) from the external voltage source is applied to the graphene, the Fermi level in graphene ($E_F - e\varphi$) shifts upward to the vacuum level E_{vac} , this makes it possible to obtain negative ions from molecules with $EA < WF \approx 4.3$ eV. When a positive potential ($\varphi > 0$) from the external voltage source is applied to the graphene, the Fermi level in graphene ($E_F - e\varphi$) shifts downward from the vacuum level E_{vac} , this makes it possible to obtain positive ions from molecules with $IP > WF \approx 4.3$ eV. From the data presented in the table it can be seen that candidates for obtaining negative and positive ions are molecules of fullerenes and fullerenes with carboxyl adducts, as well as nitrate and hydroxyl radicals and dicarbon. Positively charged ions can also be obtained from oxygen molecules, anthracene, adamantane, methyl radical, nitrogen dioxide and ammonia.

Molecules with negative electron affinity are, as a rule, very stable molecules with fully occupied outer bonding HOMO orbital ($E_{HOMO} < E_{vac}$) and antibonding unoccupied LUMO orbital ($E_{LUMO} > E_{vac}$). This rules out the addition of an extra electron to the molecule and the formation of a stable negative ion. These molecules include: hydrogen, water, carbon dioxide, ammonia, adamantane.

Conclusions

It has been shown that during the charge-exchange interaction of molecules with bent graphene layers, the generation of both negative and positive molecular ions in a flow of electrically neutral molecules is possible. Quantum chemical calculations using the PM7 semiempirical method provided estimates of the electron affinity and ionisation potential of a number of molecules. Based on values of electron affinity and ionisation potential known from the literature, supplemented by our calculated estimates, molecules are identified that are of interest for the production of molecular ions and require electron affinities and ionisation potentials close to the work function of graphene. The energy received by the molecules must be sufficient for their ionisation, which is achieved by changing the electric potential φ by adjusting the circuit to recharge molecules of a certain type.

Библиографические ссылки

1. Dudnikov VG. Surface-plasma method for the production of negative ion beams. *Physics – Uspekhi*. 2019;62(12):1233–1267. DOI: 10.3367/UFNe.2019.04.038558.
2. Gainullin IK. Resonant charge transfer during ion scattering on metallic surfaces. *Physics – Uspekhi*. 2020;63(9):888–906. DOI: 10.3367/UFNe.2019.11.038691.
3. Ieshkin AE, Kushkina KD, Kireev DS, Ermakov YuA, Chernysh VS. Polishing superhard material surfaces with gas-cluster ion beams. *Technical Physics Letters*. 2017;43(1):95–97. DOI: 10.1134/S1063785017010205.
4. Lukin VG, Khvostenko OG. Desorption processes in the measurement of weak currents. *Physics – Uspekhi*. 2020;63(5):487–499. DOI: 10.3367/UFNe.2019.07.038615.
5. Kiselev VA. Covalent-ionic transition, and activity of metal-semiconductor interfaces. *Soviet Physics, Solid State*. 1991;33(10):1734–1737.
6. Davydov SYu. Dependence of the electronic structure of a graphene nanoribbon on the concentration of adsorbed particles. *Technical Physics Letters*. 2020;46(7):625–628. DOI: 10.1134/S1063785020070068.
7. Babenko PYu, Zinoviev AN, Mikhailov VS, Tensin DS, Shergin AP. The ion-solid interaction potential determination from the backscattered particles spectra. *Technical Physics Letters*. 2022;48(7):50–53. DOI: 10.21883/TPL.2022.07.54039.19231.
8. Konstantinov OV, Dymnikov VD, Mittsev MA. Theory of catalytic dissociation of hydrogen atoms on a metal surface. *Semiconductors*. 2008;42(8):931–933. DOI: 10.1134/S1063782608080101.
9. McKenzie S, Kang HC. Squeezing water clusters between graphene sheets: energetics, structure, and intermolecular interactions. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 2014;16(47):26004–26015. DOI: 10.1039/C4CP02575J.
10. Ahmadpoor F, Sharma P. Flexoelectricity in two-dimensional crystalline and biological membranes. *Nanoscale*. 2015;7(40):16555–16570. DOI: 10.1039/C5NR04722F.
11. Dumitrică T, Landis CM, Yakobson BI. Curvature-induced polarization in carbon nanoshells. *Chemical Physics Letters*. 2002;360(1–2):182–188. DOI: 10.1016/S0009-2614(02)00820-5.
12. Poklonski NA, Ratkevich SV, Vyrko SA, Vlassov AT, Hieu NN. Quantum chemical calculation of reactions involving C_{20} , C_{60} , graphene and H_2O . *International Journal of Nanoscience*. 2019;18(3–4):1940008. DOI: 10.1142/S0219581X19400088.
13. Lebedeva IV, Popov AM, Knizhnik AA, Lozovik YE, Poklonski NA, Siahlo AI, et al. Tunneling conductance of telescopic contacts between graphene layers with and without dielectric spacer. *Computational Materials Science*. 2015;109:240–247. DOI: 10.1016/j.commatsci.2015.07.006.
14. Xiang Q, Yu J. Graphene-based photocatalysts for hydrogen generation. *The Journal of Physical Chemistry Letters*. 2013;4(5):753–759. DOI: 10.1021/jz302048d.
15. Kamat PV, Bisquert J. Solar fuels. Photocatalytic hydrogen generation. *The Journal of Physical Chemistry C*. 2013;117(29):14873–14875. DOI: 10.1021/jp406523w.
16. Yakovlev AG, Shuvalov VA. Physical stage of photosynthesis charge separation. *Physics – Uspekhi*. 2016;59(6):531–557. DOI: 10.3367/UFNe.2016.02.037701.

17. Poklonski NA, Ratkevich SV, Vyrko SA, Vlassov AT. Thermochemistry modeling of hydrogen and water influence on C_{20} cage decay. In: Burakov VS, Filatova II, Usachonak MS, editors. *Plasma physics and plasma technology (PPPT-8). Contributed papers of VIII International conference; 2015 September 14–18; Minsk, Belarus. Volume 1*. Minsk: Kovcheg; 2015. p. 177–180.
18. Поклонский НА, Раткевич СВ, Вырко СА, Власов АТ. Квантово-химический расчет реакций фуллеренов C_{20} и C_{60} с молекулами водорода, хлора и воды. В: Витязь ПА, Пенязьков ОГ, Филатов СА, Шпилевский ЭМ, редакторы. *Наноструктуры в конденсированных средах*. Минск: [б. и.]; 2016. с. 477–483.
19. Mazarov P, Dudnikov VG, Tolstoguzov AB. Electrohydrodynamic emitters of ion beams. *Physics – Uspekhi*. 2020;63(12):1219–1255. DOI: 10.3367/UFNe.2020.09.038845.
20. Kotelnikov IA, Astrelin VT. Theory of a plasma emitter of positive ions. *Physics – Uspekhi*. 2015;58(7):701–718. DOI: 10.3367/UFNe.0185.201507c.0753.
21. Barendolts SA, Mesyats GA. Explosive emission processes in thermonuclear facilities with magnetic plasma confinement and in linear electron-positron colliders. *Physics – Uspekhi*. 2023;66(7):704–721. DOI: 10.3367/UFNe.2022.02.039163.
22. Eidelman ED, Arkhipov AV. Field emission from carbon nanostructures: models and experiment. *Physics – Uspekhi*. 2020;63(7):648–667. DOI: 10.3367/UFNe.2019.06.038576.
23. Поклонский НА, Сягло АИ, Вырко СА, Раткевич СВ, Власов АТ. Модель автоэлектронной эмиссии из торца плоского графена в вакуум. *Приборы и методы измерений*. 2019;10(1):61–68. DOI: 10.21122/2220-9506-2019-10-1-61-68.
24. Горяев ФФ. Одноэлектронная перезарядка при столкновениях быстрых ионов с молекулярным водородом в представлении параметра удара. *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. 2023;164(3):349–364.
25. Latypov ZZ. Possibility for separation of polarizable molecules using electric fields. *Technical Physics*. 2014;59(6):808–812. DOI: 10.1134/S1063784214060140.
26. Gao X, Wang Y, Liu X, Chan T-L, Irle S, Zhao Y, et al. Regioselectivity control of graphene functionalization by ripples. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 2011;13(43):19449–19453. DOI: 10.1039/C1CP22491C.
27. Rut'kov EV, Afanas'eva EY, Gall NR. Graphene and graphite work function depending on layer number on Re. *Diamond and Related Materials*. 2020;101:107576. DOI: 10.1016/j.diamond.2019.107576.
28. Klavysyuk AL, Saletsky AM. Formation and properties of metallic atomic contacts. *Physics – Uspekhi*. 2015;58(10):933–951. DOI: 10.3367/UFNe.0185.201510a.1009.
29. Perrin ML, Frisenda R, Koole M, Seldenthuis JS, Gil JAC, Valkenier H, et al. Large negative differential conductance in single-molecule break junctions. *Nature Nanotechnology*. 2014;9(10):830–834. DOI: 10.1038/nnano.2014.177.
30. Smirnov BM. The Sena effect. *Physics – Uspekhi*. 2008;51(3):291–293. DOI: 10.1070/PU2008v051n03ABEH006542.
31. Massey HSW. *Negative ions*. 3rd edition. Cambridge: Cambridge University Press; 1976. XVIII, 742 p. (Cambridge monographs on physics).
32. Бучельникова НС. Отрицательные ионы. *Успехи физических наук*. 1958;65(3):351–385. DOI: 10.3367/UFNr.0065.195807a.0351.
33. Linstrom PJ, Mallard WG, editors. *NIST Chemistry WebBook: NIST standard reference database number 69* [Internet]. Gaithersburg: National Institute of Standards and Technology. [1996]–. Gas phase ion energetics data; [updated 2023 January; cited 2023 September 7]. Available from: <https://webbook.nist.gov/chemistry/>.
34. Li J, Niesner D, Fauster T. Negative electron affinity of adamantane on Cu (111). *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2021;33(13):135001. DOI: 10.1088/1361-648X/abd99a.
35. Stewart JJP. Optimization of parameters for semiempirical methods VI: more modifications to the NDDO approximations and re-optimization of parameters. *Journal of Molecular Modeling*. 2013;19(1):1–32. DOI: 10.1007/s00894-012-1667-x.

References

1. Dudnikov VG. Surface-plasma method for the production of negative ion beams. *Physics – Uspekhi*. 2019;62(12):1233–1267. DOI: 10.3367/UFNe.2019.04.038558.
2. Gainullin IK. Resonant charge transfer during ion scattering on metallic surfaces. *Physics – Uspekhi*. 2020;63(9):888–906. DOI: 10.3367/UFNe.2019.11.038691.
3. Ieshkin AE, Kushkina KD, Kireev DS, Ermakov YuA, Chernysh VS. Polishing superhard material surfaces with gas-cluster ion beams. *Technical Physics Letters*. 2017;43(1):95–97. DOI: 10.1134/S1063785017010205.
4. Lukin VG, Khvostenko OG. Desorption processes in the measurement of weak currents. *Physics – Uspekhi*. 2020;63(5):487–499. DOI: 10.3367/UFNe.2019.07.038615.
5. Kiselev VA. Covalent-ionic transition, and activity of metal-semiconductor interfaces. *Soviet Physics, Solid State*. 1991;33(10):1734–1737.
6. Davydov SYu. Dependence of the electronic structure of a graphene nanoribbon on the concentration of adsorbed particles. *Technical Physics Letters*. 2020;46(7):625–628. DOI: 10.1134/S1063785020070068.
7. Babenko PYu, Zinoviev AN, Mikhailov VS, Tensin DS, Shergin AP. The ion-solid interaction potential determination from the backscattered particles spectra. *Technical Physics Letters*. 2022;48(7):50–53. DOI: 10.21883/TPL.2022.07.54039.19231.
8. Konstantinov OV, Dymnikov VD, Mittsev MA. Theory of catalytic dissociation of hydrogen atoms on a metal surface. *Semiconductors*. 2008;42(8):931–933. DOI: 10.1134/S1063782608080101.
9. McKenzie S, Kang HC. Squeezing water clusters between graphene sheets: energetics, structure, and intermolecular interactions. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 2014;16(47):26004–26015. DOI: 10.1039/C4CP02575J.
10. Ahmadpoor F, Sharma P. Flexoelectricity in two-dimensional crystalline and biological membranes. *Nanoscale*. 2015;7(40):16555–16570. DOI: 10.1039/C5NR04722F.
11. Dumitrică T, Landis CM, Yakobson BI. Curvature-induced polarization in carbon nanoshells. *Chemical Physics Letters*. 2002;360(1–2):182–188. DOI: 10.1016/S0009-2614(02)00820-5.
12. Poklonski NA, Ratkevich SV, Vyrko SA, Vlassov AT, Hieu NN. Quantum chemical calculation of reactions involving C_{20} , C_{60} , graphene and H_2O . *International Journal of Nanoscience*. 2019;18(3–4):1940008. DOI: 10.1142/S0219581X19400088.
13. Lebedeva IV, Popov AM, Knizhnik AA, Lozovik YE, Poklonski NA, Siahlo AI, et al. Tunneling conductance of telescopic contacts between graphene layers with and without dielectric spacer. *Computational Materials Science*. 2015;109:240–247. DOI: 10.1016/j.commatsci.2015.07.006.

14. Xiang Q, Yu J. Graphene-based photocatalysts for hydrogen generation. *The Journal of Physical Chemistry Letters*. 2013;4(5):753–759. DOI: 10.1021/jz302048d.
15. Kamat PV, Bisquert J. Solar fuels. Photocatalytic hydrogen generation. *The Journal of Physical Chemistry C*. 2013;117(29):14873–14875. DOI: 10.1021/jp406523w.
16. Yakovlev AG, Shuvalov VA. Physical stage of photosynthesis charge separation. *Physics – Uspekhi*. 2016;59(6):531–557. DOI: 10.3367/UFNe.2016.02.037701.
17. Poklonski NA, Ratkevich SV, Vyrko SA, Vlassov AT. Thermochemistry modeling of hydrogen and water influence on C_{20} cage decay. In: Burakov VS, Filatova II, Usachonak MS, editors. *Plasma physics and plasma technology (PPPT-8). Contributed papers of VIII International conference; 2015 September 14–18; Minsk, Belarus. Volume I*. Minsk: Kovcheg; 2015. p. 177–180.
18. Poklonski NA, Ratkevich SV, Vyrko SA, Vlassov AT. [Quantum-chemical calculation of the reactions of fullerenes C_{20} and C_{60} with molecules of hydrogen, chlorine and water]. In: Vityaz' PA, Penyaz'kov OG, Filatov SA, Shpilevskii EM, editors. *Nanostruktury v kondensirovannykh sredakh* [Nanostructures in condensed matter]. Minsk: [s. n.]; 2016. p. 477–483. Russian.
19. Mazarov P, Dudnikov VG, Tolstoguzov AB. Electrohydrodynamic emitters of ion beams. *Physics – Uspekhi*. 2020;63(12):1219–1255. DOI: 10.3367/UFNe.2020.09.038845.
20. Kotelnikov IA, Astrelin VT. Theory of a plasma emitter of positive ions. *Physics – Uspekhi*. 2015;58(7):701–718. DOI: 10.3367/UFNe.0185.201507c.0753.
21. Barendolts SA, Mesyats GA. Explosive emission processes in thermonuclear facilities with magnetic plasma confinement and in linear electron-positron colliders. *Physics – Uspekhi*. 2023;66(7):704–721. DOI: 10.3367/UFNe.2022.02.039163.
22. Eidelman ED, Arkhipov AV. Field emission from carbon nanostructures: models and experiment. *Physics – Uspekhi*. 2020;63(7):648–667. DOI: 10.3367/UFNe.2019.06.038576.
23. Poklonski NA, Siahlo AI, Vyrko SA, Ratkevich SV, Vlassov AT. Model of field electron emission from the edge of flat graphene into vacuum. *Devices and Methods of Measurements*. 2019;10(1):61–68. Russian. DOI: 10.21122/2220-9506-2019-10-1-61-68.
24. Goryaev FF. [Single-electron charge exchange in collisions of fast ions with molecular hydrogen in the representation of the impact parameter]. *Zhurnal eksperimental'noi i teoreticheskoi fiziki*. 2023;164(3):349–364. Russian.
25. Latypov ZZ. Possibility for separation of polarizable molecules using electric fields. *Technical Physics*. 2014;59(6):808–812. DOI: 10.1134/S1063784214060140.
26. Gao X, Wang Y, Liu X, Chan T-L, Irle S, Zhao Y, et al. Regioselectivity control of graphene functionalization by ripples. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 2011;13(43):19449–19453. DOI: 10.1039/C1CP22491C.
27. Rut'kov EV, Afanas'eva EY, Gall NR. Graphene and graphite work function depending on layer number on Re. *Diamond and Related Materials*. 2020;101:107576. DOI: 10.1016/j.diamond.2019.107576.
28. Klavysyuk AL, Saletsky AM. Formation and properties of metallic atomic contacts. *Physics – Uspekhi*. 2015;58(10):933–951. DOI: 10.3367/UFNe.0185.201510a.1009.
29. Perrin ML, Frisenda R, Koole M, Seldenthuis JS, Gil JAC, Valkenier H, et al. Large negative differential conductance in single-molecule break junctions. *Nature Nanotechnology*. 2014;9(10):830–834. DOI: 10.1038/nnano.2014.177.
30. Smirnov BM. The Sena effect. *Physics – Uspekhi*. 2008;51(3):291–293. DOI: 10.1070/PU2008v051n03ABEH006542.
31. Massey HSW. *Negative ions*. 3rd edition. Cambridge: Cambridge University Press; 1976. XVIII, 742 p. (Cambridge monographs on physics).
32. Buchel'nikova NS. [Negative ions]. *Uspekhi fizicheskikh nauk*. 1958;65(3):351–385. Russian. DOI: 10.3367/UFNr.0065.195807a.0351.
33. Linstrom PJ, Mallard WG, editors. *NIST Chemistry WebBook: NIST standard reference database number 69* [Internet]. Gaithersburg: National Institute of Standards and Technology. [1996]–. Gas phase ion energetics data; [updated 2023 January; cited 2023 September 7]. Available from: <https://webbook.nist.gov/chemistry/>.
34. Li J, Niesner D, Fauster T. Negative electron affinity of adamantane on Cu (111). *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2021;33(13):135001. DOI: 10.1088/1361-648X/abd99a.
35. Stewart JJP. Optimization of parameters for semiempirical methods VI: more modifications to the NDDO approximations and re-optimization of parameters. *Journal of Molecular Modeling*. 2013;19(1):1–32. DOI: 10.1007/s00894-012-1667-x.

ФИЗИКА ЯДРА И ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ

ATOMIC NUCLEUS AND ELEMENTARY PARTICLE PHYSICS

УДК 539.1

ИСТОЧНИК ЖЕСТКИХ ГАММА-КВАНТОВ НА ОСНОВЕ ИЗЛУЧЕНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ И ПОЗИТРОНОВ В ПОЛЕ ПЛОСКОСТИ АТОМНЫХ ЦЕПОЧЕК

В. В. ТИХОМИРОВ¹⁾

¹⁾Институт ядерных проблем БГУ, ул. Бобруйская, 11, 220006, г. Минск, Беларусь

Коррелированные столкновения быстрых частиц с атомами кристаллической решетки приводят к когерентному усилению их рассеяния и излучения. Эффективные кристаллические поля при этом на 3–4 порядка превышают поля магнитных ондуляторов и могут конкурировать с ними по интенсивности излучения при длинах кристаллов, меньших на 2–3 порядка и более, а по частоте излучения превосходить их в сотни, тысячи раз и более. В частности, основанные на излучении электронов в кристаллах источники гамма-квантов с энергией несколько гигаэлектронвольт уже много лет применяются для исследования свойств мезонов. Для повышения интенсивности излучения недавно предложено использовать источник на основе короткопериодических кристаллических ондуляторов и начата разработка технологии их производства. В противовес этому в настоящей работе предлагается источник того же спектрального диапазона на основе излучения в поле плоскостей, образуемых атомными цепочками кристалла, не подверженного никакой деформации. Данный режим движения частиц относительно кристаллической решетки, введенный Й. Линдхардом под названием *string of strings*, позволяет одновременно использовать когерентное усиление излучения интенсивными полями атомных цепочек и упорядоченное движение частиц в режиме плоскостного каналирования. В качестве примера рассматривается излучение электронов и позитронов с энергией 10 ГэВ в поле оси $\langle 111 \rangle$ и плоскости (110) кристаллов алмаза толщиной 100–1000 мкм. Для расчета характеристик

Образец цитирования:

Тихомиров ВВ. Источник жестких гамма-квантов на основе излучения электронов и позитронов в поле плоскости атомных цепочек. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика*. 2023;3:65–74.
EDN: ORTTJI

For citation:

Tikhomirov VV. Hard gamma-quanta source based on the electron and positron radiation in the field of planes formed by atomic chains. *Journal of the Belarusian State University. Physics*. 2023;3:65–74. Russian.
EDN: ORTTJI

Автор:

Виктор Васильевич Тихомиров – доктор физико-математических наук, профессор; главный научный сотрудник отраслевой лаборатории радиационной безопасности.

Author:

Viktor V. Tikhomirov, doctor of science (physics and mathematics), full professor; chief researcher at the laboratory of radiation safety.
vvtikh@mail.ru



излучения применяется свободный от ряда распространенных приближений метод моделирования, прошедший десятилетнюю проверку в ряде экспериментов в Европейском центре ядерных исследований и на микротроне Майнцского университета имени Иоганна Гутенберга. Результаты расчета показывают, что по интенсивности излучения предложенный источник не уступает источнику на основе короткопериодического кристаллического ондулятора, но при этом он может быть реализован без каких-либо принципиальных задержек.

Ключевые слова: излучение; электроны; позитроны; гамма-кванты; релятивистские частицы; каналирование частиц в кристаллах; когерентное излучение частиц в кристаллах.

HARD GAMMA-QUANTA SOURCE BASED ON THE ELECTRON AND POSITRON RADIATION IN THE FIELD OF PLANES FORMED BY ATOMIC CHAINS

V. V. TIKHOMIROV^a

^a*Institute for Nuclear Problems, Belarusian State University,
11 Babrujskaja Street, Minsk 220006, Belarus*

Correlated collisions of fast particles with crystal lattice atoms lead to a coherent enhancement of both their scattering and radiation. At the same time, the effective crystal fields are 3–4 orders of magnitude superior to the fields of magnetic undulators and can compete with them in radiation intensity at crystal lengths smaller by tens and hundreds of thousands of times, and surpass them in radiation frequency by 2–3 orders and more. In particular, sources of gamma rays with energies of several gigaelectronvolts based on the emission of electrons in crystals have long been used to study the properties of mesons. To increase their intensity, it was proposed recently to use a source based on short-period crystalline undulators, and the development of a technology for their production has begun. In contrast, this paper proposes a source of the same spectral range based on radiation in the field of planes formed by atomic chains of a crystal that is not subject to any deformation. Introduced by J. Lindhard under the name of *string of strings*, this mode of particle motion relative to the crystal lattice allows for the simultaneous usage of both the coherent amplification of radiation by intense fields of atomic chains and planar channeling that regulates particle motion. As an example, we consider the radiation of electrons and positrons with the energy of 10 GeV in the field of the $\langle 111 \rangle$ axis and (110) plane of diamond crystals with thicknesses of 100–1000 μm . To calculate the radiation characteristics, a simulation method is applied, free from a number of commonly used approximations, which has been verified in multiple experiments in the last decade at the European Organisation for Nuclear Research and at the microtron of the Johannes Gutenberg University of Mainz. The simulation results show that the intensity of the proposed source is not inferior to the intensity of radiation in a short-period crystalline undulator, which makes it possible to implement such a source without any delays.

Keywords: radiation; electrons; positrons; gamma-quanta; relativistic particles; particle channeling in crystals; coherent particle radiation in crystals.

Введение

В 1950-х гг. было установлено, что коррелированные столкновения быстрых частиц с атомами кристаллической решетки приводят к когерентному усилению их рассеяния и излучения [1]. Уникальность протекания этих процессов в кристаллах обусловлена тем, что эффективные кристаллические поля на 3–4 порядка превышают поля магнитных ондуляторов и могут конкурировать с ними по интенсивности излучения при длинах кристаллов, меньших во много тысяч раз, а по частоте излучения превосходить их в тысячи раз и более [2].

Механизмы и диапазоны излучения электронов (e^-) и позитронов (e^+) в кристаллах могут существенно варьироваться как путем изменения направления падения частиц на кристаллическую решетку, так и посредством ее, как правило, периодической деформации. В отсутствие последней электроны и позитроны могут интенсивно излучать в режиме когерентного тормозного излучения (КТИ) [1], а также осевого и плоскостного каналирования [2; 3]. Высокая устойчивость каналирования позитронов открывает возможность существенного повышения интенсивности их излучения по сравнению с интенсивностью излучения электронов. Именно эффект каналирования позволяет реализовать концепцию кристаллического ондулятора [2; 4–6] в периодически деформированных кристаллах, дополнительно расширяющую спектральный диапазон когерентного излучения. Период деформации кристалла, играющий роль периода кристаллического ондулятора, может быть как значительно больше [2; 4–6], так и намного меньше [7]

периода каналирования. Короткопериодические ондуляторы позволяют генерировать наиболее жесткое когерентное излучение в ограниченной спектральной полосе и диапазоне энергий гамма-квантов 1 ГэВ и более, давно применяемое для исследования структуры нуклонов в Лаборатории имени Джефферсона (*Jefferson Lab, JLab*) [8]. В указанном диапазоне уже используется КТИ в достаточно тонком кристалле (в работе [8] толщина кристалла составляет всего 20 мкм), позволяющем применять для простого теоретического описания приближение прямолинейных траекторий. Для более мощной генерации в мишенях миллиметровой толщины, требующей применения более развитых теоретических подходов, в последнее время предлагалось использовать излучение в плотной плазме [9] и короткопериодических ондуляторах [10], экспериментальная реализация которого в обоих случаях является значительным технологическим вызовом.

В противовес этому в данной работе предлагается не менее эффективный источник того же жесткого спектрального диапазона на основе излучения в поле плоскостей, образуемых цепочками атомов кристалла, не подверженной никакой деформации. Соответствующая ориентация направления движения частиц относительно кристаллической решетки, способствующая максимальному проявлению ориентационных эффектов, была введена в обиход еще в исторической статье [3] под названием *string of strings*, которое будем переводить как *последовательность атомных цепочек*. Для расчета характеристик излучения в кристаллах значительной толщины, требующего выхода за рамки приближения прямолинейных траекторий [1] и учета эффекта каналирования позитронов [2; 3], ниже используется метод моделирования [11–15], проверенный в ряде экспериментов в ведущих мировых ускорительных центрах [16–19].

Направление падения электронов и позитронов на решетку кристалла

Взаимодействие быстрых частиц с ориентированными кристаллами и другими упорядоченными атомными структурами описывается эффективными полями, получаемыми усреднением полей атомов в направлении кристаллической оси или плоскости [2; 3]. Поскольку частота близких столкновений с атомами цепочек почти на порядок превышает среднюю частоту столкновений с атомами плоскостей, эффективные поля и соответствующие им усредненные электрические потенциалы первых более чем в 5 раз превосходят аналогичные параметры вторых, составляя около 10^{11} В/см, что на несколько порядков больше, чем у любых лабораторных полей.

Уступая по напряженности полям цепочек, атомные плоскости позволяют, однако, более эффективно управлять движением частиц в режиме плоскостного каналирования. Путем подбора направления падения частиц на кристаллическую ось и проходящую через нее плоскость удастся совместить использование интенсивного осевого поля с упорядочивающим движение частиц действием поля плоскостей [3; 11]. Для эффективного захвата частиц в режим каналирования углы их падения на плоскости θ_x (рис. 1) должны быть порядка угла плоскостного каналирования, а еще лучше в несколько раз меньше его. Угол же падения на ось θ_y следует, с одной стороны, уменьшать для увеличения длительности действия интенсивного поля отдельных цепочек, а с другой стороны, ограничивать снизу, чтобы рассеяние на отдельных цепочках не нарушало устойчивости плоскостного каналирования. При соблюдении баланса этих требований скорость каналирующих частиц на значительных участках траекторий будет претерпевать существенную высокочастотную модуляцию, аналогичную той, что создается короткопериодическими кристаллическими ондуляторами [7], для изготовления которых необходима разработка специальной технологии модификации свойств кристаллической решетки.

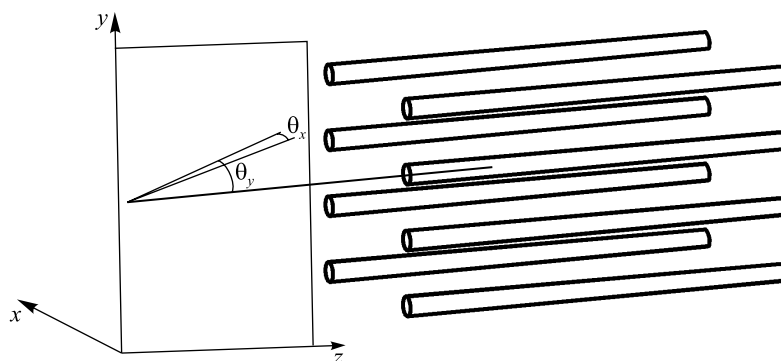


Рис. 1. Геометрия падения электронов и позитронов под углами θ_x и θ_y на семейство атомных плоскостей и образующих их цепочек

Fig. 1. Geometry of both electron and positron incidence at angles θ_x and θ_y on atomic planes and the chains that form them

Описанные требования могут быть реализованы в широком диапазоне энергий электронов и позитронов и направлений их падения на решетки различных кристаллов. Однако, поскольку эксперименты по излучению электронов и позитронов высоких энергий в ориентированных кристаллах предусмотрены лишь в нескольких ускорительных центрах, следуя работе [10], будем рассматривать в качестве примера ускорительный комплекс FACET [20]. Эксперименты по излучению электронов в кристаллах на этом комплексе ставились ранее [21], а в настоящее время на нем проводится модернизация, которая обеспечит проведение экспериментов и с пучками позитронов [22]. В соответствии с выполняемыми экспериментальными исследованиями [9; 20] и новыми проектами [9; 10] будем рассматривать излучение электронов и позитронов с энергией 10 ГэВ.

Ставя задачу оценить максимальные параметры предлагаемого источника, естественно выбрать для его реализации кристалл алмаза. Особые преимущества данного кристалла связаны с рекордной атомной концентрацией и малым атомным номером образующего его углерода, обуславливающими наибольшее превышение когерентных эффектов над некогерентными как в рассеянии, так и в излучении. Заметим, что масштаб экспериментов в физике высоких энергий позволяет не останавливаться перед использованием кристаллов алмаза даже весьма значительного объема [23].

Выбирая направление падения частиц на кристаллическую решетку, следует исходить из требований максимальной величины усредненных полей и простоты их пространственного поведения, которые приводят к выбору оси $\langle 111 \rangle$ и плоскости (110), являющемуся оптимальным не только для решетки типа алмаза, но и для объемноцентрированной кубической решетки вольфрама, играющего большую роль в исследованиях эффектов электродинамики сильного поля в кристаллах. При выбранном кристаллографическом направлении и энергии частиц 10 ГэВ характерные углы осевого и плоскостного каналирования составляют $\theta_{0ax} \approx 160$ мкрад и $\theta_{opl} \approx 65$ мкрад соответственно. Последний из них близок к характерному углу излучения $\frac{1}{\gamma} \approx 50$ мкрад, который естественно будет выбран в качестве угла коллимации излучения [10]. Исходя из величины угла θ_{opl} , для обеспечения значительной вероятности захвата частиц в режим плоскостного каналирования выбрано следующее значение среднеквадратичного угла падения частиц на плоскость: $\Delta\theta_x \approx 20$ мкрад. Поскольку величина угла θ_{0ax} существенно превышает величину угла θ_{opl} , угол падения частиц на ось должен быть достаточно большим для того, чтобы отклонение в полях отдельных цепочек фатально не возмущало процесс плоскостного каналирования. Моделирование захвата частиц в режим плоскостного каналирования при влете в кристалл привело к выбору значения $\theta_y \approx 300$ мкрад. Поскольку частота столкновений частиц с цепочками обратно пропорциональна углу θ_y падения на них (см. рис. 1), изменение последнего обеспечивает перестройку частоты излучения в широком интервале. Значение $\theta_y \approx 300$ мкрад как раз соответствует равенству энергии пика когерентного излучения 1,5 ГэВ (данное значение энергии рассматривается в качестве примера в работе [10] и настоящей статье). Отметим также, что этот способ перестройки частоты излучения реализуется при использовании единственного кристалла в противовес необходимости применения для достижения аналогичной цели определенного числа кристаллических ондуляторов с различными периодами [10]. Помимо варьирования периода осцилляций траекторий излучающих частиц, широкие возможности перестройки частоты обеспечиваются также изменением энергии излучающих частиц.

Моделирование движения электронов и позитронов

Следует отметить, что даже описание движения релятивистских частиц в кристаллах до учета излучения еще не нашло общепринятого толкования. Проблема в том, что на фоне не вызывающего принципиальных разночтений описания движения в усредненном потенциале необходимо рассматривать также возмущающее его некогерентное рассеяние частиц на отдельных ядрах и электронах атомов кристалла, обычно моделируемое с использованием формул для аморфной среды без учета влияния неравномерного распределения атомных ядер и электронов. При описании некогерентного рассеяния в кристаллах автор исходит из качественного отличия рассеяния на «малые» и «большие» углы [11]. Под последними здесь понимаются углы, уже при однократном отклонении на которые движение частиц в усредненном потенциале, в частности процесс каналирования, существенно изменяется. Например, происходит мгновенное деканалирование либо захват в режим каналирования (реканалирование) [17]. Такие процессы редки, они описываются на основе произведения резерфордского сечения на локальную плотность ядер или электронов и являются весьма удобными для моделирования методом Монте-Карло, давно осуществляемого автором [11]. Тем не менее подобные процессы игнорируются, начиная с более ранних публикаций [24; 25] и заканчивая публикациями последних лет [26]. Сопутствующее этому необоснованное включение вклада таких процессов в средний квадрат угла некогерентного рассеяния каналированных

частиц приводит к его завышению в несколько раз [25], которое приходится компенсировать искусственными методами [24–26], принципиально искажая при этом координатную зависимость локальной интенсивности некогерентного рассеяния.

Используемый же автором подход (см. [11–15]) заключается в раздельном рассмотрении рассеяния на «малые» и «большие» углы. Рассеяние на «малые» углы носит характер квазинепрерывной диффузии по поперечному импульсу и энергии. На фоне всей традиционности выделения диффузного процесса рассеяния было обнаружено [14], что рассеяние на «малые» углы в условиях неравномерного распределения рассеивателей в кристалле не всегда удается описать в терминах вероятности или сечения рассеяния. Предложенное автором решение этой проблемы основано на введении средних квадратов углов рассеяния на «малые» углы, положительная величина которых обеспечивается выбором границы между «малыми» и «большими» углами [14].

Результаты моделирования траекторий электронов и позитронов в выбранных условиях падения на кристалл представлены на рис. 2, демонстрирующем проявление влияния осевого потенциала в условиях плоскостного каналирования. Нетрудно заметить, что плоскостное каналирование позитронов обладает гораздо большей устойчивостью, чем плоскостное каналирование электронов, часто не нарушаясь даже на длине 500 мкм, в то время как электроны деканалируют сразу после попадания в кристалл либо после захвата в режим каналирования внутри него [18] на длине около 10 мкм. Более детальное представление траекторий на рис. 2, б, г, иллюстрирует кратковременное ускорение частиц в полях атомных цепочек на близких к вертикальным участках кривых. Отклонение на этих участках достигает половины угла плоскостного каналирования ($\frac{\theta_{opl}}{2} \approx 30$ мкрад), что обеспечивает значительную интенсивность излучения в поле цепочек при небольшом падении устойчивости плоскостного каналирования.

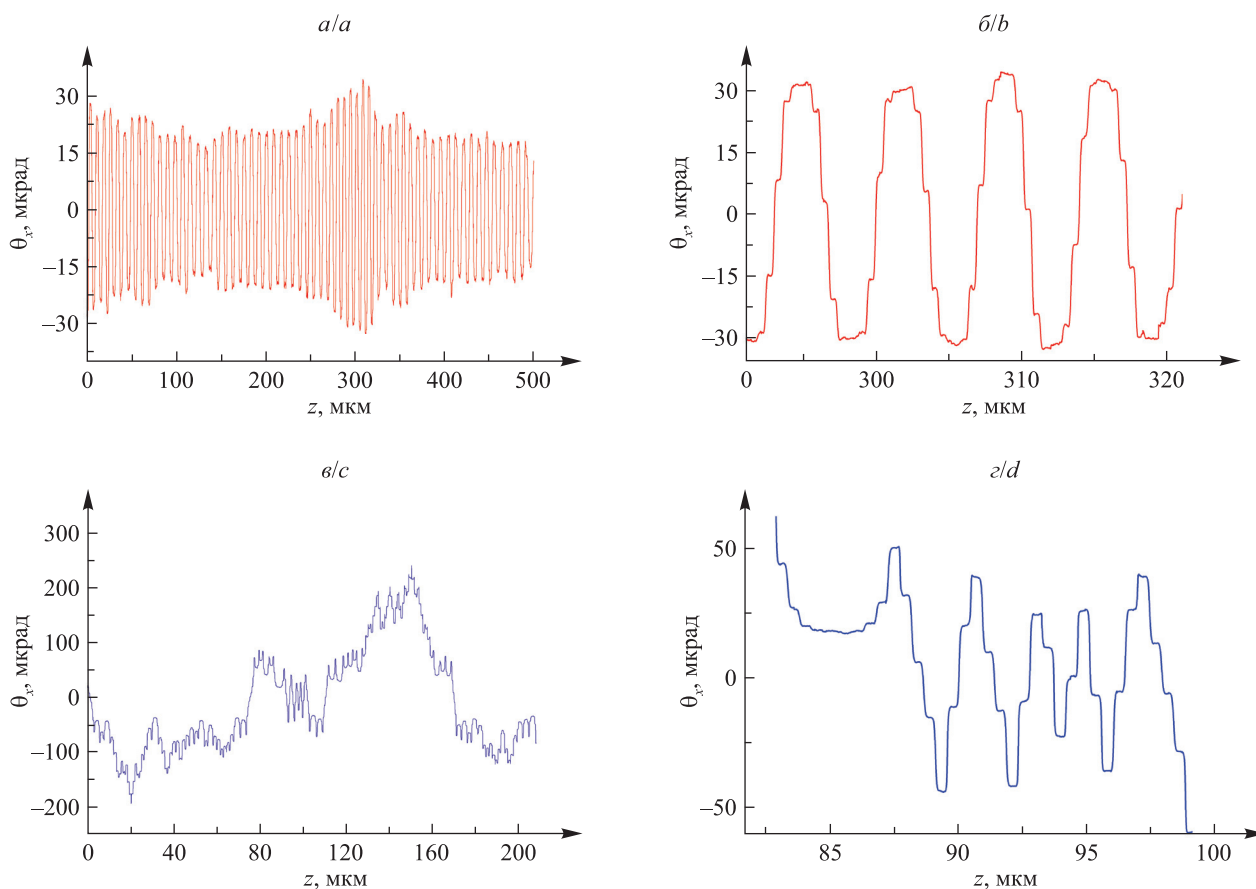


Рис. 2. Представленные в разных масштабах зависимости поперечной компоненты скорости позитрона (а, б) и электрона (в, г) с энергией 10 ГэВ от продольной координаты

Fig. 2. Dependences of the transverse component of the velocity of a positron (a, b) and an electron (c, d) with an energy of 10 GeV on the longitudinal coordinate presented on different scales

Спектры излучения электронов и позитронов

Траектории частиц, которые были получены методами, изложенными в работах [11–16], использовались для расчета вероятности излучения методом Байера – Каткова [27] по формулам (применяется система единиц $\hbar = c = 1$)

$$\frac{d^2 N}{d\omega d^2\theta} = \frac{\alpha\omega}{8\pi^2\varepsilon'^2} \left[\omega^2 |A|^2 \gamma^{-2} + (\varepsilon + \varepsilon') |\vec{B}|^2 \right], \quad (1)$$

$$A = \int_{-\infty}^{\infty} \exp\{i\varphi(t)\} dt, \quad \vec{B} = \int_{-\infty}^{\infty} (\vec{v}_{\perp}(t) - \vec{\theta}) \exp\{i\varphi(t)\} dt, \quad (2)$$

$$\varphi(t) = \int_0^t \dot{\varphi}(t') dt' = \frac{\varepsilon}{\varepsilon'} (\omega t - \vec{k}\vec{r}) = \frac{\omega'}{2} \int_0^t \left[\gamma^{-2} + (\vec{v}_{\perp}(t') - \vec{\theta})^2 \right] dt', \quad (3)$$

$$\omega' = \frac{\omega\varepsilon}{\varepsilon'}, \quad \varepsilon' = \varepsilon - \omega, \quad (4)$$

где ε и γ – энергия и лоренц-фактор электрона или позитрона; ω и \vec{k} – энергия и импульс испускаемого фотона; $\vec{\theta}$ и $\vec{v}_{\perp}(t)$ – поперечные компоненты единичного вектора направления импульса фотона и скорости электрона или позитрона в момент времени t . Отличие формул (1)–(4) от соответствующих формул классической электродинамики заключается в появлении слагаемого $\omega^2 |A|^2 \gamma^{-2}$ в формуле (1) и перенормированной частоты излучения $\omega' = \frac{\omega\varepsilon}{\varepsilon'}$ в фазе (3) интегралов (2).

Центральным элементом данного подхода является отдельное описание вкладов в вероятность излучения резких отклонений при некогерентном рассеянии и плавных отклонений при когерентном рассеянии. Некогерентные вклады рассматриваются как вклады границ при интегрировании по частям в пределах небольших участков траектории. Когерентные вклады рассчитываются аналитически в приближении однородного поля как элементарные интегралы по тем же участкам, что позволяет обеспечить их корректное поведение при энергиях гамма-квантов, приближающихся к энергии излучающей частицы, не требуя при этом связанного с обеспечением необходимой точности численного интегрирования радикального сокращения длин участков пропорционально резко убывающей при $\omega \rightarrow \varepsilon$ когерентной длине

$l_{\text{coh}} = \frac{1}{\dot{\varphi}(t)} \propto \varepsilon - \omega$. В качестве обсуждаемых участков траектории в областях больших полей и высоких концентраций ядер естественно использовать шаги расчета траекторий. В областях же малых полей и низких концентраций ядер для ускорения расчетов можно выбирать более крупные участки, получаемые объединением шагов расчета траектории. После выделения когерентного и некогерентного вкладов интегралы (2) принимают вид

$$\begin{aligned} A &= \int_{-\infty}^{\infty} \exp\{i\varphi(t)\} dt = \\ &= i \sum_{i=1}^N \left\{ \left[\frac{1}{\dot{\varphi}(t_i+0)} - \frac{1}{\dot{\varphi}(t_i-0)} \right] \exp i\varphi(t_i) - \frac{2\ddot{\varphi}(\bar{t}_i)}{\dot{\varphi}^3(\bar{t}_i)} \sin \left[\frac{\varphi(t_i-0) - \varphi(t_{i-1}+0)}{2} \right] \exp i\varphi(\bar{t}_i) \right\}, \\ \vec{B} &= \int_{-\infty}^{\infty} [\vec{v}_{\perp}(t) - \vec{\theta}] \exp\{i\varphi(t)\} dt = \\ &= i \sum_{i=1}^N \left\{ \left[\frac{\vec{v}_{\perp}(t_i) + \vec{\theta}_i - \vec{\theta}}{\dot{\varphi}(t_i+0)} - \frac{\vec{v}_{\perp}(t_i) - \vec{\theta}}{\dot{\varphi}(t_i-0)} \right] \exp i\varphi(t_i) - \right. \\ &\quad \left. - \frac{2}{\dot{\varphi}^2(\bar{t}_i)} \left[\dot{\vec{v}}_{\perp}(\bar{t}_i) - (\vec{v}_{\perp}(\bar{t}_i) - \vec{\theta}) \frac{\ddot{\varphi}(\bar{t}_i)}{\dot{\varphi}(\bar{t}_i)} \right] \sin \left[\frac{\varphi(t_i-0) - \varphi(t_{i-1}+0)}{2} \right] \exp i\varphi(\bar{t}_i) \right\}, \end{aligned}$$

где $\ddot{\varphi}(t) = \omega' (\vec{v}_{\perp}(t) - \vec{\theta}) \dot{\vec{v}}_{\perp}(t)$, $\bar{t}_i = \frac{t_i + t_{i-1}}{2}$, а также введены производные фазы (3) слева и справа от границы каждого участка траектории

$$\dot{\phi}(t_i - 0) = \frac{\omega'}{2} \left[\gamma^{-2} + (\bar{v}_\perp(t_i) - \bar{\theta})^2 \right],$$

$$\dot{\phi}(t_i + 0) = \frac{\omega'}{2} \left[\gamma^{-2} + (\bar{v}_\perp(t_i) + \bar{\theta}_i - \bar{\theta})^2 \right].$$

Пренебрегаем здесь как преломлением фотонов, так и влиянием границ кристалла, которые для рассматриваемого жесткого излучения играют гораздо меньшую роль, чем для мягкого излучения (подробнее см. [28]).

Результаты моделирования спектров излучения электронов и позитронов в изображенной на рис. 1 геометрии падения частиц на кристаллическую решетку при угле коллимации излучения $\frac{1}{\gamma} = 50$ мкрад и толщине кристалла 100; 200; 400 и 1000 мкм представлены на рис. 3 и 4, по оси ординат которых отложена энергия излучаемых фотонов в гигаэлектронвольтах. Для визуального выравнивания жесткой и мягкой областей спектров по оси абсцисс на рис. 3 традиционно отложена спектральная интенсивность излучения, полученная домножением спектрального распределения вероятности излучения на энергию фотонов. Общий вид спектров, представленных на рис. 3, позволяет сравнить интенсивности излучения в кристаллах различной толщины, а также их величины в мягкой и жесткой областях спектров. Именно излучение в жесткой области спектра ($\omega \approx 1,5$ ГэВ) является центральным предметом данной статьи, ставящей задачу разработки интенсивного источника гамма-квантов на основе излучения электронов и позитронов в поле последовательностей атомных цепочек для исследований свойств мезонов [8].

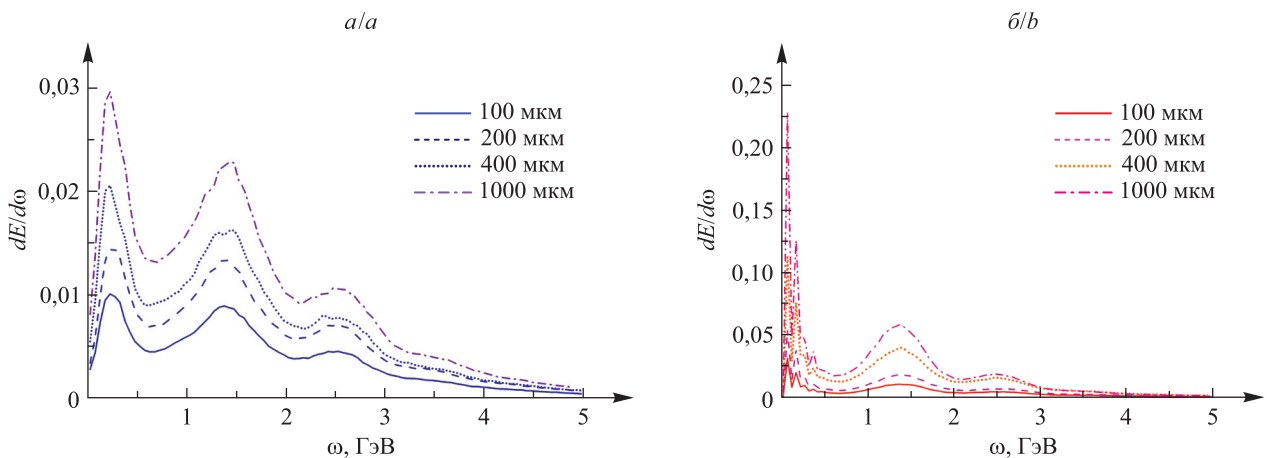


Рис. 3. Спектральное распределение энергии излучения электронов (а) и позитронов (б) с энергией 10 ГэВ в кристаллах толщиной 100; 200; 400 и 1000 мкм

Fig. 3. Spectral radiation energy distribution of electrons (a) and positrons (b) with an energy of 10 GeV in crystals with a thickness of 100; 200; 400 and 1000 μm

Излучение в мягкой области спектра ($\omega < 0,5$ ГэВ) представляет собой известное излучение при каналировании. Поскольку оно не является основным предметом данной статьи, заметим только, что значительно большая интенсивность излучения позитронов обуславливается высокой устойчивостью движения положительно заряженных частиц в режиме каналирования. Сравнение мягкой и жесткой областей спектров излучения как электронов, так и позитронов отражает обычный рост интенсивности когерентных эффектов в излучении, связанный с увеличением длины когерентности вместе с длиной волны.

Приведенные результаты расчетов для кристалла алмаза толщиной 100 мкм можно непосредственно сравнить с результатами, представленными на рис. 5 в работе [10] для кристаллического алмазного ондулятора толщиной 96 мкм с периодом 600 нм и амплитудой 0,3 Å и той же энергии частиц (10 ГэВ). Нетрудно видеть, что наши предсказания высоты жесткого пика спектра превышают предсказания работы [10] на 20–30 %. Однако, поскольку на самом деле степень этого превышения может достаточно легко варьироваться различными способами, в первую очередь путем изменения амплитуды (для кристаллического ондулятора) и направления падения частиц на ось (для рассматриваемого нами обычного кристалла), более принципиально то, что в отличие от источника, описанного в работе [10], предлагаемый источник не требует разработки специальной технологии изготовления кристаллических ондуляторов. Также стоит отметить, что в публикации [10] толщина ондулятора 96 мкм являлась максимальной для

проведения расчетов на суперкомпьютерном кластере, в то время как используемый в данной статье метод позволяет проводить расчеты для миллиметрового кристалла на персональном компьютере. Сравнение с интенсивностью излучения Бете – Гайтлера, дающей оценку интенсивности излучения в аморфной мишени, показывает, что последняя начинает превышать интенсивность когерентного излучения как электронов, так и позитронов, начиная с энергий 3–4 ГэВ, тем самым демонстрируя улучшение фоновых условий в жесткой области спектра в случае использования кристаллических источников излучения.

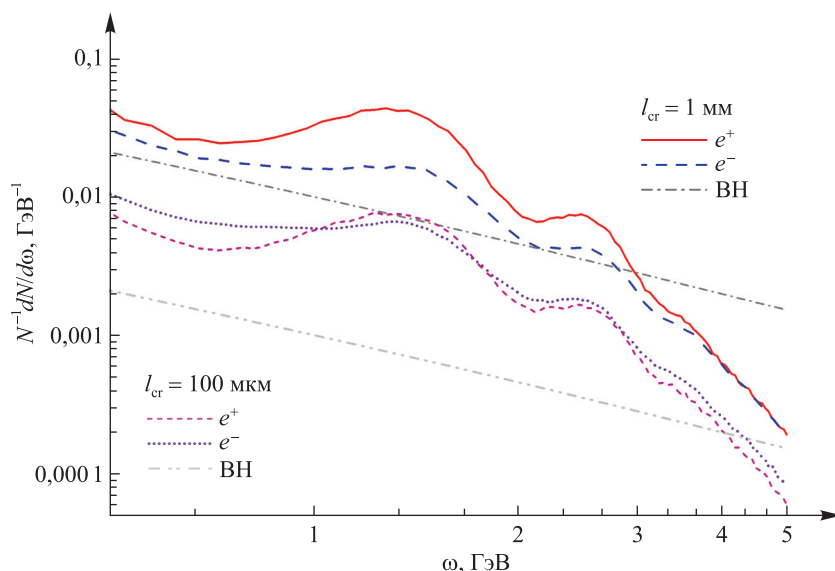


Рис. 4. Спектры излучения электронов и позитронов с энергией 10 ГэВ в кристаллах и аморфной мишени (ВН – соответствующий спектр излучения Бете – Гайтлера) толщиной (l_{cr}) 100 мкм и 1 мм

Fig. 4. Emission spectra of electrons and positrons with an energy of 10 GeV in crystals and an amorphous target (BH – corresponding Bethe – Heitler radiation spectrum) with a thickness (l_{cr}) of 100 μm and 1 mm

На рис. 4 можно более детально сравнить излучение электронов и позитронов в области когерентного жесткого пика спектра излучения частиц в кристаллах толщиной 100 мкм и 1 мм. В частности, высота пика сплошной кривой говорит о том, что в десятипроцентном интервале энергий фотонов вблизи 1,5 ГэВ в кристалле длиной 1 мм можно получить 0,0034 гамма-кванта в расчете на один позитрон. Также не трудно видеть, что при толщине кристалла 100 мкм интенсивность излучения позитронов превышает интенсивность излучения электронов примерно на 10 %, а при толщине кристалла 1 мм – более чем в 2 раза, что отражает влияние уменьшения скорости нарастания угловой расходимости пучка позитронов вследствие многократного рассеяния в условиях устойчивого каналирования. Превышение пиковой интенсивности при толщине кристаллов 100 мкм составляет примерно порядок величины, однако при толщине кристалла 1 мм оно уменьшается до 2 раз у электронов и 6 раз у позитронов, что также объясняется влиянием на излучение нарастания угловой расходимости пучков этих частиц вследствие многократного рассеяния. Благодаря данному обстоятельству ускорительные центры, предоставляющие позитронные пучки, позволяют реализовать более мощные источники гамма-квантов предложенной конструкции.

Заключение

Проведенные расчеты показали, что излучение гамма-квантов электронами и позитронами в условиях падения под малыми углами на одну из главных кристаллических осей и плоскостей позволяет создать перестраиваемый источник гамма-излучения гигаэлектронвольтового диапазона, превосходящий по интенсивности не только существующий источник на основе КТИ в тонком кристалле [8], но и предложенный в работе [10] инновационный источник на основе короткопериодического кристаллического ондулятора [7]. Кроме того, продемонстрировано, что ослабление некогерентного рассеяния в условиях каналирования делает использование в таком источнике позитронов более эффективным, чем использование электронов, позволяя в несколько раз увеличить длину кристалла и интенсивность жесткого излучения.

Библиографические ссылки

1. Тер-Микаелян МЛ. *Влияние среды на электромагнитные процессы при высоких энергиях*. Ереван: Издательство Академии наук Армянской ССР; 1969. 457 с.
2. Барышевский ВГ. *Каналирование, излучение и реакции в кристаллах при высоких энергиях*. Минск: Издательство БГУ; 1982. 255 с.
3. Линдхард Й. Влияние кристаллической решетки на движение быстрых заряженных частиц. *Успехи физических наук*. 1969;99(2):249–296. DOI: 10.3367/UFNr.0099.196910c.0249.
4. Baryshevsky VG, Tikhomirov VV. Crystal undulators: from the prediction to the mature simulations. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*. 2013;309:30–36. DOI: 10.1016/j.nimb.2013.03.013.
5. Bellucci S, Maishev VA. Radiation of relativistic particles for quasiperiodic motion in a transparent medium. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2006;18(33):S2083–S2093. DOI: 10.1088/0953-8984/18/33/S24.
6. Korol AV, Solov'yov AV, Greiner W. *Channeling and radiation in periodically bent crystals*. Berlin: Springer-Verlag; 2013. XI, 268 p. (Springer series on atomic, optical, and plasma physics; volume 69).
7. Kostyuk A. Crystalline undulator with a small amplitude and a short period. *Physical Review Letters*. 2013;110(11):115503. DOI: 10.1103/PhysRevLett.110.115503.
8. Corneliussen S. CERN set to double energy. *CERN Courier*. 2004;44(10):19–21.
9. Zhu Xing-Long, Chen Min, Weng Su-Ming, Yu Tong-Pu, Wang Wei-Min, He Feng, et al. Extremely brilliant GeV γ -rays from a two-stage laser-plasma accelerator. *Science Advances*. 2020;6(22):eaaz7240. DOI: 10.1126/sciadv.aaz7240.
10. Korol AV, Solov'yov AV. Atomistic modeling and characterization of light sources based on small-amplitude short-period periodically bent crystals. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. Section B, Beam Interactions with Materials and Atoms*. 2023;537:1–13. DOI: 10.1016/j.nimb.2023.01.012.
11. Tikhomirov VV. Simulation of multi-GeV electron energy losses in crystals. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. Section B, Beam Interactions with Materials and Atoms*. 1989;36(3):282–285. DOI: 10.1016/0168-583X(89)90670-8.
12. Тихомиров ВВ. О возможности наблюдения радиационной самополяризации и образования поляризованных e^+e^- -пар в кристаллах при доступных энергиях. *Письма в ЖЭТФ*. 1993;58(3):168–171.
13. Guidi V, Bandiera L, Tikhomirov V. Radiation generated by single and multiple volume reflection of ultrarelativistic electrons and positrons in bent crystals. *Physical Review A*. 2012;86(4):042903. DOI: 10.1103/PhysRevA.86.042903.
14. Tikhomirov VV. Quantum features of high energy particle incoherent scattering in crystals. *Physical Review Accelerators and Beams*. 2019;22(5):054501. DOI: 10.1103/PhysRevAccelBeams.22.054501. Erratum in: *Physical Review Accelerators and Beams*. 2020;23(3):039901. DOI: 10.1103/PhysRevAccelBeams.23.039901.
15. Тихомиров ВВ. Некогерентное рассеяние ультрарелятивистских частиц на ядрах при плоскостном каналировании. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика*. 2020;1:83–94. DOI: 10.33581/2520-2243-2020-1-83-94.
16. Тихомиров ВВ. Некогерентное рассеяние ультрарелятивистских каналированных частиц на электронах. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика*. 2021;3:49–61. DOI: 10.33581/2520-2243-2021-3-49-61.
17. Bandiera L, Bagli E, Guidi V, Mazzolari A, Berra A, Lietti D, et al. Broad and intense radiation accompanying multiple volume reflection of ultrarelativistic electrons in a bent crystal. *Physical Review Letters*. 2013;111(25):255502. DOI: 10.1103/PhysRevLett.111.255502.
18. Mazzolari A, Bagli E, Bandiera L, Guidi V, Backe H, Lauth W, et al. Steering of a sub-GeV electron beam through planar channeling enhanced by rechanneling. *Physical Review Letters*. 2014;112(13):135503. DOI: 10.1103/PhysRevLett.112.135503.
19. Bandiera L, Bagli E, Germogli G, Guidi V, Mazzolari A, Backe H, et al. Investigation of the electromagnetic radiation emitted by sub-GeV electrons in a bent crystal. *Physical Review Letters*. 2015;115(2):025504. DOI: 10.1103/PhysRevLett.115.025504.
20. Bandiera L, Tikhomirov VV, Romagnoni M, Argiolas N, Bagli E, Ballerini G, et al. Strong reduction of the effective radiation length in an axially oriented scintillator crystal. *Physical Review Letters*. 2018;121(2):021603. DOI: 10.1103/PhysRevLett.121.021603.
21. Yakimenko V, Alsberg L, Bong E, Bouchard G, Clarke C, Emma C, et al. FACET-II facility for advanced accelerator experimental tests. *Physical Review Accelerators and Beams*. 2019;22(10):101301. DOI: 10.1103/PhysRevAccelBeams.22.101301.
22. Wistisen TN, Mikkelsen RE, Uggerhøj UI, Wienands U, Markiewicz TW, Gessner S, et al. Observation of quasichanneling oscillations. *Physical Review Letters*. 2017;119(2):024801. DOI: 10.1103/PhysRevLett.119.024801.
23. Aryan A, Avakian RO, Badelek B, Ballestrero S, Biino C, Birol I, et al. Coherent bremsstrahlung, coherent pair production, birefringence, and polarimetry in the 20–170 GeV energy range using aligned crystals. *Physical Review Accelerators and Beams*. 2008;11(4):041001. DOI: 10.1103/PhysRevSTAB.11.041001.
24. Таратин АМ, Воробьев СА. Объемный захват протонов в режим каналирования в изогнутом кристалле. *Журнал технической физики*. 1985;55(8):1598–1604.
25. Biryukov VM, Chesnokov YA, Kotov VI. *Crystal channeling and its application at high-energy accelerators*. Berlin: Springer; 2010. XIV, 219 p. (Accelerator physics). DOI: 10.1007/978-3-662-03407-1.
26. Scandale W, Taratin AM. Channeling and volume reflection of high-energy charged particles in short bent crystals. Crystal assisted collimation of the accelerator beam halo. *Physics Reports*. 2019;815:1–107. DOI: 10.1016/j.physrep.2019.04.003.
27. Байер ВН, Катков ВМ, Страховенко ВМ. *Электромагнитные процессы при высокой энергии в ориентированных монокристаллах*. Скринский АН, редактор. Новосибирск: Наука; 1989. 395 с.
28. Tikhomirov VV. A benchmark construction of positron crystal undulator. arXiv:1502.06588v1 [Preprint]. 2015 [cited 2022 September 18]: [27 p.]. Available from: <https://arxiv.org/abs/1502.06588>.

References

1. Ter-Mikaelian ML. *Vliyanie sredy na elektromagnitnye protsessy pri vysokikh energiyakh* [Influence of the environment on electromagnetic processes at high energies]. Erevan: Publishing House of the Academy of Sciences of the Armenian SSR; 1969. 457 p. Russian.
2. Baryshevsky VG. *Kanalirovanie, izluchenie i reaktzii v kristallakh pri vysokikh energiyakh* [Channeling, radiation and reactions in crystals at high energies]. Minsk: Publishing House of the Belarusian State University; 1982. 255 p. Russian.

3. Lindhard J. [Influence of crystal lattice on motion of energetic charged particles]. *Uspekhi fizicheskikh nauk*. 1969;99(2):249–296. Russian. DOI: 10.3367/UFNr.0099.196910c.0249.
4. Baryshevsky VG, Tikhomirov VV. Crystal undulators: from the prediction to the mature simulations. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*. 2013;309:30–36. DOI: 10.1016/j.nimb.2013.03.013.
5. Bellucci S, Maishev VA. Radiation of relativistic particles for quasiperiodic motion in a transparent medium. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2006;18(33):S2083–S2093. DOI: 10.1088/0953-8984/18/33/S24.
6. Korol AV, Solov'yov AV, Greiner W. *Channeling and radiation in periodically bent crystals*. Berlin: Springer-Verlag; 2013. XI, 268 p. (Springer series on atomic, optical, and plasma physics; volume 69).
7. Kostyuk A. Crystalline undulator with a small amplitude and a short period. *Physical Review Letters*. 2013;110(11):115503. DOI: 10.1103/PhysRevLett.110.115503.
8. Corneliusen S. CEBAF set to double energy. *CERN Courier*. 2004;44(10):19–21.
9. Zhu Xing-Long, Chen Min, Weng Su-Ming, Yu Tong-Pu, Wang Wei-Min, He Feng, et al. Extremely brilliant GeV γ -rays from a two-stage laser-plasma accelerator. *Science Advances*. 2020;6(22):eaaz7240. DOI: 10.1126/sciadv.aaz7240.
10. Korol AV, Solov'yov AV. Atomistic modeling and characterization of light sources based on small-amplitude short-period periodically bent crystals. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. Section B, Beam Interactions with Materials and Atoms*. 2023;537:1–13. DOI: 10.1016/j.nimb.2023.01.012.
11. Tikhomirov VV. Simulation of multi-GeV electron energy losses in crystals. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. Section B, Beam Interactions with Materials and Atoms*. 1989;36(3):282–285. DOI: 10.1016/0168-583X(89)90670-8.
12. Tikhomirov VV. [On the possibility of observing radiative self-polarisation and the production of polarised e^+e^- pairs in crystals at accessible energies]. *Pis'ma v ZhETF*. 1993;58(3):168–171. Russian.
13. Guidi V, Bandiera L, Tikhomirov V. Radiation generated by single and multiple volume reflection of ultrarelativistic electrons and positrons in bent crystals. *Physical Review A*. 2012;86(4):042903. DOI: 10.1103/PhysRevA.86.042903.
14. Tikhomirov VV. Quantum features of high energy particle incoherent scattering in crystals. *Physical Review Accelerators and Beams*. 2019;22(5):054501. DOI: 10.1103/PhysRevAccelBeams.22.054501. Erratum in: *Physical Review Accelerators and Beams*. 2020;23(3):039901. DOI: 10.1103/PhysRevAccelBeams.23.039901.
15. Tikhomirov VV. Incoherent ultrarelativistic particle scattering by nuclei at planar channeling. *Journal of the Belarusian State University. Physics*. 2020;1:83–94. Russian. DOI: 10.33581/2520-2243-2020-1-83-94.
16. Tikhomirov VV. Incoherent ultrarelativistic channeling particle scattering by electrons. *Journal of the Belarusian State University. Physics*. 2021;3:49–61. Russian. DOI: 10.33581/2520-2243-2021-3-49-61.
17. Bandiera L, Bagli E, Guidi V, Mazzolari A, Berra A, Lietti D, et al. Broad and intense radiation accompanying multiple volume reflection of ultrarelativistic electrons in a bent crystal. *Physical Review Letters*. 2013;111(25):255502. DOI: 10.1103/PhysRevLett.111.255502.
18. Mazzolari A, Bagli E, Bandiera L, Guidi V, Backe H, Lauth W, et al. Steering of a sub-GeV electron beam through planar channeling enhanced by rechanneling. *Physical Review Letters*. 2014;112(13):135503. DOI: 10.1103/PhysRevLett.112.135503.
19. Bandiera L, Bagli E, Germogli G, Guidi V, Mazzolari A, Backe H, et al. Investigation of the electromagnetic radiation emitted by sub-GeV electrons in a bent crystal. *Physical Review Letters*. 2015;115(2):025504. DOI: 10.1103/PhysRevLett.115.025504.
20. Bandiera L, Tikhomirov VV, Romagnoni M, Argiolas N, Bagli E, Ballerini G, et al. Strong reduction of the effective radiation length in an axially oriented scintillator crystal. *Physical Review Letters*. 2018;121(2):021603. DOI: 10.1103/PhysRevLett.121.021603.
21. Yakimenko V, Alsberg L, Bong E, Bouchard G, Clarke C, Emma C, et al. FACET-II facility for advanced accelerator experimental tests. *Physical Review Accelerators and Beams*. 2019;22(10):101301. DOI: 10.1103/PhysRevAccelBeams.22.101301.
22. Wistisen TN, Mikkelsen RE, Uggerhøj UI, Wienands U, Markiewicz TW, Gessner S, et al. Observation of quasichanneling oscillations. *Physical Review Letters*. 2017;119(2):024801. DOI: 10.1103/PhysRevLett.119.024801.
23. Apyan A, Avakian RO, Badelek B, Ballestrero S, Biino C, Birol I, et al. Coherent bremsstrahlung, coherent pair production, birefringence, and polarimetry in the 20–170 GeV energy range using aligned crystals. *Physical Review Accelerators and Beams*. 2008;11(4):041001. DOI: 10.1103/PhysRevSTAB.11.041001.
24. Taratin AM, Vorobiev SA. [Volume proton capture into channeling in bent crystal]. *Journal of Technical Physics*. 1985;55(8):1598–1604. Russian.
25. Biryukov VM, Chesnokov YA, Kotov VI. *Crystal channeling and its application at high-energy accelerators*. Berlin: Springer; 2010. XIV, 219 p. (Accelerator physics). DOI: 10.1007/978-3-662-03407-1.
26. Scandale W, Taratin AM. Channeling and volume reflection of high-energy charged particles in short bent crystals. Crystal assisted collimation of the accelerator beam halo. *Physics Reports*. 2019;815:1–107. DOI: 10.1016/j.physrep.2019.04.003.
27. Baier VN, Katkov VM, Strakhovenko VM. *Elektromagnitnye protsessy pri vysokoi energii v orientirovannykh monokristallakh* [Electromagnetic processes at high energy in oriented single crystals]. Skrinkii AN, editor. Novosibirsk: Nauka; 1989. 395 p. Russian.
28. Tikhomirov VV. A benchmark construction of positron crystal undulator. arXiv:1502.06588v1 [Preprint]. 2015 [cited 2022 September 18]; [27 p.]. Available from: <https://arxiv.org/abs/1502.06588>.

ПРИБОРЫ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЙ

RESEARCH INSTRUMENTS AND METHODS

УДК 004.932, 539.1, 621.039

ИНФОРМАЦИОННО-ИЗМЕРИТЕЛЬНАЯ АВТОМАТИЗИРОВАННАЯ СИСТЕМА РАДИАЦИОННО-МЕТЕОРОЛОГИЧЕСКОГО, ПОЖАРНОГО И ВИДЕОКОНТРОЛЯ С АВТОНОМНЫМ ПИТАНИЕМ

**А. Н. НОВИК^{1), 2)}, П. В. КУЧИНСКИЙ¹⁾,
Г. И. ХИЛЬКО¹⁾, В. А. КОЖЕМЯКИН²⁾, Е. В. БЫСТРОВ²⁾**

¹⁾Институт прикладных физических проблем им. А. Н. Севченко БГУ,
ул. Курчатова, 7, 220045, г. Минск, Беларусь

²⁾Атомтех, ул. Гикало, 5, 220005, г. Минск, Беларусь

Для автоматизации процесса мониторинга радиационной и пожарной обстановки территории разработана и запущена в опытную эксплуатацию автоматизированная система радиационно-метеорологического, пожарного и видеоконтроля с автономным питанием. Система состоит из двух независимых и взаимодополняющих подсистем (подсистемы радиационно-метеорологического контроля и подсистемы пожарного и видеоконтроля) и представляет собой иерархическую информационную сеть с территориально разнесенными постами радиационно-метеорологического и видеоконтроля на базе 31 пожарно-наблюдательной вышки. Все посты имеют в своем составе программно-аппаратные средства, обеспечивающие функционирование системы по заданным алгоритмам сбора, обработки, хранения и отображения информации. Кроме того, каждый пост поддерживает коммуникационные связи для обеспечения передачи информации в пределах информационной сети. В состав системы входит центр реагирования, который оснащен программно-аппаратными средствами для приема, обработки, хранения и отображения информации с постов радиационно-метеорологического и видеоконтроля. Коммуникация между постами радиационно-метеорологического и видеоконтроля и центром реагирования осуществляется через интернет. Такая конфигурация системы обеспечивает территориальную гибкость при выборе места размещения центра реагирования и простую интеграцию элементов системы различных уровней. Особенностью системы является оснащение

Образец цитирования:

Новик АН, Кучинский ПВ, Хилько ГИ, Кожемякин ВА, Быстров ЕВ. Информационно-измерительная автоматизированная система радиационно-метеорологического, пожарного и видеоконтроля с автономным питанием. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2023;3:75–86.
EDN: UXMSMH

For citation:

Novik AN, Kuchinsky PV, Khilko GI, Kozhemyakin VA, Bystrov EV. Information-measuring automated system of radiation-meteorological, fire and video control with autonomous power supply. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2023;3:75–86. Russian.
EDN: UXMSMH

Сведения об авторах см. на с. 86.

Information about the authors see p. 86.



постов, не имеющих промышленной питающей сети, фотоэлектрическими станциями. Назначение системы – надежный, достоверный, непрерывный автоматизированный контроль радиационной и пожарной обстановки для раннего обнаружения пожаров и оперативного принятия решения при возникновении чрезвычайных ситуаций природного и техногенного характера.

Ключевые слова: автоматизированная система; ионизирующее излучение; радиационно-метеорологический мониторинг; видеоконтроль; солнечная электростанция.

INFORMATION-MEASURING AUTOMATED SYSTEM OF RADIATION-METEOROLOGICAL, FIRE AND VIDEO CONTROL WITH AUTONOMOUS POWER SUPPLY

A. N. NOVIK^{a, b}, P. V. KUCHINSKY^a,
G. I. KHILKO^a, V. A. KOZHEMYAKIN^b, E. V. BYSTROV^b

^aA. N. Sevchenko Institute of Applied Physical Problems, Belarusian State University,
7 Kurchatava Street, Minsk 220045, Belarus

^bAtomteh, 5 Gikala Street, Minsk 220005, Belarus

Corresponding author: G. I. Khilko (hilko_313@mail.ru)

To automate the process of monitoring the radiation and fire situation of the territory, an automated system of radiation-meteorological, fire and video control with autonomous power supply was developed and put into trial operation. The system consists of two independent and mutually complementary subsystems (the radiation-meteorological control subsystem and the fire and video control subsystem) and is a hierarchical information network with territorially separated radiation-meteorological and video control posts based on 31 fire observation towers. All posts include software and hardware that ensure the functioning of the system according to specified algorithms for collecting, processing, storing and displaying information. In addition, each post maintains communication links to ensure the delivery of information within the information network. The system includes a response centre, which is equipped with software and hardware for receiving, processing, storing and displaying information from radiation-meteorological and video control posts. Communication between the radiation-meteorological and video control posts and the response center is carried out via the Internet. This configuration of the system provides territorial flexibility in choosing the location of the response centre and easy integration of different levels of the system with each other. A feature of the system is the equipping of stations with no industrial supply network with photovoltaic power plants. The purpose of the system is reliable, credible, continuous automated monitoring of the radiation and fire situation for early detection of fires and prompt decision-making in the event of natural and man-made emergencies.

Keywords: automated system; ionising radiation; radiation-meteorological monitoring; video control; solar power plant.

Введение

Беларусь, как одно из наиболее пострадавших при аварии на Чернобыльской АЭС государств, уделяет большое внимание ликвидации ее последствий для безопасности проживания и жизнедеятельности населения в пределах страны.

Необходимость радиационно-экологического, пожарного и видеоконтроля территории также обусловлена наличием вблизи границ республики четырех АЭС сопредельных государств и вводом в эксплуатацию Белорусской АЭС¹ [1].

На всех АЭС России функционируют автоматизированные системы контроля радиационной обстановки (АСКРО) в районах их расположения, объединенные в отраслевую подсистему с центральным пультом контроля в кризисном центре концерна «Росэнергоатом».

При создании АСКРО российских АЭС использовалось в основном отечественное оборудование (система «Атлант», размещенная на всех АЭС, кроме Кольской и Ленинградской АЭС). Дополнительно к системе «Атлант» на Балаковской, Калининской и Курской АЭС установлена система «SkyLink» (Германия). На Кольской и Ленинградской АЭС применяются системы фирмы *Rados Technology* (Финляндия)².

¹Мониторинг окружающей среды и источников для целей радиационной защиты : рук. по безопасности. Вена : Междунар. агентство по атом. энергии, 2016. 141, [19] с. (Серия норм безопасности МАГАТЭ ; № RS-G-1.8).

²Радиационный контроль [Электронный ресурс] // Концерн «Росэнергоатом» : [сайт]. URL: https://www.rosenergoatom.ru/safety_environment/obespechenie-bezopasnosti/radiatsionnyy-kontrol/ (дата обращения: 15.09.2022).

Оборудованные системой «SkyLink» АСКРО функционируют на Игналинской АЭС (Литва), Чернобыльской АЭС (Украина) и всех 19 АЭС Франции³.

В белорусской части зоны отчуждения Чернобыльской АЭС расположен Полесский государственный радиационно-экологический заповедник. Территория заповедника в наибольшей степени подверглась радиоактивному загрязнению при аварии на Чернобыльской АЭС. В настоящее время там ведется хозяйственная деятельность, и одним из основных требований к администрации заповедника является контроль радиоактивного загрязнения, а также проведение мероприятий по обнаружению и ликвидации очагов возгорания. На территории заповедника размещена сеть пожарно-наблюдательных вышек высотой 30–35 м. Мониторинг пожарной обстановки ведется в пожароопасный период силами работников заповедника, которые каждые сутки осуществляют визуальное наблюдение за территорией с пожарно-наблюдательных вышек, используя бинокли. Мониторинг радиационной обстановки выполняется путем периодического измерения в ручном режиме мощности дозы гамма-излучения с применением портативных дозиметров. Это требует наличия определенных человеческих и технических ресурсов, в связи с чем актуальной задачей стали разработка и создание автоматизированной системы контроля пожарной и радиационной обстановки данной территории. Еще одной актуальной задачей при разработке и создании такой системы являлось проектирование автономных блоков питания на основе фотоэлектрических станций.

Общая структура автоматизированной системы радиационно-метеорологического, пожарного и видеоконтроля

С точки зрения коммуникаций система радиационно-метеорологического, пожарного и видеоконтроля (далее – система) представляет собой иерархическую информационную сеть с территориально разнесенными постами радиационно-метеорологического и видеоконтроля (далее – ПРМВК) на базе 31 пожарно-наблюдательной вышки Полесского государственного радиационно-экологического заповедника. Все ПРМВК имеют в своем составе программно-аппаратные средства, обеспечивающие функционирование системы по заданным алгоритмам сбора, обработки, хранения и отображения информации.

Система состоит из двух независимых и взаимодополняющих подсистем – подсистемы радиационно-метеорологического контроля и подсистемы пожарного и видеоконтроля. Выбор конфигурации системы, параметров радиационного контроля и соответствующих блоков детектирования гамма-излучения основывался на существующей АСКРО Белорусской АЭС [2–5].

В состав системы также входит центр реагирования (ЦР), который оснащен программно-аппаратными средствами для приема, обработки, хранения и отображения информации, получаемой с ПРМВК.

Коммуникация между ПРМВК и ЦР осуществляется через интернет. Для этого все ПРМВК оснащены GSM-модемами, выход в интернет выполняется через одного из сотовых операторов Беларуси. Такая конфигурация системы обеспечивает территориальную гибкость при выборе места размещения ЦР и простую интеграцию составных элементов системы.

Особенностью системы является отсутствие на большинстве пожарно-наблюдательных вышек промышленной питающей сети. Для решения этой проблемы 26 ПРМВК оснащены разработанными фотоэлектрическими станциями.

На рис. 1 (см. вклейку) представлена общая структура системы.

По функциональному назначению оборудование каждого из ПРМВК системы можно разделить на следующие блоки: блок видеоканала, блок радиационного мониторинга и управления работой оборудования ПРМВК, блок питания на основе фотоэлектрических станций.

На каждом ПРМВК блок видеоканала включает поворотную и четыре стационарные видеокамеры, охранную видеокамеру, маршрутизаторы и GSM-модем.

Блок радиационного мониторинга и управления работой оборудования ПРМВК состоит из модуля управляющей электроники, дозиметрического блока детектирования БДКГ-224, спектрометрического блока детектирования БДКГ-211М и метеостанции WXT-536 (Финляндия)⁴.

Каждый ПРМВК оснащен двумя датчиками радиационного контроля, один из них размещен снизу, а другой – на вершине пожарно-наблюдательной вышки. Таким образом, измеряется радиационный фон на уровне земли и на высоте 30–35 м.

³Интегрированная автоматизированная система контроля радиационной обстановки (АСКРО) на базе «SkyLink» для атомных станций, предприятий РосРАО и других радиационно опасных объектов [Электронный ресурс] / ОАО «Союзатомприбор»; дизайн Н. Кравцова. URL: <https://www.calameo.com/read/002942705a1dcd81ec684/> (дата обращения: 15.09.2022).

⁴Vaisala [Electronic resource]. URL: <http://www.vaisala.com/> (date of access: 18.09.2022).

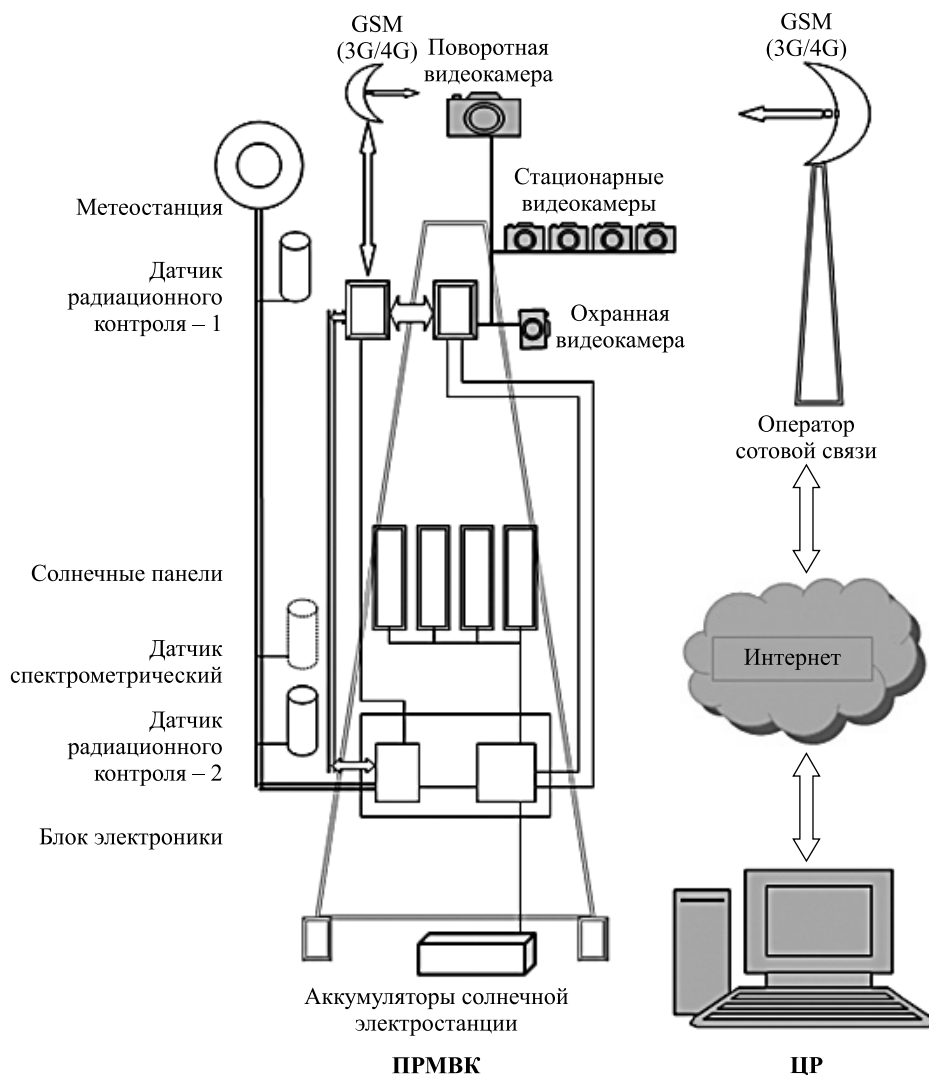


Рис. 1. Общая структура системы
Fig. 1. General structure of the system



Рис. 2. Фотография ПРМВК, оборудованного солнечной электростанцией
Fig. 2. Photograph of a radiation-meteorological and video control post equipped with a solar power plant

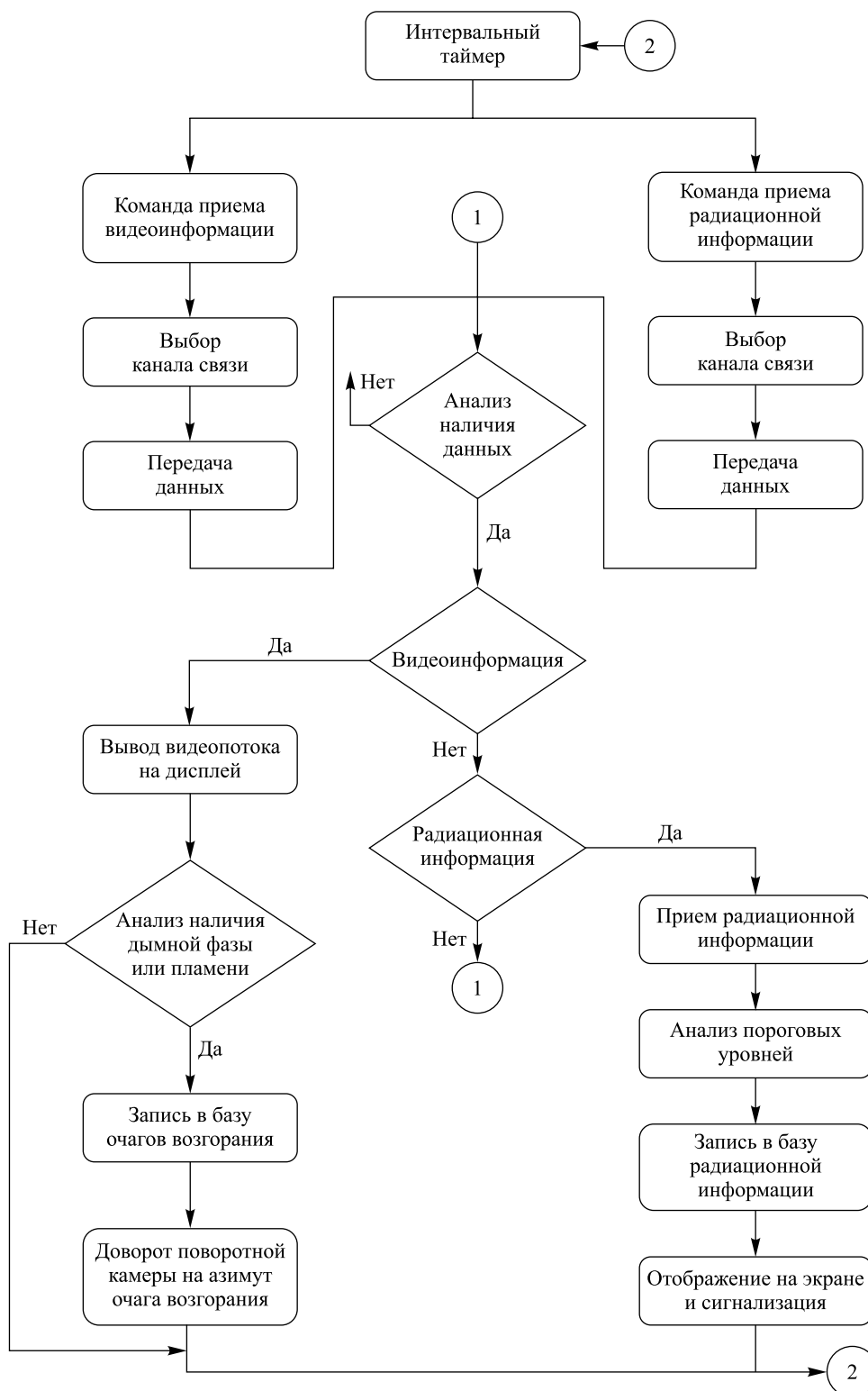


Рис. 3. Алгоритм работы системы
Fig. 3. Algorithm of operation of the system

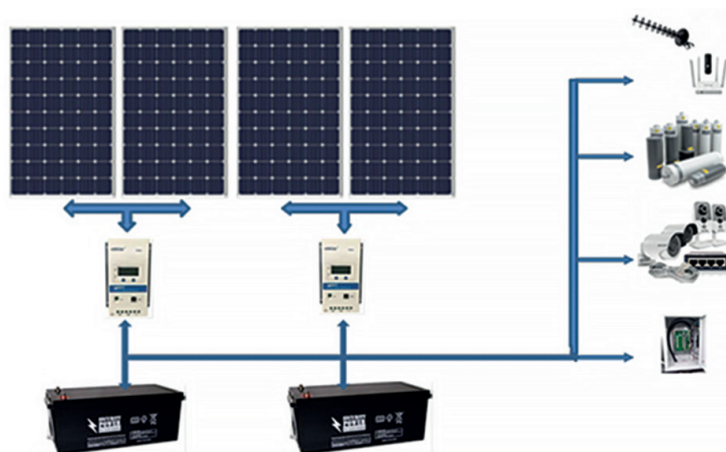


Рис. 4. Схема солнечной электростанции и подключения оборудования ПРМВК

Fig. 4. Scheme of solar power plant and connection of radiation-meteorological and video control post equipment



Рис. 5. Видеоизображения территории Полесского государственного радиационно-экологического заповедника в зимний (а), весенний (б), летний (в) и осенний (г) периоды с ПРМВК, оборудованных солнечными электростанциями

Fig. 5. Video images of the territory of the Polesie State Radiation-Ecological Reserve in winter (a), spring (b), summer (c) and autumn (d) periods with radiation-meteorological and video control posts equipped with solar power plants

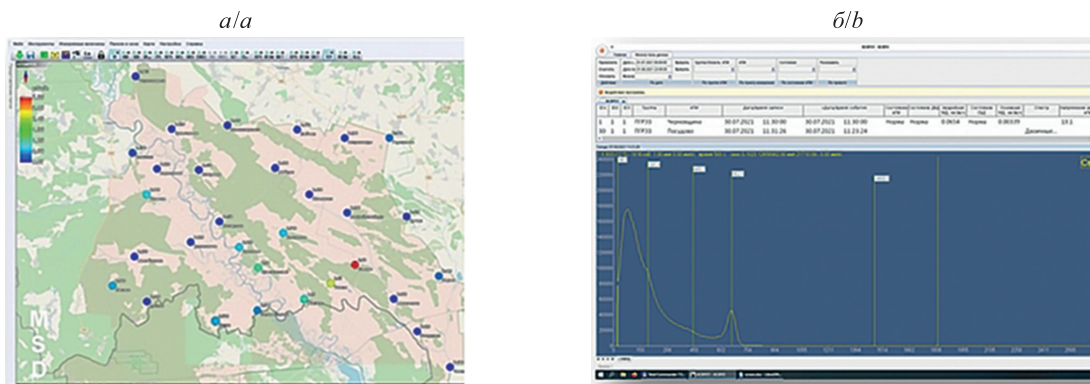


Рис. 6. Примеры отображения радиационной информации:
а – электронная карта с отображением мощности дозы гамма-излучения;
б – окно приложения для просмотра базы данных и отображения спектра гамма-излучения
Fig. 6. Examples of displaying radiation information:
а – electronic map displaying gamma radiation dose rate;
б – application window for browsing the database and displaying the gamma radiation spectrum

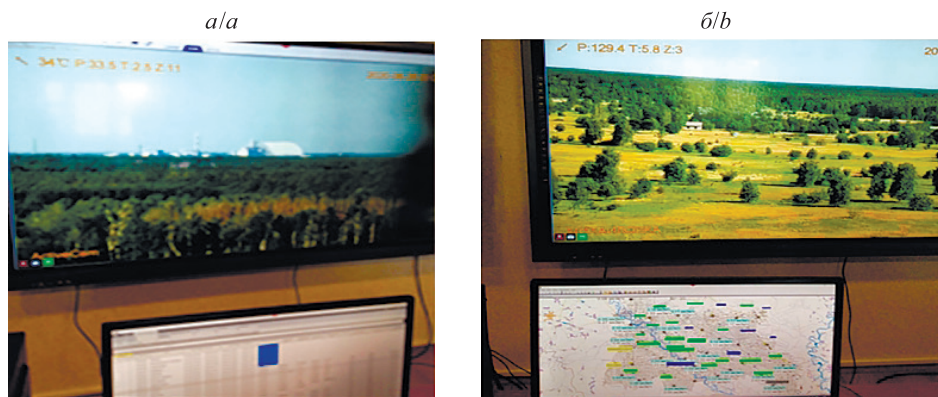


Рис. 7. Пример отображения радиационной обстановки на мониторах ЦР
Fig. 7. Example of displaying the radiation situation on the monitors of the response centre

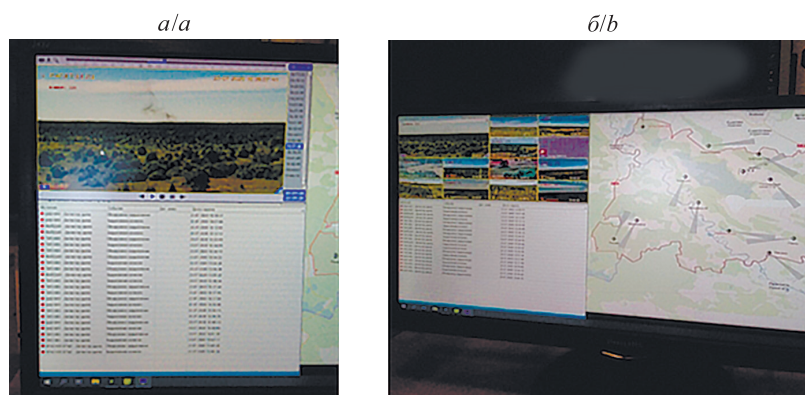


Рис. 8. Пример отображения информации на мониторах ЦР при обнаружении очагов возгорания (дыма, открытого огня)
Fig. 8. Example of displaying information when fires (smoke, open fire) are detected on the monitors of the response centre

Во время пожаров в зоне отчуждения существует вероятность вторичного ветрового подъема и переноса радионуклидов, при этом направление их перемещения будет определяться метеорологической обстановкой. При возникновении данной ситуации во время прохождения облака радионуклидов через точку установки ПРМВК возможно увеличение показаний верхнего датчика по отношению к показаниям нижнего датчика, что позволяет определить трафик движения облака радионуклидов и является дополнительным условием обнаружения возгорания.

Блок питания на основе фотоэлектрических станций разработан на основе солнечных поликристаллических модулей мощностью 275 Вт, двух контроллеров заряда с током заряда 40 А и двух аккумуляторных батарей с напряжением 12 В и емкостью 200 А · ч. На рис. 2 (см. вклейку) приведена фотография ПРМВК, оборудованного солнечной электростанцией.

Центр реагирования собирает информацию со всех ПРМВК через интернет. Оборудование ЦР осуществляет запрос, прием, накопление, обработку и отображение информации.

На рис. 3 (см. вклейку) приведен общий алгоритм работы системы. Программное обеспечение функционирования системы установлено на сервере ЦР. Интервальный таймер задает интервалы запроса видеoinформации и показаний блоков детектирования с ПРМВК. Далее производятся выбор канала связи и передача команд выдачи информации с видеокamer и блоков детектирования гамма-излучения. После получения данных запускаются два модуля программного обеспечения – модуль радиационных измерений и модуль обработки видеoinформации.

Модуль радиационных измерений осуществляет обработку информации с блоков детектирования гамма-излучения, анализ пороговых уровней, запись в базу радиационной информации, отображение на экране и сигнализацию. Модуль обработки видеoinформации выполняет анализ наличия дымной фазы или пламени, запись в базу очагов возгорания и при обнаружении очагов возгорания доворачивает поворотную камеру на азимут очага возгорания.

Блок видеоканала

На всех пожарно-наблюдательных вышках установлены четыре стационарные видеокamеры, угол обзора каждой из которых составляет 90°, и поворотная видеокamera для обеспечения угла обзора 360° с привязкой к азимутальному кругу, что позволяет контролировать территорию вокруг вышки на удалении не менее 10 км.

Сформированные камерами видеоизображения по GSM-каналам сотовой связи (3G/4G) передаются в ЦР.

При обнаружении очагов возгорания (дыма, открытого огня) поворотные видеокamеры под управлением программно-аппаратного комплекса поворачиваются в сторону обнаруженного очага возгорания и передают видеоизображение в ЦР.

Видеокamеры имеют возможность дистанционного управления телеметрией (изменение фокусного расстояния, поворот объектива камеры к очагу возгорания для определения его координат).

В целях обеспечения бесперебойной работы системы на ПРМВК с питанием от солнечной электростанции для осуществления видеоконтроля в осенне-зимний период и во время длительных дождей предусмотрена возможность подавать электропитание на одну поворотную или четыре стационарные видеокamеры, при этом не происходит отключение и нарушение работы блока радиационного мониторинга и управления работой оборудования ПРМВК и канала передачи данных в ЦР.

На каждой вышке установлена еще одна стационарная видеокamera, контролирующая зону приближения к вышке. При обнаружении движения в поле зрения камеры видеоизображение передается в ЦР для анализа программно-аппаратным комплексом.

Все видеокamеры имеют возможность динамического изменения потока передачи данных, что позволяет уменьшить трафик в период обстановки, не связанной с возгоранием на территории.

Блок питания на основе солнечной электростанции

Оборудование ПРМВК имеет потребляемую мощность около 50 Вт. При такой потребляемой мощности вырабатываемая солнечной электростанцией энергия должна составлять 1,2 кВт · ч.

Солнечная электростанция на основе фотоэлектрических солнечных панелей мощностью 1,12 кВт разработана исходя из расчета инсоляции для географической широты Полесского государственного радиационно-экологического заповедника в наихудший месяц для выработки энергии (декабрь) с использованием программы мониторинга солнечной активности *SolarGIS*⁵. Результаты расчета выработки солнечной электростанции приведены в таблице. При возникновении ситуации, когда солнечные панели не обеспечивают необходимую мощность из-за погодных условий, недостающая энергия пополняется за счет аккумуляторов

⁵SolarGIS [Electronic resource]. URL: <https://solargis.info> (date of access: 18.09.2022).

суммарной емкостью 400 А · ч, заряда которых будет хватать на трое суток без подзарядки. Кроме того, при прогнозировании падения эффективности видеонаблюдения из-за погодных условий предусмотрена возможность дистанционно отключать некоторых потребителей (часть видеокамер) с ЦР.

Результаты расчета выработки солнечной электростанции
Results of calculation of solar power plant output

Параметры	Январь	Февраль	Март	Апрель	Май	Июнь	Июль	Август	Сентябрь	Октябрь	Ноябрь	Декабрь
Количество часов пиковой нагрузки	40	56	87	118	127	132	134	116	92	71	37	30
Мощность станции, кВт	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12	1,12
Выработка в месяц, кВт · ч	44	62	96	130	140	145	147	128	101	78	41	33
Количество дней в месяце	31	28	31	30	31	30	31	31	30	31	30	31
Выработка в сутки, кВт · ч	1,42	2,21	3,09	4,33	4,52	4,83	4,74	4,13	3,37	2,52	1,37	1,06

Примечание. За год общее количество часов пиковой нагрузки достигает величины 1040, а суммарная выработка энергии составляет 1145 кВт · ч.

На рис. 4 (см. вклейку) приведена схема солнечной электростанции и подключения оборудования ПРМВК.

Блок радиационного мониторинга и управления работой оборудования ПРМВК

Электроника блока радиационного мониторинга и управления работой оборудования ПРМВК построена на базе процессора ATxmega256A1 и функционирует под управлением встроенного программного обеспечения.

Разработанный алгоритм управления обеспечивает:

- первоначальную инициализацию аппаратных средств и определение конфигурации при включении питания;
- анализ работоспособности периферии и аппаратных средств контроллера;
- мониторинг заряда аккумуляторов солнечной электростанции;
- поддержку интерфейса RS485 для опроса детекторов гамма-излучения и других сенсоров;
- поддержку порта Ethernet для проводной связи с роутерами видеоканала;
- поддержку технологии пакетного цифрового приема-передачи по протоколу UDP/IP;
- поддержку интерфейса связи с метеостанцией;
- сохранение информации в энергонезависимой памяти;
- постоянный контроль и синхронизацию работы программных модулей, выполняющих заданные функции;
- реализацию аппаратно-программного механизма перезапуска программного обеспечения при сбоях или зависании в цикле выполнения программных модулей;
- поддержку управления настроечными параметрами функционирования программного обеспечения и сохранение их в энергонезависимой памяти контроллера ПРМВК;
- поддержку инициированной передачи информации в ЦР при превышении измеренными значениями параметров заданных пороговых уровней;
- поддержку протоколов ТСР/IP, IP-адресации, уровней привилегий доступа к ПРМВК.

Каждую из перечисленных функций реализует соответствующий программный модуль. Общая синхронизация и выделение временных интервалов для работы одного из программных модулей осуществляются главным системным планировщиком. Управление параметрами функционирования программного обеспечения и их сохранение реализуются программным модулем настроек, который поддерживает интерфейс доступа с ЦР.

Передача информации в ЦР осуществляется по запросу программного обеспечения ЦР или иницируется программным обеспечением контроллера ПРМВК при превышении измеренными значениями параметров заданных пороговых уровней. При нарушении связи ПРМВК с ЦР происходит накопление информации в энергонезависимой памяти через задаваемые временные интервалы. Передача возобновляется при восстановлении нормальной работоспособности канала связи с ЦР.

В состав рассматриваемого блока входят высокочувствительный спектрометрический интеллектуальный блок детектирования гамма-излучения БДКГ-211М на основе сцинтиллятора NaI(Tl), предназначенный для быстрого обнаружения источников гамма-излучения, измерения спектра гамма-излучения

с последующей идентификацией радионуклидного состава, а также измерения мощности амбиентного эквивалента дозы гамма-излучения, и широкодиапазонный дозиметрический интеллектуальный блок детектирования гамма-излучения БДКГ-224 на базе тканеэквивалентного пластмассового сцинтиллятора [6].

Дозиметрический и спектрометрический блоки детектирования гамма-излучения совместно с каналом измерения метеоданных по своим метрологическим характеристикам обеспечивают получение исчерпывающей информации о радиационной обстановке. Применяемые средства измерений соответствуют требованиям к мощности дозы гамма-излучения, чувствительности спектрометрического канала, метеопараметрам (давление, относительная влажность, скорость ветра, направление ветра, температура воздуха, жидкие и твердые осадки). Возможность изменения настроек посредством удаленного доступа позволяет оперативно проводить все действия по управлению датчиками и их диагностированию.

Центр реагирования

Центр реагирования – это верхний по отношению к ПРМВК узел информационной сети. Он оборудован сервером с системным программным обеспечением, двумя дисплеями с размером экрана по диагонали 86 дюймов для визуального отображения информации, двумя компьютеризированными рабочими местами операторов. Аппаратура ЦР имеет канал выхода в интернет.

Сервер ЦР функционирует под управлением интегрированного программного обеспечения радиационного и видеомониторинга. Это программное обеспечение определяет алгоритм работы системы, представленный на рис. 3 (см. вклейку).

На компьютерах рабочих мест операторов установлено клиентское программное обеспечение радиационного и видеомониторинга. Информация выводится на мониторы компьютеров, а также обзорные дисплеи.

Размещение пожарно-наблюдательных вышек на территории Полесского государственного радиационно-экологического заповедника, а также информация о радиационной обстановке в режиме реального времени отображаются на карте посредством геоинформационной системы *MapInfo*⁶. Кроме того, с помощью интегрированного программного обеспечения радиационного и видеомониторинга на электронной карте отображаются векторы азимутов текущего положения поворотной камеры каждой из вышек. Контекст выводимой информации определяется настройками программного обеспечения компьютеров рабочих мест операторов.

Сформированный видеокамерами ПРМВК сигнал после передачи посредством интернета в ЦР подвергается многоступенчатой видеоаналитике программным комплексом *Интеллект*⁷.

При обнаружении очагов возгорания (дыма, открытого огня) программно-аппаратный комплекс дает команду поворотным видеокамерам ПРМВК повернуться в сторону обнаруженного очага возгорания и передавать видеоизображения в ЦР. С использованием возможности дистанционного управления телеметрией видеокамер видеоизображения очага возгорания с указанием текущих координат выводятся на мониторы компьютеров, а также обзорные дисплеи ЦР.

При обнаружении движения в поле зрения стационарной видеокамеры, контролирующей зону приближения к вышке, программно-аппаратный комплекс подает тревожный сигнал, позволяющий организовать мероприятия по предотвращению фактов вандализма и попыток умышленного выведения из строя установленного на вышке оборудования.

Использование в составе системы быстродействующих высокочувствительных спектрометрических блоков детектирования гамма-излучения дает возможность накапливать измеренные спектры гамма-излучения в базе данных ЦР и производить автоматическую идентификацию радионуклидов, фиксировать малейшие изменения радиационного фона.

Метеорологический мониторинг осуществляется метеостанцией WXT-536, установленной на ПРМВК.

Функционирование системы в автоматическом режиме

На рис. 5–8 (см. вклейку) приведены примеры видеоизображений и радиационной информации, отображаемых на мониторах ЦР.

Программно-аппаратный комплекс системы, работающей в автоматическом режиме, позволяет:

- отображать в реальном времени ситуационную обстановку на территории мониторинга;
- реагировать и выдавать тревожные сигналы и команды на исполнительные устройства благодаря многоступенчатой видеоаналитике в автоматическом режиме по ранее запрограммированным сценариям;

⁶ MapInfo [Электронный ресурс] // GIS-техника: все о ГИС и их применении : [сайт]. URL: <http://gistech.ru/programmy-gis/mapinfo/> (дата обращения: 18.09.2022).

⁷ ITV [Электронный ресурс]. URL: <https://www.itv.ru/> (дата обращения: 18.09.2022).

- отправлять СМС- и ММС-уведомления, сообщения на электронную почту с вложенными видеофрагментами, вести запись информации и хранить архив в течение отчетного месяца;
- накапливать архив, оперативно искать записанные данные в архиве и копировать их на внешние носители информации;
- выполнять автоматический обмен информацией с модулями радиационно-метеорологического мониторинга с помощью модуля интеграции специализированного протокола;
- отображать данные радиационно-метеорологического мониторинга в видеоизображениях соответствующих видеоканалов, а также вести их запись в архив;
- подключать удаленные рабочие места, с помощью специализированного приложения осуществлять подключение мобильных устройств.

Заключение

Описаны принципы построения и алгоритмы функционирования автоматизированной системы радиационно-метеорологического, пожарного и видеоконтроля с автономным питанием.

Опытная эксплуатация системы на базе Полесского государственного радиационно-экологического заповедника в течение 2019–2022 гг. показала ее способность выполнять мониторинг радиационной и пожарной обстановки территории.

Библиографические ссылки

1. Косов АД, Орехов АА, Илларионенкова ДВ, Смирнов ИВ. Стратегия радиационного мониторинга для защиты персонала и населения в случае аварии. *Аппаратура и новости радиационных измерений*. 2022;2:3–13. DOI: 10.37414/2075-1338-2022-109-2-3-13.
2. Новик АН, Кучинский ПВ, Белый ИВ, Тамашевич СГ. Автоматизированная система контроля радиационной обстановки окружающей среды с открытой архитектурой построения. *Доклады БГУИР*. 2015;2:131–134.
3. Белый ИВ, Кучинский ПВ, Новик АН, Тамашевич СГ. Программно-аппаратные средства автоматизированной системы контроля радиационной обстановки окружающей среды в зоне наблюдения АЭС с применением спектрометрических блоков детектирования гамма-излучения. В: Гусев ОК, Енин ЮИ, Жагора НА, Зуйков ИЕ, Киселев МГ, Князев МА и др., редакторы. *Приборостроение-2014. Материалы 7-й Международной научно-технической конференции; 19–21 ноября 2014 г.; Минск, Беларусь*. Минск: БНТУ; 2014. с. 106–108.
4. Кучинский ПВ, Новик АН, Белый ИВ, Тамашевич СГ. Программно-аппаратные средства автоматического пункта измерения АСКРО АЭС с применением спектрометрических блоков детектирования гамма-излучения. В: Национальная академия наук Беларуси, Объединенный институт энергетических и ядерных исследований – Сосны. *IV Международная конференция «Ядерные технологии XXI века». Республиканский научный семинар «Атомная энергетика, ядерные и радиационные технологии»: программа, тезисы докладов; 21–23 октября 2014 г.; Минск, Беларусь*. Минск: Право и экономика; 2014. с. 59.
5. Новик АН, Белый ИВ, Быстров ЕВ, Кожемякин ВА, Кучинский ПВ. Автоматизированная система контроля радиационной обстановки в зоне влияния Белорусской АЭС. В: Кузьмин АВ, Кувшинов ВИ, Корбут ТН, Трифонов АГ, редакторы. *Ядерные технологии XXI века. Доклады VI Международной конференции; 25–27 октября 2016 г.; Минск, Беларусь*. Минск: Право и экономика; 2016. с. 36–40.
6. Кожемякин ВА. Линейка интеллектуальных блоков детектирования гамма-излучения для использования в составе роботизированных и других систем. В: *Проблемы прикладной спектрометрии и радиометрии. Тезисы докладов XIII Международного совещания; 5–8 октября 2015 г.; Санкт-Петербург, Россия*. Санкт-Петербург: [б. и.]; 2015. с. 101–105.

References

1. Kosov AD, Orekhov AA, Illarionenkova DV, Smirnov IV. Radiation monitoring strategy for personnel and population protection in case of accident. *Apparatura i novosti radiatsionnykh izmerenii*. 2022;2:3–13. Russian. DOI: 10.37414/2075-1338-2022-109-2-3-13.
2. Novik AN, Kuchinskiy PV, Belyi IV, Tamashevich SG. Automated radiation control system environmental construction with open architecture. *Doklady BGUIR*. 2015;2:131–134. Russian.
3. Bely IV, Kuchinsky PV, Novik AN, Tamashevich SG. [Software and hardware for an automated system for monitoring the radiation situation of the environment in the NPP observation zone using spectrometric gamma radiation detection units]. In: Gusev OK, Enin YuI, Zhagora NA, Zuykov IE, Kiselev MG, Knyazev MA, et al., editors. *Priboroostroenie-2014. Materialy 7-i Mezhdunarodnoi nauchno-tekhnicheskoi konferentsii; 19–21 noyabrya 2014 g.; Minsk, Belarus* [Instrumentation-2014. Proceedings of the 7th International scientific and technical conference; 2014 November 19–21; Minsk, Belarus]. Minsk: Belarusian National Technical University; 2014. p. 106–108. Russian.
4. Kuchinsky PV, Novik AN, Bely IV, Tamashevich SG. [Software and hardware of an automatic measurement point for ARMS of NPP using spectrometric units for detecting gamma radiation]. In: National Academy of Sciences of Belarus, Joint Institute for Power and Nuclear Research – Sosny. *IV Mezhdunarodnaya konferentsiya «Yadernye tekhnologii XXI veka». Respublikanskii nauchnyi seminar «Atomnaya energetika, yadernye i radiatsionnye tekhnologii»: programma, tezisy докладов; 21–23 oktyabrya 2014 g.; Minsk, Belarus* [4th International conference «Nuclear technologies of the 21st century». Republican scientific seminar «Nuclear energy, nuclear and radiation technologies»: programme, abstracts of reports; 2014 October 21–23; Minsk, Belarus]. Minsk: Pravo i ekonomika; 2014. p. 59. Russian.

5. Novik AN, Bely IV, Bystrov EV, Kozhemyakin VA, Kuchinsky PV. [Automated system for monitoring the radiation situation in the zone of influence of the Belarusian NPP]. In: Kuz'min AV, Kuvshinov VI, Korbut TN, Trifonov AG, editors. *Yadernye tekhnologii XXI veka. Doklady VI Mezhdunarodnoi konferentsii; 25–27 oktyabrya 2016 g.; Minsk, Belarus'* [Nuclear technologies of the 21st century. Reports of the 6th International conference; 2016 October 25–27; Minsk, Belarus]. Minsk: Pravo i ekonomika; 2016. p. 36–40. Russian.

6. Kozhemyakin VA. [A line of intelligent units for detecting gamma radiation for use as part of robotic and other systems]. In: *Problemy prikladnoi spektrometrii i radiometrii. Tezisy dokladov XIII Mezhdunarodnogo soveshchaniya; 5–8 oktyabrya 2015 g.; Sankt-Peterburg, Rossiya* [Problems of applied spectrometry and radiometry. Abstracts of reports of the 13th International meeting; 2015 October 5–8; Saint Petersburg, Russia]. Saint Petersburg: [s. n.]; 2015. p. 101–105. Russian.

Получена 20.06.2023 / принята 29.07.2023.
Received 20.06.2023 / accepted 29.07.2023.

Авторы:

Александр Николаевич Новик – ведущий инженер отдела метрологии и стандартизации¹⁾, ведущий инженер лаборатории систем радиационного контроля²⁾.

Петр Васильевич Кучинский – доктор физико-математических наук, профессор; директор.

Геннадий Иосифович Хилько – старший научный сотрудник лаборатории полупроводниковой электроники, исполняющий обязанности заведующего лабораторией полупроводниковой электроники.

Валерий Александрович Кожемякин – кандидат технических наук; директор.

Евгений Вадимович Быстров – начальник лаборатории программного обеспечения.

Authors:

Alexander N. Novik, leading engineer at the department of metrology and standardisation^a and leading engineer at the laboratory of radiation monitoring systems^b.

alexnoviknik@gmail.com

<https://orcid.org/0009-0005-0676-2465>

Petr V. Kuchinsky, doctor of science (physics and mathematics), full professor; director.

kuchynski@bsu.by

<https://orcid.org/0000-0001-8543-8930>

Gennady I. Khilko, senior researcher and acting head of the laboratory of semiconductor electronics.

hilko_313@mail.ru

<https://orcid.org/0009-0002-8366-3573>

Valeriy A. Kozhemyakin, PhD (engineering); director.

info@atomtex.com

Evgeny V. Bystrov, head of the laboratory of software.

bystrov@atomtex.com

<https://orcid.org/0009-0005-2458-0200>

АННОТАЦИИ ДЕПОНИРОВАННЫХ В БГУ РАБОТ
INDICATIVE ABSTRACTS OF THE PAPERS DEPOSITED IN BSU

УДК 535(06)+004(06)+537.86(06)+538.9(06)

Прикладные проблемы оптики, информатики, радиофизики и физики конденсированного состояния [Электронный ресурс] : материалы VII Междунар. науч.-практ. конф., посвящ. 120-летию со дня рождения акад. Антона Никифоровича Севченко, Минск, 18–19 мая 2023 г. / НИУ «Ин-т прикл. физ. проблем им. А. Н. Севченко» БГУ ; [редкол.: Ю. И. Дудчик (гл. ред.), И. М. Цикман, И. Н. Кольчевская]. 2-я ред., доп. Электрон. текстовые дан. Минск : БГУ, 2023. 476 с. : ил. Библиогр. в тексте. Режим доступа: <https://elib.bsu.by/handle/123456789/300452>. Загл. с экрана. Деп. в БГУ 28.08.2023, № 007528082023.

Сборник содержит материалы VII Международной научно-практической конференции по следующим научным направлениям: прикладные проблемы оптики и спектроскопии; прикладные проблемы информатики; прикладные проблемы радиофизики; прикладные проблемы физики конденсированного состояния; аэрокосмические технологии и технологии ДЗЗ.

СОДЕРЖАНИЕ

ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ

<i>Ивакин Е. В., Толстик А. Л.</i> Определение параметров теплопереноса в тонкой поглощающей пленке на подложке методом динамических решеток	4
<i>Шачнева Е. Ю.</i> Оптические химические сенсоры на основе комплексных соединений	10
<i>Станевич В. Ю., Чепелева Д. С., Курилов А. Д., Безрученко В. С., Муравский А. А.</i> Массивы жидкокристаллических линз на основе фоточувствительного полимерного ориентанта	22

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

<i>Фурс А. Н.</i> Интегралы финитного движения в поле тяготения Шварцшильда с точностью до членов порядка c^{-2}	31
--	----

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

<i>Константинов С. В., Комаров Ф. Ф., Чижов И. В., Зайков В. А., Пилько В. В.</i> Эффект влияния углерода на структурно-фазовое состояние и трибомеханические свойства наноструктурированных покрытий TiAlCN	44
<i>Поклонский Н. А., Раткевич С. В., Вырко С. А., Власов А. Т.</i> Две схемы получения молекулярных ионов на изогнутых листах графена	57

ФИЗИКА ЯДРА И ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ

<i>Тихомиров В. В.</i> Источник жестких гамма-квантов на основе излучения электронов и позитронов в поле плоскости атомных цепочек	65
--	----

ПРИБОРЫ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЙ

<i>Новик А. Н., Кучинский П. В., Хилько Г. И., Кожемякин В. А., Быстров Е. В.</i> Информационно-измерительная автоматизированная система радиационно-метеорологического, пожарного и видео-контроля с автономным питанием	75
Аннотации депонированных в БГУ работ	87

CONTENTS

OPTICS AND SPECTROSCOPY

<i>Ivakin E. V., Tolstik A. L.</i> Determination of heat transfer parameters in absorbing thin films on substrate by the transient grating method.....	4
<i>Shachneva E. Yu.</i> Optical chemical sensors based on complex compounds	10
<i>Stanevich V. Yu., Chepeleva D. S., Kurilov A. D., Bezruchenko V. S., Murauski A. A.</i> Arrays of liquid crystal lenses based on photosensitive polymer orientant	22

THEORETICAL PHYSICS

<i>Furs A. N.</i> Integrals of finite motion in the Schwarzschild gravitational field up to terms of order c^{-2}	31
--	----

CONDENSED STATE PHYSICS

<i>Konstantinov S. V., Komarov F. F., Chizhov I. V., Zaikov V. A., Pilko V. V.</i> The effect of carbon on the structural-phase state and tribomechanical properties of nanostructured TiAlCN coatings	44
<i>Poklonski N. A., Ratkevich S. V., Vyrko S. A., Vlassov A. T.</i> Two schemes for producing molecular ions on a bent graphene layers	57

ATOMIC NUCLEUS AND ELEMENTARY PARTICLE PHYSICS

<i>Tikhomirov V. V.</i> Hard gamma-quanta source based on the electron and positron radiation in the field of planes formed by atomic chains	65
--	----

RESEARCH INSTRUMENTS AND METHODS

<i>Novik A. N., Kuchinsky P. V., Khilko G. I., Kozhemyakin V. A., Bystrov E. V.</i> Information-measuring automated system of radiation-meteorological, fire and video control with autonomous power supply ...	75
Indicative abstracts of the papers deposited in BSU	87

Журнал включен Высшей аттестационной комиссией Республики Беларусь в Перечень научных изданий для опубликования результатов диссертационных исследований по техническим (экспериментальная и прикладная физика; микро- и нанoeлектроника) и физико-математическим наукам.

Журнал включен в библиографическую базу данных научных публикаций «Российский индекс научного цитирования» (РИНЦ), China National Knowledge Infrastructure.

**Журнал Белорусского
государственного университета. Физика.
№ 3. 2023**

Учредитель:
Белорусский государственный университет

Юридический адрес: пр. Независимости, 4,
220030, г. Минск, Республика Беларусь.
Почтовый адрес: пр. Независимости, 4,
220030, г. Минск, Республика Беларусь.
Тел. (017) 259-70-74, (017) 259-70-75.
E-mail: jphys@bsu.by
URL: <https://journals.bsu.by/index.php/physics>

«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).

Редакторы *О. А. Семенец, М. А. Подголина*
Технический редактор *В. В. Пижикова*
Корректор *Л. А. Меркуль*

Подписано в печать 29.09.2023.
Тираж 105 экз. Заказ 881.

Республиканское унитарное предприятие
«СтройМедиаПроект».
ЛП № 02330/71 от 23.01.2014.
Ул. В. Хоружей, 13/61, 220123,
г. Минск, Республика Беларусь.

© БГУ, 2023

**Journal
of the Belarusian State University. Physics.
No. 3. 2023**

Founder:
Belarusian State University

Registered address: 4 Niezaliezhnasci Ave.,
Minsk 220030, Republic of Belarus.
Correspondence address: 4 Niezaliezhnasci Ave.,
Minsk 220030, Republic of Belarus.
Tel. (017) 259-70-74, (017) 259-70-75.
E-mail: jphys@bsu.by
URL: <https://journals.bsu.by/index.php/physics>

«Journal of the Belarusian State University. Physics»
published since January, 1969.
Until 2017 named «Vestnik BGU.
Seriya 1, Fizika. Matematika. Informatika»
(ISSN 1561-834X).

Editors *O. A. Semenets, M. A. Podgolina*
Technical editor *V. V. Pishkova*
Proofreader *L. A. Merkul'*

Signed print 29.09.2023.
Edition 105 copies. Order number 881.

Republic Unitary Enterprise
«StroiMediaProekt».
License for publishing No. 02330/71, 23 January, 2014.
13/61 V. Haruzhaj Str.,
Minsk 220123, Republic of Belarus.

© BSU, 2023