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 2024

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

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

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ

Ануфрик С. С. Гродненский государственный университет им. Янки Купалы, Гродно, Беларусь.
Гусев О. К. Белорусский национальный технический университет, Минск, Беларусь.
Казак Н. С. Государственное научно-производственное объединение «Оптика, оптоэлектроника и лазерная техника» Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь.
Килин С. Я. Национальная академия наук Беларуси, Минск, Беларусь.
Кононов В. А. СП «ЛОТИС ТИИ», Минск, Беларусь.
Маляревич А. М. Белорусский национальный технический университет, Минск, Беларусь.
Пенязьков О. Г. Институт тепло- и массообмена им. А. В. Лыкова Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь.
Пилипенко В. А. Государственный центр «Белмикроанализ» филиала НТЦ «Белмикросистемы» ОАО «Интеграл» – управляющей компании холдинга «Интеграл», Минск, Беларусь.
Плетюхов В. А. Брестский государственный университет им. А. С. Пушкина, Брест, Беларусь.
Семченко И. В. Государственное научно-производственное объединение «Оптика, оптоэлектроника и лазерная техника» Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь.
Федосюк В. М. ГНПО «Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению», Минск, Беларусь.
Шкадаревич А. П. 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.
Maksimenko 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.
Pogrebnjak 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 535.421

ЗАПИСЬ ОБЪЕМНЫХ ПРОПУСКАЮЩИХ ГОЛОГРАММ СИНГУЛЯРНЫХ ПУЧКОВ В ФОТОРЕФРАКТИВНОМ КРИСТАЛЛЕ СИЛИКАТА ВИСМУТА

***СЕ ЧЖАО*[1]*, И. Г. ДАДЕНКОВ*[1]*, Е. А. МЕЛЬНИКОВА*[1]*, А. Л. ТОЛСТИК*[1]**

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

Аннотация. Разработка и совершенствование методов получения и детектирования оптических вихрей позволяют расширить область их применения. В настоящей работе реализована импульсная запись динамических голограмм сингулярных пучков в фоторефрактивном кристалле силиката висмута. На представленной экспериментальной установке записывались пропускающие объемные динамические голограммы с использованием широкого спектрального диапазона для восстановления голографического изображения. В качестве источника сингулярного пучка применялась объемная статическая голограмма, записанная в слое фотополимера. Восстановление записанной

Образец цитирования:
Се Чжао, Даденков ИГ, Мельникова ЕА, Толстик АЛ. Запись объемных пропускающих голограмм сингулярных пучков в фоторефрактивном кристалле силиката висмута. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2024; 3:4–9 (на англ.).
EDN: TIRMSJ

For citation:
Xie Zhao, Dadenkov IG, Melnikova EA, Tolstik AL. Recording of a volume transmitting vortex hologram in a photorefractive crystal of bismuth silicate. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2024;3:4–9.
EDN: TIRMSJ

Авторы:
Се Чжао – магистрант кафедры лазерной физики и спектроскопии физического факультета. Научный руководитель – А. Л. Толстик.
Иван Геннадьевич Даденков – младший научный сотрудник научно-исследовательской лаборатории нелинейной оптики и спектроскопии физического факультета.
Елена Александровна Мельникова – кандидат физико-математических наук, доцент; доцент кафедры лазерной физики и спектроскопии физического факультета.
Алексей Леонидович Толстик – доктор физико-математических наук, профессор; заведующий кафедрой лазерной физики и спектроскопии физического факультета.

Authors:
Xie Zhao, master's degree student at the department of laser physics and spectroscopy, faculty of physics.
575593225@qq.com
Ivan G. Dadenkov, junior researcher at the laboratory of nonlinear optics and spectroscopy, faculty of physics.
dadenkov.ivan@gmail.com
https://orcid.org/0000-0003-0722-4683
Elena A. Melnikova, PhD (physics and mathematics), docent; associate professor at the department of laser physics and spectroscopy, faculty of physics.
melnikova@bsu.by
https://orcid.org/0000-0001-5097-5832
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

голограммы осуществлялось с помощью непрерывного лазера с другой длиной волны, что позволило пространственно разделить записывающий и восстанавливающий пучки. Также был реализован интерференционный метод определения топологического заряда оптического вихря с использованием прошедшего и восстановленного лучей.

Ключевые слова: голография; фоторефрактивные кристаллы; оптические вихри; силикат висмута; интерференционная картина.

Благодарность. Работа выполнена в рамках государственной исследовательской программы «Фотоника и электроника для инноваций» и при финансовой поддержке Китайского национального фонда обучения за рубежом.

RECORDING OF A VOLUME TRANSMITTING VORTEX HOLOGRAM IN A PHOTOREFRACTIVE CRYSTAL OF BISMUTH SILICATE

***XIE ZHAO*[a], *I. G. DADENKOV*[a], *E. A. MELNIKOVA*[a], *A. L. TOLSTIK*[a]**

[a]*Belarusian State University, 4 Niezaliezhnasci Avenue, Minsk 220030, Belarus*
Corresponding author: I. G. Dadenkov (dadenkov.ivan@gmail.com)

Abstract. Recent breakthroughs in vortex beam research, characterised by structured beams bearing orbital angular momentum, have significantly transformed various applications of beams. These advancements have notably impacted fields such as advanced optical manipulation, high capacity optical communications, and super-resolution imaging. Undoubtedly, the development and refinement of generation and detection techniques for vortex beams play pivotal roles in enabling and enhancing their applications. In this work, pulsed recording of dynamic holograms of singular beams in photorefractive bismuth silicate crystals is realised. The experimental setup presented in this work is based on the recording of transmissive volume dynamic holograms, which allows us to use a wide spectral range to reconstruct the holographic image. A volumetric static hologram recorded in a photopolymer layer was used as a singular beam source. The restoration of the recorded hologram was realised using a continuous laser with a different wavelength, which allowed the recording and restoring beams to be spatially separated. An interference method for determining the topological charge of an optical vortex from the transmitted and restored beams was also realised.

Keywords: holography; photorefractive crystals; optical vortices; bismuth silicate; interference pattern.

Acknowledgements. The work was carried out within the framework of the state research programme «Photonics and electronics for innovation» and with the financial support of the National Study Abroad Fund of China.

Introduction

Singular dynamic holography represents a novel advancement in the field of dynamic holography, particularly distinguished by its utilisation of light beams characterised by phase singularities, commonly referred to as optical vortices. A defining characteristic of these singular beams is the presence of specific points known as screw dislocations on the wave front. At these points, the light's intensity drops to zero, and the phase becomes undefined. An interesting phenomenon occurs when one traverses around a screw dislocation in the beam's cross section: the phase undergoes a change by an amount of $2\pi l$. Here, l denotes the topological charge, a crucial parameter in this context. Screw dislocations can be categorised based on the sign of l into positive (right-handed) or negative (left-handed) dislocations. One of the remarkable attributes of singular light beams is their ability to conserve their topological charge as they propagate. Despite the inevitable diffraction divergence, which affects the beam [1–4].

Photorefractive crystals, known for their nonlinear electro-optic properties, are highly effective for real-time capture of volume phase holograms [5]. These materials play a crucial role in the architecture of holographic storage solutions. Their unique capabilities make them ideal for a range of applications, including adaptive interferometry, associative memory systems, optical image enhancement, as well as data archiving and manipulation. The holographic recording process in these crystals relies on the spatial reallocation of charges under the influence of light rays, interacting with various impurity and defect centers that possess distinct properties [6; 7].

Singular optics and generation

Singular optics focuses on the exploration of wave field vortices and phase singularities, along with their inherent topological properties. These singularities, also known as optical vortices, are characterised by a zero intensity at their core, rendering the phase undefined. This phenomenon is often referred to as a «phase defect»,

where the light's phase exhibits a 2π spiral pattern around the beam's central axis during coherent transmission, a common occurrence in wave propagation [8].

The so-called vortex beam is a beam with a continuous spiral phase. In other words, the wavefront of the beam is neither flat nor spherical, but vortex-like with singularity. The vortex beam has a propagating property of cylindrical symmetry. In the center of this beam is observed a dark spot, exhibiting zero light intensity and maintaining this level of intensity throughout the propagation process. The phase wavefront of the vortex beam is distributed in a spiral shape, so the wave vector has an azimuth term, and it rotates around the vortex center. And precisely because of this rotation, the light wave carries orbital angular momentum.

In 1992, L. Allen and his colleagues [9] showed that a Laguerre – Gaussian beam can have a spiral phase structure, which has a significant orbital angular momentum per photon. In the center of this spiral phase there is a singularity, since the phase here is indeterminate, and the field amplitude also disappears so that a «black center beam» is formed at the center of the light wave. This revealed new understanding of the relationship between macroscopic optics and quantum effects. The complex amplitude of a singular light beam propagating along the axis z, can be written in the following form:

$$E(r, \theta) = A_0 \left(\frac{r}{r_0} \right)^{|l|} \exp\left(\frac{r^2}{r_0^2} + il\theta \right),$$

where $r = \sqrt{x^2 + y^2}$, x, y are Decart coordinates of a point in the cross section of a singular beam of radius r_0 (the center of the coordinate system is at the beam center); $\theta = \mathrm{arctg}\left(\frac{y}{x} \right)$ is an azimuthal angle; l is a topological charge. Computer modelling of the optical vortex propagation profile is shown in fig. 1, *b*.

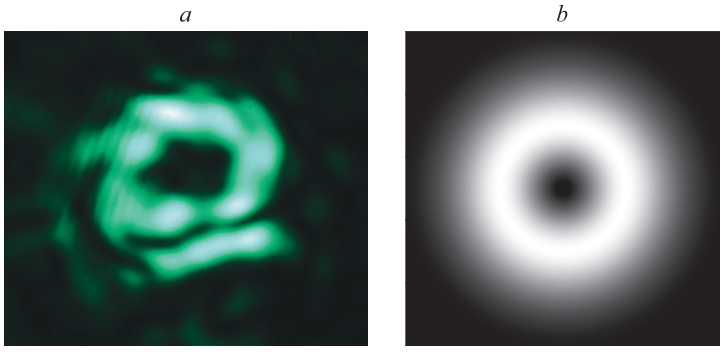

Fig. 1. Photo of the vortex beam (*a*)
and the result of numerical modelling of the singular beam profile (*b*)

Interference methods are widely used to determine the topological charge of an optical vortex. They involve the observation of special interference patterns when an optical vortex interferes with other waves. For example, when an optical vortex and a plane wave interfere, a characteristic fork is observed in the interference pattern (fig. 2, *a*). The light field intensity distribution of the interference pattern of an optical vortex and a plane wave can be described by the following formula:

$$I(x, y) \sim A_1^2 + A_2^2 \left(\frac{x^2 + y^2}{r_0^2} \right)^{|l|} + 2A_1A_2 \left(\frac{x^2 + y^2}{r_0^2} \right)^{\frac{|l|}{2}} \cos\left(\frac{2\pi x}{\Lambda} - l\,\mathrm{arctg}\left(\frac{y}{x} \right) \right).$$

Various methods can be used to produce optical vortices. One of them involves the use of in-cavity mold selection, where the Laguerre – Gaussian beam, a common example of a phase vortex beam, is generated in a cylindrically symmetric stable resonator. This is achieved by combining an associated Laguerre polynomial with a Gaussian distribution, and by fine-tuning the resonator's components, such as the cavity mirrors, to produce the desired Laguerre – Gaussian output.

Another innovative approach is the development of digital lasers, which represent a departure from conventional lasers that typically produce a single mode [10]. To access different modes in traditional setups, adjustments to the resonator's parameters are necessary. However, digital lasers, which have emerged in recent years, enable the generation of any desired laser mode, including vortex beams, without the need for structural modifications to the resonant cavity. This is accomplished through computer control, where varying electrical inputs dictate the laser's output, allowing for the creation of optical vortices.

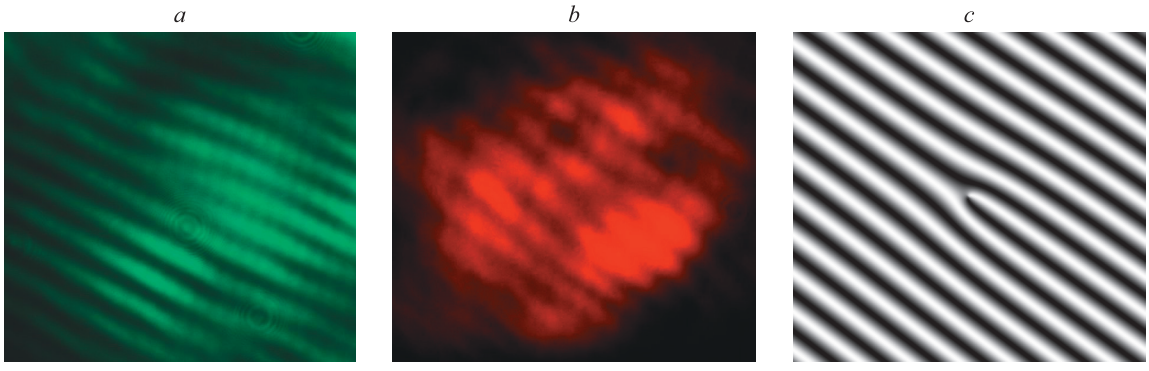

Fig. 2. Photography of the interference pattern of beams recording the hologram (*a*), beams restoring the hologram (*b*) and computer modelling (*c*)

Application a spiral phase plate (vortex lens) is an effective method for creating a vortex beam, characterised by its helical wavefront. This is achieved by transforming the wavefront of a standard Gaussian beam into a helical shape. By using a phase modulation device that imparts varying phase delays at different angular positions θ, the planar wavefront is reshaped into a helical form. A spiral phase plate, a type of optical element, facilitates this transformation [11].

Another approach involves the use of a fork-shaped grating (see fig. 2, *a*), a diffractive element with a specific fork-like profile. As a Gaussian beam pass this grating, in the diffraction pattern in the first order direction in the far field a vortex beam is formed. The topological charge of the vortex beam is determined by the number of grating splits. Due to their ease of fabrication and cost-effectiveness, fork-shaped gratings are widely used for vortex beam generation [12]. The simplest method of obtaining such a fork-shaped grating is to record a static hologram, which is formed as a result of interference of singular and plane waves. Such a hologram was used in the paper to obtain an optical vortex.

Photorefractive crystals

Photorefractive crystals are a class of nonlinear electro-optic materials known for its ability to dynamically record volume holograms. Their significance lies in their application within holographic storage solutions, playing a pivotal role in the development of advanced optical systems. These materials are integral to a wide are used in range of technologies including adaptive interferometry, associative memory systems, optical amplification, and the field of holographic recording and data management. The underlying mechanism of hologram formation within photorefractive crystals revolves around the spatial redistribution of electric charges under the influence of the light field in the interference pattern. This redistribution occurs between different parts of the crystal, as a result of which they acquire different optical properties under the action of the light field. Notable examples of photorefractive materials include lithium niobate ($LiNbO_3$), barium titanate ($BaTiO_3$), bismuth silicon oxide (BSO), and bismuth germanium oxide (BGO) [13].

The focus of this study is recording holograms of singular beams in sillenite-type photorefractive crystals. Sillenites have garnered significant attention in the photorefractive domain due to their exceptional sensitivity and minimal energy requirements for pulse recording ~1–10 mJ · cm^{-2} [14; 15]. In sillenite crystals, the photorefractive effect arises from the activity of both electrons and holes, contributing to the demonstration of two types of photoconductivity. Although electron-driven conductivity predominates, the presence of hole migration tempers the resultant space charge field from the electron grating, leading to a dynamic equilibrium between the two types of charge carriers.

Experimental setup and results

To study the processes of recording dynamic holograms in photorefractive crystals, an experimental setup was assembled, the scheme of which is shown in the fig. 3. The second harmonic of pulsed Nd : YAG laser *1* with wavelength $\lambda = 532$ nm and a pulse duration of 20 ns was used as a recording source. Then the laser radiation is divided into two identical beams by a semi-transparent mirror *8*. A plate *9* with an already recorded hologram of a singular beam in photopolymer was placed on the path of one of the beams. Mirror *3* directed the reconstructed singular beam to the crystal as a signal beam. Another beam from semi-transmitting mirror *8* was also directed to the crystal by mirror *4* as a reference wave. As a result of interference of these beams in the crystal a hologram was formed.

The resulting hologram was reconstructed using a continuous helium-neon laser *11*. To determine the topological charge, both the transmitted and diffracted beams of this laser were used in the interference scheme.

This scheme includes mirrors *6* and *7* as well as a dividing cube *13*. To equalise the intensities of the waves involved in the interference, a neutral light filter *12* was installed on the path of the passed wave. The obtained interference pattern was recorded using camera *14*.

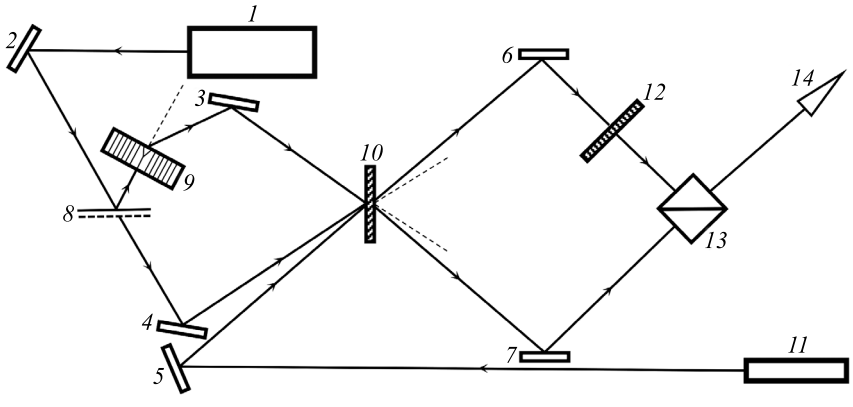

Fig. 3. Scheme of the experimental setup for recording dynamic hologram of singular beam in bismuth silicate crystal:
1 – Nd : YAG laser (second harmonic, 532 nm);
2, *3*, *4*, *5*, *6*, *7* – mirrors; *8* – semi-transmitting mirror;
9 – vortex grating ($l = 1$); *10* – BSO crystal; *11* – helium-neon laser (632.8 nm);
12 – neutral optical filter; *13* – divide cube; *14* – CD camera

Figure 1 shows images of the singular beam, which was used as a signal wave for recording the pulse hologram and the result of numerical modelling of the singular beam profile. As can be seen from the figure, the obtained beam has a «doughnut-like» of the spatial intensity distribution with a minimum in the center, which is characteristic of an optical vortex.

The interference of an optical vortex and a plane wave in a bismuth silicate crystal resulted in the recording of the interference pattern shown in fig. 2, *a*, with a characteristic «fork». The obtained hologram can be reconstructed by helium-neon laser radiation by selecting the correct angle of incidence of radiation according to the Bragg condition. As a result of diffraction, we form a diffracted beam, which is an optical vortex. Further, the classical interference scheme of topological charge determination is used by determining the number of splits (additional lines) and the direction of the «fork». Figure 2, *b*, shows the interference pattern of the past and diffracted beam of the helium-neon laser. As you can see, the number of splits and their direction coincides with the topological charge of the fork-like diffraction structure used to record the grating in the crystal.

Conclusions

To record and recover singular dynamic holograms in photorefractive bismuth silicate crystals, we have developed an experimental scheme involving the use of a pulsed laser for record hologram and continuous laser light for its reconstruction. A static hologram, which is a fork-like diffraction grating was used as the source of the optical vortex. When light passes through it, an optical vortex propagates in the direction of the first order of diffraction. After reconstruction of the obtained dynamic hologram of the singular beam, two beams (the passed and the reconstructed beams) were observed at the crystal exit. These beams were brought together and an interference pattern with a characteristic fork was recorded on the CD camera. A distinctive feature of this scheme is the use of the passed beam as a plane wave source for the interference analyses of the topological charge of the optical vortex. As many photorefractive crystals have optical activity, the use of two passing beams can compensate the effect of optical activity and obtain a high quality interference pattern with a high visibility value.

References

1. Nye JF, Berry MV. Dislocations in wave trains. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences.* 1974;336(1605):165–190.

2. Courtial J, Dholakia K, Allen L, Padgett MJ. Gaussian beams with very high orbital angular momentum. *Optics Communications.* 1997;144(4–6):210–213. DOI: 10.1016/S0030-4018(97)00376-3.

3. Romanov OG, Gorbach DV, Tolstik AL. Frequency transformation of optical vortices upon nondegenerate multiwave interaction in dye solutions. *Optics and Spectroscopy.* 2010;108(5):768–773. DOI: 10.1134/S0030400X10050152.

4. Tolstik AL. Singular dynamic holography. *Russian Physics Journal.* 2016;58(10):1431–1440. DOI: 10.1007/s11182-016-0665-3.

5. Pochi Yeh. *Introduction to photorefractive nonlinear optics.* New York: Wiley; 1993. 410 p.

6. Kornienko T, Kisteneva M, Shandarov S, Tolstik A. Light-induced effects in sillenite crystals with shallow and deep traps. *Physics Procedia.* 2017;86:105–112. DOI: 10.1016/j.phpro.2017.01.029.

7. Dadenkov IG, Tolstik AL, Miksyuk YuI, Saechnikov KA. Photoinduced absorption and pulsed recording of dynamic holograms in bismuth silicate crystals. *Optics and Spectroscopy.* 2020;9:1401–1406. DOI: 10.1134/S0030400X20090052.

8. Zhi Hao Jiang, Werner DH. *Electromagnetic vortices: wave phenomena and engineering applications.* [S. l.]: Wiley; 2022. 496 p. DOI: 10.1002/9781119662945.

9. Allen L, Beijersbergen MW, Spreeuw RJC, Woerdman JP. Orbital angular momentum of light and the transformation of Laguerre – Gaussian laser modes. *Physical Review A.* 1992;45(11):8185–8189. DOI: 10.1103/PhysRevA.45.8185.

10. Ngcobo S, Litvin I, Burger L, Forbes A. A digital laser for on-demand laser modes. *Nature Communications.* 2013;4:2289. DOI: 10.1038/ncomms3289.

11. Galinier L, Renaud-Goud P, Brusau J, Kergadallan L, Augereau J, Simon B. Spiral diopter: freeform lenses with enhanced multifocal behavior. *Optica.* 2024;11(2):238–244. DOI: 10.1364/OPTICA.507066.

12. Shiyao Fu, Chunqing Gao. *Optical vortex beams.* Singapore: Tsinghua University Press; 2023. 362 p. Chinese. DOI: 10.1007/978-981-99-1810-2.

13. Bjelkhagen HI. Holographic recording materials and their processing. In: Guenther RD, Steel DG, Bayvel L, editors. *Encyclopedia of modern optics. Volume 2.* Oxford: Elsevier; 2004. p. 47–57.

14. Dadenkov IG, Tolstik AL, Miksiuk YI, Saechnikov KA. Pulse recording of dynamic holograms in bismuth silicate crystal in a broad wavelength range. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics.* 2022;22(6):1025–1030. Russian. DOI: 10.17586/2226-1494-2022-22-6-1025-1030.

15. Tolstik AL, Ivakin EV, Dadenkov IG. Light beam transformation and material diagnostics by dynamic holography methods. *Journal of Applied Spectroscopy.* 2023;90(2):407–413. DOI: 10.1007/s10812-023-01547-1.

Received 18.04.2024 / revised 22.04.2024 / accepted 21.05.2024.

УДК 535.343.32, 543.421/.424

КЛАССИФИКАЦИЯ ГЕОГРАФИЧЕСКОГО ПРОИСХОЖДЕНИЯ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ТРАВ С ПОМОЩЬЮ МНОГОПАРАМЕТРИЧЕСКОГО СПЕКТРАЛЬНОГО АНАЛИЗА

П. С. КОЛОДОЧКА[1]***, М. А. ХОДАСЕВИЧ***[1]

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

Аннотация. На примере ромашки аптечной, изготовленной в России и Беларуси, проведена классификация географического происхождения и производителя лекарственных трав методами многопараметрического анализа спектров оптической плотности 70 % спиртовых настоек в диапазоне длин волн 230–2600 нм. Для построения классификационных моделей применялись метод главных компонент, метод построения деревьев классификации и метод выбора спектральных переменных. Метод главных компонент позволяет существенно уменьшить размерность пространства признаков, в котором осуществляется построение деревьев классификации. Максимальное количество рассматриваемых главных компонент ограничено величиной 10, что дает возможность описать более 0,999 общей дисперсии измеренных спектров. Деревья классификации при проведении десятикратной кросс-валидации идентифицируют страну происхождения образцов в четырехмерном пространстве и производителя в трехмерном пространстве главных компонент широкополосных спектров оптической плотности с точностью более 0,93. Ранжирование спектральных переменных в порядке уменьшения модуля среднего отклонения оптической плотности от усредненной величины позволяет повысить точность классификационных моделей. Достоверная классификация географического происхождения ромашки аптечной достигается в пространстве главных компонент 20 из 2623 переменных, имеющихся в широкополосных спектрах. Точность классификации производителя была повышена до 0,94 за счет выбора 14 спектральных переменных.

Ключевые слова: спектральный анализ; метод главных компонент; дерево классификации; выбор спектральных переменных; лекарственное растительное сырье.

Образец цитирования:
Колодочка ПС, Ходасевич МА. Классификация географического происхождения лекарственных трав с помощью многопараметрического спектрального анализа. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2024;3:10–16.
EDN: WPFCRK

For citation:
Kolodochka PS, Khodasevich MA. Classification of the geographical origin of medicinal herbs using multivariate spectral analysis. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2024;3:10–16. Russian.
EDN: WPFCRK

Авторы:
Полина Сергеевна Колодочка – младший научный сотрудник центра «Диагностические системы».
Михаил Александрович Ходасевич – доктор физико-математических наук, доцент; главный научный сотрудник центра «Диагностические системы».

Authors:
Polina S. Kolodochka, junior researcher at the centre «Diagnostic systems».
kolodochka.p@gmail.com
Mikhail A. Khodasevich, doctor of science (physics and mathematics), docent; chief researcher at the centre «Diagnostic systems».
m.khodasevich@tut.by

CLASSIFICATION OF THE GEOGRAPHICAL ORIGIN OF MEDICINAL HERBS USING MULTIVARIATE SPECTRAL ANALYSIS

***P. S. KOLODOCHKA*[a], *M. A. KHODASEVICH*[a]**

[a]*B. I. Stepanov Institute of Physics, National Academy of Sciences of Belarus, 68 Niezaliezhnasci Avenue, Minsk 220072, Belarus*

Corresponding author: P. S. Kolodochka (kolodochka.p@gmail.com)

Abstract. Classification of the geographical origin and manufacturer of medicinal herbs was carried out by multivariate analysis of the optical density spectra of 70 % alcohol tinctures in the wavelength range 230–2600 nm using the example of chamomile from Russia and Belarus. Principal component analysis, classification and regression tree method, and spectral variable selection were used to build the models. The principal component analysis allows one to significantly reduce the dimension of the feature space. Classification and regression trees are being constructed in it. The maximum number of principal components considered is limited to 10, which made it possible to describe more than 0.999 of the total dispersion of the measured spectra. Classification and regression trees with tenfold cross-validation classify the country of origin of samples in a four-dimensional space and the manufacturer in a three-dimensional space of the principal components of broadband optical density spectra with an accuracy of more than 0.93. Ranking the spectral variables in decreasing order of the absolute value of the average deviation of optical density from the average value made it possible to improve the accuracy of classification models. A reliable classification of the geographical origin of chamomile is achieved in the space of principal components of 20 variables out of 2623 available in the broadband spectra. The manufacturer's classification accuracy was improved to 0.94 by selecting 14 spectral variables.

Keywords: spectral analysis; principal component analysis; classification and regression tree; spectral variable selection; medicinal herbs.

Введение

Широкое использование лекарственного растительного сырья (ЛРС) на протяжении многих столетий является основой народной медицины. Научные исследования ЛРС ограничены отсутствием общепринятой исследовательской методологии для оценки нетрадиционной медицины [1]. Для определения качества и подлинности ЛРС при качественном и количественном анализе отдельных трав или многокомпонентных препаратов, как правило, используются один или два фармакологически активных компонента. Такая оценка не дает полного представления о ЛРС, поскольку за терапевтический эффект может отвечать множество активных компонентов, которые трудно или невозможно разделить. Кроме того, набор и содержание химических компонентов, входящих в состав ЛРС, могут варьироваться в зависимости от сезона сбора, географического происхождения, процессов заготовки и многих других факторов. В связи с этим для идентификации ЛРС можно использовать «отпечаток пальца» [2] – характерный профиль, который отражает сложный химический состав анализируемого образца и может быть получен с помощью хроматографических, спектроскопических или иных методов. Этот профиль должен характеризоваться фундаментальными признаками сходства и различия. С помощью «отпечатков пальцев» можно с некоторой вероятностью определять подлинность ЛРС и идентифицировать его [3–5], даже если набор и (или) концентрации характерных компонентов отличаются для разных образцов.

Целью проводимого исследования являются разработка модели классификации, основанной на применении «отпечатков пальцев» в ультрафиолетовой, видимой и ближней инфракрасной абсорбционной спектроскопии с использованием метода главных компонент (*principal component analysis*, PCA) и метода построения деревьев классификации (*classification and regression tree*, CART), для определения географического происхождения и производителя ЛРС на примере ромашки аптечной и повышение точности классификации с помощью выбора спектральных переменных.

Материалы и методы исследования

Спектры оптической плотности 70 % спиртовых настоек образцов ромашки аптечной были зарегистрированы на спектрофотометре Shimadzu UV-3101PC (Япония) со спектральной шириной щели 1 нм в диапазоне длин волн 230–480 нм с шагом 0,5 нм и в диапазоне длин волн 480–2600 нм с шагом 1 нм. Выбранная ширина щели на порядок меньше характерных ширин особенностей спектров рассматриваемых объектов. Для проведения исследований использовалась ромашка аптечная двух производителей из Беларуси (Могилёвская и Витебская области; суммарно 38 образцов) и двух производителей из России (Тверь и Алтайский край; суммарно 35 образцов).

В качестве метода исследований применялась оптическая абсорбционная спектроскопия, объектами исследования являлись спиртоводные настойки лекарственного сырья. Для анализа спектров использовались методы PCA [6] и CART [7].

В данном исследовании метод PCA применяется для анализа информации, выявления выбросов и уменьшения размерности пространства признаков, в котором будет проводиться классификация образцов. Вместо исходного множества спектральных переменных набор данных может быть описан с использованием небольшого количества главных компонент без значительной потери данных. Подробно основы метода PCA изложены в статье [8].

В настоящей работе дерево классификации строится в пространстве найденных главных компонент [9–12]. Используется следующий наиболее часто встречающийся алгоритм реализации метода CART. В пространстве главных компонент все образцы разбиваются на две группы различным образом. Далее выбирается вариант разбиения, при котором максимальное количество образцов одного класса попадают в одну группу (это первый узел дерева). Дальнейшее разбиение продолжается подобным образом до тех пор, пока не будет достигнуто ограничивающее условие. В данном случае таким условием является ухудшение точности классификационной модели при проведении десятикратной кросс-валидации.

Результаты и их обсуждение

Перед применением метода PCA выполнялась предварительная обработка спектров посредством центрирования. После этого проводилось уменьшение размерности матрицы исходных данных (2623 спектральных переменных) с помощью PCA. На этапе применения PCA учитывается избыточное количество главных компонент, ограниченное величиной 10. На рис. 1 показано, что 10 главных компонент описывают 0,999 2 общей дисперсии данных. На этапе построения классификационных моделей выбираются компоненты, которые являются наиболее значимыми для определения страны происхождения и производителя лекарственного средства. Ниже показано, что количество таких компонент не превышает 5.

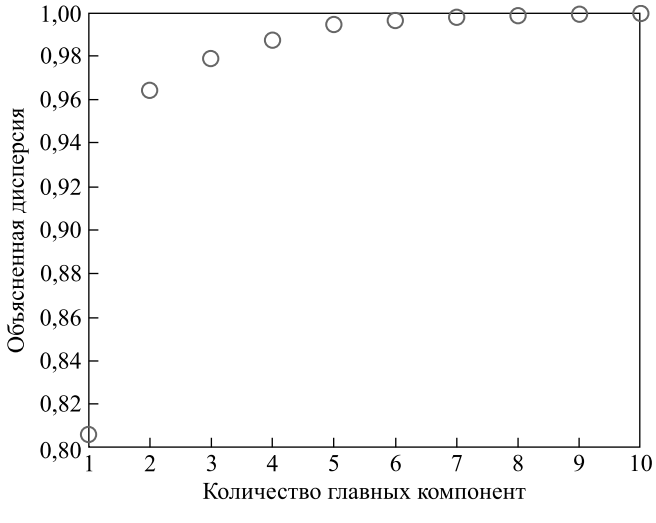

Рис. 1. Объясненная дисперсия спектров оптической плотности 73 настоек ромашки аптечной в зависимости от количества главных компонент

Fig. 1. Explained dispersion of the optical density spectra of 73 chamomile tinctures depending on the number of principal components

На рис. 2 изображены счета в пространстве наиболее информативных первой (PC1) и второй (PC2) главных компонент, которые суммарно описывают более 0,96 дисперсии данных. Видно, что на двумерном графике два образца ЛРС одного из российских производителей попадают в кластеры, состоящие из продукции других производителей. При этом с точки зрения определения страны происхождения значимым является попадание в кластеры, состоящие из продукции белорусских производителей. Попадание обозначенного кружком образца в кластер продукции, обозначенной звездочкой, не сказывается на точности определения страны происхождения, а существенно только при определении региона производства в пределах одной страны.

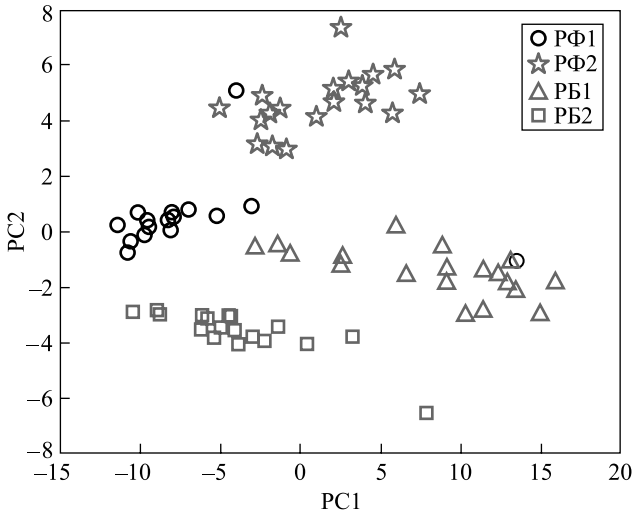

Рис. 2. Счета спектров оптической плотности настоек ромашки аптечной в пространстве первой и второй главных компонент (РФ1, РФ2 – российские производители; РБ1, РБ2 – белорусские производители)

Fig. 2. First and second principal components scores of the optical density spectra of chamomile tinctures (РФ1, РФ2 – Russian manufacturers; РБ1, РБ2 – Belarusian manufacturers)

Классификационное дерево было построено на основе полученных 10 главных компонент с применением десятикратной кросс-валидации. Оно представлено на рис. 3. Точность определения географического происхождения ромашки аптечной составила более 0,93.

Из рис. 3 видно, что для построения модели использовались только первая (PC1), вторая (PC2), четвертая (PC4) и пятая (PC5) главные компоненты. Можно сделать вывод о том, что именно они несут в себе информацию, наиболее полезную для классификации географического происхождения рассматриваемого ЛРС методом CART в пространстве главных компонент широкополосных спектров оптической плотности 70 % спиртовых настоек. В пространстве тех же главных компонент была построена модель CART для классификации ромашки аптечной по производителю (рис. 4), точность которой при десятикратной кросс-валидации превышает 0,93.

Классификационное дерево для определения производителя ромашки аптечной может также выполнять функцию определения географического происхождения образцов. Модели на рис. 3 и 4 показывают вариативность классификационных деревьев: различные модели могут характеризоваться одинаковой точностью. Однако классификация географического происхождения ромашки аптечной является более универсальной, поскольку не ограничена четырьмя производителями, но требует дополнительной валидации.

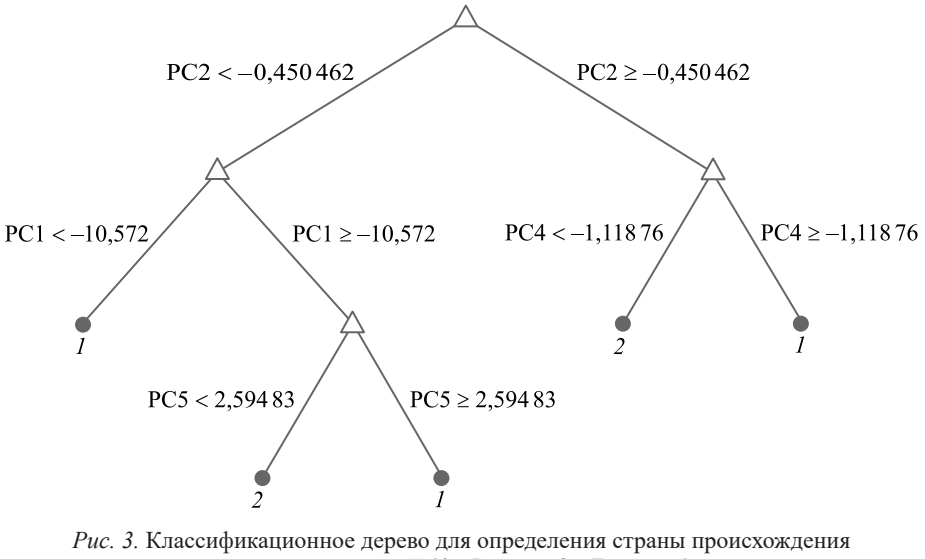

Рис. 3. Классификационное дерево для определения страны происхождения ромашки аптечной (*1* – Россия; *2* – Беларусь)

Fig. 3. Classification tree for determining the country origin of chamomile (*1* – Russia; *2* – Belarus)

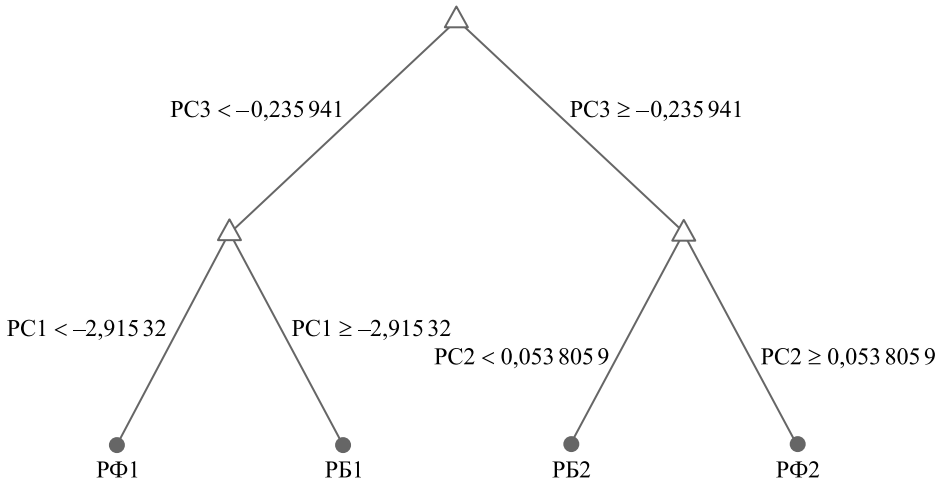

Рис. 4. Классификационное дерево для определения производителя ромашки аптечной

Fig. 4. Classification tree for determining the manufacturer of chamomile

Для повышения точности классификации ко всему спектральному диапазону был применен метод выбора спектральных переменных по значению модуля среднего по всем образцам отклонения оптической плотности от усредненной величины (рис. 5). Количество выбранных спектральных переменных должно превышать количество рассматриваемых главных компонент. По этой причине метод PCA был реализован для пространств спектральных переменных размерности от 11 до 2623, т. е. от 11 спектральных переменных, характеризующихся наибольшими величинами сортирующего параметра, до всего измеренного спектра в диапазоне длин волн 230–2600 нм, который был упорядочен по убыванию модуля среднего отклонения оптической плотности от усредненной величины.

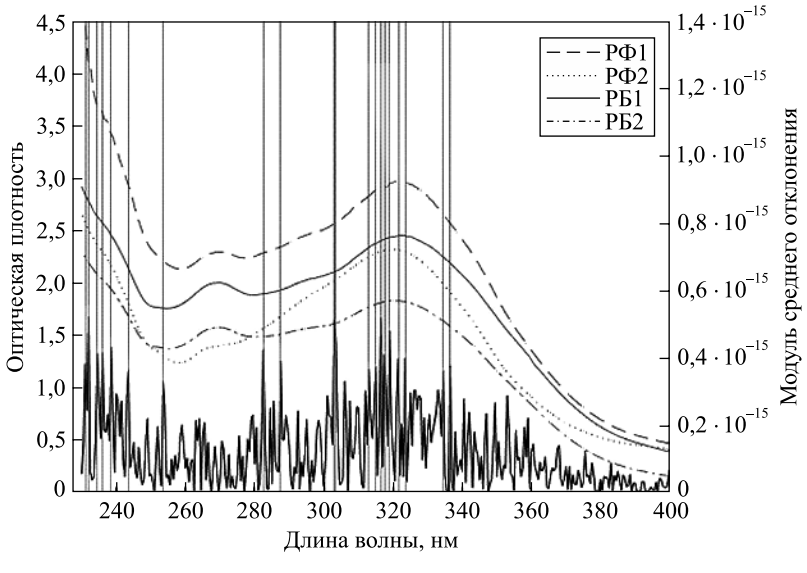

Рис. 5. Модуль среднего отклонения оптической плотности от усредненной величины (график черного цвета), спектры оптической плотности 70 % спиртовых настоек образцов ромашки аптечной и выбранные для проведения классификации страны происхождения 20 спектральных переменных (вертикальные линии)

Fig. 5. Absolute value of the average deviation of optical density from the average value (black graph), optical density spectra of 70 % alcohol tinctures of chamomile samples and 20 spectral variables (vertical lines) selected for country origin classification

Существенно возросшие потребности вычислительных ресурсов, по сравнению с классификацией по широкополосным спектрам, привели к ограничению размерности пространства главных компонент для построения классификационного дерева величиной не более 3. Классификационные модели были

разработаны для всех комбинаций 3 из 10 главных компонент, построенных в пространствах выбираемых спектральных переменных. Таким образом, одновременно решались две задачи. Первая задача заключалась в выборе спектральных переменных из их упорядоченного множества и построении десятимерного пространства главных компонент. Вторая задача состояла в построении калибровочной модели максимальной точности в пространстве главных компонент размерности не более 3 из 10 рассматриваемых главных компонент. На рис. 5 представлены выбранные для построения оптимальной модели 20 спектральных переменных вместе со спектрами оптической плотности случайных образцов ромашки аптечной из каждой группы. Дерево, наиболее точно классифицирующее географическое происхождение данного ЛРС, представлено на рис. 6. Классификационное дерево в двумерном пространстве третьей (PC3) и четвертой (PC4) главных компонент, построенном по 20 выбранным спектральным переменным, характеризуется достоверностью классификации рассмотренных образцов ромашки аптечной при проведении десятикратной кросс-валидации.

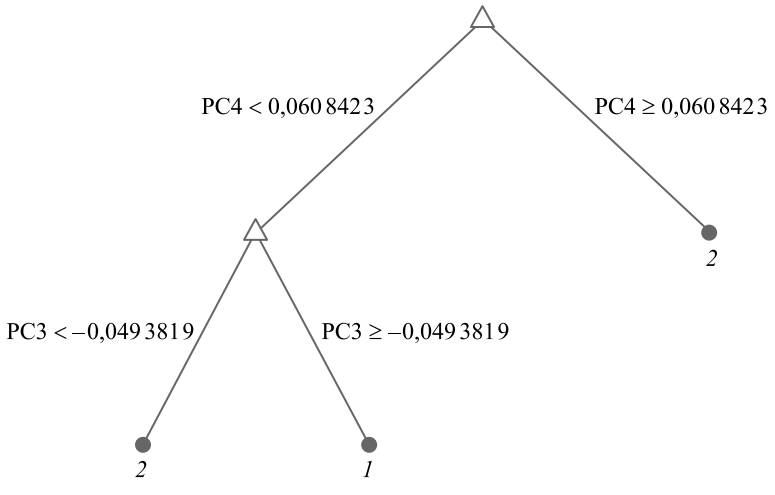

Рис. 6. Классификационное дерево для определения страны происхождения ромашки аптечной (*1* – Россия; *2* – Беларусь) с выбором спектральных переменных

Fig. 6. Classification tree for determining the country origin of chamomile (*1* – Russia; *2* – Belarus) with spectral variable selection

Аналогичный метод выбора спектральных переменных был применен и для улучшения модели классификации ромашки аптечной по производителю. Наилучшая точность (более 0,94) была достигнута в пространстве второй (PC2), третьей (PC3) и пятой (PC5) главных компонент (рис. 7) при выборе 14 спектральных переменных (рис. 8). В этом случае удалось добиться незначительного повышения точности классификации. Такая особенность согласуется с более высокой сложностью задачи классификации производителя по сравнению с задачей классификации географического происхождения.

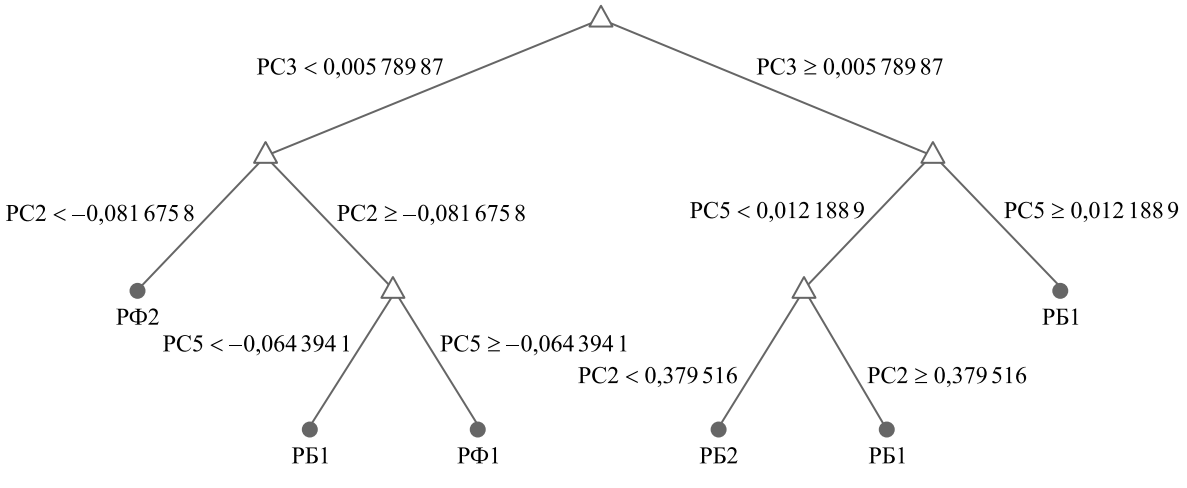

Рис. 7. Классификационное дерево для определения производителя ромашки аптечной

Fig. 7. Classification tree for determining the manufacturer of chamomile

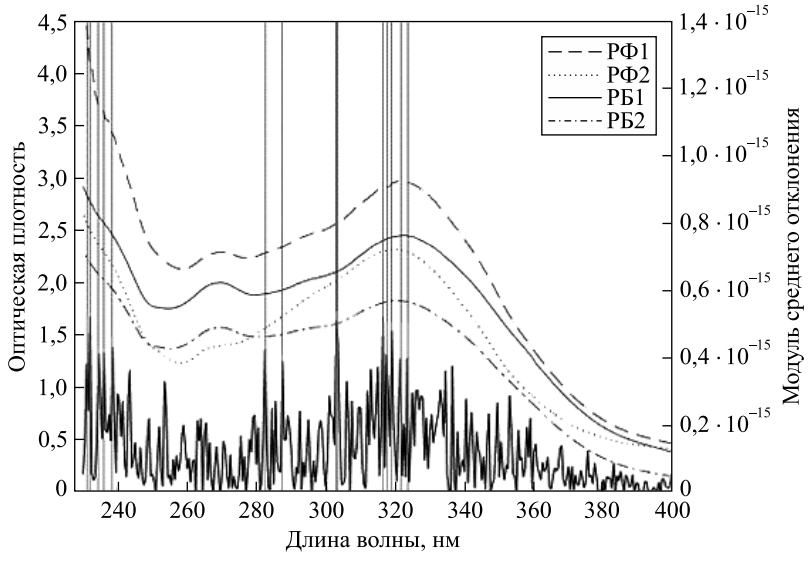

Рис. 8. Модуль среднего отклонения оптической плотности от усредненной величины (график черного цвета), спектры оптической плотности 70 % спиртовых настоек образцов ромашки аптечной и выбранные для проведения классификации производителя 14 спектральных переменных (вертикальные линии)

Fig. 8. Absolute value of the average deviation of optical density from the average value (black graph), optical density spectra of 70 % alcohol tinctures of chamomile samples and 14 spectral variables (vertical lines) selected for manufacturer classification

Заключение

В работе продемонстрированы возможности применения методов многопараметрического анализа для построения моделей классификации географического происхождения и производителя ЛРС по спектрам оптической плотности спиртовых настоек.

Использование метода выбора спектральных переменных по уменьшению модуля средней по всем образцам величины разброса оптической плотности для построения маломерного пространства главных компонент и применения в нем методов кластерного анализа позволило достичь достоверной классификации образцов ромашки аптечной российского и белорусского производства. Достигнутая точность определения производителя данного лекарственного сырья составила 0,94, что достаточно для практического применения.

Библиографические ссылки

1. Liang Y-Z, Xie P, Chan K. Quality control of herbal medicines. *Journal of Chromatography B.* 2004;812(1–2):53–70. DOI: 10.1016/j.jchromb.2004.08.041.

2. Noviana E, Indrayanto G, Rohman A. Advances in fingerprint analysis for standardization and quality control of herbal medicines. *Frontiers in Pharmacology.* 2022;13:853023. DOI: 10.3389/fphar.2022.853023.

3. Wang P, Yu Z. Species authentication and geographical origin discrimination of herbal medicines by near infrared spectroscopy: a review. *Journal of Pharmaceutical Analysis.* 2015;5(5):277–284. DOI: 10.1016/j.jpha.2015.04.001.

4. Klein LC Jr, de Souza MR, Viaene J, Bresolin TMB, de Gasper AL, Henriques AT, et al. Quality control of herbal medicines: from traditional techniques to state-of-the-art approaches. *Planta Medica.* 2021;87(12–13):964–988. DOI: 10.1055/a-1529-8339.

5. Chen R, Liu F, Zhang C, Wang W, Yang R, Zhao Y, et al. Trends in digital detection for the quality and safety of herbs using infrared and Raman spectroscopy. *Frontiers in Plant Science.* 2023;14:1128300. DOI: 10.3389/fpls.2023.1128300.

6. Drivelos SA, Georgiou CA. Multi-element and multi-isotope-ratio analysis to determine the geographical origin of foods in the European Union. *Trends in Analytical Chemistry.* 2012;40:38–51. DOI: 10.1016/j.trac.2012.08.003.

7. Resce G, Vaquero-Piñeiro C. Predicting agri-food quality across space: a machine learning model for the acknowledgment of geographical indications. *Food Policy.* 2022;112:102345. DOI: 10.1016/j.foodpol.2022.102345.

8. Li S, Yu X, Zhen Z, Huang M, Lu J, Pang Y, et al. Geographical origin traceability and identification of refined sugar using UPLC-QTof-MS analysis. *Food Chemistry.* 2021;348:128701. DOI: 10.1016/j.foodchem.2020.128701.

9. Bro R, Smilde AK. Principal component analysis. *Analytical Methods.* 2014;6(9):2812–2831. DOI: 10.1039/C3AY41907J.

10. Loh W-Y. Fifty years of classification and regression trees. *International Statistical Review.* 2014;82(3):329–348. DOI: 10.1111/insr.12016.

11. Mishra S, Datta-Gupta A. *Applied statistical modeling and data analytics: a practical guide for the petroleum geosciences.* [S. l.]: Elsevier; 2018. Chapter 5, Multivariate data analysis; p. 97–118. DOI: 10.1016/B978-0-12-803279-4.00005-5.

12. Kolodochka PS, Khodasevich MA. Classification of sugar types by UV-VIS-NIR spectroscopy and multivariate analysis. In: *The 12th International conference on photonics and applications (ICPA-12); 2022 September 28 – October 1; Con Dao, Ba Ria – Vung Tau, Vietnam.* [S. l.]: [s. n.]; 2023. p. 244–247.

Получена 11.06.2024 / исправлена 17.07.2024 / принята 28.07.2024.
Received 11.06.2024 / revised 17.07.2024 / accepted 28.07.2024.

УДК 54.057 + 542.973 + 544.526.2 + 535.243.2

СИНТЕЗ И ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ ГЕТЕРОСТРУКТУР TiO_2/Ti

М. А. ЕВСЕЙЧИК[1)]***, Л. С. ХОРОШКО***[1), 2)]***, Д. И. ГАГЛОЕВА***[3)]***,***
С. А. ХУБЕЖОВ[4)]***, А. В. БАГЛОВ***[1), 2)]***, И. И. МАКОЕД***[5)]***,***
Ш. И. МАМАТКУЛОВ[6)]***, М. Д. ПЕЧЕРСКАЯ***[6)]***, Д. В. ЯКИМЧУК***[7)]

[1)]*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,*
ул. П. Бровки, 6, 220013, г. Минск, Беларусь
[2)]*Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Беларусь*
[3)]*Северо-Осетинский государственный университет им. К. Л. Хетагурова,*
ул. Ватутина, 44–46, 362025, г. Владикавказ, Россия
[4)]*Центр инноваций и развития*
Харбинского инженерного университета, 266000, г. Циндао, Китай
[5)]*Брестский государственный университет им. А. С. Пушкина,*
бул. Космонавтов, 21, 224016, г. Брест, Беларусь
[6)]*Институт материаловедения научно-производственного объединения*
«Физика – Солнце» Академии наук Республики Узбекистан,
ул. Чингиза Айтматова, 2б, 100084, г. Ташкент, Узбекистан
[7)]*Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению,*
ул. П. Бровки, 19, 220072, г. Минск, Беларусь

Аннотация. Методом химического структурирования с последующим отжигом на основе титановой фольги получена гетероструктура TiO_2/Ti с развитой сетчато-игольчатой поверхностью, сформированной квазиупорядоченно пересекающимися нанонитями диоксида титана со средней толщиной 55 нм. По результатам рентгеновского

Образец цитирования:
Евсейчик МА, Хорошко ЛС, Гаглоева ДИ, Хубежов СА, Баглов АВ, Макоед ИИ, Маматкулов ШИ, Печерская МД, Якимчук ДВ. Синтез и фотокаталитическая активность гетероструктур TiO_2/Ti. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2024;3:17–24.
EDN: RJKHKS

For citation:
Yauseichyk MA, Khoroshko LS, Gagloeva DI, Khubezhov SA, Baglov AV, Makoed II, Mamatkulov ShI, Pecherskaya MD, Yakimchuk DV. Synthesis and photocatalytic activity of TiO_2/Ti heterostructures. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2024;3:17–24. Russian.
EDN: RJKHKS

Сведения об авторах см. на с. 24.

Information about the authors see p. 24.

CC BY NC

дифракционного анализа и спектроскопии комбинационного рассеяния света установлено образование на поверхности титановой фольги после химической и последующей термической обработки тонкого структурированного оксидного слоя, состоящего из смеси полиморфных модификаций TiO_2 – анатаза и рутила, причем анатаз является доминирующей фазой. Фотокаталитическая активность гетероструктуры TiO_2/Ti в отношении модельного загрязнителя метиленового синего в водном растворе при активации УФ-излучением (365 нм) приводит к деградации 9 % красителя в течение 50 мин, что является высоким показателем для тонких пленок. Полученные структурированные фотокаталитически активные слои диоксида титана могут применяться в портативных устройствах очистки воды и воздуха, а также благодаря высокоразвитой поверхности могут стать основой для сенсорных устройств и плазмонных материалов.

Ключевые слова: наноструктуры; диоксид титана; фотокатализ; функциональные наноматериалы.

Благодарность. Исследования выполнены в рамках проекта Ф23УЗБ-061.

SYNTHESIS AND PHOTOCATALYTIC ACTIVITY OF TiO_2/Ti HETEROSTRUCTURES

M. A. YAUSEICHYK*[a], *L. S. KHOROSHKO*[a, b], *D. I. GAGLOEVA*[c], *S. A. KHUBEZHOV*[d], *A. V. BAGLOV*[a, b], *I. I. MAKOED*[e], *Sh. I. MAMATKULOV*[f], *M. D. PECHERSKAYA*[f], *D. V. YAKIMCHUK*[g]

[a]*Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, 6 P. Browki Street, Minsk 220013, Belarus*
[b]*Belarusian State University, 4 Niezaliezhnasci Avenue, Minsk 220030, Belarus*
[c]*North Ossetian State University after K. L. Khetagurova, 44–46 Vatutina Street, Vladikavkaz 362025, Russia*
[d]*Innovation and Development Base, Harbin Engineering University, Qingdao 266000, China*
[e]*Brest State A. S. Pushkin University, 21 Kasmanawtaw Boulevard, Brest 224016, Belarus*
[f]*Institute of Material Science, Scientific Production Association «Physics – Sun», Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan, 2b Chingiz Aytmatov Street, Tashkent 100084, Uzbekistan*
[g]*Scientific and Practical Centre of the National Academy of Sciences of Belarus for Materials Science, 19 P. Browki Street, Minsk 220072, Belarus*

Corresponding author: A. V. Baglov (baglov@bsu.by)

Abstract. The heterostructure TiO_2/Ti with developed surface based on titanium foil was obtained by the chemical structuring and subsequent annealing. The surface of heterostructure formed by the quasi-ordered massive consists of nanowires with average diameter about 55 nm. According to the results of X-ray diffraction analysis and Raman spectroscopy, the formation of a thin structured oxide layer consisting of a mixture of polymorphic modifications of TiO_2 – anatase and rutile – on the surface was established herewith anatase-dominated. The photocatalytic activity of the heterostructure TiO_2/Ti against the model pollutant methylene blue in aqueous solution under UV-irradiation (365 nm) activation has been established at 9 % in 50 min, which is a good value for thin films. The obtained structured photocatalytically active titanium dioxide layers can be used in portable water and air purification devices and, due to the highly developed surface, become the basis for sensor devices and materials for plasmonics.

Keywords: nanostructures; titanium dioxide; photocatalysis; functional nanomaterials.

Acknowledgements. The studies were supported with the project F23UZB-061.

Введение

Диоксид титана TiO_2 на протяжении многих лет является одним из самых популярных и активно исследуемых материалов для гетерогенного фотокатализа [1–7]. Фотокаталитически активные материалы на основе диоксида титана отличаются сравнительной простотой технологии получения, вариативностью форм-фактора (порошковые и иммобилизованные катализаторы, наноструктурированный диоксид титана в виде нитей, столбиков и т. д.), а также наличием антибактериальной активности [6–8]. Среди полиморфных модификаций TiO_2 наиболее высокую эффективность разложения поллютантов

демонстрируют анатаз и рутил, характеризующиеся оптической шириной запрещенной зоны 3,0 и 3,2 эВ соответственно [1; 9; 10]. Брукит используется реже ввиду более сложной процедуры синтеза и стабилизации кристаллической фазы [2]. Главными недостатками диоксида титана как типичного широкозонного полупроводника являются его слабая чувствительность к видимому излучению и необходимость активации УФ-излучением. Повышение фотокаталитической активности материалов на основе диоксида титана может осуществляться как с помощью легирования для сенсибилизации к видимому излучению, так и за счет формирования высокоразвитой наноструктурированной поверхности, получение которой возможно химическими методами и сочетанием химических и термических методик.

Целью данной работы является исследование морфологии и фотокаталитической активности тонких слоев диоксида титана, получаемых на титановой фольге, путем сочетания методов химического и термического окисления.

Материалы и методы исследования

Диоксид титана на поверхности титановой фольги ВТ1-0 (ГОСТ 19807-91) получали двухстадийным методом (рис. 1). На первой стадии предварительно очищенную в 10 % растворе азотной кислоты фольгу термохимически окисляли в кипящем растворе пероксида водорода (30 %) в течение 10 мин, на второй стадии проводили отжиг образцов на воздухе при температуре 550 °С в течение 30 мин.

Морфологию полученных структур исследовали с применением сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) на микроскопе EVO10 (*Carl Zeiss*, Германия). Определение толщин нанонитей осуществляли с использованием программы *ImageJ*, статистический анализ проводили средствами пакета *MS Excel*. Фазовый состав оксидного слоя определяли методом рентгеновской дифракции (РД) на дифрактометре Maxima_X XRD-7000 (*Shimadzu*, Япония) с источником характеристического рентгеновского излучения CuK_α (λ = 1,540 6 Å). Запись данных производили в геометрии Брэгга – Брентано ($\theta - 2\theta$) с шагом 0,01° при обзорном исследовании и с шагом 0,005° при детальном изучении. Исследования методом рамановской спектроскопии (комбинационного рассеяния света (КРС)) проводили на зондовой нанолаборатории «ИНТЕГРА Спектра» (ООО «НТ-МДТ», Россия) с красным лазерным источником возбуждения (λ = 633 нм, P = 1 мВт).

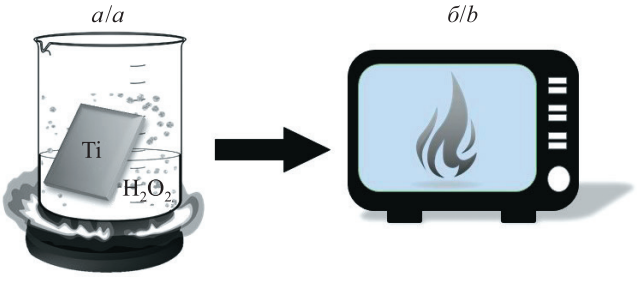

Рис. 1. Схематическое изображение этапов получения образцов TiO_2/Ti:
а – химическое окисление образца в 30 % растворе пероксида водорода;
б – термическое окисление на воздухе при 550 °С

Fig. 1. Schematic representation of the stages of obtaining TiO_2/Ti samples:
a – chemical oxidation of the sample in a 30 % solution of hydrogen peroxide;
b – thermal oxidation in air at 550 °C

Каталитическую активность структур определяли по изменению концентрации тестового загрязнителя – органического красителя метиленового синего ($C_{16}H_{18}N_3SCl$) – после воздействия на него УФ-излучения в присутствии образца TiO_2/Ti и в отсутствие образца TiO_2/Ti. Изменение концентрации оценивали по снижению интенсивности основного пика поглощения метиленового синего в водном растворе, которую определяли с помощью двухлучевого спектрофотометра Evolution 300 UV-Vis (*Thermo Electron Scientific Instruments LLC*, США) с разрешением 1 нм. Спектры регистрировали в диапазоне длин волн 400–800 нм со скоростью сканирования 1200 нм/мин. Концентрация красителя в исходном растворе составляла $5 \cdot 10^{-7}$ моль/л, реакционный объем раствора составлял 2 мл. В процессе исследования растворы в кварцевых кюветах помещали под УФ-источник (лампа Omnilux UV 400W E-40 (Германия), λ = 365 нм), спектры регистрировали каждые 10 мин. Для установления адсорбционного равновесия образцы выдерживали в тестовом растворе при темновом режиме (т. е. в условиях минимизации воздействия оптического излучения) в течение 30 мин.

Результаты и их обсуждение

Сочетание химической и термической обработки способствует более эффективному окислению титана, достаточно устойчивого к внешним воздействиям, за счет термостимулированного формирования поверхностного слоя оксида-дигидроксида титана $TiO(OH)_2$, который, в свою очередь, при дальнейшей термической обработке разрушается с образованием целевого оксида. На рис. 2, *а–в*, представлены изображения поверхности структуры TiO_2/Ti, полученные СЭМ-методом при различном увеличении. Данные изображения свидетельствуют о выраженном сетчато-игольчатом наноструктурированном рельефе оксидного слоя по всей поверхности образца, при большем увеличении также наблюдается формирование квазипериодической структуры (см. рис. 2, *в*).

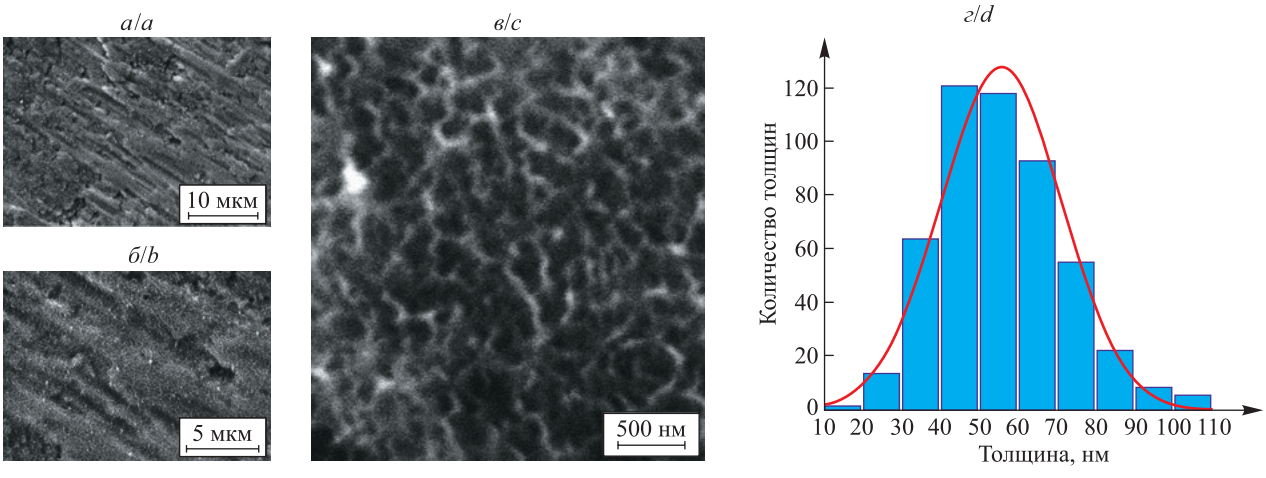

Рис. 2. СЭМ-изображения поверхности TiO_2/Ti, полученные при увеличении ×7000 (*а*), ×15 000 (*б*) и ×65 000 (*в*), и распределение толщин нанонитей оксидного слоя на поверхности титана (*г*)

Fig. 2. SEM images of the TiO_2/Ti surface obtained at the magnifications ×7000 (*a*), ×15 000 (*b*) and ×65 000 (*c*), and thickness distribution of nanowires of oxide layer on the titanium surface (*d*)

Наблюдаемый развитый поверхностный рельеф, который характеризуется игольчатой морфологией и квазиупорядоченной сетчатой структурой, состоящей из пересекающихся нанонитей, формируется за счет неравномерности диффузионных процессов, свойственной поверхности титановой фольги. Так, для высокочистого (99,99 %) титана и для титановых сплавов, включая используемый в настоящей работе сплав, характерны некоторые особенности начальных стадий термического окисления, проводимого при температурах ниже температур, соответствующих фазовому переходу в самом металле (800–900 °C). При стандартных условиях нагревания титана на воздухе окислительные процессы, приводящие к утолщению оксидного покрытия, начинают протекать при температурах выше 600 °C [11–14]. Слой естественного рентгеноаморфного оксида толщиной несколько нанометров (3 нм), который по соотношению титана и кислорода близок к соотношению титана и кислорода, содержащихся в TiO_2 [11; 15], образуется на поверхности титана при комнатной температуре (20 °C). В случае повышения температуры увеличивается скорость диффузии кислорода в титане, при этом его концентрация растет в основном в приповерхностном слое, сокращаясь на границе раздела оксид – металл, что способствует быстрому торможению и прекращению процесса термического окисления при отсутствии внешних влияющих факторов (дальнейшее повышение температуры или давления кислорода в реакционной камере). Толщины таких слоев не превышают обычно 100–200 нм [12; 14; 16]. Предварительная химическая обработка, включающая насыщение поверхности титана кислородом с образованием аморфных оксидов и гидроксидов, способна увеличить толщину термически окисляемого слоя на поверхности металлического титана в несколько раз. В частности, реакция титана с перекисью водорода начинается уже при комнатной температуре с образованием перекиси-дигидроксида [13]:

$$Ti + 3H_2O_2 = Ti(OH)_2O_2 + 2H_2O.$$

В свою очередь, полученное соединение при нагревании разлагается с формированием оксида, а дополнительное оксидирование поверхности способствует увеличению толщины образующегося оксида. В нашем эксперименте, исходя из количества раствора (250 мл) и площади фольги (5 × 5 × 2 см), при температуре около 115 °C и при допущении, что все возможные объемы реагентов вступили в реакцию за указанное время, объем полученной перекиси-гидроксида в пересчете на диоксид титана соответствует

толщине окисленного слоя около 200 нм[1]. Кроме того, взаимодействие титана с водным раствором пероксида водорода при повышенной температуре способствует дополнительному формированию на поверхности фольги ряда аморфных оксидных соединений титана Ti_xO_y, которые при дальнейшем отжиге на воздухе доокисляются в устойчивые формы TiO_2, причем различие коэффициентов теплового расширения в ряду оксидов титана приводит к образованию дополнительно развитого рельефа поверхности[2] [13]. Таким образом, исходя из режимов химического и термического окисления, толщина оксида в рассматриваемом случае не превышает 500 нм, более точная инструментальная оценка толщины слоя TiO_2 на данном этапе не осуществлялась, она является одной из целей дальнейших исследований.

Проведенный статистический анализ толщин нанонитей на случайно выбранных 30 участках фольги размером 15 × 10 мм (количество нанонитей на каждом участке равнялось (500 ± 5) шт.) показал, что толщины подчиняются нормальному закону распределения. Среднее значение толщины нанонитей составляет (55,68 ± 0,96) нм для 95 % доверительного интервала по Стьюденту, медианное значение – (54,06 ± 0,96) нм. Близость среднего и медианного значений толщин нанонитей свидетельствует о хорошей однородности процесса оксидирования используемой фольги при заданных режимах синтеза и применимости метода двухстадийного химико-термического окисления для получения наноструктурированных пленок TiO_2.

По результатам РД-анализа поверхностный слой структуры TiO_2/Ti состоит из смеси фаз анатаза и рутила (рефлексы в области значений 2θ равны 25° (JCPDS 71-1167) и 27,5° (JCPDS 75-1753) соответственно (вставка на рис. 3, *а*)). Соотношение пиков, полученных для титановой подложки (см. рис. 3, *а*, JCPDS 44-1294) и оксидного слоя, также свидетельствует о малой толщине формируемого TiO_2.

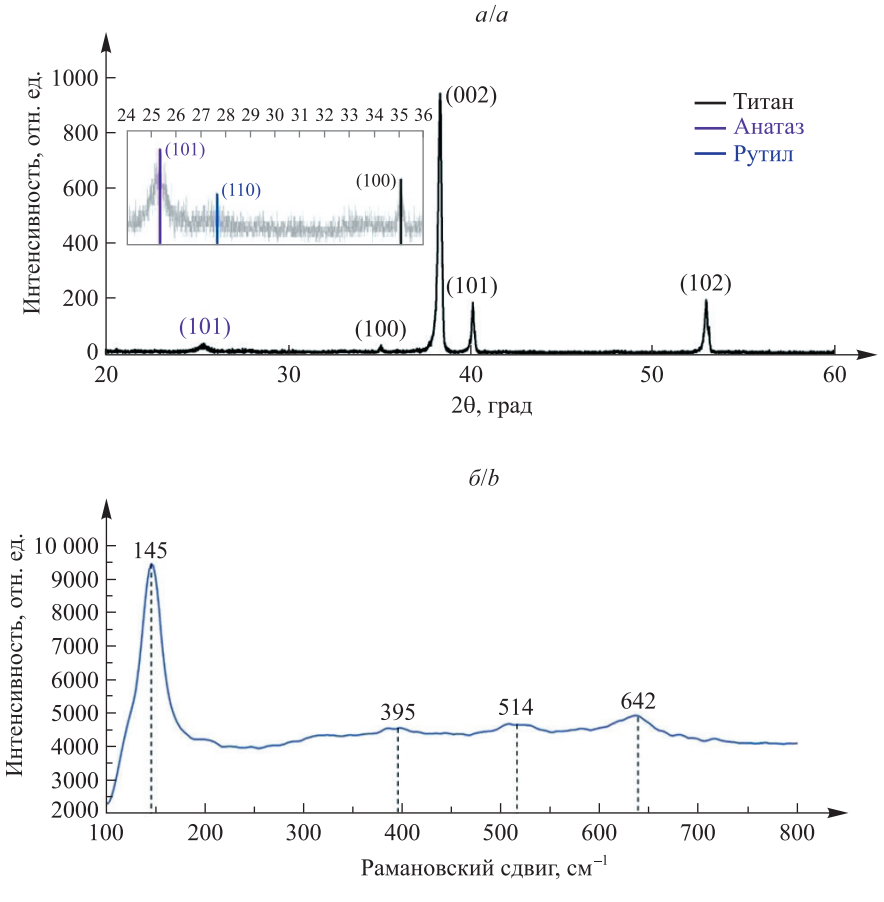

Рис. 3. Дифрактограмма гетероструктуры TiO_2/Ti (на вставке представлена дифрактограмма, полученная с шагом 0,005°) (*а*) и спектры КРС TiO_2/Ti (*б*)

Fig. 3. Diffractogram of TiO_2/Ti heterostructure (on the insert, a diffractogram obtained with increments of 0.005° is presented) (*a*) and Raman spectra of the heterostructure TiO_2/Ti (*b*)

Учитывая свидетельства низкого количества содержания оксидной фазы на поверхности образца, а также отсутствие на дифрактограмме всех рефлексов анатаза, кроме рефлекса (101), для уточнения фазового состава оксидного слоя и подтверждения наличия именно данной полиморфной модифика-

ции вещества были проведены исследования с применением КРС-спектроскопии (рис. 3, *б*). В спектре КРС отчетливо видны пики с максимумами 145; 395; 514 и 642 см$^{-1}$, соответствующие колебательным модам структурной модификации TiO_2 типа анатаза с пространственной группой $I4_1/amd$ [17]. Область 200–400 см$^{-1}$ характеризуется отсутствием колебательных линий с интенсивностью, сопоставимой с вышеуказанными пиками, что свидетельствует об отсутствии в образце фазы брукита. Более того, отсутствие в спектре КРС пиков, связанных со структурой рутила, а также невысокая интенсивность связанных с данной структурой линий на дифрактограмме (см. рис. 3, *а*) позволяют сделать вывод о значительном преобладании фазы анатаза над фазой рутила в поверхностном слое образца.

Исследование спектров поглощения растворов метиленового синего после УФ-облучения в присутствии гетероструктуры TiO_2/Ti показывает снижение интенсивности максимума основного пика поглощения на длине волны 664 нм, а также выравнивание дополнительного пика на длине волны 615 нм (рис. 4, *а*), что свидетельствует о деградации красителя в присутствии фотокатализатора в течение времени экспонирования.

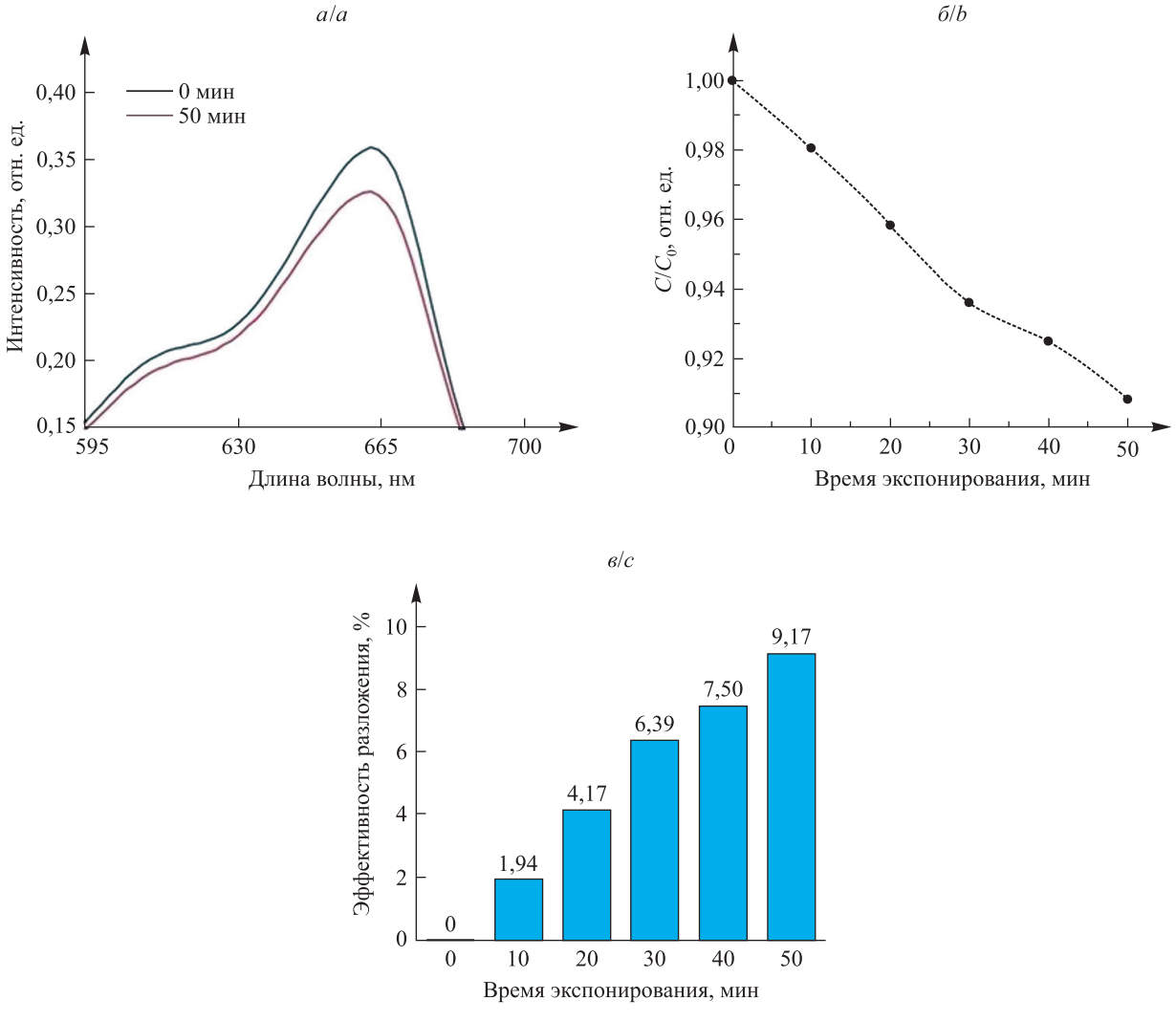

Рис. 4. Эволюция спектров поглощения метиленового синего в водном растворе ($5 \cdot 10^{-7}$ моль/л) под действием УФ (λ = 365 нм) в присутствии образцов TiO_2/Ti (*а*); кинетика разложения метиленового синего при экспонировании УФ-излучением (λ = 365 нм) в присутствии образцов TiO_2/Ti (*б*); эффективность разложения тестового загрязнителя с течением времени экспонирования (*в*)

Fig. 4. Evolution of the absorption spectra of methylene blue in the aqueous solution under the UV-irradiation (λ = 365 nm) in the presence of the TiO_2/Ti samples (*a*); kinetic of photocatalytic destruction of methylene blue in the aqueous solution under the UV-irradiation (λ = 365 nm) in the presence of the TiO_2/Ti samples (*b*); efficiency of decomposition of the test pollutant over the irradiation time (*c*)

Кроме того, наблюдается смещение максимума поглощения метиленового синего при длительном облучении, что связано с последовательным деметилированием, деаминированием и последующим окислением исходных молекул метиленового синего (более подробно механизм деколоризации (фотодеструкции) метиленового синего описан в [18]). Влияния адсорбции красителя структурой TiO_2/Ti на концентрацию исходного раствора инструментально не зарегистрировано по причине малых толщин оксидного слоя, изменение концентрации красителя после темновой выдержки в течение 10–30 мин не достигало величины более 0,1 %, ввиду чего данные по темновой адсорбции на графиках не приводятся.

За время УФ-облучения структур TiO_2/Ti в течение 50 мин разложению подвергается порядка 9 % красителя (рис. 4, *б* и *в*), что в сочетании с малыми значениями площади (64 мм^2) и толщины (~400–500 нм) свидетельствует о достаточно высокой фотокаталитической активности исследуемых тонкопленочных образцов, сопоставимой с фотокаталитической активностью пленочных фотокатализаторов, получаемых золь-гель методом [19; 20].

Заключение

Используемое при синтезе структур TiO_2/Ti сочетание химического и термического воздействия позволило сформировать на поверхности титановой фольги слой диоксида титана толщиной до 500 нм, характеризующийся высокой степенью неоднородности и комбинированным фазовым составом, что подтверждается результатами РД-анализа и КРС-спектроскопии. Полученная двухстадийным химико-термическим окислением гетероструктура TiO_2/Ti имеет развитый рельеф поверхности, представляющий собой квазиупорядоченную сетчатую структуру с характерными размерами нанонитей около 55 нм. Гетероструктуры демонстрируют высокую фотокаталитическую активность в отношении тестового загрязнителя – органического красителя метиленового синего в водном растворе. Через 50 мин экспонирования УФ-излучением (λ = 365 нм) раствора метиленового синего (исходная концентрация красителя $5 \cdot 10^{-7}$ моль/л) в присутствии структуры TiO_2/Ti отмечается снижение концентрации красителя по сравнению с исходным раствором на 9 %. Полученные структуры TiO_2/Ti могут быть интересны для создания не только эффективных тонкопленочных фотокатализаторов, включая системы для проточных реакторов и портативных устройств, но и приложений плазмоники, поверхностно-усиленной рамановской спектроскопии, а также систем мониторинга концентраций молекул и протекания химических реакций [21–23]. Задачей дальнейших исследований является создание на основе TiO_2/Ti гетероструктур, содержащих оксидные и металлические наночастицы, способствующие сенсибилизации структур к излучению видимого диапазона.

Библиографические ссылки

1. Leong S, Razmjou A, Wang K, Hapgood K, Zhang X, Wang H. TiO_2 based photocatalytic membranes: a review. *Journal of Membrane Science.* 2014;472:167–184. DOI: j.memsci.2014.08.016.

2. Žerjav G, Žižek K, Zavašnik J, Pintar A. Brookite *vs* rutile *vs* anatase: what's behind their various photocatalytic activities? *Journal of Environmental Chemical Engineering*. 2022;10(3):107722. DOI: j.jece.2022.107722.

3. Pelaez M, Nolan NT, Pillai SC, Seery MK, Falaras P, Kontos AG, et al. A review on the visible light active titanium dioxide photocatalysts for environmental applications. *Applied Catalysis B: Environmental*. 2012;125:331–349. DOI: j.apcatb.2012.05.036.

4. Verma V, Al-Dossari M, Singh J, Rawat M, Kordy MGM, Shaban M. A review on green synthesis of TiO_2 NPs: photocatalysis and antimicrobial applications. *Polymers*. 2022;14(7):1444. DOI: polym14071444.

5. Kumar SG, Devi LG. Review on modified TiO_2 photocatalysis under UV/visible light: selected results and related mechanisms on interfacial charge carrier transfer dynamics. *Journal of Physical Chemistry A*. 2011;115(46):13211–13241. DOI: jp204364a.

6. Schneider J, Matsuoka M, Takeuchi M, Zhang J, Horiuchi Y, Anpo M, et al. Understanding TiO_2 photocatalysis: mechanisms and materials. *Chemical Reviews*. 2014;114(19):9919–9986. DOI: cr5001892.

7. Yadav S, Jaiswar G. Review on undoped/doped TiO_2 nanomaterial; synthesis and photocatalytic and antimicrobial activity. *Journal of the Chinese Chemical Society*. 2016;1:103–116. DOI: 10.1002/jccs.201600735.

8. Baglov AV, Shevtsova TA, Khoroshko LS, Dudchik NV, Drozdova AV, Borisenko VE. Forming immobilized nanostructured titanium dioxide having antibacterial properties. *Doklady of the National Academy of Sciences of Belarus*. 2019;63(2):157–163. Russian. DOI: 1561-8323-2019-63-2-157-163.

9. Lan Y, Lu Y, Ren Z. Mini review on photocatalysis of titanium dioxide nanoparticles and their solar applications. *Nano Energy*. 2013;2(5):1031–1045. DOI: j.nanoen.2013.04.

10. Ohtani B, Prieto-Mahaney OO, Li D, Abe R. What is Degussa (Evonik) P25? Crystalline composition analysis, reconstruction from isolated pure particles and photocatalytic activity test. *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*. 2010;216(2–3): 179–182. DOI: j.jphotochem.2010.07.024.

11. Кубашевский О, Гопкинс БЭ. *Окисление металлов и сплавов.* Алексеева ВА, переводчик. Москва: Металлургия; 1965. 428 с.

12. Vaquila I, Vergara LI, Passeggi MCG, Vidal RA, Ferron J. Chemical reactions at surfaces: titanium oxidation. *Surface and Coatings Technology*. 1999;122(1):67–71. DOI: 10.1016/s0257-8972(99)00420-x.

13. Лучинский ГП. *Химия титана.* Москва: Химия; 1971. 471 с.

14. Войтович РФ, Головко ЭИ. *Высокотемпературное окисление титана и его сплавов.* Киев: Наукова думка; 1984. 256 с.
15. Korshunov AV, Il'in AP, Lotkov AI, Ratochka IV, Morozova TP, Lykova ON. Features of oxidation of submicrocrystalline titanium when heated in air. *Izvestiya Tomskogo politekhnicheskogo universiteta*. 2011;319(3):10–16. Russian.
16. Bertrand G, Jarraya K, Chaix JM. Morphology of oxide scales formed on titanium. *Oxidation of Metals*. 1984;21(1–2):1–19. DOI: 10.1007/bf00659464.
17. Li G-G, Ishigaki T, Sun X. Anatase, brookite, and rutile nanocrystals via redox reactions under mild hydrothermal conditions: phase-selective synthesis and physicochemical properties. *Journal of Physical Chemistry C*. 2007;111(13):4969–4976. DOI: 10.1021/jp0673258.
18. Azmat R, Saeed A. Catalytic degradation of methylene blue by nanostructured CrO(OH) prepared by hydrothermal method. *European Chemical Bulletin*. 2014;3(5):417–421. DOI: 10.17628/ECB.2014.3.417.
19. Baglov AV, Denisov NM, Borisenko VE, Uglov VV, Malashevich AA. Photocatalytic activity of nanostructured titania coatings on aluminum substrates. *Inorganic Materials*. 2017;53:1180–1184. DOI: 10.1134/S0020168517110036.
20. Khoroshko L, Borisenko V, Baltrukovich P, Nurmonov S, Ruzimuradov O. One-step sol-gel fabrication of TiO_2/(CuO + Cu_2O) photocatalysts. *Journal of Sol-Gel Science and Technology*. 2023;108:320–324. DOI: 10.1007/s10971-022-05906-w.
21. Baglov AV, Radionov AA, Chubenko EB, Zaycev VA, Borisenko VE. Installation for photocatalytic water purification from organic pollution in the flow reactor. *Doklady BGUIR*. 2018;(4):45–50. Russian.
22. Gavrilov DA, Leus AV, Gavrilova TS. Application of portable Raman spectrometer in security systems. *T-Comm*. 2011;1:35–37. Russian.
23. Zalduendo MM, Oestreicher V, Langer J, Liz-Marzán LM, Angelomé PC. Monitoring chemical reactions with SERS-active Ag-loaded mesoporous TiO_2 films. *Analytical Chemistry*. 2020;92(20):13656–13660. DOI: 10.1021/acs.analchem.0c03310.

Получена 16.04.2024 / исправлена 18.06.2024 / принята 22.06.2024.
Received 16.04.2024 / revised 18.06.2024 / accepted 22.06.2024.

Авторы:
Мария Александровна Евсейчик – младший научный сотрудник центра 4.11 «Наноэлектроника и новые материалы» научно-исследовательской части, ассистент кафедры физики факультета компьютерных систем и сетей.
Людмила Сергеевна Хорошко – кандидат физико-математических наук, доцент; доцент кафедры микро- и наноэлектроники факультета радиотехники и электроники[1)], ведущий научный сотрудник научно-исследовательской лаборатории энергоэффективных материалов и технологий физического факультета[2)].
Диана Ивановна Гаглоева – инженер центра коллективного пользования «Физика и технологии наноструктур».
Сослан Арсенович Хубежов – кандидат физико-математических наук; научный сотрудник.
Алексей Викторович Баглов – научный сотрудник центра 4.11 «Наноэлектроника и новые материалы» научно-исследовательской части[1)], старший научный сотрудник научно-исследовательской лаборатории энергоэффективных материалов и технологий физического факультета[2)].
Игорь Иванович Макоед – кандидат физико-математических наук, доцент; доцент кафедры общей и теоретической физики физико-математического факультета.
Шавкат Исроилович Маматкулов – доктор физико-математических наук; заведующий лабораторией многофункциональных материалов.
Мария Дмитриевна Печерская – младший научный сотрудник лаборатории многофункциональных материалов.
Дмитрий Владимирович Якимчук – кандидат физико-математических наук, доцент; старший научный сотрудник.

Authors:
Maryia A. Yauseichyk, junior researcher at the centre 4.11 «Nanoelectronics and advanced materials» of R & D department, assistant at the department of physics, faculty of computer systems and networks.
m.yauseichyk@gmail.com
Liudmila S. Khoroshko, PhD (physics and mathematics), docent; associate professor at the department of micro- and nanoelectronics, faculty of radioengineering and electronics[a], and leading researcher at the laboratory of energy efficient materials and technologies, faculty of physics[b].
l.s.khoroshko@yandex.by
Diana I. Gagloeva, engineer at the centre for collective use «Physics and technologies of nanostructures».
artemidiana@yandex.ru
Soslan A. Khubezhov, PhD (physics and mathematics); researcher.
soslan.khubezhov@gmail.com
Aleksey V. Baglov, researcher at the centre 4.11 «Nanoelectronics and advanced materials» of R & D department[a], senior researcher at the laboratory of energy efficient materials and technologies, faculty of physics[b].
baglov@bsu.by
Igor I. Makoed, PhD (physics and mathematics), docent; associate professor at the department of general and theoretical physics, faculty of physics and mathematics.
igmak2010@yandex.by
Shavkat I. Mamatkulov, doctor of science (physics and mathematics); head of the laboratory of multifunctional materials.
sh.mamatkulov@imssolar.uz
Mariya D. Pecherskaya, junior researcher at the laboratory of multifunctional materials.
mariya.pecherskaya@yahoo.com
Dmitry V. Yakimchuk, PhD (physics and mathematics), docent; senior researcher.
dim2yakim@gmail.com

УДК 528.8, 004.932.4

МЕТОД МАТЕМАТИЧЕСКОЙ КОРРЕКЦИИ ЭФФЕКТА ДВОЕНИЯ ИЗОБРАЖЕНИЯ ПОСЛЕ ОТРАЖЕНИЯ ОТ СВЕТОДЕЛИТЕЛЬНОЙ ПЛАСТИНЫ

***А. О. МАРТИНОВ*[1], *Г. С. ЛИТВИНОВИЧ*[1], *С. И. ГУЛЯЕВА*[1], *Л. А. СМОЛЕНЦЕВА*[2], *И. В. РАССКАЗОВ*[2]**

[1]*Институт прикладных физических проблем им. А. Н. Севченко БГУ, ул. Курчатова, 7, 220045, г. Минск, Беларусь*
[2]*Ракетно-космическая корпорация «Энергия» им. С. П. Королева, ул. Ленина, 4а, 141070, г. Королев, Россия*

Образец цитирования:
Мартинов АО, Литвинович ГС, Гуляева СИ, Смоленцева ЛА, Рассказов ИВ. Метод математической коррекции эффекта двоения изображения после отражения от светоделительной пластины. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2024;3:25–40.
EDN: AABHFI

For citation:
Martinov AO, Litvinovich HS, Guliaeva SI, Smolentseva LA, Rasskazov IV. Method for mathematical correction of ghosts in an image after reflection from the beam splitter plate. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2024;3:25–40. Russian.
EDN: AABHFI

Авторы:
Антон Олегович Мартинов – кандидат физико-математических наук; старший научный сотрудник лаборатории оптико-физических измерений.
Глеб Святославович Литвинович – кандидат физико-математических наук; старший научный сотрудник лаборатории оптико-физических измерений.
Светлана Игоревна Гуляева – научный сотрудник лаборатории оптико-физических измерений.
Лилия Алексеевна Смоленцева – главный специалист.
Игорь Владимирович Рассказов – инженер 1-й категории.

Authors:
Anton O. Martinov, PhD (physics and mathematics); senior researcher at the laboratory of optical and physical measurements.
antonmartenov@gmail.com
https://orcid.org/0000-0001-6871-1173
Hleb S. Litvinovich, PhD (physics and mathematics); senior researcher at the laboratory of optical and physical measurements.
litvinovichgs@yandex.by
https://orcid.org/0000-0002-1841-8013
Svetlana I. Guliaeva, researcher at the laboratory of optical and physical measurements.
ms.bruchkovskaya@yandex.by
https://orcid.org/0000-0002-5191-8466
Liliya A. Smolentseva, chief specialist.
lilka26@yandex.ru
https://orcid.org/0009-0009-4705-1503
Igor V. Rasskazov, engineer of the 1st category.
igor.rasskazov1@rsce.ru
https://orcid.org/0000-0001-9426-7854

CC BY NC

Аннотация. При тестировании научной аппаратуры «Видеоспектральная система», разработанной для использования в рамках космического эксперимента «Ураган» на российском сегменте Международной космической станции, обнаружена проблема двоения изображения (возникновения призраков). Установлено, что данный эффект обусловлен особенностями оптической схемы аппаратуры: изображение формируется на приемной матрице в отраженном от светоделительной пластины свете. Предложен программный метод коррекции призраков на изображениях, и оценена его эффективность. Построена первичная модель формирования призраков на изображении. По результатам исследования возникновения призраков на снимках, полученных научной аппаратурой «Видеоспектральная система» при съемке коллимированного излучения точечного источника на оптическом стенде, определены более сложные законы пространственного формирования призраков по сравнению с первичной моделью, которые уточнены в новой модели. Совмещение разработанной пространственно-яркостной модели формирования призраков и рекурсивного метода их коррекции позволило устранить призраки с изображений, получаемых научной аппаратурой «Видеоспектральная система».

Ключевые слова: двукратное отражение; паразитное отражение; призраки; светоделитель; обработка изображений; программная коррекция.

Благодарность. Авторы выражают признательность И. И. Бручковскому за идею и проведение экспериментов с лазерными диодами и В. С. Федосееву за помощь в обработке полученных данных.

METHOD FOR MATHEMATICAL CORRECTION OF GHOSTS IN AN IMAGE AFTER REFLECTION FROM THE BEAM SPLITTER PLATE

A. O. MARTINOV [a], ***H. S. LITVINOVICH*** [a],
S. I. GULIAEVA [a], ***L. A. SMOLENTSEVA*** [b], ***I. V. RASSKAZOV*** [b]

[a] *A. N. Sevchenko Institute of Applied Physical Problems, Belarusian State University, 7 Kurchatava Street, Minsk 220045, Belarus*
[b] *Rocket and Space Corporation «Energia» named after S. P. Korolev, 4a Lenina Street, Koroljov 141070, Russia*

Corresponding author: A. O. Martinov (antonmartenov@gmail.com)

Abstract. When testing the scientific equipment «Videospectral system», developed for use as part of the space experiment «Uragan» on the Russian segment of the International Space Station, a problem of double image (ghosts) was discovered. It has been established that this effect is due to the peculiarities of the optical design of the equipment: the image is formed on the matrix in light reflected from the beam splitter plate. A software method for correcting ghosts in images is proposed and its effectiveness is assessed. A primary model for the formation of ghosts in the image has been constructed. Based on the results of a study of the appearance of ghosts in images obtained by the scientific equipment «Videospectral system» when shooting collimated radiation from a point source on an optical stand, more complex laws of the spatial formation of ghosts were determined, in comparison with the primary model, which were clarified in the new model. The combination of the developed spatial-brightness model for the formation of ghosts and the recursive method of their correction made it possible to eliminate ghosts from images obtained by the scientific equipment «Videospectral system».

Keywords: double reflection; parasitic reflection; ghosts; beam splitter; image processing; software correction.

Acknowledgements. The authors would like to thank I. I. Bruchkovsky for the idea and conducting experiments with laser diodes and V. S. Fedoseev for assistance in processing the obtained data.

Введение

При использовании оптических систем со светоделителем возникает проблема двукратного отражения от его граней (рис. 1), что приводит к появлению двоящегося изображения (*ghost reflection*). Для формирующегося паразитного изображения в данной работе используется термин «призрак». Визуально фотоснимок с призраками представляет собой двоящееся изображение, в котором одна компонента четкая и яркая (I_0), а другая, паразитная, менее интенсивная (I_g) (см. рис. 1).

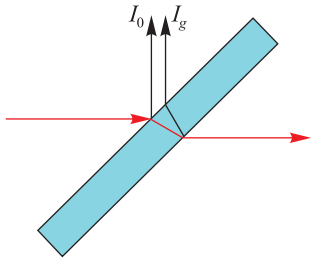

Рис. 1. Явление двукратного отражения от граней светоделителя

Fig. 1. The phenomenon of double reflection from the edges of the beam splitter

На текущий момент существует возможность аппаратного устранения двукратного отражения путем применения особых оптических схем – тонкопленочных просветляющих покрытий, светоделительного куба. Так, в работе [1] в качестве светоделительного элемента предложено использовать клин с небольшим углом, таким, чтобы падающее излучение, отражающееся от второй грани, претерпевало полное внутреннее отражение и оставалось внутри клина. Однако подобное решение работает только в случае с квазипараллельным

пучком. Кроме того, отсутствует прошедший пучок, который может использоваться (как, например, в рассматриваемом приборе). Известны решения[1] с применением тонких пленок на основе нитроцеллюлозной мембраны. Из-за небольшой толщины пленки (около 2 мкм) призрак практически сливается с оригинальным отражением. Но описанное решение не может использоваться в оптической аппаратуре, подверженной вибрации, ввиду чувствительности пленки к акустическим колебаниям. В литературе описано применение светоделительного куба, однако он имеет проблему множественных отражений.

Любой из описанных аппаратных методов решения проблемы двукратного отражения накладывает ограничения на геометрию оптической системы. В силу этого перспективными являются методы программной коррекции, ставшие возможными с ростом производительности компьютеров.

Существующие методы устранения отражений делятся на три категории в зависимости от типа входных данных, используемых для создания скорректированных изображений без призраков: 1) коррекцию по одиночному изображению [2–5]; 2) коррекцию по нескольким изображениям [6–8]; 3) удаление мультимодального отражения [9; 10].

В работе [2] используется база данных с так называемыми естественными участками изображений. Предложенный в публикации [3] алгоритм основывается на классификации пикселов краев объектов. В статье [6] используются несколько изображений, снятых с коротким временным интервалом. В работе [7] несколько изображений с отражениями корректируются с помощью алгоритма на основе расширенного множителя Лагранжа. Примененный в публикации [8] подход использует тонкие изменения в отражении относительно фона в небольшом наборе изображений, полученных с немного различающихся точек обзора. В работе [9] используются данные датчиков, которые имеют два фотодиода на пиксел, для получения двух субапертурных изображений сцены из одного снятого изображения. В статье [10] описывается коррекция изображений, снятых пленоптической камерой.

Имеются работы, посвященные созданию физической модели отражения от полупрозрачной среды с учетом поляризации прошедшего и отраженного излучения [11]. Предлагаются методы на основе алгоритмов глубокого обучения [12], требующие существенных компьютерных мощностей. Хорошие результаты показывает алгоритм, использующий модель гауссовой смеси (*Gaussian mixture model*, GMM) [5]. Данный метод является универсальным и не требует предварительных лабораторных измерений. Однако время обработки одного изображения размером 400 × 600 пк занимает 22 мин при использовании 22 ядер процессора. Если предположить, что сложность алгоритма линейно зависит от числа пикселов, то для больших изображений (100 Мпк) время коррекции составит 120 ч. Вместе с тем зависимость может быть не только линейной, но и более высокого порядка. Представленные выше алгоритмы описывают другую геометрию, когда фотографирование объекта происходит через полупрозрачный материал (например, окно). В настоящей работе рассматривается случай, когда прибор регистрирует паразитную сдвинутую копию исходного объекта из-за особенностей своей оптической схемы. По этой причине был предложен собственный метод коррекции призраков на изображениях.

Аппаратура и получение экспериментальных данных

Дистанционное зондирование Земли (ДЗЗ) в современном мире все больше проникает в разные сферы деятельности человека. Сельское хозяйство, геодезия, картографирование, мониторинг состояния поверхности Земли, Мирового океана и атмосферы – основные, но не единственные области применения ДЗЗ.

Одной из задач космического эксперимента (КЭ) «Ураган» [13–17], который проводится на борту российского сегмента Международной космической станции (РС МКС), является отработка научной аппаратуры и методов изучения Земли. Наибольшее внимание в КЭ «Ураган» уделяется наблюдению за потенциально опасными и катастрофическими явлениями, возникающими на Земле. Для изучения объектов и явлений на поверхности Земли и в ее атмосфере применяются разные виды научной аппаратуры, в том числе приборы, работающие в различных областях спектра электромагнитного излучения. По этой причине для реализации КЭ «Ураган» создается и используется научная аппаратура, способная работать в различных спектральных диапазонах, что позволяет комплексно исследовать изучаемые в рамках эксперимента объекты и явления. Обнаружение какого-либо фактора в исследуемом явлении или процессе любым из используемых в КЭ «Ураган» приборов может сигнализировать о начале важного, иногда даже катастрофического, события на Земле. Одним из приборов спектральной съемки является научная аппаратура «Видеоспектральная система» (НА «ВСС») [18], которая была разработана Институтом прикладных физических проблем имени А. Н. Севченко БГУ по техническому заданию Ракетно-космической корпорации «Энергия» имени С. П. Королева в рамках выполнения государственного контракта. Улучшенная модификация НА «ВСС», отличающаяся бóльшим разрешением фотоснимка и рассматриваемая в данной работе, доставлена на борт РС МКС в мае 2023 г. Постановщиком КЭ «Ураган» (Ракетно-космическая корпорация «Энергия» имени С. П. Королева) в 2023 г. в ходе тестовых включений НА «ВСС»

[1]Pellicle beamsplitters // Edmund Optics, Ltd. : website. York, 2024. URL: https://www.edmundoptics.eu/f/pellicle-beamsplitters/12443/ (date of access: 10.01.2024).

выполнена съемка международных полигонов сети RadCalNet в целях верификации данных. В рамках государственного контракта совместно с разработчиком (Институт прикладных физических проблем имени А. Н. Севченко БГУ) проведен анализ полученных данных.

НА «ВСС» предназначена для проведения научно-прикладных исследований в ходе КЭ «Ураган» [19] с борта РС МКС. Она представляет собой устройство, позволяющее получать фотоизображения (11 600 × 8700 пк) в видимом диапазоне длин волн и более 270 спектров отраженного излучения подстилающих поверхностей трех спектрометров в диапазоне 400–950 нм с разрешением 2–5 нм.

Особенностью НА «ВСС» является используемая соосная схема (рис. 2): с помощью светоделителя (плоскопараллельная полупрозрачная пластина *4* из стекла марки К8 толщиной 8 мм, расположенная под углом 45° к оптической оси и имеющая интерференционное покрытие для отражения 20 % излучения в представленной геометрии) световой поток, спроецированный объективом *1–3*, разделяется на два потока. Один из них проецируется на приемную матрицу *5* блока изображений, а другой используется для формирования трех областей спектрометрирования матричных спектрометров *7–11*. Применение светоделителя приводит к возникновению эффекта двоящегося изображения на получаемых фотоснимках, так как световой поток отражается не только от передней, но и от задней грани светоделителя.

На рис. 3 показано изображение контрольной миры, полученное с помощью НА «ВСС». Невооруженным глазом видно двоящееся изображение: темные линии миры дублируются и накладываются на однотонный фон с некоторым смещением вверх.

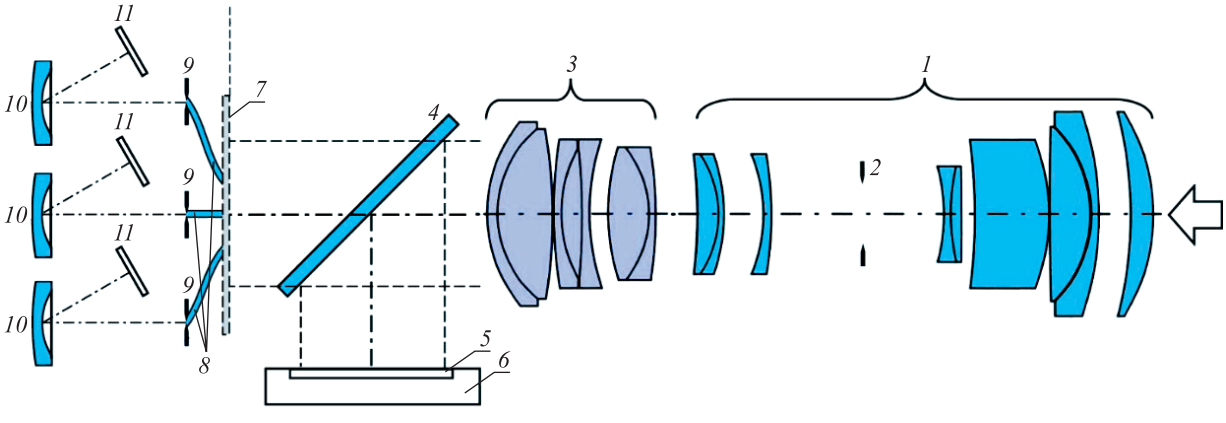

Рис. 2. Упрощенная оптическая схема НА «ВСС»:
1 – входной объектив; *2* – электромеханический затвор; *3* – конвертер;
4 – плоскопараллельная полупрозрачная пластина узла светоделителя; *5* – цветная приемная матрица;
6 – цифровой адаптер (задник); *7* – вторая плоскость изображения; *8* – световоды;
9 – входные щели полихроматоров; *10* – вогнутые голографические решетки;
11 – приемные матрицы полихроматоров

Fig. 2. Simplified optical design of the scientific equipment «Videospectral system» (SE «VSS»):
1 – input lens; *2* – electromechanical shutter; *3* – converter;
4 – plane-parallel translucent plate of the beam splitter assembly; *5* – color photodetector matrix;
6 – digital adapter (back); *7* – second image plane; *8* – light guides;
9 – entrance slits of polychromators; *10* – concave hologram gratings;
11 – receiving matrices of polychromators

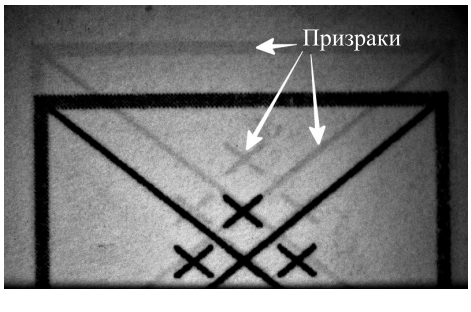

Рис. 3. Полученный НА «ВСС» фотоснимок тестовой миры
с паразитным изображением (призраком)

Fig. 3. The image of a test target
with a ghost reflection taken by SE «VSS»

Модели формирования и коррекции призраков

Первичная модель формирования призраков. Ниже представлена упрощенная модель формирования призраков в описанной геометрии. Основную идею модели можно изложить, рассмотрев процесс формирования итогового изображения, регистрируемого фотокамерой. Часть падающего на переднюю грань полупрозрачной пластины (светоделителя) светового пучка отражается в направлении приемной матрицы фотокамеры и формирует на ней изображение. Часть светового пучка проходит сквозь светоделитель, отражается от его задней грани и выходит через переднюю грань в сторону приемной матрицы, где формируется паразитное изображение. Таким образом, итоговое изображение на приемной матрице является результатом сложения (по интенсивностям) двух изображений. Эти два изображения (в первом приближении) геометрически сдвинуты друг относительно друга на постоянную величину d, определяемую толщиной светоделителя. Основной вклад в итоговое изображение дает изображение, полученное при отражении от передней грани. После коррекции его необходимо оставить, убрав из итогового изображения компоненту, сформированную отражением от задней грани светоделителя. Изображение, полученное в результате отражения от передней грани, будем называть неискаженным изображением, изображение, полученное в результате отражения от задней грани, – изображением-призраком, а итоговое изображение, регистрируемое фотокамерой, – искаженным изображением. Неискаженное изображение и изображение-призрак отличаются только двумя параметрами – интенсивностью (первое ярче второго) и константным сдвигом друг относительно друга.

На рис. 4 смоделировано искаженное изображение, регистрируемое приемной матрицей фотокамеры при съемке светлого круга на темном фоне (см. рис. 4, *а*) или темного круга на светлом фоне (см. рис. 4, *б*). Более контрастный круг *1* (неискаженное изображение) возникает из-за отражения светового пучка от передней грани светоделителя, а менее контрастный круг *2* (искаженное изображение) является результатом отражения от задней грани. Данное смоделированное изображение (см. рис. 4, *б*) аналогично реальному изображению тестовой миры с черными полосами и их призраками, полученному НА «ВСС» (см. рис. 3).

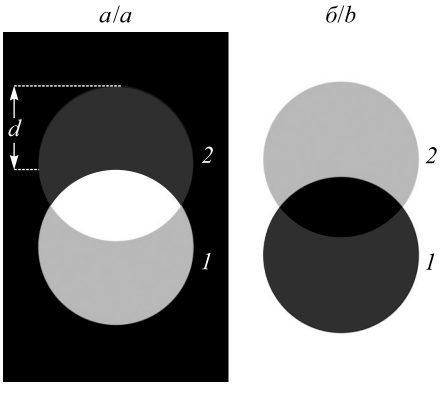

Рис. 4. Смоделированное искаженное изображение на приемной матрице, полученное при съемке круга в результате отражения светового пучка от передней (*1*) и задней (*2*) граней полупрозрачной пластины:
а – изображение светлого круга на темном фоне;
б – изображение темного круга на светлом фоне

Fig. 4. Simulated distorted circle image on the matrix, as a result of the light beam reflection from the front (*1*) and back (*2*) edges of the translucent plate:
a – image of a light circle on a dark background;
b – image of a dark circle on a light background

Рассмотрим процессы отражения, происходящие на светоделителе (рис. 5). Схема отображена в приближении, что падающий на светоделитель световой пучок является параллельным (в действительности он сходящийся от объектива), а отражение от задней грани происходит лишь однократно (дальнейшее рассмотрение отражений нецелесообразно ввиду их очень слабого влияния). Для удобства восприятия ход двух разных световых лучей, падающих на светоделитель, обозначен красным и синим цветом. Представим интенсивность падающего луча в виде слагаемых I_0 и I_t, где I_0 – интенсивность луча, который будет полностью (суммарно от передней и задней граней) отражен от светоделителя; I_t – интенсивность луча, который пройдет через светоделитель (поглощением светоделителя пренебрегаем). Интенсивность светового луча, отраженного от передней грани светоделителя, можно представить в виде

$(1-p)I_0$, а интенсивность светового луча, отраженного от задней грани, – в виде pI_0. Сумма этих двух интенсивностей равна I_0, а параметр p лежит в диапазоне от 0 до 1. Параметр p можно интерпретировать как отношение интенсивности отраженного от задней грани излучения ко всей интенсивности отраженного излучения. Рассмотрим формирование значения интенсивности конкретного пиксела на приемной матрице. Синий световой луч отражается от передней грани светоделителя и падает на пиксел с координатами (x, y) в приемной матрице фотокамеры. Красный световой луч в результате отражения от задней грани также попадает в пиксел (x, y). Таким образом, интенсивность излучения I, падающего на пиксел (x, y) приемной матрицы, состоит из интенсивности отраженного от передней грани луча («неискаженного» пиксела) и интенсивности отраженного от задней грани луча («призрачного» пиксела). Красный световой луч после отражения от передней грани попал бы в пиксел $(x, y+d)$ приемной матрицы, но этот ход луча на схеме не отображен.

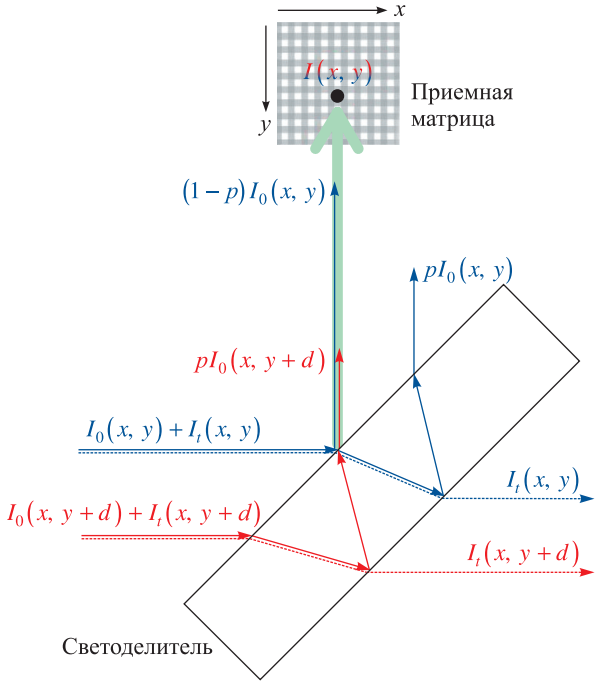

Рис. 5. Ход световых лучей, формирующих изображение на приемной матрице фотокамеры

Fig. 5. The light rays path which form image on the camera matrix

Модель возникновения призраков можно сформулировать следующим образом: на неискаженное изображение накладывается смещенное по вертикали идентичное изображение с определенным процентом непрозрачности. Данную модель можно выразить в виде

$$I(x, y) = (1-p)I_0(x, y) + pI_g(x, y), \tag{1}$$

$$I_g(x, y) = I_0(x, y+d), \tag{2}$$

где x, y – координаты изображения (начало координат находится в левом верхнем углу); $I(x, y)$ – значение интенсивности пиксела изображения с призраком в соответствующих RGB-каналах; $I_0(x, y)$ – значение интенсивности пиксела неискаженного изображения (без призрака); $I_g(x, y)$ – значение интенсивности пиксела изображения-призрака; p – доля непрозрачности (от 0 до 1) изображения-призрака при наложении на неискаженное изображение; d – величина смещения по вертикали изображения-призрака относительно неискаженного изображения.

Стоит отметить, что 24-битное RGB-изображение использует по 8 бит для представления красной, синей и зеленой составляющих. Чтобы не перегружать формулы, индексы для обозначения конкретного канала ($I_{\text{red}}(x, y)$, $I_{\text{green}}(x, y)$, $I_{\text{blue}}(x, y)$) не вводились, и далее в статье они опускаются. Все интенсивности I означают интенсивность в каждом из каналов изображения и рассматриваются независимо.

Выражения (1) и (2) – это первичная упрощенная модель формирования результирующего изображения, которая дает представление о процессе возникновения изображения-призрака, но не учитывает сходимость пучка от объектива и другие оптические эффекты, характерные для реальной НА «ВСС». В ней учитывается только двукратное отражение от граней светоделителя.

Первичная модель коррекции призраков. Вторым этапом была разработка методов устранения призраков с изображения. Основной особенностью восстановления исходного изображения по искаженному изображению с призраком является то, что для анализа имеется только изображение I, а компонента-призрак I_g отсутствует.

Из формулы (1) можно выразить пикселы неискаженного изображения:

$$I_0(x, y) = \frac{I(x, y) - pI_g(x, y)}{1 - p}.$$

Если в выражении (2) сделать приближение и заменить I_0 на I (изображение I формируется в основном из I_0, так как отражение от задней грани слабое), то получим формулу для записи первого разработанного метода коррекции призраков:

$$I_0(x, y) = \frac{I(x, y) - pI(x, y + d)}{1 - p}. \quad (3)$$

Графическая интерпретация метода: имеется искаженное изображение I, которое нужно избавить от призраков. Из этого изображения путем линейного сдвига на d по вертикали создаем изображение, которое считаем псевдопризраком I_g. Вычитаем (с учетом доли непрозрачности) из изображения I псевдопризрак I_g. Параметры d и p должны быть определены заранее.

Рекурсивная модель коррекции призраков с учетом нелинейной пространственной модели формирования призраков. При детальном анализе фотоснимков, сделанных НА «ВСС» (в том числе рис. 3), можно заметить, что призраки формируются по более сложному закону, чем просто смещение изображения по вертикали. Если применять метод коррекции изображения, полученного НА «ВСС», с простой моделью формирования призраков, не учитывающей аберраций и эффектов, которые возникают при отражении от пластины сходящихся пучков, то призраки будут устранены лишь частично.

Для уточнения пространственной модели формирования призраков был проведен лабораторный эксперимент (рис. 6), в ходе которого регистрировались изображения лазерного пучка и его призраков с помощью НА «ВСС». Непрозрачная диафрагма, имеющая отверстие диаметром 0,1 мм, с расположенным за ней полупроводниковым лазером размещалась в фокальной плоскости сферического зеркала (F = 1,4 м). Сформированный параллельный монохроматический пучок подавался на входной объектив НА «ВСС», которая располагалась на гониометрической установке, обеспечивающей вращение прибора в двух взаимно перпендикулярных осях, что позволило перемещать сформированное объективом изображение квазиточечного источника по плоскости детектора. Всего было зарегистрировано 25 изображений, в каждом из которых положение лазерного пучка и, соответственно, призрака по отношению к полю изображения менялось. На рис. 7 представлено комбинированное изображение, полученное наложением этих 25 изображений, на котором видны все зарегистрированные лазерные пучки и их призраки.

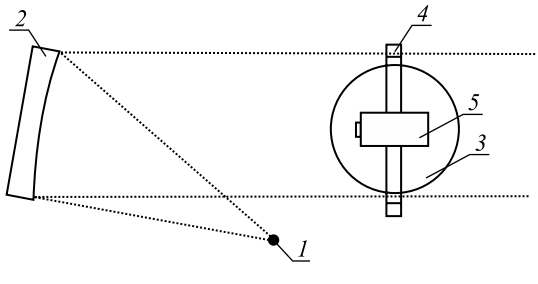

Рис. 6. Схема эксперимента по определению пространственной модели формирования призраков:
1 – лазерный диод с диафрагмой; *2* – сферическое зеркало;
3 – поворотная платформа (горизонтальная плоскость);
4 – поворотная платформа (вертикальная плоскость); *5* – НА «ВСС»

Fig. 6. Experiment scheme for determine the spatial model of ghosts:
1 – laser diode with a diaphragm; *2* – spherical mirror;
3 – rotating platform (horizontal plane); *4* – rotating platform (vertical plane); *5* – SE «VSS»

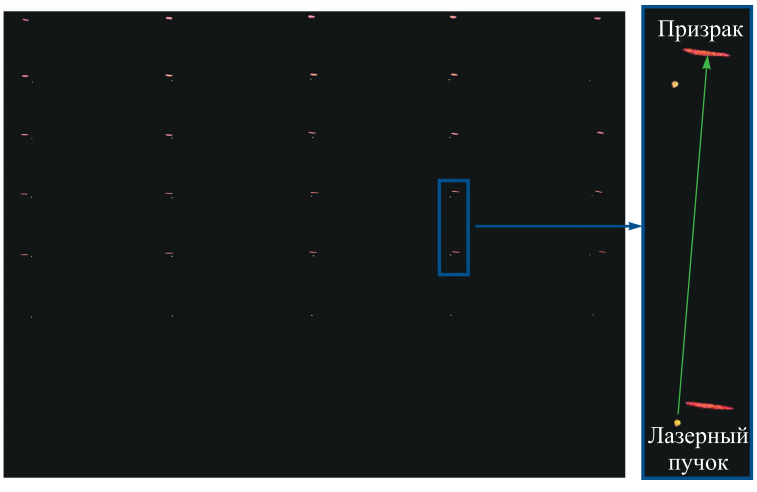

Рис. 7. Зарегистрированные лазерные пучки (желтые точки) и их призраки (красные вытянутые овалы)

Fig. 7. Registered laser beams (yellow dots) and their ghosts (red elongated ovals)

Рассчитана матрица с координатами призраков для каждого из 101 082 464 пикселов. Ее визуализация (в виде векторного поля) представлена на рис. 8. Стрелка указывает, куда пиксел-«прообраз» (начало стрелки) изображения дает свой призрак (конец стрелки). Начало системы координат традиционно находится в левом верхнем углу изображения. Значения по осям x и y соответствуют номеру столбца и номеру строки интересующего пиксела соответственно. Таким образом, используемое ранее приближение формирования призрака константным сдвигом на d можно улучшить введением $g_x(x)$ и $g_y(y)$ – функций координат пиксела-призрака от координат его «прообраза». Далее также будут использоваться обратные функции $g_x^{-1}(x)$ и $g_y^{-1}(y)$, которые являются функциями координат пиксела-«прообраза» от координат пиксела-призрака.

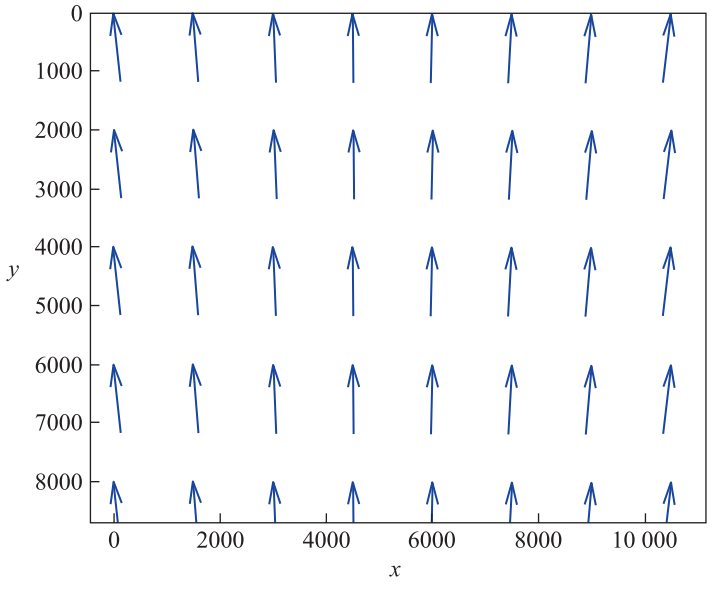

Рис. 8. Векторное поле «прообразов» и их призраков: Начало стрелки (x, y) – «прообраз» призрака; конец стрелки $(g_x(x), g_y(y))$ – призрак

Fig. 8. Vector field of prototypes and their ghosts: the beginning of the arrow (x, y) is a prototype of a ghost; the end of the arrow $(g_x(x), g_y(y))$ is a ghost

Интерполированные поверхности значений разности dx и dy между соответствующими координатами пикселов (i, j) и их призраков, вычисляемых по формулам

$$dy_{ij} = y_{ij} - g_y(y_{ij}),$$
$$dx_{ij} = x_{ij} - g_x(x_{ij}),$$

где x_{ij} и y_{ij} – координаты пиксела (i, j), представлены на рис. 9. Приведенные поверхности подтверждают сложный характер формирования призраков в НА «ВСС».

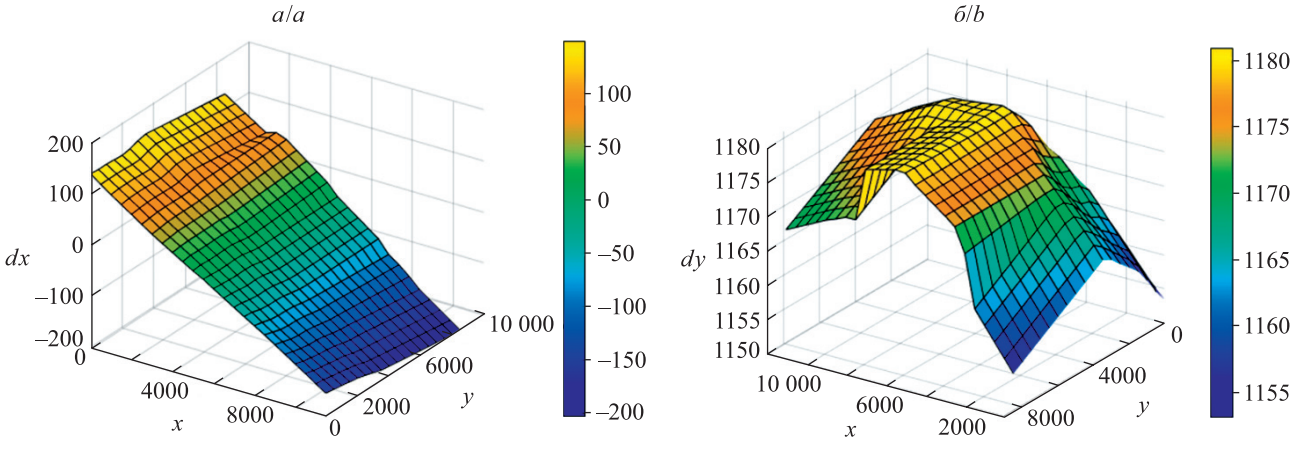

Рис. 9. Интерполированные поверхности значений разности между x-координатами (*а*) и y-координатами (*б*) пикселов-«прообразов» и их призраков

Fig. 9. Interpolated surfaces of the difference between x-coordinates (*a*) and y-coordinates (*b*) of pixels-prototypes and their ghosts

Следующее уточнение первичной модели коррекции призраков связано с лучшим учетом модели формирования призраков. На значения интенсивности пиксела с координатами (x, y) влияют значения интенсивности пиксела с координатами $\left(g_x^{-1}(x),\ g_y^{-1}(y)\right)$. Однако пиксел с координатами $\left(g_x^{-1}(x),\ g_y^{-1}(y)\right)$ также является результатом наложения призрака на неискаженное изображение, т. е. на этот пиксел оказывает влияние пиксел с координатами $\left(g_x^{-1}\left(g_x^{-1}(x)\right),\ g_y^{-1}\left(g_y^{-1}(y)\right)\right)$ и т. д. Данная модель описывается формулой

$$\begin{cases} I_0(x, y) = \dfrac{I(x, y) - pI_{g1}(x, y)}{1 - p}, \\ I_{g1}(x, y) = \dfrac{I\left(g_x^{-1}(x),\ g_y^{-1}(y)\right) - pI_{g2}(x, y)}{1 - p}, \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ I_{gn-1}(x, y) = \dfrac{I\left(\underbrace{g_x^{-1}\left(g_x^{-1} \ldots \left(g_x^{-1}(x)\right)\right)}_{n-1},\ \underbrace{g_y^{-1}\left(g_y^{-1} \ldots \left(g_y^{-1}(y)\right)\right)}_{n-1}\right) - pI_{gn}(x, y)}{1 - p}, \\ I_{gn}(x, y) = I\left(\underbrace{g_x^{-1}\left(g_x^{-1} \ldots \left(g_x^{-1}(x)\right)\right)}_{n},\ \underbrace{g_y^{-1}\left(g_y^{-1} \ldots \left(g_y^{-1}(y)\right)\right)}_{n}\right), \end{cases} \tag{4}$$

где x, y – координаты изображения (начало координат находится в левом верхнем углу); $I(x, y)$ – значение интенсивности пиксела изображения с призраком в соответствующих RGB-каналах; $I_0(x, y)$ –

значение интенсивности пиксела неискаженного изображения (без призрака); $I_g(x, y)$ – значение интенсивности пиксела изображения-призрака; p – доля непрозрачности (от 0 до 1) изображения-призрака при наложении на неискаженное изображение; n – количество итераций по учету влияния на пиксел-призрак его «прообраза»; $g_x(x)$ и $g_y(y)$ – функции координат пиксела-призрака от координат его «прообраза»; $g^{-1}(x)$ и $g^{-1}(y)$ – функции координат пиксела-«прообраза» от координат пиксела-призрака.

С точки зрения программной реализации модели (4) функции $g^{-1}(x)$ и $g^{-1}(y)$ представляют собой две матрицы с тем же числом строк и столбцов, что и в изображении, которое нужно скорректировать. В каждом элементе (i, j) матрицы, соответствующей функции $g^{-1}(x)$, хранятся x-координаты пиксела изображения, который является «прообразом» призрака для этого элемента матрицы. Аналогично устроена и вторая матрица с y-координатами призрака.

Предложенная модель включает в себя первичную модель (3), которая является частным случаем рекурсивной модели с количеством максимальных итераций $n = 1$. Временная сложность алгоритма коррекции призраков линейно зависит от n, а также от числа пикселов изображения. Можно говорить о том, что алгоритм работает за линейное время, или за время $O(n)$, что является хорошей характеристикой алгоритма [20].

Такая рекурсивная модель определения значения интенсивности неискаженного пиксела имеет свои ограничения, которые связаны с конечностью размеров самого изображения. Для пиксела вблизи края изображения может отсутствовать пиксел-«прообраз».

Непрозрачность призрака. В моделях формирования изображений с призраками (1) и (4) присутствует параметр p, который можно интерпретировать как долю непрозрачности (от 0 до 1) изображения-призрака при наложении на неискаженное изображение. В явном виде p выражается следующим образом:

$$p = \frac{I_0(x, y) - I(x, y)}{I_0(x, y) - I_g(x, y)}. \tag{5}$$

Данный параметр можно оценить по результатам лабораторных измерений лазерных пучков. Для этого на рис. 7 выбирается пара лазерный образ – его призрак. В локализованной пространственной области лазерного призрака (x_g, y_g) на изображении $I_0(x_g, y_g) = 0$ (абсолютно черное изображение), поэтому p упрощается до выражения

$$p = \frac{I(x_g, y_g)}{I_g(x_g, y_g)}. \tag{6}$$

Стоит отметить, что лазерные образы и их призраки представлены не в виде одного пиксела, а в виде пятен сложной формы, поэтому формула (6) примет адаптированный вид

$$p = \frac{\sum\limits_{x,\, y \in S_g} I(x, y)}{\sum\limits_{x,\, y \in S_0} I(x, y)}, \tag{7}$$

где в числителе находится сумма интенсивностей пикселов в области светового пятна призрака S_g, а в знаменателе – сумма интенсивностей пикселов в области светового пятна лазерного образа S_0.

Проведены расчеты параметра p для каждой пары лазерный образ – его призрак, и получено усредненное значение $p = 0{,}16$. Однако часть пикселов в лазерных образах имеют максимально возможные значения 255 в красном канале, что говорит о недостатке динамического диапазона при данных условиях съемки. То есть знаменатель формулы (7) должен быть больше, чем знаменатель, полученный по результатам эксперимента. Указанное обстоятельство приводит к тому, что равенство $p = 0{,}16$ преобразуется в неравенство $p < 0{,}16$.

Повторить эксперимент со съемкой лазеров с применением НА «ВСС» в других условиях не представлялось возможным, поэтому параметр p был рассчитан другим способом. В качестве данных для анализа использовался фотоснимок тестовой миры, полученный НА «ВСС» (см. рис. 3). Он характеризуется наличием черных линий, их призраков и одинаковым равномерным окружающим фоном. Методика расчета параметра p выглядит следующим образом. Берется усредненная по области 5 × 5 пк интенсивность пикселов на темной линии (I_g), усредненная по области 5 × 5 пк интенсивность пикселов равномерного окружающего фона (I_0) и усредненная по области 5 × 5 пк интенсивность пикселов на призраке линии (I). Далее по формуле (5) вычисляется параметр p. Расчеты повторяются для разных участков изображения, и полученные значения усредняются. Результаты измерений представлены в табл. 1.

Таблица 1

Доля непрозрачности призраков, рассчитанная по изображению тестовой миры, полученному НА «ВСС»

Table 1

The proportion of ghosts calculated from the image of a test target taken by SE «VSS»

Номер точки	Средняя интенсивность пикселов на темной линии				Средняя интенсивность пикселов равномерного фона				Средняя интенсивность пикселов на призраке линии				Доля непрозрачности призрака
	R	G	B	RGB	R	G	B	RGB	R	G	B	RGB	
1	1	66	45	37,3	0	137	90	75,7	1	128	85	71,3	0,11
2	1	48	31	26,7	1	161	108	90,0	0	148	98	82,0	0,13
3	0	68	49	39,0	0	156	103	86,3	0	148	99	82,3	0,09
4	0	75	52	42,3	0	150	99	83,0	0	140	93	77,7	0,13
5	0	58	38	32,0	1	117	76	64,7	0	114	73	62,3	0,07

В результате применения данной методики получено значение $p = 0{,}09$ со стандартным отклонением по выборке 0,026, что согласуется с ранее приведенным неравенством $p < 0{,}16$.

Таким образом, по итогам лабораторных исследований уточнена пространственно-яркостная модель формирования призраков и предложена их рекурсивная коррекция.

Результаты коррекции призраков

Коррекция смоделированного изображения. Выбор числа итераций. Разработано программное обеспечение на языке Matlab, реализующее предложенный метод коррекции призраков. Для оценки качества устранения призраков разными программными методами использовалась первичная модель формирования призраков. Взято тестовое изображение городской застройки[2] с большим числом разнообразных объектов, и согласно модели (1) сгенерирован и наложен призрак (рис. 10). Характеристики проверочной модели: размер изображения 3840 × 2360 пк; доля непрозрачности призрака $p = 0{,}1$; смещение призрака по вертикальной оси $d = 132$ пк. Данные характеристики являются достаточно типовыми и могут использоваться как тестовые.

а/*a* *б*/*b*

Рис. 10. Фотоснимок Токио со сгенерированным призраком (*а*) и его увеличенный фрагмент (*б*)

Fig. 10. A photograph of Tokyo with a generated ghost (*a*) and its enlarged fragment (*b*)

Протестирован рекурсивный метод устранения призраков (4). Результаты представлены в табл. 2. Исследовано влияние максимального числа итераций n по учету призраков. Качество устранения призраков с фотоснимка оценивалось следующим образом. Для неискаженного и скорректированного изображений проводится попиксельное усреднение трех цветовых каналов в один (расчет средней интенсивности пиксела). Далее из такого одноканального неискаженного изображения попиксельно вычитается одноканальное скорректированное изображение, и получается разностное изображение, все отрицательные интенсивности пикселов которого заменяются на положительные. Все пикселы разностного изображения

[2]File: Tokyo Tower and Tokyo Sky Tree 2011 January. jpg [Electronic resource]. URL: https://commons.wikimedia.org/wiki/File: Tokyo_Tower_and_Tokyo_Sky_Tree_2011_January.jpg (date of access: 10.01.2024).

суммируются и делятся на количество пикселов изображения. Таким образом, рассчитывается средняя разность (diff) интенсивностей пикселов неискаженного и скорректированного изображений.

Таблица 2

Влияние максимального числа итераций в рекурсивном методе устранения призраков на среднюю разность интенсивностей пикселов исходного и скорректированного изображений

Table 2

The influence of the maximum number of iterations in the recursive ghost removal method on the average difference in pixel intensities of the original and corrected images

Число итераций	Средняя разность интенсивностей пикселов
0 (без коррекции)	3,082
1	0,389
2	0,110
3	0,095
4	0,093
5	0,093

Средняя разность интенсивностей пикселов неискаженного изображения и изображения с призраком (diff_0) составляет 3,082. После применения рекурсивного метода устранения призраков значение данного параметра (diff_i, $i = 1, \ldots, 5$) снижается. Увеличение максимального числа итераций n уменьшает величину diff, что подтверждает предположение о том, что рост числа итераций приводит к лучшему результату устранения призраков. Если построить зависимость значений $\frac{\mathrm{diff}_0}{\mathrm{diff}_i}$ от числа итераций n, то можно оценить, во сколько раз увеличивается качество скорректированного изображения по сравнению с качеством исходного изображения (рис. 11).

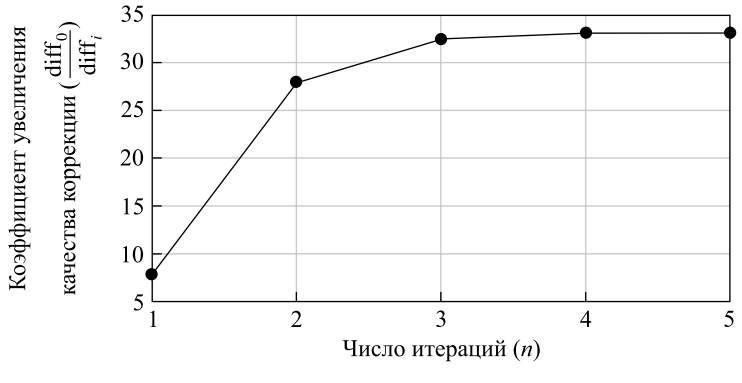

Рис. 11. Увеличение качества коррекции призраков с ростом максимального числа итераций рекурсивного метода устранения призраков

Fig. 11. Increasing the quality of ghost correction with an increase in the maximum number of iterations of the recursive ghost removal method

По характеру графика этой зависимости можно сделать вывод о том, что с увеличением числа итераций рост точности коррекции замедляется. При $n > 3$ он становится совсем незначительным, а именно 0,002 в абсолютных значениях интенсивностей.

Кроме численной оценки качества устранения призраков, учитывалась экспертная оценка ввиду высокой контрастной чувствительности человеческого глаза. Так, на результатах коррекции тестового изображения, представленного на рис. 10, при $n = 1$ видны едва заметные очертания здания на фоне однотонного неба. При $n = 2$ эти остаточные призраки были устранены (рис. 12).

Рис. 12. Результат устранения призраков при $n = 2$

Fig. 12. Result of eliminating ghosts with $n = 2$

Дальнейшее увеличение n визуально не изменяло результат коррекции. Такое поведение легко обосновывается тем, что при $p = 0{,}09$ на интенсивность пиксела-призрака влияет 9 % интенсивности первого пиксела-«прообраза» ($n = 1$) и лишь 0,81 % интенсивности второго пиксела-«прообраза» ($n = 2$). Очевидно, что дальнейшее увеличение n приведет к еще меньшим вкладам последующих пикселов-«прообразов» (0,07 % и т. д.). По этой причине при использовании метода коррекции с $n = 2$ достигается оптимальный баланс между точностью устранения призраков и временем на проведение вычислений.

Коррекция призраков на фотоснимках, сделанных НА «ВСС». После исследования особенностей устранения призраков на тестовом изображении была выполнена проверка устранения призраков на изображениях, полученных НА «ВСС». На рис. 13 представлен фотоснимок Минска, зарегистрированный НА «ВСС» из здания Института прикладных физических проблем имени А. Н. Севченко БГУ.

Для устранения призраков на изображении, снятом НА «ВСС», выбран рекурсивный метод с $n = 2$. В целях демонстрации различий между простой пространственной моделью формирования призраков и уточненной моделью, полученной в результате лабораторных измерений, выполнена коррекция призраков с помощью этих двух пространственных моделей. На рис. 14, *б*, остались следы призраков, в то время как на рис. 14, *в*, призраки устранены.

Рис. 13. Фотоснимок Минска, зарегистрированный НА «ВСС»

Fig. 13. A photograph of Minsk registered by SE «VSS»

а/*a* *б*/*b* *в*/*c*

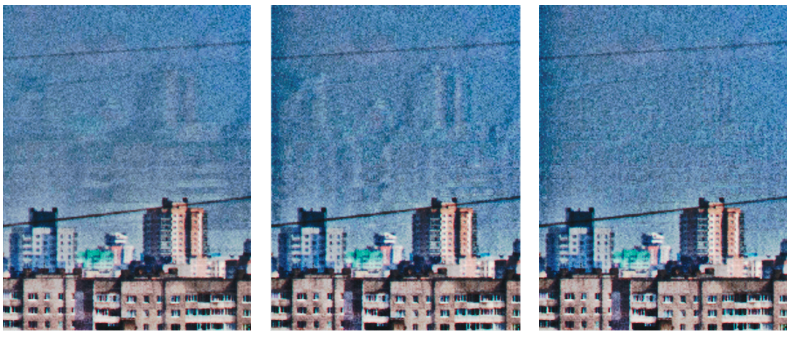

Рис. 14. Результат устранения призраков на увеличенном фрагменте изображения, полученного НА «ВСС»: *а* – изображение с призраком; *б* – результат устранения призраков рекурсивным методом с простой пространственной моделью; *в* – результат устранения призраков рекурсивным методом с уточненной пространственной моделью

Fig. 14. The result of eliminating ghosts on an enlarged fragment of the image obtained by SE «VSS»: *a* – an image with a ghost; *b* – the result of eliminating ghosts by the recursive method with a simple spatial model; *c* – the result of eliminating ghosts using a recursive method with a refined spatial model

В отличие от исследования качества устранения сгенерированных призраков, как на рис. 10, дать количественную оценку качеству устранения призраков на изображениях, полученных НА «ВСС», довольно проблематично, так как отсутствует неискаженное изображение, с которым можно проводить сравнение. Качественную (экспертную) оценку дать проще. Так, на рис. 15 представлен фотоснимок тестовой миры, полученный НА «ВСС» и симметрично разделенный на две части. Левая часть изображения (см. рис. 15, *а*) не подвергалась коррекции, а для правой части изображения (см. рис. 15, *б*) выполнено устранение призраков рекурсивным методом с $n = 2$. Все призраки темных линий были устранены по всему полю изображения, кроме полосы в нижней части фотоснимка с высотой, составляющей 14 % от высоты изображения. Эта область возникает, так как необходимая для устранения призраков информация отсутствует на фотоснимке.

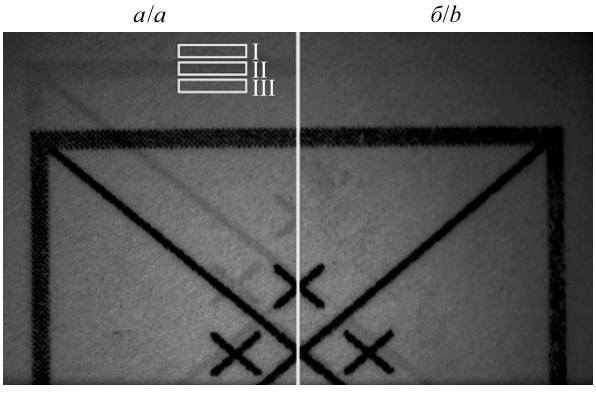

Рис. 15. Фотоснимок тестовой миры, полученный НА «ВСС»:
а – часть изображения, не подвергавшаяся коррекции;
б – часть изображения, для которой выполнено устранение призраков

Fig. 15. A photograph of the test target obtained by SE «VSS»:
a – part of the image that has not been corrected;
b – part of the image that has been deghosted

Предложен численный способ дать количественную оценку качеству устранения призраков. Как и в случае расчета доли непрозрачности призраков, используется изображение тестовой миры. Оно характеризуется наличием черных линий, их призраков и одинаковым равномерным окружающим фоном. На рис. 15 была выбрана прямоугольная область II, покрывающая призрак темной линии. Выше и ниже этой области выбраны аналогичные по размеру прямоугольные области I и III, на которых отсутствуют призраки темных линий. Для этих областей рассчитаны средние значения интенсивности пикселов (табл. 3).

Таблица 3

Различия между областями I–III для изображений с призраками и изображений с устранением призраков рекурсивным методом

Table 3

Differences between regions I–III for ghosted images and images with recursive deghosting

Область	Средняя интенсивность пикселов для изображения с призраками				Средняя интенсивность пикселов для изображения с устранением призраков			
	R	G	B	RGB	R	G	B	RGB
I	1	138	91	76,67	1	137	90	76,00
II	0	135	89	74,67	0	138	91	76,33
III	1	143	94	79,33	1	137	91	76,33

Отношение средней яркости области II к усредненной яркости областей I и III для изображения с призраками равно 0,957, а для изображения с выполненной коррекцией призраков составляет 1,002. Другими словами, до коррекции призрак темной линии темнее окружающего фона на $(1 – 0{,}957) \cdot 100 = 4{,}3$ %, а после коррекции область с устраненным призраком ярче окружающего фона на $(1{,}002 – 1) \cdot 100 = 0{,}2$ %. Полученный результат свидетельствует о качественном устранении призраков на изображении.

Заключение

Построена первичная модель формирования призраков на изображении. Разработан рекурсивный метод коррекции призраков на изображениях, и оценена его эффективность.

Проанализировано влияние максимального числа итераций на результат устранения призраков. Выбрано оптимальное значение числа итераций (n = 2), дальнейшее увеличение которого продолжает увеличивать время расчета, но практически не влияет на качество коррекции (рост числа итераций до n = 3 позволит дополнительно учитывать вклады всего 0,07 % составляющей призрака).

Исследовано формирование призраков на изображениях, полученных НА «ВСС» при съемке коллимированного излучения точечного источника на оптическом стенде. По результатам исследования определены более сложные законы пространственного формирования призраков по сравнению с первичной моделью, которые уточнены в новой модели. Выведена зависимость координат призраков от координат их «прообразов». Определена доля исходного изображения, полученного НА «ВСС», в призраке.

Совмещение новой пространственно-яркостной модели формирования призраков и рекурсивного метода их коррекции позволило устранить призраки на получаемых НА «ВСС» снимках. Различие между призраком тестовой миры и однородным фоном на изображении до коррекции составляло 4,3 %, а после коррекции – 0,2 %.

Однако программной коррекции призраков присущ недостаток: для призраков на изображении, получаемом НА «ВСС», существует область (14 % от его общей площади), которая не может быть подвергнута коррекции, так как «прообразы» призраков отсутствуют на фотоснимке.

Разработанный метод коррекции призраков, а также приведенные методы лабораторных измерений и обработки полученных результатов могут эффективно применяться для решения задачи улучшения качества изображений.

Библиографические ссылки

1. Liepmann TW. Wedged plate beam splitter without ghost reflections. *Applied Optics.* 1992;31(28):5905–5906. DOI: 10.1364/AO.31.005905.

2. Levin A, Zomet A, Weiss Y. Separating reflections from a single image using local features. In: *Proceedings of the 2004 IEEE Computer Society conference on computer vision and pattern recognition. CVPR-2004; 2004 June 27 – July 2; Washington, USA. Volume 1.* Los Alamitos: IEEE Computer Society; 2004. p. I-306 – I-313. DOI: 10.1109/CVPR.2004.1315047.

3. Chung Y-C, Chang S-L, Wang J-M, Chen S-W. Interference reflection separation from a single image. In: *2009 Workshop on applications of computer vision (WACV-2009); 2009 December 7–8; Snowbird, USA.* [S. l.]: IEEE; 2010. p. 1–6. DOI: 10.1109/WACV.2009.5403036.

4. Li Y, Brown MS. Single image layer separation using relative smoothness. In: *2014 IEEE conference on computer vision and pattern recognition; 2014 June 23–28; Columbus, USA.* Los Alamitos: IEEE Computer Society; 2014. p. 2752–2759. DOI: 10.1109/CVPR.2014.346.

5. Shih Y, Krishnan D, Durand F, Freeman WT. Reflection removal using ghosting cues. In: *2015 IEEE conference on computer vision and pattern recognition (CVPR); 2015 June 7–12; Boston, USA.* [S. l.]: IEEE; 2015. p. 3193–3201. DOI: 10.1109/CVPR.2015.7298939.

6. Gai K, Shi Z, Zhang C. Blind separation of superimposed moving images using image statistics. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence.* 2012;34(1):19–32. DOI: 10.1109/TPAMI.2011.87.

7. Guo X, Cao X, Ma Y. Robust separation of reflection from multiple images. In: *2014 IEEE conference on computer vision and pattern recognition; 2014 June 23–28; Columbus, USA.* Los Alamitos: IEEE Computer Society; 2014. p. 2195–2202. DOI: 10.1109/CVPR.2014.281.

8. Li Y, Brown MS. Exploiting reflection change for automatic reflection removal. In: *2013 IEEE International conference on computer vision. ICCV-2013; 2013 December 1–8; Sydney, Australia.* Los Alamitos: IEEE Computer Society; 2013. p. 2432–2439. DOI: 10.1109/ICCV.2013.302.

9. Punnappurath A, Brown MS. Reflection removal using a dual-pixel sensor. In: *2019 IEEE/CVF conference on computer vision and pattern recognition; 2019 June 15–20; Long Beach, USA.* Los Alamitos: IEEE Computer Society; 2019. p. 1556–1565. DOI: 10.1109/CVPR.2019.00165.

10. Li T, Lun DPK, Chan Y-H, Budianto. Robust reflection removal based on light field imaging. *IEEE Transactions on Image Processing.* 2019;28(4):1798–1812. DOI: 10.1109/TIP.2018.2880510.

11. Kong N, Tai Y-W, Shin JS. A physically-based approach to reflection separation: from physical modeling to constrained optimization. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence.* 2014;36(2):209–221. DOI: 10.1109/tpami.2013.45.

12. Pawan Prasad BH, Green Rosh KS, Lokesh RB, Mitra K, Chowdhury S. V-DESIRR: very fast deep embedded single image reflection removal. In: *2021 IEEE/CVF International conference on computer vision. ICCV-2021; 2021 October 10–17; Montreal, Canada.* Los Alamitos: IEEE Computer Society; 2021. p. 2370–2379. DOI: 10.1109/ICCV48922.2021.00239.

13. Belyaev MYu. Scientific equipment and Earth studies techniques in space experiment «Uragan» on board the International Space Station. *Sovremennye problemy distantsionnogo zondirovaniya Zemli iz kosmosa.* 2021;18(3):92–107. Russian. DOI: 10.21046/2070-7401-2021-18-3-92-107.

14. Belyaev MYu, Desinov LV, Karavaev DYu, Legostaev VP, Ryazantsev VV, Yurina OA. Features of imaging the Earth surface and using the results of the imaging made by the ISS Russian segment crews. *Space Engineering and Technology.* 2015;1:17–30. Russian. EDN: TZWTHH.

15. Belyaev MYu, Desinov LV, Karavaev DYu, Legostaev VP. Use of ground surface survey from the ISS for the benefit of fuel and energy complex. *Izvestiya Rossiiskoi akademii nauk. Energetika.* 2013;4:75–90. Russian. EDN: REJWYN.

16. Belyaev MYu, Desinov LV, Karavaev DYu, Sarmin EE, Yurina OA. The study of catastrophic events that may lead to environmental challenges under the program «Hurricane» onboard the Russian segment of the International Space Station. *Kosmonavtika i raketostroenie.* 2015;1:71–79. Russian. EDN: UJTWFJ.

17. Belyaev MYu, Volkov ON, Solomina ON, Tertitsky GM. Animal migration studies with the use of Icarus scientific equipment in the Uragan space experiment aboard the ISS RS. *Giroskopiya i navigatsiya.* 2022;30(3):3–19. Russian. EDN: UTJSZC.

18. Belyaev BI, Belyaev MYu, Sarmin EE, Gusev VF, Desinov LV, Ivanov VA, et al. Design and flight tests of science hardware «Videospectral system» on board the Russian segment of the ISS. *Space Engineering and Technology.* 2016;2:70–79. Russian. EDN: WCKDEN.

19. Belyaev BI, Belyaev YuV, Domaratskii AV, Katkovskii LV, Krot YuA, Rogovets AV, et al. The photospectral system for the space experiment «Uragan». *Space Science and Technology.* 2010;16(2):41–48. Russian. DOI: 10.15407/knit2010.02.041.

20. Prasanna Kumar KN, Kiranagi BS, Bagewadi CS. A general theory of the system «quantum information – quantum entanglement, subatomic particle decay – asymmetric spin states, non locality – hidden variables» – a concatenated model. *International Journal of Scientific and Research Publications.* 2012;2(7).

Получена 30.04.2024 / исправлена 03.05.2024 / принята 09.07.2024.
Received 30.04.2024 / revised 03.05.2024 / accepted 09.07.2024.

УДК 535.33:621.374.825

РЕЖИМ АВТОКОЛЕБАНИЙ ИЗЛУЧЕНИЯ ЛАЗЕРА С РЕЗОНАНСНОЙ ФАЗОВОЙ НЕЛИНЕЙНОСТЬЮ

Е. В. ТИМОЩЕНКО[1]***, В. А. ЮРЕВИЧ***[2]

[1]*Могилёвский государственный университет им. А. А. Кулешова, ул. Космонавтов, 1, 212022, г. Могилёв, Беларусь*
[2]*Белорусский государственный университет пищевых и химических технологий, пр. Шмидта, 3, 212027, г. Могилёв, Беларусь*

Аннотация. Представлена резонансная модель генерации полупроводникового лазера, излучающего на длинах волн ИК-диапазона, в которой учтена нелинейная фазовая перестройка резонансного материального отклика среды и поля вынужденного излучения. Схема моделирования генерации основывается на модификации уравнений Максвелла – Блоха для материалов с квантово-размерными эффектами. При условии относительно высокой концентрации квантовых точек, представляемых дипольными частицами, для этих сред типично сочетание нелинейных эффектов, вызывающих динамику фазового соотношения поля и резонансной поляризованности. К ним относят взаимное влияние ближних полей дипольных частиц, резонансную нелинейную рефракцию, оптический эффект Штарка. Результаты численного расчета и качественный анализ модели показали, что особая неустойчивость излучения обусловлена оптическим эффектом Штарка, которым поддерживается действенный уровень амплитудно-фазовой связи в схеме лазера. Продемонстрировано, что именно фактор нелинейного штарковского смещения резонансной линии усиления способен дестабилизировать устойчивые состояния лазерной системы. Во взаимосвязи с остальными механизмами фазовой нелинейности эффект Штарка порождает автомодуляционную динамику в вынужденном излучении, стимулируя интересный с практической точки зрения режим самоподдерживающихся пульсаций интенсивности.

Ключевые слова: лазерное излучение; полупроводниковые квантово-размерные структуры; самопульсации интенсивности; оптический эффект Штарка.

Образец цитирования:
Тимощенко ЕВ, Юревич ВА. Режим автоколебаний излучения лазера с резонансной фазовой нелинейностью. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2024; 3:41–49.
EDN: AWQNUL

For citation:
Timoshchenko EV, Yurevich VA. Self-oscillation mode of laser radiation with resonant phase nonlinearity. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2024;3:41–49. Russian.
EDN: AWQNUL

Авторы:
Елена Валерьевна Тимощенко – кандидат физико-математических наук, доцент; заведующий кафедрой физики и компьютерных технологий факультета математики и естествознания.
Владимир Антонович Юревич – доктор физико-математических наук, профессор; профессор кафедры техносферной безопасности и общей физики механического факультета.

Authors:
Elena V. Timoshchenko, PhD (physics and mathematics), docent; head of the department of physics and computer technology, faculty of mathematics and natural sciences.
timoshchenko@msu.by
Vladimir A. Yurevich, doctor of science (physics and mathematics), full professor; professor at the department of technosphere safety and general physics, mechanical faculty.
va_yurevich@mail.ru

CC BY NC

Журнал Белорусского государственного университета. Физика. 2024;3:41–49
Journal of the Belarusian State University. Physics. 2024;3:41–49

SELF-OSCILLATION MODE OF LASER RADIATION WITH RESONANT PHASE NONLINEARITY

E. V. TIMOSHCHENKO[a], *V. A. YUREVICH*[b]

[a]*Mogilev State A. Kuleshov University,*
1 Kasmanawtaw Street, Magiliow 212022, Belarus
[b]*Belarusian State University of Food and Chemical Technologies,*
3 Shmidta Avenue, Magiliow 212027, Belarus
Corresponding author: E. V. Timoshchenko (timoshchenko@msu.by)

Abstract. The paper presents a resonance model of generation of a semiconductor laser emitting at wavelengths in the IR-range, which takes into account the nonlinear phase transformation of the resonant material response of the medium and the field of stimulated emission. The scheme for modelling the generation is based on a modification of the Maxwell – Bloch equations for materials with quantum-size effects. Under the condition of a relatively high concentration of quantum dots represented by dipole particles, a combination of nonlinear effects causing the dynamics of the phase relationship of the field and resonant polarisation is typical for these media. These include the mutual influence of near fields of dipole particles, resonant nonlinear refraction, and the optical Stark effect. The results of numerical calculation and qualitative analysis of the model showed that a special instability of the radiation is caused by the optical Stark effect, which maintains an effective level of amplitude-phase coupling in the laser scheme. It is shown that it is the factor of the nonlinear Stark shift of the resonant gain line that is capable of destabilising stable states of the laser system. In conjunction with other mechanisms of phase nonlinearity, the Stark effect generates self-modulation dynamics in forced emission, stimulating, among other things, a regime of self-sustaining intensity pulsations that is interesting from a practical point of view.

Keywords: laser radiation; semiconductor quantum-dimensional structures; intensity self-pulsations; optical Stark effect.

Введение

Стабильное получение регулярных серий контрастных импульсов субпико- и пикосекундной длительности обычно требует использования высокотехнологичных лазерных систем. Особые перспективы в миниатюризации таких лазеров, применяемых в предельно компактных устройствах нанофотоники, связаны с возможностью использования квантово-размерных полупроводниковых структур в качестве материалов для активных элементов [1–3]. Целенаправленное изменение характеристик структуры излучения в устройствах пониженной размерности происходит за счет вариации уровня постоянного во времени тока накачки или параметров компактного пассивного дисперсионного элемента в схеме обратной связи[1]. Структурные элементы (например, квантовые точки) используемых в лазерной оптике полупроводниковых слоев с квантово-размерными эффектами характеризуются большими дипольными моментами, связанными с экситонными переходами (их величина оценивается в несколько десятков дебаев) [4]. Субмикронные и нанометровые слои на основе подобных сред с выраженным резонансным откликом на поле когерентного излучения могут обладать сильной нелинейностью, в этих объектах возможно наблюдение когерентных оптических эффектов [4–6] и нелинейных фазовых вариаций действующего в слое поля. Баланс энергии источника возбуждения, коррелирующего и излучаемого поля в такой структуре может быть рассмотрен традиционно, т. е. в рамках двухуровневой схемы образующих ее резонансных частиц – квантовых излучателей (КИ), представленных элементарными диполями.

Характерными следствиями проявления нелинейности резонансного материального отклика квантово-размерных структур на поле когерентного излучения являются факторы, обусловливающие перенормировку фазового соотношения действующего светового поля и поляризационного отклика вещества. К ним относят влияние диполь-дипольного взаимодействия на резонансную частоту усиливающего слоя [7], резонансную нелинейную рефракцию [8] и оптический эффект Штарка [9; 10]. В работе, положенной в основу настоящей статьи, представлена нестационарная балансная модель динамики вынужденного излучения с учетом вышеупомянутых взаимосвязанных нелинейных фазовых эффектов, типичных для резонансного взаимодействия светового поля с веществом квантово-размерных структур. Численное моделирование процесса излучения проведено для параметров полупроводниковых лазеров на квантовых точках.

Постановка задачи и формулировка схемы расчета

Возможность проявления нелинейных фазовых эффектов оказывается высокой в условиях сравнительно большой концентрации элементарных активных центров, представленных дипольными КИ. Эффекты фазовой перестройки излучения связаны с оптическим эффектом Штарка, диполь-дипольным

[1]*Жуков А. Е.* Лазеры и микролазеры на основе квантовых точек : учеб. пособие. СПб. : Политех-пресс, 2019. 42 с.

взаимодействием и автомодуляционным смещением частоты вынужденного излучения из-за влияния поглощения в квазирезонансных переходах. Известно, что в ряде твердотельных лазеров, включая полупроводниковые, при возбуждении релаксационных колебаний (т. е. колебаний, параметры которых зависят только от соотношения времен релаксации поля в среде и резонаторе со скоростью возбуждения) могут развиваться переходные серии достаточно коротких пульсаций. Регулярная последовательность импульсов возникает даже в условиях постоянного уровня накачки и отсутствия модулирующих элементов в резонаторе. В работе поставлена задача оценки следствий нелинейности в материальном отклике массива КИ, образующих усиливающий элемент, на динамику светового поля как фактора произвольного перехода излучения лазера в режим самоподдерживающихся пульсаций.

Анализ нелинейной динамики излучения в относительно низкоразмерном массиве КИ проводится в рамках балансного приближения для напряженности поля $E(t)$ с частотой ω в усиливающем элементе и для вероятностных переменных, определяющих его реакцию на световое поле и возбуждение накачкой. При предположении однородного уширения спектральной линии усиления с центральной частотой ω_{12} эти вероятностные переменные являются согласованными с переменной поля величинами вероятности поляризованности ρ и разности населенностей уровней резонансного перехода n. Исходные уравнения для переменных поля и резонансного отклика известны как система Максвелла – Блоха [11] и традиционно используются для анализа динамики генерации в одночастотном приближении. Система формулируется с применением представлений двухуровневой квантово-механической матрицы плотности:

$$\frac{dE}{dt} = \frac{1}{T_c}\left(R - \sigma E\right),\ \frac{d\rho}{dt} = \frac{\mu}{\hbar} nE - \frac{\rho}{T_2}\left(1 - i\Delta\right),$$
$$\frac{dn}{dt} = \frac{j - n}{T_1} - \frac{\mu}{2\hbar}\left(\rho^* E + \rho E^*\right),\ \Delta = \Delta_0 - \pi\frac{\Delta\alpha}{\hbar}\varepsilon_0 \left|E\right|^2 T_2, \tag{1}$$

где R – комплексная переменная, определяемая вероятностью поляризованности ρ; μ – матричный элемент дипольного момента перехода; N – объемная концентрация активных центров; T_c и σ – время прохода света по резонатору и коэффициент потерь в резонаторе соответственно; T_1 и T_2 – времена продольной и поперечной (фазовой) релаксации перехода соответственно (в случае полупроводниковых активных сред эти величины соответствуют временам межзонной и внутризонной релаксации); $\frac{j}{T_1}$ – компонент, характеризующий скорость накачки. В выражение для частотной отстройки Δ включены нормированная линейная отстройка частоты поля от частоты резонанса $\Delta_0 = \left(\omega - \omega_{12}\right)T_2$ и записанный аналогично, например, в [12; 13] нелинейный компонент, определяющий смещение частоты из-за оптического эффекта Штарка, где $\Delta\alpha$ – дефект поляризуемости (различие поляризуемостей КИ на уровнях основного перехода).

Далее ставится задача учета резонансной нелинейной рефракции, которая может быть решена путем обобщения двухуровневой схемы взаимодействия в соответствии с подходом, обоснованным в [12]. Аналогично [14] переменная поляризованности в этом представлении определяет вклад квазирезонансной поляризуемости:

$$R = \frac{N}{\varepsilon_0}\left[\mu\rho + i2\pi\Delta\alpha\varepsilon_0\left(n - n_0\right)E\right], \tag{2}$$

где N – объемная концентрация КИ; n_0 – некоторое начальное значение инверсии.

Перераспределение КИ по уровням перехода в процессе накачки и при насыщении приводит к безынерционному в отношении вариаций инверсии смещению фазового соотношения поля и резонансной поляризованности. В таком случае учет оптического эффекта Штарка вполне правомерно сочетается с рассмотрением следствий резонансной нелинейной рефракции, поскольку коэффициент нелинейности, определяющий величину эффекта, также пропорционален дефекту поляризуемости $\Delta\alpha$.

В связи с поставленной задачей учета фазовой резонансной нелинейности особо важна перенормировка фазового соотношения поля и поляризованности из-за влияния ближних полей диполей на положение резонансной частоты спектральной линии усиления. Именно поэтому допускается, что в формировании отклика среды под действием поля существенна локальная поправка Лоренца, устанавливающая отличие действующего на КИ поля E' от поля E. В дальнейшей модификации системы кинетических уравнений рассматривается следующее соотношение действующего и коррелирующего (излучаемого) поля: $E' = E + \frac{iR}{3}$. Производится соответствующая замена переменной для напряженности поля в уравнениях Блоха в системе (1) и представлении поляризованности (2).

В последующих представлениях удобно использовать нормированные переменные, а также ввести новые обозначения параметров нелинейности и накачки:

$$\mathrm{e} = \frac{\mu}{\hbar}\sqrt{T_1 T_2}E,\ \ p = \rho\sqrt{\frac{T_1}{T_2}},\ \ y = \frac{n}{\sigma},\ \ \kappa = \frac{j}{\sigma},\ \ \beta = \frac{2\pi\Delta\alpha\hbar}{\mu^2 T_2}\varepsilon_0,\ \ \gamma = \frac{\mu^2 N}{3\varepsilon_0\hbar}T_2.$$

Для записи балансной схемы энергообмена излучения и накачки в усиливающем элементе далее применяем адиабатическое приближение системы (1). Его считают допустимым при большом различии времен релаксации $T_1 \gg T_2$ (в случае некогерентного взаимодействия поля излучения с активной средой, когда характерное время развития излучения, например длительность светового импульса, может значительно превышать время фазовой релаксации). В этом предположении поляризованность оценивается как безынерционно «следящая» за полем, и в сингулярном пределе уравнения для вероятности поляризованности получаем

$$\begin{gathered} p = \frac{y\mathrm{e}}{B},\ \ \mathrm{e}' = \frac{1 - i\Delta}{B}\mathrm{e}, \\ B = A - i\left(A\Delta + \gamma y\right),\ \ A = 1 + \beta\gamma\left(y - y_0\right),\ \Delta = \Delta_0 - \beta\frac{T_2}{2T_1}\left|\mathrm{e}\right|^2. \end{gathered} \tag{3}$$

Принимая во внимание соотношения (3), запишем модификацию скоростных уравнений, следующих из системы (1), в виде

$$\begin{gathered} \frac{dX}{d\tau} = \frac{1}{\tau_r}\left(Gy - 1\right)X,\ \ \frac{dy}{d\tau} = \kappa - \left(1 + GX\right)y, \\ G = \left\{A^2 + \left[A\left(\Delta_0 - \beta\frac{T_2}{2T_1}X\right) + \gamma y\right]^2\right\}^{-1}. \end{gathered} \tag{4}$$

В представлениях системы (4) для характеристики излучения использованы переменная интенсивности $X(\tau) = \left|\mathrm{e}(\tau)\right|^2$, нормированная по величине характерной интенсивности насыщения усиления, переменная времени $\tau = \frac{t}{T_1}$ и скоростной параметр времени жизни фотона в резонаторе τ_r, нормированные по величине T_1, в дальнейших оценках предполагается также, что $y_0 = 1$.

Выражение G в системе (4) описывает, в сущности, нелинейный форм-фактор линии усиления и наряду с линейной отстройкой частоты содержит три нелинейных компонента, включение которых определено значимостью диполь-дипольного взаимодействия, резонансной нелинейной рефракции и оптического эффекта Штарка.

Устойчивость решений и режим автоколебаний

В скоростных уравнениях (4) отражен ряд взаимосвязанных нелинейных эффектов, возможных при динамических сценариях развития вынужденного излучения в структурах из КИ, представляющих экситоны или квантовые точки в используемых в лазерной оптике полупроводниках.

Качественное изучение поведения решений для $X(\tau)$ вблизи равновесного состояния с ненулевой мощностью X_S прежде всего дает возможность оценить зону параметров системы (4), в которой это состояние устойчиво. На временно́й шкале кривые, описывающие решения для обеих переменных, выходя из начальных точек, после ряда осцилляций затухают к равновесным значениям. Выражения для равновесных значений X_S, y_S следуют из сингулярных пределов системы (4):

$$\kappa = X_\mathrm{S} + y_\mathrm{S},\ \ \frac{\beta T_2}{2T_1}X_\mathrm{S} = \Delta_0 + \frac{\gamma y_\mathrm{S} - \sqrt{y_\mathrm{S} - A_\mathrm{S}^2}}{A_\mathrm{S}},\ \ A_\mathrm{S} = 1 + \beta\gamma\left(y_\mathrm{S} - 1\right). \tag{5}$$

Линеаризация системы (4) в окрестности точек равновесия (5) позволяет записать аналог балансной схемы (4) для относительно малых решений $\Delta X(\tau)$ и $\Delta y(\tau)$ в некоторой области фазовой плоскости (X, y), содержащей геометрическое место точек X_S, y_S. Линеаризованный аналог схемы представляется в виде системы линейных дифференциальных уравнений

$$\tau_r \frac{d\Delta X}{d\tau} = -\frac{FX_S}{y_S}\Delta X + \frac{1-M}{y_S} X_S \Delta y,$$

$$\frac{d\Delta y}{d\tau} = \left(\frac{FX_S}{y_S} - 1\right)\Delta X - \left[1 + (1-M)\frac{X_S}{y_S}\right]\Delta y,$$

$$F = \beta \frac{T_2}{T_1} A_S \left[A_S \left(\Delta_0 - \beta \frac{T_2}{2T_1} X_S \right) + \gamma y_S \right], \tag{6}$$

$$M = 2\gamma \left\{ \beta A_S + \left[1 + \beta \left(\Delta_0 - \beta \frac{T_2}{2T_1} X_S \right) \right] \left[A_S \left(\Delta_0 - \beta \frac{T_2}{2T_1} X_S \right) + \gamma y_S \right] \right\}.$$

На основе (6) формулируется характеристический полином относительно χ – комплексного коэффициента затухания в показателе экспоненциального решения $\exp(\chi\tau)$ системы (6).

Наиболее реальны осциллирующие решения, но если осцилляции определенно релаксирующие, т. е. затухают к равновесным значениям, то система (4) описывает переход лазера к установившемуся стационарному режиму излучения. Тогда особая точка (X_S, y_S) на фазовой плоскости (X, y) системы (3) представляет собой устойчивый фокус и является аттрактором фазовых кривых. Характеристический полином, выраженный квадратным уравнением, должен обладать комплексно-сопряженными корнями $\chi_{1,2} = \frac{\left(\mathrm{Re}\,\chi \pm i\sqrt{D}\right)}{2}$.

Выражения для вещественной части корней и дискриминанта характеристического уравнения записываются следующим образом:

$$\mathrm{Re}\,\chi = -\left[1 + \left(1 - M - \frac{F}{\tau_r}\right)\frac{X_S}{y_S}\right],\ D = \frac{4}{\tau_r}(1 - M - F)X_S - \left[1 + \left(1 - M - \frac{F}{\tau_r}\right)\frac{X_S}{y_S}\right]^2. \tag{7}$$

Совместно с соотношениями (5) значения корней (7) могут быть положены в основу критерия характеристики поведения траекторий на фазовой плоскости (X, y) в окрестности равновесного состояния (X_S, y_S). Устойчивость фокуса X_S, y_S допустима при условии $\mathrm{Re}\,\chi < 0$. Представление в (7) величин $\mathrm{Re}\,\chi$ и D функциями y_S удобно для последующего параметрического расчета зависимостей типа $\mathrm{Re}\,\chi(\kappa)$. Переменная величина y_S при этом считается неотрицательным линейно нарастающим в определенном диапазоне параметром.

При определении условия автоколебаний, очевидно, следует выделить зоны параметров (4), где точки X_S, y_S нестабильны по типу неустойчивого фокуса. Уход траекторий, соответствующих осцилляторным решениям (4), из окрестности точки равновесия должен означать, что их аттрактором окажется предельный цикл. Такое поведение решений обусловлено неизбежным периодически происходящим насыщением роста $y(\tau)$ при увеличении мощности вынужденного излучения $X(\tau)$ с последующим снижением (сбросом инверсии). Особая точка оказывается неустойчивым фокусом, если $\mathrm{Re}\,\chi > 0$. Такого рода неустойчивость соответствует периодическому решению с частотой $\Omega = \frac{\sqrt{D}}{2}$ у линеаризованных уравнений. Исходная система (4) характеризуется осцилляторными решениями для $X(\tau)$ и $y(\tau)$, амплитуды которых стабилизируются. Тогда моделью описывается развитие сценария регулярных незатухающих пульсаций. Такой режим излучения, реализуемый при постоянном уровне накачки, интересен с практической точки зрения. Условие его достижимости удобно иллюстрировать на шкале параметра возбуждения κ для разных значений отстройки частоты (рис. 1, *а*). Положением точек пересечения кривых $\mathrm{Re}\,\chi(\kappa)$ с горизонтальной осью определяется так называемый второй порог генерации (уровень накачки κ, начиная с которого возможна самопроизвольная неустойчивость вынужденного излучения). Частота релаксационных пульсаций с ростом накачки должна увеличиваться (рис. 1, *б*).

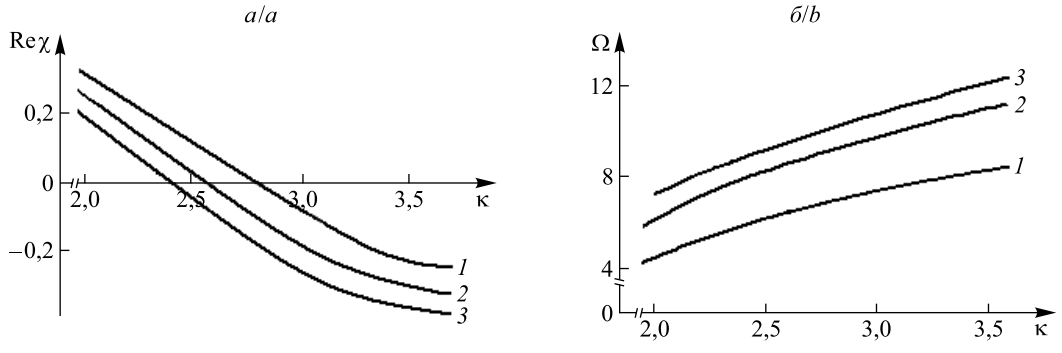

Рис. 1. Зависимости действительной (*а*) и мнимой (*б*) частей корней характеристического уравнения от уровня возбуждения (накачки): $\Delta_0 = -0{,}04$ (*1*), $\Delta_0 = 0$ (*2*), $\Delta_0 = 0{,}04$ (*3*), $\beta = 0{,}15$, $\gamma = 0{,}34$, $\tau_r = 7{,}0 \cdot 10^{-3}$, $T_1 = 2{,}0 \cdot 10^{-9}$ с, $T_2 = 5{,}0 \cdot 10^{-12}$ с

Fig. 1. Dependences of the real (*a*) and imaginary (*b*) parts of the roots of the characteristic equation on the excitation (pumping) level: $\Delta_0 = -0.04$ (*1*), $\Delta_0 = 0$ (*2*), $\Delta_0 = 0.04$ (*3*), $\beta = 0.15$, $\gamma = 0.34$, $\tau_r = 7.0 \cdot 10^{-3}$, $T_1 = 2.0 \cdot 10^{-9}$ s, $T_2 = 5.0 \cdot 10^{-12}$ s

В оценке масштаба предсказываемых явлений (как при расчете пороговых характеристик согласно соотношениям (5) и (7), так и при численном моделировании на основе уравнений (4)) исходили примерно из тех параметров для квантово-размерных лазеров, которые взяты из литературы для структуры квантовых точек в слоях *InAs*/(*Al*)*GaAs* на подложках *GaAs* и слоях *InGaAs*/*InAlAs* на подложках *InP*, излучающих в зависимости от концентрации квантовых точек и уровня оптических потерь (в расчетах $N \sim (1\ldots4) \cdot 10^{18}$ см$^{-3}$, $\sigma \sim 0{,}5$) в диапазоне длин волн 1250–1290 нм [2; 3] и 1030–1195 нм [15].

Моделирование релаксационной динамики излучения

Расчеты процессов излучения основывались на численном интегрировании кинетической системы (4) методом Рунге – Кутты. Начальные условия соответствовали выполнению амплитудного условия генерации, т. е. предполагалось, что $y(\tau = 0) = y_S$. При этом величина $X(\tau = 0)$ на несколько порядков меньше равновесного значения, т. е. на начальном этапе моделирования процесса вынужденного излучения решалась задача усиления слабого сигнала. Ход кривых, описывающих решения (4) для нормированной мощности в этом диапазоне величин $X(\tau = 0)$, не зависел от их выбора. На рис. 2 и 3 развертки динамической картины вынужденного излучения для переменной мощности $X(t)$, полученные путем моделирования процесса, приведены в наносекундном диапазоне времени.

На рис. 2 представлены результаты моделирования, которые дают возможность сравнить развитие колебательного процесса в динамике переменных X, y в условиях полного учета нелинейных механизмов модуляции (см. рис. 2, *а*) и пренебрежения факторами, вызывающими неустойчивость процесса излучения (см. рис. 2, *б* и *в*).

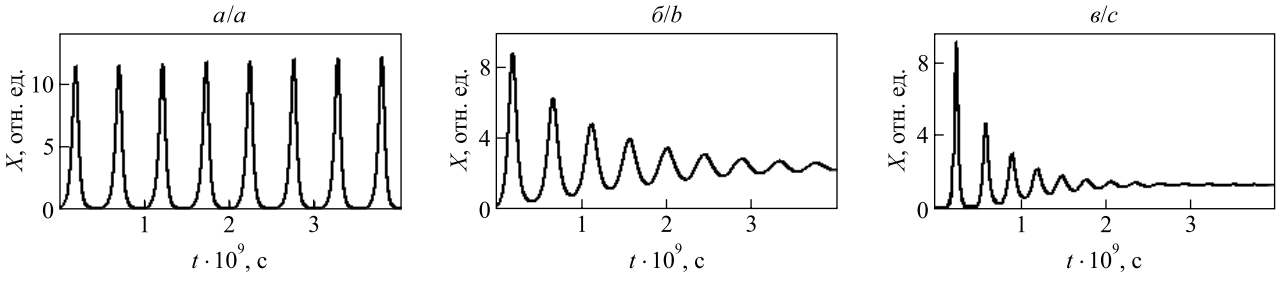

Рис. 2. Временная структура нормированной мощности вынужденного излучения: $\beta = 0{,}15$ (*а*, *б*), $\beta = 0$ (*в*), $\frac{\beta T_2}{T_1} = 1{,}5 \cdot 10^{-3}$ (*а*), $\frac{\beta T_2}{T_1} = 0$ (*б*, *в*), $\gamma = 0{,}34$ (*а*, *б*), $\gamma = 0$ (*в*), $\kappa = 2{,}6$, $\Delta_0 = 0$, $\tau_r = 7 \cdot 10^{-3}$, $T_1 = 2{,}0 \cdot 10^{-9}$ с

Fig. 2. Temporal structure of normalised stimulated emission power: $\beta = 0.15$ (*a*, *b*), $\beta = 0$ (*c*), $\frac{\beta T_2}{T_1} = 1.5 \cdot 10^{-3}$ (*a*), $\frac{\beta T_2}{T_1} = 0$ (*b*, *c*), $\gamma = 0.34$ (*a*, *b*), $\gamma = 0$ (*c*), $\kappa = 2.6$, $\Delta_0 = 0$, $\tau_r = 7 \cdot 10^{-3}$, $T_1 = 2.0 \cdot 10^{-9}$ s

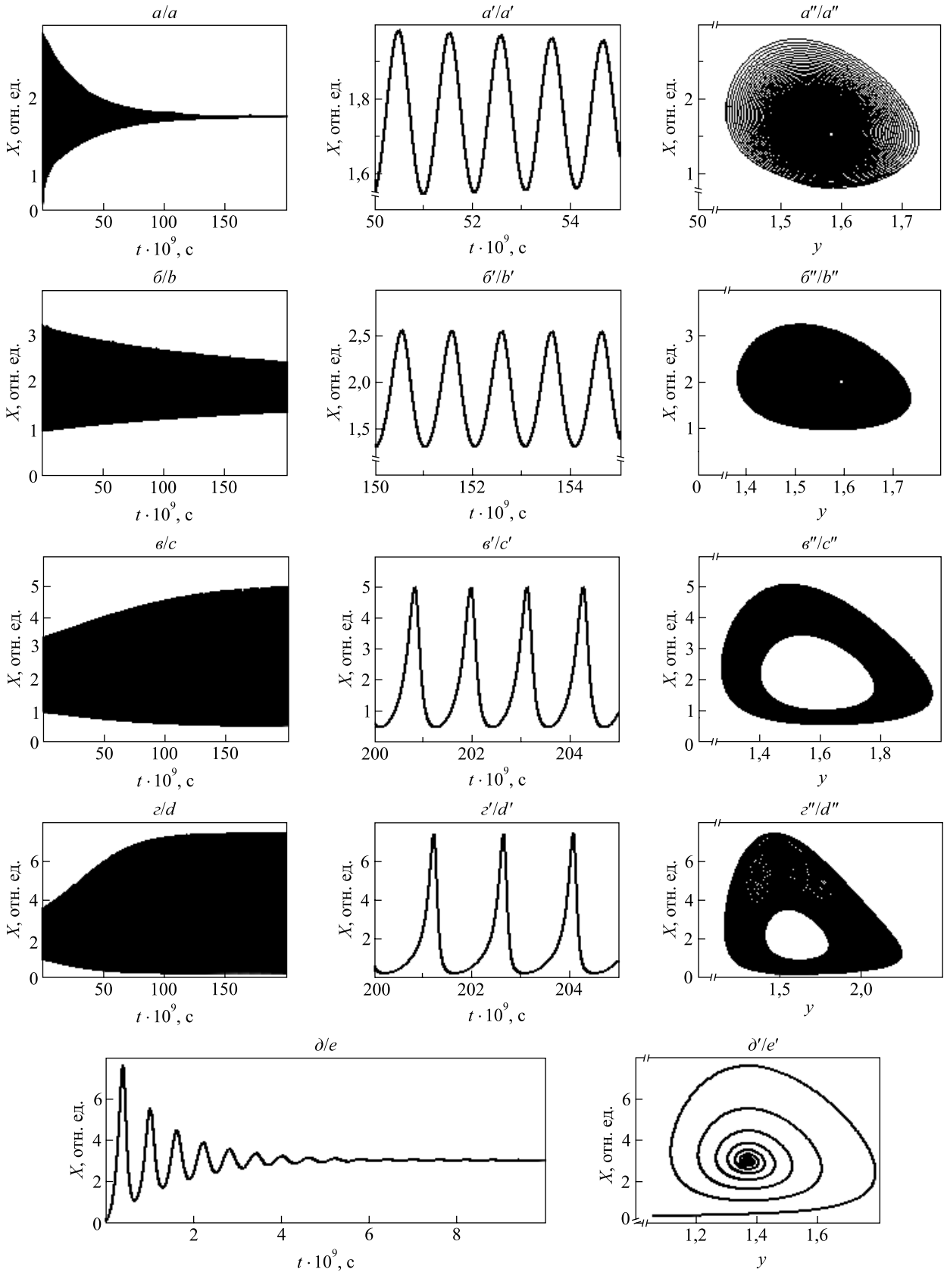

Рис. 3. Временна́я развертка мощности вынужденного излучения (*а*–*д*), мощность в более высоком разрешении (*а′*–*г′*) и фазовые портреты решений (*а″*–*г″*, *д′*): $\kappa = 2{,}3$ (*а*), $\kappa = 2{,}4$ (*б*), $\kappa = 2{,}45$ (*в*), $\kappa = 2{,}5$ (*г*, *д*), $\beta = 0{,}12$ (*а*–*г*), $\beta = 0$ (*д*), $\gamma = 0{,}34$ (*а*–*г*), $\gamma = 0$ (*д*), $\Delta_0 = 0{,}04$, $\tau_r = 7 \cdot 10^{-3}$, $T_1 = 5{,}0 \cdot 10^{-9}$ с, $T_2 = 1{,}0 \cdot 10^{-12}$ с

Fig. 3. Time sweep of the stimulated emission power (*a*–*e*), power in higher resolution (*a′*–*d′*), phase portraits of solutions (*a″*–*d″*, *e′*): $\kappa = 2.3$ (*a*), $\kappa = 2.4$ (*b*), $\kappa = 2.45$ (*c*), $\kappa = 2.5$ (*d*, *e*), $\beta = 0.12$ (*a*–*d*), $\beta = 0$ (*e*), $\gamma = 0.34$ (*a*–*d*), $\gamma = 0$ (*e*), $\Delta_0 = 0.04$, $\tau_r = 7 \cdot 10^{-3}$, $T_1 = 5.0 \cdot 10^{-9}$ s, $T_2 = 1.0 \cdot 10^{-12}$ s

Различие в ходе зависимостей на рис. 2 свидетельствует о том, что автоколебания мощности развиваются в случае присутствия штарковского смещения. «Раскачка» стационарного состояния происходит именно благодаря существованию амплитудно-фазовой связи вследствие эффекта Штарка, который является решающим дестабилизирующим фактором, и только в этих условиях может формироваться серия регулярных незатухающих импульсов (см. рис. 2, *а*). Однако режим самоподдерживающихся пульсаций возникает при превышении определенного уровня накачки, согласованного с материальными параметрами усиливающего элемента, уровнем обратной связи в резонаторе и начальной отстройкой частоты Δ_0. Фазовые эффекты резонансной нелинейной рефракции и диполь-дипольного взаимодействия, приводящие к смещению частоты поля при перераспределении КИ по уровням перехода, дополнительно стимулируют осцилляции мощности. Эти факторы способны замедлить переходный к стационарному режиму излучения этап, но не оказывают модулирующего действия, достаточного для стимуляции автоколебаний (см. рис. 2, *б*). Численные решения (4), как и в случае полного отсутствия фазовой нелинейности (см. рис. 2, *в*), описывают переход к стационарному режиму излучения, инверсная населенность стабилизируется на значениях, соответствующих пороговому уровню усиления.

В обоснование вывода о принципиальной значимости эффекта Штарка можно исходить из оценки условий неустойчивости особых точек, определенных соотношениями (5) и (7). Выводы о характеристиках автомодуляционного режима основывались на анализе большого количества вариантов моделирования процесса излучения, подобных приведенным на фрагментах рис. 3 вариантам. Особо интересен переход к сценарию автоколебаний по мере того, как уровень накачки достигает критического значения, а затем превышает его (второй порог генерации) (см. рис. 3, *б*–*г*). Можно отметить, как изменяется форма образующих квазирегулярную или периодическую временную структуру всплесков интенсивности, а также их контраст и скважность.

Считалось также целесообразным привести ряд автомодуляционных разверток мощности излучения на фоне изображения фазовых кривых в плоскости (X, y). Сочетание значений κ и остальных использованных при интегрировании (4) параметров примерно соответствует зависимости, представленной кривой *3* на рис. 1, *а*. Такого рода варианты результатов моделирования приведены на рис. 3.

На фрагментах *а* и *б* рис. 3 иллюстрированы переходные режимы с «выходом» на стационарную излучаемую мощность, амплитуда и контраст осцилляций, естественно, снижаются (см. рис. 3, *а*′ и *б*′). Фазовые кривые с разным темпом входят в окрестность особых точек (см. рис. 3, *а*″ и *б*″). Развертка мощности на рис. 3, *д*, с фазовым портретом на рис. 3, *д*′, рассчитанная для отсутствия нелинейности ($\beta = 0$) и относительно высокого значения κ, типична для обычных переходных режимов, и ее быстро релаксирующая к некоторому установившемуся значению нормированной мощности динамика призвана подтвердить, что автоколебания в этом случае также не развиваются.

Режим самоподдерживающихся пульсаций в течение действия непрерывной накачки «стартует» начиная с определенной величины скорости накачки (см. рис. 3, *в* и *г*), фазовые кривые в качестве аттрактора имеют предельный цикл (см. рис. 3, *в*″ и *г*″). С нарастанием параметра κ увеличиваются скважность и пиковая амплитуда мощности, снижается длительность импульсов и усиливается асимметрия их фронтов (см. рис. 3, *в*′ и *г*′). Такое поведение кривых может быть объяснено тем, что повышается уровень модуляции: при отстройке от резонанса инверсия нарастает в большей степени (до выполнения пороговых условий генерации). Изменение инверсии из-за нелинейного частотного смещения приобретает особую неустойчивость. В свою очередь, переход в режим автоколебаний требует довольно незначительных автомодуляционных колебаний инверсии и связанного с ней среднего уровня усиления [9]. Затем на фазе развития вынужденного излучения нелинейная перестройка частоты возвращает световое поле и отклик среды в состояние, близкое к резонансу, в результате высвечивается более мощный и короткий импульс. Импульсы, формирующие периодическую осцилляторную структуру в выходном излучении, асимметричны, что указывает на роль динамической нелинейности в формировании их фронтов.

Заключение

Предложенная в работе резонансная модель генерации, учитывающая эффекты фазовой перестройки материального отклика среды (представлена ансамблем двухуровневых диполей) на поле излучения, позволила описать процесс автоколебаний выходной мощности полупроводниковых лазеров, излучающих в ближнем ИК-диапазоне. На основе эффектов фазовой динамики в использованном приближении описания энергообмена поля излучения и тока накачки определен лишь вид функции форм-фактора спектральной линии усиления, поэтому модель взаимодействия относительно проста. Две степени свободы (нормированные переменные мощности излучения и инверсной заселенности) дают возможность применения качественного анализа устойчивости стационарных состояний в зависимости от уровня возбуждения.

Учет фактора нелинейного штарковского смещения резонанса ввиду его способности дестабилизировать устойчивые состояния системы и обусловливать автомодуляционную динамику в вынужденном излучении представляется принципиальным. Можно предположить, что наблюдаемая в полупроводниковых квантово-размерных структурах нелинейная рефракция является следствием перераспределения резонансных КИ по уровням основного перехода с различием поляризуемости. Тогда следует учитывать оптический эффект Штарка с типичным коэффициентом нелинейности, который также пропорционален дефекту поляризуемости. Производимая им отстройка усиления зависит от интенсивности. В условиях действенности ближних полей активных центров на диэлектрическую восприимчивость усиливающего элемента и положение центра спектральной линии усиления, определяемого уровнем инверсии, оба фактора нелинейной фазовой отстройки являются конкурирующими. На разных этапах формирования импульсов, образующих структуру излучения, они способны усиливать один другого. В целом результаты моделирования и качественного анализа рассмотренной модели показали, что наряду с остальными механизмами нелинейной перестройки фазового соотношения поля и резонансной поляризованности эффект Штарка способен сильно стимулировать амплитудно-фазовую связь в излучении, обусловливая развитие самоподдерживающихся пульсаций при постоянном уровне возбуждения.

Библиографические ссылки

1. Baimuratov AS, Rukhlenko ID, Turkov VK, Baranov AV, Fedorov AV. Quantum-dot supercrystals for future nanophotonics. *Scientific Reports.* 2013;3:1727. DOI: 10.1038/srep01727.

2. Salii RA, Mintairov SA, Nadtochiy AM, Nevedomskii VN, Shvarts MZ, Kalyuzhnyy NA. Comparative analysis of the optical and physical properties of InAs and $In_{0.8}Ga_{0.2}As$ quantum dots and solar cells based on them. *Semiconductors.* 2020;54(10):1267–1275. DOI: 10.1134/S1063782620100255.

3. Zainabidinov SZ, Saidov AS, Boboev AY, Usmonov JN. Features of the properties of the surface of $(GaAs)_{1-x-y}(Ge_2)_x(ZnSe)_y$ semiconductor solid solution with ZnSe quantum dots. *Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques.* 2021;15(1):94–99. DOI: 10.1134/S102745102101016X.

4. Borri P, Langbein W, Schneider S, Woggon U, Sellin RL, Ouyang D, et al. Rabi oscillations in the excitonic ground-state transition of InGaAs quantum dots. *Physical Review B.* 2002;66(8):081306. DOI: 10.1103/PhysRevB.66.081306.

5. Htoon H, Takagahara T, Kulik D, Baklenov O, Holmes AL Jr, Shih CK. Interplay of Rabi oscillations and quantum interference in semiconductor quantum dots. *Physical Review Letters.* 2002;88(8):087401. DOI: 10.1103/PhysRevLett.88.087401.

6. Vasil'ev PP. Strong coupling regime and Rabi oscillations in GaAs/AlGaAs heterostructures as a consequence of electron-hole pair condensation at room temperature. *Pis'ma v ZhETF.* 2022;115(7–8):424–430. Russian. EDN: FKVUXH.

7. Sanchez F, Brunel M, Martel G, Aït Ameur K. Local field correction to the second laser threshold. *Physical Review A.* 2000; 61(3):033817. DOI: 10.1103/PhysRevA.61.033817.

8. Garmire E. Resonant optical nonlinearities in semiconductors. *IEEE Journal of Selected Topics and Quantum Electronics.* 2000; 6(6):1094–1110. DOI: 10.1109/2944.902158.

9. Unold T, Mueller K, Lienau C, Elsaesser T, Wieck AD. Optical Stark effect in a quantum dot: ultrafast control of single exciton polarizations. *Physical Review Letters.* 2004;92(15):157401. DOI: 10.1103/PhysRevLett.92.157401.

10. Slobodeniuk AO, Koutenský P, Bartoš M, Trojánek F, Malý P, Novotný T, et al. Semiconductor Bloch equation analysis of optical Stark and Bloch – Siegert shifts in monolayer WSe_2 and MoS_2. *Physical Review B.* 2022;106(23):235304. DOI: 10.1103/PhysRevB.106.235304.

11. Ханин ЯИ. *Лекции по квантовой радиофизике.* Нижний Новгород: ИПФ РАН; 2005. 224 с.

12. Oraevskii AN. Dynamics of lasers with a saturable absorber. *Kvantovaya elektronika.* 2003;33(10):849–855. Russian.

13. Апанасевич ПА. *Основы теории взаимодействия света с веществом.* Степанов БИ, редактор. Минск: Наука и техника; 1977. 496 с.

14. Timoshchenko EV. Dynamical mode of laser radiation in quantum dots structures with the optical stark effect. *Nonlinear Phenomena in Complex Systems.* 2024;27(2):185–193. DOI: 10.5281/zenodo.12621694.

15. Andryushkin VV, Novikov II, Gladyshev AG, Babichev AV, Karachinsky LYa, Dudelev VV, et al. Features of epitaxial growth by MBE of thin highly strained InGaAs/InAlAs layers on InP substrates. *Zhurnal tekhnicheskoi fiziki.* 2023;93(8):1166–1172. Russian. DOI: 10.21883/JTF.2023.08.55979.41-23.

Получена 28.06.2024 / исправлена 17.07.2024 / принята 17.07.2024.
Received 28.06.2024 / revised 17.07.2024 / accepted 17.07.2024.

УДК 539.1

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ЛИВНЕЙ В ОРИЕНТИРОВАННЫХ КРИСТАЛЛАХ

В. В. ТИХОМИРОВ*[1]*, В. В. ГАВРИЛОВЕЦ*[1]*,
***А. С. ЛОБКО*[1]*, Н. С. СОЧИВКО*[2]*, С. Л. ЧЕРКАС*[1]**

[1]*Институт ядерных проблем БГУ, ул. Бобруйская, 11, 220006, г. Минск, Беларусь*
[2]*Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Беларусь*

Аннотация. Образующие электромагнитные ливни последовательности процессов излучения гамма-квантов электронами и позитронами и рождения электрон-позитронных пар гамма-квантами играют существенную роль в формировании спектров астрофизических источников жесткого излучения, прохождении космического излучения

Образец цитирования:
Тихомиров ВВ, Гавриловец ВВ, Лобко АС, Сочивко НС, Черкас СЛ. Моделирование высокоэнергетических электромагнитных ливней в ориентированных кристаллах. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2024;3:50–61.
EDN: AXXHWA

For citation:
Tikhomirov VV, Haurylavets VV, Lobko AS, Sachyuka MS, Cherkas SL. Simulation of the high-energy electromagnetic showers in oriented crystals. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2024;3:50–61. Russian.
EDN: AXXHWA

Авторы:
Виктор Васильевич Тихомиров – доктор физико-математических наук, профессор; главный научный сотрудник отраслевой лаборатории радиационной безопасности.
Виктор Васильевич Гавриловец – научный сотрудник отраслевой лаборатории радиационной безопасности.
Александр Сергеевич Лобко – доктор физико-математических наук, доцент; заместитель директора по научной работе.
Никита Сергеевич Сочивко – аспирант кафедры ядерной физики физического факультета. Научный руководитель – А. С. Лобко.
Сергей Леонидович Черкас – кандидат физико-математических наук; ведущий научный сотрудник лаборатории фундаментальных взаимодействий.

Authors:
Viktor V. Tikhomirov, doctor of science (physics and mathematics), full professor; chief researcher at the laboratory of radiation safety.
vvtikh@mail.ru
Viktar V. Haurylavets, researcher at the laboratory of radiation safety.
bycel@tut.by
Alexander S. Lobko, doctor of science (physics and mathematics), docent; deputy director for research.
lobko@inp.bsu.by
Mikita S. Sachyuka, postgraduate student at the department of nuclear physics, faculty of physics.
nikitasochivko@gmail.com
Sergey L. Cherkas, PhD (physics and mathematics); leading researcher at the laboratory of fundamental interactions.
cherkas@inp.bsu.by

через атмосферу, а также измерении энергии электронов, позитронов и гамма-квантов электромагнитными калориметрами, используемыми в физике высоких энергий и на орбитальных гамма-телескопах. Обширные теоретические и экспериментальные исследования 1950–80-х гг. показали, что при движении частиц под углами порядка градуса и менее к осям и плоскостям кристаллов процессы рассеяния, излучения и рождения пар демонстрируют когерентную природу и претерпевают качественные изменения. В зависимости от атомного номера вещества кристалла степень когерентного увеличения интенсивности излучения и вероятности рождения пар в нем достигает 10–100 раз при энергиях частиц от десятых долей до единиц тераэлектронвольта, приводя к настолько же масштабному уменьшению эффективной радиационной длины, характеризующей скорость развития ливня. Для моделирования высокоэнергетических электромагнитных ливней в ориентированных кристаллах в статье представлена программа, сочетающая развитые нами и протестированные совместно с исследователями из Университета Феррары и Национального института ядерной физики (INFN) (Италия) в Европейском центре ядерных исследований (CERN) методы описания когерентных процессов рассеяния, излучения и рождения пар в кристаллической решетке при высоких энергиях и малых отклонениях импульсов частиц от главного кристаллического направления с алгоритмами инструментария Geant4 для моделирования аналогичных процессов в приближении аморфной среды при низких энергиях и больших отклонениях импульсов частиц. Программа может быть использована как для проведения надежных расчетов характеристик электромагнитных ливней в кристаллах в настоящее время, так и для внедрения усовершенствованных теоретических подходов в целях повышения точности и производительности расчетов в будущем.

Ключевые слова: электроны; позитроны; гамма-кванты; релятивистские частицы; излучение; рождение пар; моделирование; электромагнитные ливни; электромагнитные каскады.

Благодарность. Работа выполнена при финансовой поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (проект Ф22МЦ-006 «Разработка средств моделирования процессов излучения гамма-квантов электронами и позитронами, образования электрон-позитронных пар гамма-квантами высоких энергий и каскадных последовательностей этих процессов в ориентированных кристаллах и их приложений в физике высоких энергий»).

SIMULATION OF THE HIGH-ENERGY ELECTROMAGNETIC SHOWERS IN ORIENTED CRYSTALS

V. V. TIKHOMIROV [a], ***V. V. HAURYLAVETS*** [a],
A. S. LOBKO [a], ***M. S. SACHYUKA*** [b], ***S. L. CHERKAS*** [a]

[a] *Institute for Nuclear Problems, Belarusian State University,*
11 Babrujskaja Street, Minsk 220006, Belarus
[b] *Belarusian State University, 4 Niezaliezhnasci Avenue, Minsk 220030, Belarus*
Corresponding author: V. V. Tikhomirov (vvtikh@mail.ru)

Abstract. The sequences of processes of gamma-quanta emission by electrons and positrons and of the production of electron-positron pairs by gamma-quanta that form electromagnetic showers play the significant role in the formation of the spectra of hard electromagnetic radiation of astrophysical sources, in the passage of cosmic radiation through the atmophere, as well as in the measurement of the energy of electrons, positrons and gamma-quanta by electromagnetic calorimeters, used in high-energy physics and on orbital gamma-ray telescopes. Extensive theoretical and experimental studies have showed in the 1950–80s, that when particles move at angles of the order of a degree or less with respect to the axes and planes of crystals, the processes of scattering, radiation and pair production exhibit a coherent nature and undergo qualitative changes. Depending on the atomic number of a crystal ions, the degree of coherent increase in the radiation intensity and the probability of pair production multiply 10–100 times at energies from tenths to units of teraelectronvolt, leading to an equally large-scale reduction in the effective radiation length, which characterises the rate of a shower development. To numerically simulate high-energy electromagnetic showers in the oriented crystals, the programme has been developed that combines the methods for describing coherent processes of scattering, radiation and pair production in a crystal lattice at high energies and small deviations of particle momenta from the main crystalline directions, developed by us and tested jointly with scientists from the University of Ferrara and the National Institute for Nuclear Physics (INFN) (Italy) at the European Centre for Nuclear Research (CERN), with the Geant4 toolkit algorithms for simulating similar processes in the approximation of an amorphous medium at low energies and large deflections. The programme can be used both for reliable simulations of the characteristics of electromagnetic showers in crystals at present and for implementation of upgraded theoretical approaches in order to improve the accuracy and productivity of simulations in the future.

Keywords: electrons; positrons; gamma-quanta; relativistic particles; radiation; pair production; simulation; electromagnetic showers; electromagnetic cascades.

Acknowledgements. The work was carried out with the financial support of the Belarusian Republican Foundation for Fundamental Research (project F22MC-006 «Development of means for simulating the processes of gamma-quanta emission by electrons and positrons, the production of electron-positron pairs by high-energy gamma-quanta and cascade sequences of these processes in oriented crystals and their applications in high-energy physics»).

Введение

Процессы излучения гамма-квантов электронами и позитронами и рождения электрон-позитронных пар гамма-квантами определяют взаимодействие с веществом электронов, позитронов и гамма-квантов с энергиями десятки мегаэлектронвольт и выше. Многоступенчатые последовательности этих процессов, именуемые электромагнитными ливнями или электромагнитными каскадами, играют существенную роль в формировании спектров астрофизических источников жесткого излучения, прохождении космического излучения через атмосферу, а также регистрации и измерении энергии электронов, позитронов и гамма-квантов электромагнитными калориметрами, используемыми в физике высоких энергий и на орбитальных гамма-телескопах.

Обширные теоретические и экспериментальные исследования 1950–80-х гг. показали [1–7], что при движении частиц под углами порядка градуса и менее к осям и плоскостям кристаллов процессы рассеяния, излучения и рождения пар демонстрируют когерентную природу и претерпевают качественные изменения. В частности, проявляются эффекты каналирования, когерентного рассеяния заряженных частиц цепочками атомов, излучения при каналировании, когерентного тормозного и магнитотормозного излучения и рождения пар. Начиная с энергий, составляющих единицы – десятки гигаэлектронвольт, интенсивность излучения гамма-квантов электронами и позитронами и вероятность рождения электрон-позитронных пар гамма-квантами в кристаллах кратно превышают аналогичные величины в аморфном веществе, а сами процессы сопровождаются значительными поляризационными эффектами [1–5]. В зависимости от атомного номера вещества кристалла степень когерентного увеличения интенсивности излучения и вероятности рождения пар в нем достигает 10–100 раз при энергиях частиц от десятых долей до единиц тераэлектронвольта, приводя к настолько же масштабному уменьшению эффективной радиационной длины, характеризующей скорость развития ливня.

Перечисленные эффекты открывают широкие перспективы для совершенствования детекторов, применяемых в физике высоких энергий и космических исследованиях [8; 9]. В целях их демонстрации с нашим участием были поставлены эксперименты по наблюдению за ускорением электромагнитных ливней, порождаемых электронами [10; 11] и гамма-квантами [12], а также проведено разностороннее моделирование источника позитронов для проектируемых коллайдеров на основе использования излучения электронов в кристаллах [13].

В настоящее время моделирование каскадных электромагнитных процессов с помощью Geant4 [14; 15] и подобных программных инструментов обеспечивается только для аморфной среды. Однако разработка конструкций детекторов нового типа требует всестороннего моделирования протяженных каскадных процессов в кристаллах [5; 11; 16]. Для первичной оценки преимуществ применения кристаллов в электромагнитных калориметрах нами был предложен подход [17], основанный на введении в Geant4 коэффициентов, учитывающих возрастание интенсивности излучения и вероятности рождения пар, вызываемое когерентными эффектами в кристаллах. Этот прием впервые позволил оценить смещение пика энерговыделения и сокращение продольной утечки электромагнитных ливней в кристаллах вольфрамата свинца $PbWO_4$ (PWO), используемых в электромагнитном калориметре детектора CMS (компактного мюонного соленоида) Большого адронного коллайдера в Европейском центре ядерных исследований. Однако данный подход не позволял учесть модификацию спектров излучения и образования пар в кристаллах и их угловую зависимость, а также не обладал простыми возможностями уточнения своих предсказаний. Предлагаемая статья посвящена варианту решения указанных проблем на основе интеграции известных методов расчета характеристик ливневых процессов в аморфном веществе в разработанную нами программу расчета характеристик рассеяния, излучения и рождения пар в кристаллах [10; 11; 18].

Расширение возможностей моделирования электромагнитных ливней в кристаллах за счет интеграции с методами аналогичных расчетов в аморфном веществе

При значительных энергиях частиц и толщинах кристаллов в развитии ливня естественно выделить две качественно различные стадии: начальную, многократно ускоренную под влиянием когерентных эффектов при высоких (десятки гигаэлектронвольт и более) энергиях и малых (порядка миллирадиана и менее) углах отклонения направлений импульсов частиц от главного кристаллического направления,

и конечную, включающую максимальное развитие и последующее затухание ливня вследствие преобладания ионизационных энергетических потерь электронов и позитронов над радиационными при энергиях частиц десятки – сотни мегаэлектронвольт. Практика моделирования когерентных радиационных процессов в кристаллах [9–13; 17; 18] на основе метода Байера – Каткова [5] демонстрирует возможность его полного проведения лишь для короткой начальной стадии развития ливня, на которой энергии заряженных частиц успевают уменьшиться в несколько раз на миллиметровой длине, их число не превышает нескольких десятков, а величина углов отклонения – нескольких миллирадиан. В то же время при начальных энергиях сотни гигаэлектронвольт и более число частиц ливня на конечной стадии достигает многих тысяч, а величина углов отклонения – многих градусов. Трудоемкость точных расчетов возрастает при этом на один-два порядка за счет большей длины траекторий, на два-три порядка за счет увеличения количества частиц и на один-два порядка за счет уменьшения шага интегрирования уравнений движения частиц, отклонившихся на такие значительные углы. Указанные факторы делают проведение полного моделирования развития высокоэнергетических ливней в кристаллах протяженностью более нескольких радиационных длин на основе метода Байера – Каткова практически невозможным и заведомо избыточным.

Итак, ускорение развития ливней на порядок и более проявляется в кристаллах только на малых длинах [3–5; 9–13; 16; 17]. Довольно быстро процессы излучения и рождения пар перестают радикально отличаться от аналогичных процессов в аморфном веществе по причине ослабления когерентных эффектов в результате падения энергий частиц и значительных отклонений их импульсов от главных кристаллических направлений. Как следствие, проведение трудоемких расчетов методом Байера – Каткова оказывается принципиально необходимым лишь для небольшого числа частиц достаточно высоких энергий в узкой области направлений движения. В связи с этим, если исключить учет влияния когерентных процессов при низких энергиях и больших отклонениях импульсов частиц и продолжать моделирование электромагнитного ливня более быстрыми методами [14; 15], используемыми при рассмотрении аморфного вещества, можно совместить детальное описание значительного эффекта когерентного ускорения развития ливня с прослеживанием тысяч и более траекторий его частиц на стадии максимального развития и перехода к затуханию.

Характерный масштаб углов проявления когерентного усиления процессов излучения и рождения пар при энергиях несколько гигаэлектронвольт и выше задается величиной $\frac{V_0}{m}$, где V_0 – амплитуда усредненного потенциала атомной цепочки или плоскости; m – масса покоя электрона [4]. Для главных кристаллических осей эта величина составляет, например, около 2 мрад для вольфрама и 0,3 мрад для кремния и алмаза. Для кристаллических плоскостей она обычно в 5–7 раз меньше. В области энергий, при которых интенсивность излучения и вероятность рождения пар в кристаллах заметно превосходят аналогичные величины в аморфном веществе, угол $\frac{V_0}{m}$ превышает угол каналирования в несколько раз и более. Поскольку при углах падения $\theta \gg \frac{V_0}{m}$ и достаточно высоких энергиях частиц роль когерентных процессов быстро уменьшается, эти процессы необходимо учитывать только до углов, составляющих 3–5 углов $\frac{V_0}{m}$, а при бóльших величинах переходить к модели аморфного вещества [14; 15], предусмотрев при этом возможность ее уточнения в будущем.

Интенсивность когерентного излучения в полях атомных цепочек сравнивается с интенсивностью некогерентных процессов при энергии ε_{eq}, составляющей 0,5–1,0 ГэВ для цепочек с наименьшими межатомными расстояниями и амплитудами тепловых колебаний и 1,0–1,5 ГэВ и более для остальных цепочек. Что касается процесса когерентного рождения пар, то при энергиях фотонов несколько гигаэлектронвольт и ниже его вероятность несущественно отличается от вероятности Бете – Гайтлера в аморфном веществе.

Поскольку набор инструментов Geant4 [14; 15] не располагает возможностями частого кратковременного подключения в ходе моделирования электромагнитных ливней в кристаллах, был выбран путь внедрения его процедур в алгоритм моделирования каскадных процессов в кристаллах. Приступая к реализации этой идеи, следует исходить из того, что данный инструментарий разрабатывался в качестве универсального средства, описывающего процессы рассеяния и излучения в очень широком диапазоне параметров. В то же время условия использования когерентных процессов рассеяния и излучения в кристаллах заметно ограниченны, что позволяет сузить рассматриваемый ниже минимальный набор необходимых процедур Geant4 и ускорить их реализацию.

Рассеяние. Естественно начать с процесса рассеяния. Помимо того, что столкновения электронов и позитронов с атомами порождают процессы излучения и рождения пар в аморфном веществе, они

также вызывают отклонение электронов и позитронов, определяющее распределение частиц ливня по направлениям движения. В Geant4 и ряде других пакетов моделирование процесса рассеяния проводится на базе сечения рассеяния ультрарелятивистских электронов и позитронов атомом [15, sect. 8.2.1]

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega} = \frac{4Z^2\alpha^2}{p^2v^2\left(\theta_{sc}^2 + \theta^2\right)^2}, \tag{1}$$

где Z – атомный номер вещества; α – постоянная тонкой структуры; p и v – импульс и скорость электрона; $d\Omega = \theta d\theta d\varphi$ – элемент телесного угла; $\theta \ll 1$ и φ – полярный и азимутальный углы рассеяния; $\theta_{sc} = \frac{\hbar}{pR}\left(1{,}13 + 3{,}76\frac{\alpha Z}{\beta^2}\right)$ – эффективный минимальный угол, описывающий влияние на рассеяние экранирования ядерного потенциала атомными электронами, в определении которого $R = 0{,}885\, a_B Z^{-\frac{1}{3}}$ и a_B – радиус экранирования и боровский радиус соответственно, а β – скорость частицы в единицах скорости света. Максимальный же угол рассеяния ограничивается в логарифмическом приближении предельным углом [15, sect. 8.2.1]

$$\theta_n = \frac{12\hbar}{pr_n},$$

где r_n – радиус ядра. Оценка интеграла (1) по полному телесному углу $\sigma \approx 4\pi Z^2\alpha^2R^2 \approx 1{,}5 \cdot 10^{-20} \cdot Z^{\frac{4}{3}}$ см^2 показывает, что при типичных концентрациях атомов $n \sim 5 \cdot 10^{22}$ см$^{-3}$ длина пробега электронов не достигает микрометра. Поскольку радиационная длина X_0 составляет 3,5 мм в вольфраме и 9,36 см в кремнии, понятно, что полное аналоговое моделирование процесса рассеяния с настолько малым шагом является излишним.

Для оптимизации выбора шага моделирования процесса рассеяния введем промежуточный угол θ_2, $\theta_{sc} \ll \theta_2 \ll \theta_n$, и будем описывать многочисленные отклонения частиц на «малые» углы $\theta \ll \theta_2$, следуя теории многократного рассеяния [1; 15; 19], а редкие случаи рассеяния на «большие» углы $\theta_2 \ll \theta \ll \theta_n$ моделировать методом Монте-Карло, разыгрывая (определяя вероятностным методом) сначала длину рассеяния

$$l_{sc} = -\frac{\ln r}{n\sigma_{\text{tot}}}, \tag{2}$$

где r – определяемое на единичном интервале псевдослучайное число [14; 15]; $\sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi Z^2\alpha^2}{p^2v^2}\left[\frac{1}{\theta_{sc}^2 + \theta_2^2} - \frac{1}{\theta_{sc}^2 + \theta_n^2}\right]$ – интегральное сечение рассеяния на углы $\theta_2 < \theta < \theta_n$. Двумерный угол однократного рассеяния $\vec{\theta}_s$ разыгрывается с использованием сечения (1). Затем к нему добавляется угол многократного рассеяния $\vec{\theta}_{ms}$ на длине (2), разыгрываемый с использованием гауссова распределения и среднего квадрата угла рассеяния на единичной длине

$$\theta_s^2 \equiv n l_{sc}\int\theta^2 d^2\sigma = \frac{4\pi Z^2\alpha^2 n l_{sc}}{p^2v^2}\left[\ln\left(1 + \frac{\theta_2^2}{\theta_{sc}^2}\right) - \frac{\theta_2^2}{\theta_2^2 + \theta_{sc}^2}\right].$$

Следуя описанному алгоритму и выбирая θ_2^2 равным 10^2–10^3 θ_{sc}^2, можно сократить число шагов моделирования процесса рассеяния в десятки – сотни раз при сохранении условия $l_{sc} \ll X_0$.

Излучение. Для моделирования процесса излучения исходным является полное (проинтегрированное по энергиям $\omega > \omega_c$, где ω_c – минимальная энергия фотона, и направлениям испускания фотонов) сечение этого процесса σ_{rad}. Поскольку процессы излучения исследуются лишь в кристаллах немногих химических элементов (алмаз, Si, Ge, W, PWO), вместо параметризации сечений по атомному номеру [18, sect. 8.2.1] проще использовать исходные данные [20] для отдельных элементов. Отметим, что в работе [20] выбрано исключительно низкое значение ω_c (0,1 эВ), обеспечивающее полную независимость от него результатов моделирования. Подобно длине рассеяния (2), сечение излучения используется для разыгрывания длины пробега частицы до точки испускания гамма-кванта

$$l_{\text{rad}} = -\frac{\ln r}{n\sigma_{\text{rad}}}. \tag{3}$$

В случае $l_{\text{rad}} > l_{sc}$ разыгрывается суммарный угол однократного и многократного рассеяния и рассчитываются ионизационные потери энергии излучающей частицы на длине l_{sc}, производится замена

$l_{\text{rad}} \to l_{\text{rad}} - l_{sc}$, а длина l_{sc} разыгрывается снова и сравнивается с l_{rad}. При выполнении условия $l_{\text{rad}} \le l_{sc}$ разыгрывается угол многократного рассеяния $\vec{\theta}_{ms}$ и рассчитываются ионизационные потери на длине l_{rad}, производится замена $l_{sc} \to l_{sc} - l_{\text{rad}}$, разыгрываются новое значение l_{rad} и, главное, энергия испущенного фотона. С этой целью дифференциальное сечение излучения представляется в форме функции

$$\frac{d\sigma_{\text{rad}}}{d\omega} = \frac{S(x)}{S(x_0)\,x\ln x_0}$$

параметра $x = \frac{\omega}{t}$, где t – кинетическая энергия излучающей частицы $x_0 = \frac{\omega_c}{t}$, а функция $S(x)$ описана в работе [21, sect. 8.2.2]. Далее разыгрывается значение введенного параметра $x = e^{r_1 \ln x_0}$, где r_1 – случайное число. При выполнении условия $r_2 < \frac{S(x)}{S(x_0)}$, где r_2 – другое случайное число, значение x используется для расчета энергии гамма-кванта $\omega = xt$, определяющей также кинетическую энергию испустившей его частицы $t - \omega$. Если же последнее неравенство не выполняется, разыгрывание энергии излученного гамма-кванта повторяется до его успешной реализации.

Помимо энергии фотона, разыгрывается отклонение частицы при его испускании. Для этого генерируется сначала случайная величина

$$b = \begin{cases} 0{,}625, & r_1 < 0{,}25, \\ 1{,}875, & r_1 \ge 0{,}25, \end{cases} \tag{4}$$

а затем параметр

$$u = -\frac{\ln(r_2 r_3)}{b}, \tag{5}$$

определяющий величину $\theta = \frac{mu}{\varepsilon}$, которая используется далее в качестве полярного угла рассеяния при выполнении условия $\theta \le \pi$. В противном случае повторяется его разыгрывание с использованием формул (4) и (5). Азимутальный угол рассеяния равномерно разыгрывается на интервале от 0 до 2π.

Рождение пар. Моделирование рождения пары также начинается с разыгрывания длины пробега гамма-кванта по формуле, аналогичной выражениям (2) и (3), с использованием полного сечения. Поскольку каскадные процессы исследуются на практике в кристаллах небольшого числа химических элементов, вместо параметризации сечения рождения пары по атомному номеру [18, sect. 6.5.1] также используются исходные данные [22] для рассматриваемых элементов. Остановимся на моделировании распределения энергии в паре, существенно различающемся для когерентных и некогерентных процессов. В аморфном веществе это распределение является симметричным и описывается дифференциальным сечением

$$\frac{d\sigma}{d\varepsilon} = \alpha r_e^2 Z^2 \left[A_1 (0{,}5 - \varepsilon)^2 F_1 + A_2 F_2 \right], \tag{6}$$

$$F_1(\varepsilon) = 3\Phi_1(\varepsilon) - \Phi_2(\varepsilon) - F(Z), \tag{7}$$

$$F_2(\varepsilon) = \frac{3}{2}\Phi_1(\varepsilon) + \frac{1}{2}\Phi_2(\varepsilon) - F(Z), \tag{8}$$

где ε – энергия произвольной частицы пары. Функции $\Phi_1(\varepsilon)$, $\Phi_2(\varepsilon)$ и $F(Z)$ приведены в руководстве пользователя Geant4 [15; 21], а коэффициенты A_1, A_2 введены для сокращенной записи выражения (6), детальный вид которого нам не понадобится. Поводом для упоминания здесь явных выражений (7) и (8) является следующее обстоятельство: как наши выкладки, так и сравнение результатов численных расчетов с графиками классической монографии [23] указывают на то, что знак «минус» перед дробью $\frac{1}{2}$ в выражении (8) в обеих версиях руководства пользователя Geant4 [15; 21] ошибочен, а «правильный» спектр [23] удается воспроизвести только после его исправления на стоящий в формуле (8) знак «плюс».

Выражение (6) также позволяет пояснить, что энергия выбранной частицы пары разыгрывается после вероятностного выбора первого либо второго слагаемого в квадратных скобках по соответствующей ему формуле

$$\varepsilon = 0{,}5 - (0{,}5 - \varepsilon_{\min}) r^{\frac{1}{3}}$$

или

$$\varepsilon = \varepsilon_{\min} + \left(0,5 - \varepsilon_{\min}\right) r,$$

где r – псевдослучайное число. Наконец, полярный угол θ вылета частицы относительно направления импульса родительского фотона разыгрывается с использованием алгоритма [21]

$$\theta = -\frac{16}{15}\ln\left(r_2 r_3\right)\frac{m}{\varepsilon}\begin{cases} 3, & r_1 < 0,25, \\ 1, & r_1 \geq 0,25, \end{cases}$$

где $r_{1,2,3}$ – также псевдослучайные числа. Азимутальный угол вылета рождающихся частиц по-прежнему равномерно разыгрывается на интервале от 0 до 2π.

Последовательность моделирования процессов в электромагнитном ливне

При моделировании развития высокоэнергетического электромагнитного ливня, образуемого процессами излучения и рождения пар, записываются координаты точек испускания, энергии и направления импульса гамма-квантов, излучаемых исходными либо рождающимися электронами и позитронами, а также аналогичные характеристики электронов и позитронов, рождаемых падающими или излученными ранее гамма-квантами, как это иллюстрирует блок-схема на рис. 1. Сохраненные данные используются для моделирования образования пар, рассеяния, ионизационного торможения и излучения вторичных электронов и позитронов, а также рождения пар излученными гамма-квантами вплоть до завершения прослеживания траекторий электронов и позитронов и исчерпания списка сохраненных гамма-квантов с энергиями, превышающими определенный порог, который чаще выбирается в области десятков – сотен мегаэлектронвольт. Данная последовательность действий одинакова для аморфного вещества и кристалла.

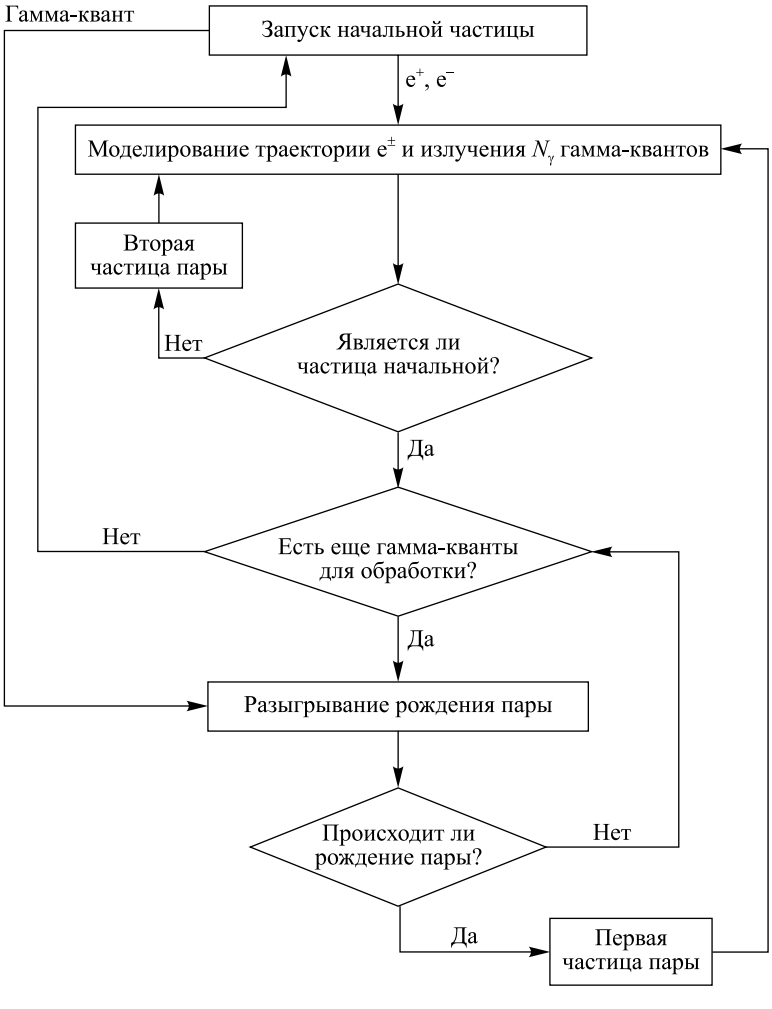

Рис. 1. Блок-схема алгоритма моделирования электромагнитного ливня
Fig. 1. Flow chart of the electromagnetic shower simulation algorithm

Цикл моделирования начинается с запуска частицы, падающей на кристалл, – электрона ($IZ_0 = -1$), позитрона ($IZ_0 = +1$) или гамма-кванта ($IZ_0 = 0$). В первых двух случаях проводится моделирование движения с учетом рассеяния, ионизационных потерь и излучения. При этом N_γ испущенным гамма-квантам присваиваются номера $I_\gamma = 1, 2, \ldots, N_\gamma$ и в памяти сохраняются энергия $\omega\left(I_\gamma\right)$, продольная координата точки испускания $z_\gamma\left(I_\gamma\right)$ и поперечные компоненты скорости $v_x\left(I_\gamma\right)$, $v_y\left(I_\gamma\right)$ каждого кванта. Также для соответствующего прослеживания частиц, падающих на кристалл и рождающихся в нем, вводится параметр IP. Для первых частиц он полагается равным нулю, а для вторых частиц задается способом, описанным ниже.

Если начальной частицей является гамма-квант ($IZ_0 = 0$), то осуществляется переход к моделированию рождения пары с увеличением номера I_γ рассмотренных квантов на единицу. Аналогичный переход осуществляется также после завершения моделирования движения и излучения электрона и позитрона предыдущей пары при наличии квантов для обработки ($I_\gamma < N_\gamma$). В отсутствие же излученных квантов ($N_\gamma = 0$) или по завершении их рассмотрения ($I_\gamma = N_\gamma$) после окончания моделирования траекторий электрона и позитрона последней пары выполняется переход к следующей начальной частице.

При моделировании рождения пары очередным квантом энергии $\omega\left(I_\gamma\right)$ его вероятность, дифференциальная по энергии ε одной из частиц пары с зарядом $IZ \cdot e$, используется для разыгрывания распределения энергии в паре. Затем рассчитывается интегральная вероятность $W_{PP}\left(\omega\left(I_\gamma\right)\right)$ и разыгрывается координата точки рождения пары $z_{PP} = z_\gamma\left(I_\gamma\right) - \dfrac{\ln r}{W_{PP}\left(\omega\left(I_\gamma\right)\right)}$, где r – случайное число. При выходе этой координаты за пределы кристалла ($z_{PP} \geq l_{cr}$) энергия и поперечные компоненты скорости кванта сохраняются для последующего анализа и использования характеристик излучения, покинувшего кристалл. Далее в случае исчерпания списка сохраненных характеристик излученных гамма-квантов ($I_\gamma = N_\gamma$) осуществляется переход к следующей начальной частице. В противном случае ($I_\gamma < N_\gamma$) моделируется рождение пары следующим квантом из списка.

При попадании же точки рождения пары внутрь кристалла ($z_{PP} < l_{cr}$) моделируются стартующие из этой точки движение и излучение частиц родившейся пары, заряд $IZ \cdot e$ и энергия ε одной из которых уже были разыграны при вычислении вероятности рождения пары. Для управления переходом к моделированию движения второй частицы пары и последующим переходом к разыгрыванию рождения пары следующим квантом введенный выше параметр IP изначально полагается равным единице. На этом же шаге задаются поперечные компоненты скорости частицы $v_x = v_{x\gamma}\left(I_\gamma\right) + \theta_x$, $v_y = v_{y\gamma}\left(I_\gamma\right) + \theta_y$ в точке рождения пары $z = z_\gamma\left(I_\gamma\right)$, которые складываются из компонент скорости фотона и отклонений от них θ_x, θ_y, приобретаемых при рождении. При рассмотрении кристалла также проводится разыгрывание поперечных координат точки рождения пары, не отображенное на рис. 1. Далее, как и в случае падения заряженных частиц на кристалл, проводится моделирование движения частиц, рожденных внутри него, с учетом рассеяния, ионизационных потерь и излучения и в памяти сохраняются энергии $\omega\left(I_\gamma\right)$, координаты точек испускания $z_\gamma\left(I_\gamma\right)$ и поперечные компоненты скорости $v_x\left(I_\gamma\right)$, $v_y\left(I_\gamma\right)$ всех N_γ испущенных гамма-квантов, которым присваиваются номера $I_\gamma = 1, 2, \ldots, N_\gamma$. Увеличение параметра IP до двух после завершения моделирования траектории первой частицы пары обеспечивает переход к моделированию траектории второй частицы пары, начинающемуся с изменения заряда ($IZ = -IZ$) и энергии ($\varepsilon = \omega\left(N_\gamma\right) - \varepsilon$), возврата к начальной координате $z = z_\gamma\left(I_\gamma\right)$ и нового задания поперечных компонент скорости $v_x = v_{x\gamma}\left(I_\gamma\right) + \theta_x$, $v_y = v_{y\gamma}\left(I_\gamma\right) + \theta_y$. Увеличение значения параметра IP до трех по окончании моделирования прохождения через кристалл второй частицы пары обеспечивает переход к рассмотрению следующего гамма-кванта. При этом номер I_γ рассмотренного кванта сравнивается с полным количеством N_γ квантов в списке. В случае $I_\gamma < N_\gamma$ осуществляется переход к моделированию рождения пары этим гамма-квантом, а в случае $I_\gamma = N_\gamma$ – переход к рассмотрению новой начальной частицы, завершающий цикл моделирования, порожденный предыдущей начальной частицей.

Примеры расчетов ливневых процессов

В качестве весьма актуального примера рассмотрим излучение электронов с начальной энергией 6 ГэВ в кристалле вольфрама, лежащее в основе увеличения выхода гамма-квантов в источнике позитронов повышенной интенсивности, разрабатываемом с нашим участием в Европейском центре ядерных исследований [13]. Как было отмечено выше, интенсивность когерентного излучения в полях атомных цепочек

сравнивается с интенсивностью некогерентного излучения при энергии ε_{eq}, составляющей 0,5–1,0 ГэВ для цепочек с наименьшими межатомными расстояниями и амплитудами тепловых колебаний и 1,0–1,5 ГэВ и более для остальных цепочек. При энергиях $\varepsilon < \varepsilon_{eq} \sim 1$ ГэВ отношение когерентного вклада в интенсивность излучения к некогерентному вкладу убывает как отношение $\frac{\varepsilon}{\varepsilon_{eq}}$, вследствие чего область учета когерентных эффектов в излучении естественно ограничить энергией E_{th}, в несколько раз меньшей энергии ε_{eq}. Спектральные распределения энергетических потерь электронов в миллиметровом кристалле вольфрама, рассчитанные при значениях граничной энергии E_{th}, равных 0,5; 0,2 и 0,05 ГэВ, приводятся на рис. 2.

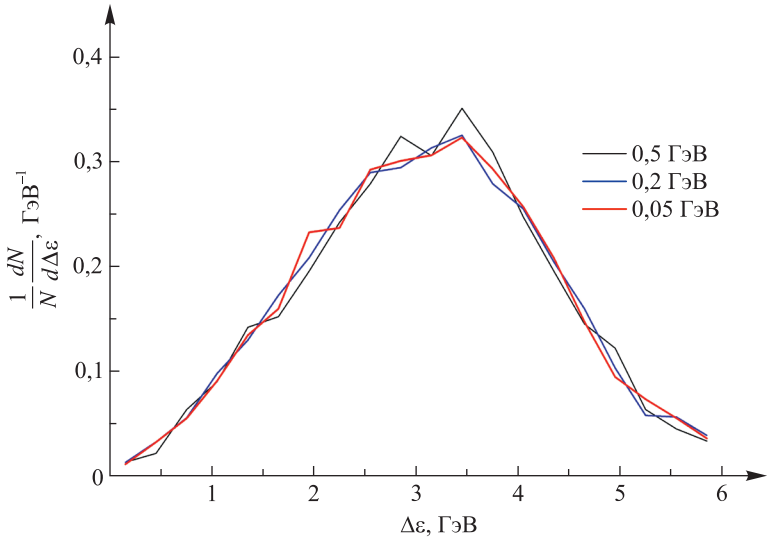

Рис. 2. Распределение энергетических потерь электронов с начальной энергией 6 ГэВ в миллиметровом кристалле вольфрама, ориентированном вдоль оси <111>, при значениях энергии E_{th} перехода от детального расчета вероятности излучения по формулам Байера – Каткова к ее расчету по формуле Бете – Гайтлера, равных 0,5; 0,2 и 0,05 ГэВ

Fig. 2. Distribution of energy losses of electrons with 6 GeV initial energy in the millimeter-thick tungsten crystal oriented along the <111> axis at values of the transition energy E_{th} from the detailed calculation of the radiation probability using the Bayer – Katkov formulas to the calculation using the Bethe – Heitler formula equal to 0.5; 0.2 and 0.05 GeV

Сравнение приведенных распределений, равно как и спектров излучаемых фотонов, рассчитанных при различных значениях граничной энергии E_{th}, показывает, что переход между значениями 0,2 и 0,05 ГэВ вызывает заметно меньшее изменение указанных распределений, чем переход между значениями 0,5 и 0,2 ГэВ, иллюстрируя сходимость результатов моделирования при уменьшении граничной энергии E_{th}, и обосновывает выбор значения $E_{th} \approx 0{,}2$ ГэВ для дальнейшего моделирования реальных установок.

На рис. 3 представлена спектральная интенсивность излучения электронов с начальной энергией 6 ГэВ в миллиметровом кристалле вольфрама вместе со спектральной интенсивностью излучения в миллиметровой мишени из аморфного вольфрама. Их сравнение позволяет убедиться в том, что переход на кристаллический радиатор позволит увеличить выход гамма-квантов в широком диапазоне энергий в 6 раз и более. При этом важнейшей особенностью спектра излучения в кристалле является его выход на плато в играющей центральную роль при получении позитронов области энергий фотонов 100–200 МэВ, что принципиально отличает кривую, представленную на рис. 3, от кривых, приведенных на рис. 1 и 3 в работе [24]. Это отличие связано с принципиальной необходимостью рассмотрения реальной протяженности области формирования излучаемых квантов на мягком конце спектра излучения [18].

В качестве примера масштабного применения развитого подхода рассмотрим ливень, инициируемый гамма-квантами с энергией 1 ТэВ (10^{12} эВ) в сантиметровом кристалле вольфрама, также ориентированном вдоль оси <111>. Усредненно развитие ливня по всей длине сантиметрового кристалла (1 см соответствует примерно 2,86 X_0) характеризуется примерно 10 эффективными радиационными длинами (рис. 4). Почти десятикратное возрастание интенсивности излучения и вероятности рождения пар приводит к тому, что при энергиях 0,1–1,0 ТэВ на 1 см кристалла укладывается около 30 эффективных радиационных длин, вследствие чего средние энергии частиц ливня успевают уменьшиться до нескольких десятков

гигаэлектронвольт на длине порядка 2 мм. При этом высокая скорость радиационных потерь энергии не позволяет заметно проявиться эффекту деканалирования. Кроме того, последний ослабляется, а излучение электронов усиливается вследствие эффекта радиационного охлаждения [25; 26]. В подобных условиях энергетические потери электронов заметно превосходят таковые позитронов, что приводит к отраженному на рис. 4 превышению количества позитронов с энергией несколько гигаэлектронвольт и более над количеством электронов. Как видно из рис. 4, в условиях трудоемкого прослеживания многочисленных траекторий электронов и позитронов большой длины в диапазоне энергий от сотен гигаэлектронвольт до сотен мегаэлектронвольт приемлемой статистики в области энергий порядка 10 ГэВ и выше набрать не удается. Однако этого нетрудно достичь, повысив соответствующим образом нижнюю границу энергий, при которой прекращается моделирование.

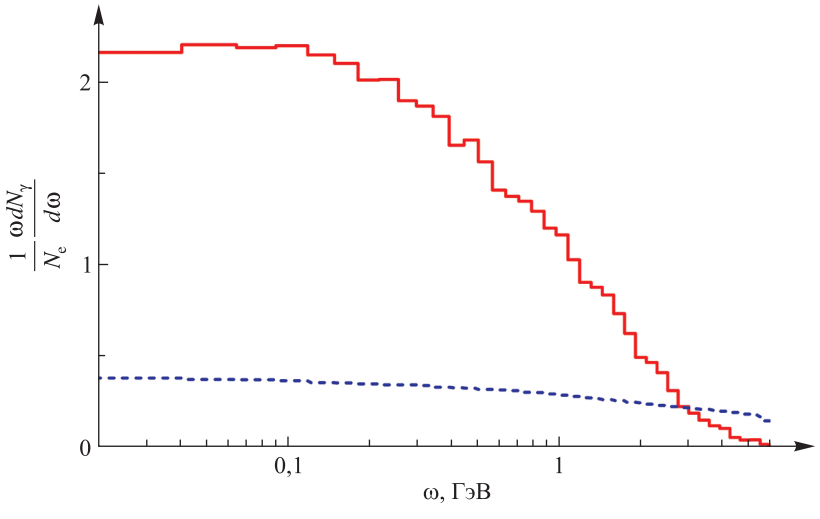

Рис. 3. Спектральное распределение фотонов, излученных электронами с начальной энергией 6 ГэВ в миллиметровом кристалле вольфрама, ориентированном вдоль оси <111> (сплошная линия), и миллиметровой аморфной вольфрамовой мишени (пунктирная линия)

Fig. 3. Spectral distribution of photons emitted by electrons with 6 GeV initial energy in the millimeter-thick tungsten crystal oriented along the <111> axis (solid line) and the millimeter-thick amorphous tungsten target (dashed line)

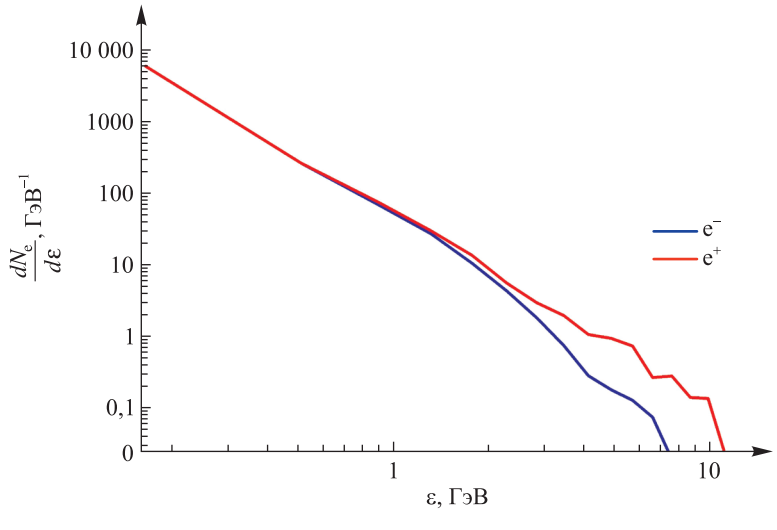

Рис. 4. Энергетические распределения электронов и позитронов электромагнитного ливня, инициированного гамма-квантом с энергией 1 ТэВ в сантиметровом кристалле вольфрама, ориентированном вдоль оси <111>

Fig. 4. Energy distribution of electrons and positrons in the electromagnetic shower initiated by the 1 TeV gamma-quantum in the centimeter-long tungsten crystal oriented along the <111> axis

При энергиях несколько гигаэлектронвольт типичное отклонение электронов и позитронов на радиационной длине вследствие рассеяния на ядрах уже превышает угол каналирования и достигает характерного угла $\frac{V_0}{m}$, что приводит к ослаблению излучения электронов и выравниванию радиационных потерь электронов и позитронов. При дальнейшем понижении энергии большинство электронов и позитронов отклоняются на углы, превышающие угол $\frac{V_0}{m}$ в несколько раз, и роль когерентных эффектов в рассеянии, излучении и рождении пар становится второстепенной, что и позволяет перейти к моделированию завершения развития электромагнитного ливня методами, разработанными для аморфной среды в рамках набора программных инструментов моделирования Geant4 [14; 15].

Заключение

Таким образом, нами разработана гибридная программа, сочетающая моделирование когерентно усиленных процессов рассеяния, излучения и рождения пар в кристаллической решетке при высоких энергиях и малых отклонениях импульсов частиц от главного кристаллического направления с моделированием аналогичных процессов в приближении аморфной среды при низких энергиях и больших отклонениях импульсов частиц. Программа может быть использована как для внедрения уточненных теоретических подходов в будущем, так и для проведения надежных расчетов в настоящее время.

В рамках развития новых подходов на очереди стоит задача перехода к выражениям, учитывающим остаточные ориентационные эффекты при больших отклонениях от главных кристаллических осей на уровне поправок к формулам теории Бете – Гайтлера. Значительное количество и протяженность траекторий ставят задачу разработки приближений, позволяющих существенно понизить трудоемкость расчетов по формулам теории когерентного тормозного излучения и образования пар. При получении подобных формул можно воспользоваться усреднением по значительным интервалам направлений движения. Кроме того, следует учесть возможность попадания частиц в условия плоскостного каналирования, сохраняющуюся и при больших углах падения на ось.

В существующем же виде в зависимости от соотношения угла падения на ось ψ_{BK}, ограничивающего область применения формулы Байера – Каткова, и характерного угла $\frac{V_0}{m}$ программа может быть использована как для быстрой демонстрации роли когерентных эффектов в развитии высокоэнергетических электромагнитных ливней, так и для детальных расчетов с контролируемой точностью. В первом случае угол ψ_{BK} может составлять 2–3 угла $\frac{V_0}{m}$, что соответствует примерно 5 мрад в вольфраме и 1 мрад в кремнии и алмазе. Для более точных расчетов и проверки сходимости результатов следует выбирать угол ψ_{BK}, равный 5–10 углам $\frac{V_0}{m}$, что соответствует 10–20 мрад в вольфраме и 3–5 мрад в кремнии и алмазе.

Внедрение нами адаптированных процедур Geant4 в программу моделирования радиационных процессов в кристаллах было продиктовано большей сложностью и трудоемкостью последней по сравнению с Geant4. При решении же задач детального моделирования работы сложных экспериментальных установок рациональнее, наоборот, включать алгоритмы моделирования радиационных процессов в кристаллах в Geant4 [27], используя изложенный нами подход для дальнейшей разработки и тестирования внедряемых процедур.

Библиографические ссылки

1. Тер-Микаелян МЛ. *Влияние среды на электромагнитные процессы при высоких энергиях*. Ереван: Издательство Академии наук Армянской ССР; 1969. 457 с.

2. Diambrini Palazzi G. High-energy bremsstrahlung and electron pair production in thin crystals. *Reviews of Modern Physics.* 1968;40(3):611–631. DOI: 10.1103/RevModPhys.40.611.

3. Барышевский ВГ. *Каналирование, излучение и реакции в кристаллах при высоких энергиях*. Минск: Издательство БГУ имени В. И. Ленина; 1982. 256 с.

4. Baryshevsky VG, Tikhomirov VV. Synchrotron-type radiation processes in crystals and polarization phenomena accompanying them. *Soviet Physics Uspekhi.* 1989;32(11):1013–1032. DOI: 10.1070/PU1989v032n11ABEH002778.

5. Байер ВН, Катков ВМ, Страховенко ВМ. *Электромагнитные процессы при высокой энергии в ориентированных монокристаллах*. Скринский АН, редактор. Новосибирск: Наука; 1989. 395 с.

6. Kimball JC, Cue N. Quantum electrodynamics and channeling in crystals. *Physics Reports.* 1985;125(2):69–101. DOI: 10.1016/0370-1573(85)90021-3.

7. Sørensen AH, Uggerhøj E. Channeling and channeling radiation. *Nature.* 1987;325(6102):311–318. DOI: 10.1038/325311a0.

8. Baryshevsky VG, Tikhomirov VV. Crystal applications in high energy physics for new phenomena observation and acceleration technology development. *Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics Series.* 2017;4:20–32. EDN: YNZIMD.

9. Bandiera L, Baryshevsky VG, Canale N, Carsi S, Cutini S, Davì F, et al. A highly-compact and ultra-fast homogeneous electromagnetic calorimeter based on oriented lead tungstate crystals. *Frontiers in Physics.* 2023;11:1254020. DOI: 10.3389/fphy.2023.1254020.

10. 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.

11. 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.

12. Soldani M, Bandiera L, Moulson M, Ballerini G, Baryshevsky VG, Bomben L, et al. Strong enhancement of electromagnetic shower development induced by high-energy photons in a thick oriented tungsten crystal. *The European Physical Journal C.* 2023; 83(1):101. DOI: 10.1140/epjc/s10052-023-11247-x.

13. Soldani M, Alharthi F, Bandiera L, Canale N, Cavoto G, Chaikovska I, et al. Radiation in oriented crystals: innovative application to future positron sources. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. Section A, Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment.* 2024;1058:168828. DOI: 10.1016/j.nima.2023.168828.

14. Agostinelli S, Allison J, Amako K, Apostolakis J, Araujo H, Arce P, et al. Geant4 – a simulation toolkit. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. Section A, Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment.* 2003;506(3):250–303. DOI: 10.1016/S0168-9002(03)01368-8.

15. *Geant4: a simulation toolkit. Physics reference manual* [Internet]. Release 11.2, Rev8.0. [S. l.]: Geant4 Collaboration; 2023 December 8 [cited 2024 February 20]. XII, 454 p. Available from: https://geant4-userdoc.web.cern.ch/UsersGuides/PhysicsReferenceManual/fo/PhysicsReferenceManual.pdf.

16. Møller SP, Sørensen AH, Uggerhøj E, Elsener K. *Can a crystalline detector be used in very high energy gamma ray astronomy?* Geneva: European Organization for Nuclear Research; 1989 November 14. 14 p. Report No.: CERN-EP-89-149.

17. Baryshevsky VG, Haurylavets VV, Korjik MV, Lobko AS, Mechinsky VA, Sytov AI, et al. On the influence of crystal structure on the electromagnetic shower development in the lead tungstate crystals. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. Section B, Beam Interactions with Materials and Atoms.* 2017;402:35–39. DOI: 10.1016/j.nimb.2017.02.066.

18. Guidi V, Bandiera L, Tikhomirov VV. 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.

19. Jackson JD. *Classical electrodynamics.* 3rd edition. [S. l.]: John Wiley & Sons; 1999. XXII, 811 p.

20. Perkins ST, Cullen DE, Seltzer SM. *Tables and graphs of electron-interaction cross sections from 10 eV to 100 GeV derived from the LLNL Evaluated Electron Data Library (EEDL), Z = 1–100*. Livermore: Lawrence Livermore National Laboratory; 1991. XVI, 485 p. (UCRL-50400 series; volume 31).

21. *Geant4: a simulation toolkit. Physics reference manual* [Internet]. Version Geant4 9.6.0. [S. l.]: [s. n.]; 2012 November 30 [cited 2024 February 20]. 572 p. Available from: https://geant4-userdoc.web.cern.ch/UsersGuides/PhysicsReferenceManual/BackupVersions/V9.6/fo/PhysicsReferenceManual.pdf.

22. Hubbell JH, Gimm HA, Øverbø I. Pair, triplet, and total atomic cross sections (and mass attenuation coefficients) for 1 MeV – 100 GeV photons in elements $Z = 1$ to 100. *Journal of Physical and Chemical Reference Data.* 1980;9(4):1023–1148. DOI: 10.1063/1.555629.

23. Гайтлер В. *Квантовая теория излучения*. Боголюбов НН, редактор. Москва: Издательство иностранной литературы; 1956. 491 с.

24. Dadoun O, Le Meur G, Touze F, Variola A, Artru X, Chehab R, et al. An event generator for crystal source. Application of the CLIC positron baseline. *Journal of Physics: Conference Series.* 2012;357:012024. DOI: 10.1088/1742-6596/357/1/012024.

25. 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.

26. Artru X. A simulation code for channeling radiation by ultrarelativistic electrons or positrons. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. Section B, Beam Interactions with Materials and Atoms.* 1990;48(1–4):278–282. DOI: 10.1016/0168-583X(90)90122-B.

27. Sytov AI, Tikhomirov VV, Bandiera L. Simulation code for modeling of coherent effects of radiation generation in oriented crystals. *Physical Review Accelerators and Beams.* 2019;22(6):064601. DOI: 10.1103/PhysRevAccelBeams.22.064601.

Получена 23.08.2024 / исправлена 26.08.2024 / принята 09.09.2024.
Received 23.08.2024 / revised 26.08.2024 / accepted 09.09.2024.

Теоретическая физика

Theoretical physics

УДК 533.723:577.352.4(086.48)

ВРАЩАТЕЛЬНЫЙ РЭТЧЕТ, УПРАВЛЯЕМЫЙ ДИХОТОМНЫМ ИЗМЕНЕНИЕМ ОРИЕНТАЦИЙ ПРИЛОЖЕННОГО ПОЛЯ

И. В. ШАПОЧКИНА[1), 2)]***, В. М. РОЗЕНБАУМ***[1), 2)]

[1)]*Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Беларусь*
[2)]*Совместный институт Даляньского политехнического университета и Белорусского государственного университета, ул. Цингунюань, 1, 116034, г. Далянь, Китай*

Аннотация. Рассмотрено однонаправленное вращение полярного ротора (вращательный рэтчет) в потенциале заторможенного вращения, управляемое дихотомными флуктуациями ориентаций электрического поля. Проведен анализ симметрии, который показал отсутствие рэтчет-эффекта при нечетном количестве ям потенциала заторможенного вращения, а также при четном количестве ям потенциала заторможенного вращения, когда средний угол флуктуирующих ориентаций электрического поля совпадает с осями симметрии потенциала заторможенного вращения. Получены аналитические выражения для средней скорости вращения ротора в двухъямном потенциале заторможенного вращения в низкотемпературном адиабатическом приближении, когда происходит прыжковое вращение и в каждом состоянии дихотомного процесса успевает установиться термодинамическое равновесие, а также в высокотемпературном приближении при произвольных частотах флуктуаций, когда тепловая энергия много больше барьера переориентаций потенциала заторможенного вращения и энергии взаимодействия дипольного ротора с электрическим полем. Показано, что в обоих случаях максимальная скорость вращения достигается при больших электрических полях, флуктуирующих по знаку, и имеет колоколообразную форму в зависимости от амплитуды угловых флуктуаций, ширину которой и наличие плато можно регулировать средним углом флуктуаций.

Образец цитирования:
Шапочкина ИВ, Розенбаум ВМ. Вращательный рэтчет, управляемый дихотомным изменением ориентаций приложенного поля. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2024;3:62–73 (на англ.).
EDN: EYNLGO

For citation:
Shapochkina IV, Rozenbaum VM. Rotational ratchet controlled by dichotomous changes in applied field orientations. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2024;3:62–73.
EDN: EYNLGO

Авторы:
Ирина Викторовна Шапочкина – кандидат физико-математических наук, доцент; доцент кафедры компьютерного моделирования физического факультета[1)], доцент[2)].
Виктор Михайлович Розенбаум – доктор физико-математических наук, профессор; старший научный сотрудник кафедры компьютерного моделирования физического факультета[1)], профессор[2)].

Authors:
Irina V. Shapochkina, PhD (physics and mathematics), docent; associate professor at the department of computer modelling, faculty of physics[a], and associate professor[b].
shapoch@mail.ru
https://orcid.org/0000-0002-6962-7931
Viktor M. Rozenbaum, doctor of science (physics and mathematics), full professor; senior researcher at the department of computer modelling, faculty of physics[a], and professor[b].
vik-roz@mail.ru
https://orcid.org/0000-0003-2889-3915

Зависимость скорости вращения от частоты флуктуаций также имеет колоколообразную форму, широкую для стохастических дихотомных флуктуаций и узкую для детерминистических дихотомных флуктуаций, с одинаковыми линейными низкочастотными асимптотиками.

Ключевые слова: вращательный рэтчет; заторможенное вращение; диффузионный транспорт; адиабатические броуновские моторы; дихотомный процесс; гармонические флуктуации.

Благодарность. Работа частично выполнена в рамках государственной программы научных исследований Республики Беларусь «Фотоника и электроника для инноваций» (задание 1.17.1 «Моделирование и создание фотонных и оптоэлектронных наноструктур на основе графеноподобных материалов для управления оптическим излучением»).

ROTATIONAL RATCHET CONTROLLED BY DICHOTOMOUS CHANGES IN APPLIED FIELD ORIENTATIONS

I. V. SHAPOCHKINA[a, b]***, V. M. ROZENBAUM***[a, b]

[a]*Belarusian State University, 4 Niezaliezhnasci Avenue, Minsk 220030, Belarus*
[b]*Joint Institute of Dalian Polytechnic University and Belarusian State University, 1 Qinggongyuan, Dalian 116034, China*

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

Abstract. We explore the unidirectional rotation of a polar rotor (rotational ratchet) in a hindered-rotation potential (HRP), controlled by the dichotomous fluctuations of the orientation of the electric field. A symmetry analysis is carried out, which shows the absence of the ratchet effect for either an odd number of wells of the HRP or for an even number of wells if the average angle of the fluctuating orientations of the electric field coincides with any symmetry axes of the HRP. Analytical expressions are obtained for the average rotation velocity of the rotor in the double-well HRP in the low-temperature adiabatic approximation, when the hopping rotation occurs and thermodynamic equilibrium has time to be established in each state of the dichotomous process, and in the high-temperature approximation at arbitrary fluctuation frequencies, when the thermal energy is much greater than both the reorientation barrier of the HRP and the energy of the dipole rotor – electric field interaction. We showed that the maximum rotation velocity is achieved at large electric fields that fluctuate in sign, and the dependence of the rotation velocity on the amplitude of the angular fluctuations is bell-shaped, the width of which and the presence of the plateau can be tuned by the value of the average fluctuation angle. The dependence of the rotation velocity on the fluctuation frequency is also bell-shaped, wide for the stochastic fluctuations and narrow for the deterministic dichotomous ones, with the same linear low-frequency asymptotics.

Keywords: rotational ratchet; hindered rotation; diffusion transport; adiabatic Brownian motors; dichotomous process; harmonic fluctuations.

Acknowledgements. The work was partially carried out within the framework of the state scientific research programme of the Republic of Belarus «Photonics and electronics for innovation» (assignment 1.17.1 «Modelling and creation of photonic and optoelectronic nanostructures based on graphene-like materials for controlling optical radiation»).

Introduction

Ratchet systems (also called Brownian motors) include nanomachines that, under the influence of various nonequilibrium fluctuations, convert a chaotic Brownian motion into a translational, reciprocating or rotational motion [1–8]. In natural systems, ratchets provide contractile activity of tissues (muscular activity), cell motility (e. g., the motility of bacterial flagella), and intra- and intercellular transport of organelles and relatively large particles of substances (cell nutrition and waste disposal). Current knowledge shows that biomolecules that control a number of intracellular fundamental processes have one common feature, namely, they all respond to energy absorption or energy dissipation by changing their conformation and, hence, their physical shape in one plane. Cyclically repeated single-plane changes in their shapes cause a unidirectional, linear or rotational, motion in molecules and the associated processes, that are controlled by this motion; this is the basis of mechanical activity and work performed within cells [9].

Moving on to the consideration of rotational ratchets, note that the difference between molecular motors (or ratchets) and molecular rotors is that the former exhibit unidirectional rotation while the latter may randomly rotate in any direction. A molecular rotor is usually understood to mean a molecular system in which a molecule or part of a molecule (the rotor or rotator proper) rotates against another part of the molecule or against a macroscopic entity such as a surface or a solid (stator). Rotation of the rotor can occur freely (without a rotational

potential) or by thermally activated jumps (hindered rotation) in the presence of an N-well rotational potential, where the value of N corresponds to the order of the rotation axis and is determined by the symmetry of the stator [10; 11]. A powerful tool for analysing the local environment of a surface molecular rotor is scanning tunneling microscopy (STM) [12]. For example, the *tert*-butyl groups on an Au(111) surface are characterised by a rotational potential with $N = 12$ [13], whereas a single acetylene (C_2H_2) rotor on an achiral PdGa(111) surface is in a potential with $N = 6$ [14]. Asymmetry in the potential energy landscape is commonly achieved by adsorbing chiral molecules on achiral surfaces or by the electric field generated by the STM tip at a certain position relative to the rotor (see reference [14] and supplementary materials for it).

Hindered rotational motion is also typical of chemisorbed polyatomic molecules or polyatomic groups tightly bound to a surface through one atom, whereas other atoms can have several equilibrium positions in the potential induced by the nearest substrate atoms. For example, for hydroxyl groups strongly bonded by an oxygen atom to a surface atom forming an oxide, the equilibrium positions of the hydrogen atom are determined by a radial distance of 1 Å relative to the oxygen atom, a polar angle of about 90°, and N values of the azimuthal angle corresponding to N symmetric wells of the hindered-rotation potential (HRP). The number N is one unit less than the valence of the surface atom forming the oxide and is equal to the number of symmetrically located oxygen atoms of the substrate closest to the hydroxyl group in question [15; 16].

First nanomachines in which unidirectional rotation occurred under the influence of light were constructed in the late 1990s by the scientific team of professor B. L. Feringa [17]. Further, the efficiency of those light-driven machines increased significantly [18]. In the experiment published in [14], a system was also considered in which the rotor was an acetylene molecule C_2H_2, and the stator was a cluster of three palladium atoms on the surface of a palladium – gallium crystal PdGa(111) with broken rotational symmetry. The unidirectional rotation of the acetylene molecule occurred due to the quantum tunneling effect in a scanning tunneling microscope. The rotational symmetry can also be broken with the fluctuating electric field itself, the orientation of which does not coincide with the symmetry axes of HRP [19]. This result was obtained using the low-temperature kinetic approach, in which the particle motion in a periodic N-well potential relief is reduced to a hopping overcoming the potential barriers. One more simplification of the consideration performed in reference [19] was the use of the second-order perturbation theory in a small alternating electric field $E(t) = E_0 \cos \omega t$ (E_0 and ω are the amplitude and frequency of the field change with time t, respectively). It turned out that, with the mentioned simplifications made, the ratchet effect occurs only at $N = 2$ and at the orientations of the electric field different from the orientations of the axes of the potential wells and barriers. The analysis of the ratchet driven by the adiabatic dichotomous arbitrary-amplitude fluctuations of the electric field $E(t) = \pm E$ characterised by an arbitrary angle φ_E to a symmetry axis of the HRP, showed the presence of the ratchet effect at even values $N > 2$ [20].

In contrast to the previous approaches to describing rotational ratchets, this article considers systems with dichotomous change in the orientations of the applied electric field themselves. The use of the low-temperature and high-temperature approximations leads to the analytical expressions for the average rotation velocity, the analysis of which provides the comprehensive information about the properties of the system not only at arbitrary, relative to the thermal energy, energies of the interaction of the rotor with the fluctuating electric field, but also at arbitrary fluctuation frequencies.

It should be noted that modern electron beam lithography [21] allows the formation of systems of closely spaced nanoelectrodes, the switching of electrical potentials between which ensures the creation of electric fields of a given intensity and direction. For example, in reference [22] the formation of structures consisting of two, four, six, and eight electrodes converging into a nanoscale region was reported. The dichotomy of the process is an essential simplification of the description and, in addition, gives a significant increase in the average rotation velocity at low frequencies of the potential switching.

N-well HRP in an external electric field

Let's consider a flat polar rotor in an N-well HRP, one of the wells of which is oriented along the axis x of a 2D coordinate system. Let the rotor be characterised by a dipole moment μ and be placed in an external electric field of a magnitude E, the orientation of which fluctuates in the plane of the rotor rotation and is specified by the values of two azimuthal angles φ_+ and φ_- (the case of dichotomous fluctuations). Then the potential energy of the rotor in the states «plus» and «minus» of the dichotomous process is represented as

$$U^{\pm}(\varphi) = -\left(\frac{\Delta U}{2}\right)\cos N\varphi - \mu E \cos(\varphi - \varphi_{\pm}), \tag{1}$$

where ΔU is the energy barrier of the HRP.

The potential energy (1) can be rearranged to the standard additive-multiplicative form of the potential energy of a pulsating ratchet:

$$U(x, t) = u(x) + \sigma(t) w(x), \tag{2}$$

in which the time function $\sigma(t)$ plays the role of a fluctuation variable with the zero mean $\langle \sigma(t) \rangle = 0$, while $u(x)$ and $w(x)$ are periodic functions of the particle coordinate x, that describe the average potential energy and its fluctuating component, respectively [23]. In the case of dichotomous fluctuations, the dependence $\sigma(t)$ can be represented as a switching, either random or deterministic, of its values between +1 and –1. For the rotational motion, the coordinate is the angular variable φ. Therefore, the potential energy $U(x, t)$ can be attributed to states «plus» or «minus» of the dichotomous process characterised by the variable $\sigma(t) = \pm 1$ and denoted as $U^{\pm}(\varphi)$. It is clear that for relations (1) and (2) to be equivalent, the functions $u(x)$ and $w(x)$ with $x = \varphi$ must be

$$\begin{gathered} u(\varphi) = -\left(\frac{\Delta U}{2}\right)\cos N\varphi - \mu E \cos\varphi_1 \cos(\varphi - \varphi_0), \\ w(\varphi) = -\mu E \sin\varphi_1 \sin(\varphi - \varphi_0), \\ \varphi_0 = \frac{\varphi_+ + \varphi_-}{2},\ \varphi_1 = \frac{\varphi_+ - \varphi_-}{2}. \end{gathered} \tag{3}$$

Note that in the particular case $\varphi_1 = \frac{\pi}{2}$, the values of the angles φ_+ and φ_- differ by π. This corresponds to the sign fluctuations of the electric field oriented at an angle φ_E to the axis x. Then $\varphi_E = \varphi_+$, $\varphi_0 = \varphi_E - \frac{\pi}{2}$, $\sin(\varphi - \varphi_0) = \cos(\varphi - \varphi_E)$, and we obtain that the average potential energy $u(\varphi) = -\left(\frac{\Delta U}{2}\right)\cos N\varphi$ is independent of the applied electric field while its fluctuating part $w(\varphi) = -\mu E \cos(\varphi - \varphi_E)$ becomes equal to the interaction energy of the polar rotor with the external electric field of the orientation φ_E (the second term of equation (1)). The behaviour of rotor systems with the sign fluctuations of the applied electric field have been analysed in a number of works [13; 14]. This work differs from those previous studies by considering the general case when it is not the sign that fluctuates, but the electric-field orientations themselves, i. e. the parameter φ_1 is arbitrary.

Besides the energy parameters, ΔU and μE, the potential energy (1) is characterised by the number N of azimuthal potential wells and the parameters φ_0 and φ_1, that specify the average angle of the fluctuating orientations of the electric field and the fluctuation amplitude, respectively. We should exclude from the consideration the parameters' values that make the ratchet effect impossible. First of all, we exclude the values at which there are no fluctuations (i. e. $w(\varphi) = 0$), namely, $\mu E = 0$ and $\varphi_1 = 0$; here and hereafter we do not mention the trivial values, such as, for example, the value $\varphi_1 = \pi$ that corresponds to the difference $\varphi_+ - \varphi_- = 2\pi$.

Next, we do not need the values that are prohibited by the symmetry restrictions. Such prohibitions cover the potential energies that are described by shift-symmetric or symmetric periodic coordinate functions [2; 24–27]. For periodic potential energies $U^{\pm}(x + L) = U^{\pm}(x)$ (L is the period) associated with the two states of the dichotomous process, the shift-symmetric and symmetric functions are defined by the following identities:

$$U^{\pm}_{\text{sh}}\left(x + \frac{L}{2}\right) = -U^{\pm}_{\text{sh}}(x),\ U^{\pm}_{\text{s}}(x + x_{\text{s}}) = U^{\pm}_{\text{s}}(-x + x_{\text{s}}), \tag{4}$$

where x_{s} is the location of the symmetry axis. An additional symmetry prohibition exists in ratchet systems with the time dependence of the particle potential energy (2) specified by the function $\sigma(t)$ that belongs to the universal symmetry type [26]. For a symmetric dichotomous process (equal durations of the states «plus» and «minus»), this additional symmetry property corresponds to $\sigma(t) = \pm 1$ with $\langle \sigma(t) \rangle = 0$ and is specified by the following identity:

$$U^{\pm}(x + x_{\text{s}}) = U^{\mp}(-x + x_{\text{s}}). \tag{5}$$

In our model, for which the coordinate is the angular variable φ, the functions under consideration have the natural period 2π, $L = 2\pi$. Since $U^{\pm}(\varphi + \pi) = -U^{\pm}(\varphi)$ for odd N, the first of the properties (4) leads to the absence of the ratchet effect when the number of wells of the HRP is odd.

The potential energy (1) will satisfy the second identity in the pair (4) if both $u(\varphi)$ and $w(\varphi)$ are symmetric with the same symmetry axis specified by the angle φ_{s}. Since the parameters ΔU and μE are arbitrary, the func-

tion $u(\varphi)$ is symmetric for $\varphi_s = \frac{\pi q}{N}$, $q = 0, 1, \ldots, N-1$, if either $\varphi_1 = \frac{\pi}{2}$ or $\varphi_1 \neq \frac{\pi}{2}$ with $\sin(\varphi_s - \varphi_0) = 0$. In turn, the function $w(\varphi)$ is symmetric if $\cos(\varphi_s - \varphi_0) = 0$. Since the conditions $\sin(\varphi_s - \varphi_0) = 0$ and $\cos(\varphi_s - \varphi_0) = 0$ cannot be simultaneously satisfied, the only case when the two functions $u(\varphi)$ and $w(\varphi)$ are symmetric together is specified by the equations $\varphi_1 = \frac{\pi}{2}$ and $\cos(\varphi_s - \varphi_0) = 0$.

To satisfy the identity (5), the functions $u(\varphi)$ and $w(\varphi)$ must be symmetric and antisymmetric, respectively, with the same symmetry axis φ_s. This is realised when $\sin(\varphi_s - \varphi_0) = 0$. Summarising, from the above symmetry analysis, it follows that, at arbitrary amplitude φ_1 of the orientation fluctuations, the ratchet effect is impossible for an odd number of wells of the HRP, as well as for an even number of wells, if the average angle φ_0 of the fluctuating orientations of the electric field coincides with any of the symmetry axes of the HRP $\varphi_s = \frac{\pi q}{N}$, $q = 0, 1, \ldots, N-1$, which are oriented along the extrema of this potential.

Hopping rotation in a double-well HRP

At thermal energies $k_B T$ (k_B is Boltzmann constant, T is the absolute temperature) that are low compared to the reorientation barrier ΔU, the main contribution to the unidirectional rotation of the rotor is made by the hopping rotation. The description of such a rotation is simplified by the fact that the rotation parameters include the rate constants of transitions between the particle states in neighbouring potential wells [19; 28], i. e. the rate constants for overcoming the potential barriers that separate these wells. Therefore, we can take into account not only thermally activated overcoming the potential barriers, but also tunneling, which occurs at temperatures close to the absolute zero and, thus, to study ratchet systems in a wide temperature range with both the classical and quantum descriptions [29; 30].

Using the results of reference [31], the authors of reference [20] obtained an expression for the average rotation velocity Ω of the ratchet driven by the adiabatic alternation of two periodic N-well potential reliefs (states «plus» and «minus») characterised by the sets of minimum and maximum energy values $v^{\pm}_{\min, n}$ and $v^{\pm}_{\max, n}$, respectively, corresponding to the same angular coordinates $\varphi_{\min, n}$ and $\varphi_{\max, n}$ ($n = 1, 2, \ldots, N$, $0 = \varphi_{\min, 0} < \varphi_{\max, 1} < \varphi_{\min, 1} < \varphi_{\max, 2} \ldots < \varphi_{\min, N-1} < \varphi_{\max, N} < \varphi_{\min, N} = 2\pi$). The adiabatic alternation is understood as such an alternation when the time intervals between the switching potential reliefs (τ^+ and τ^-) are so long that the thermodynamic equilibrium has time to be established in each of them. The average angular velocity Ω is expressed through the nested sums of the functions $R^{\pm}_{\max, n}$ and $R^{\pm}_{\min, n}$ that depend on the sets of minimum and maximum energy values as follows:

$$\Omega = \frac{2\pi}{\tau}\Lambda_N,\ \Lambda_N = \sum_{n=2}^{N}\left(R^{+}_{\max, n} - R^{-}_{\max, n}\right)\sum_{m=2}^{n}\left(R^{+}_{\min, m} - R^{-}_{\min, m}\right),$$
$$R^{\pm}_{\max, n} = \frac{\exp\left(\beta v^{\pm}_{\max, n}\right)}{\sum_{l=1}^{N}\exp\left(\beta v^{\pm}_{\max, l}\right)},\ R^{\pm}_{\min, m} = \frac{\exp\left(-\beta v^{\pm}_{\min, m}\right)}{\sum_{l=1}^{N}\exp\left(-\beta v^{\pm}_{\min, l}\right)}, \tag{6}$$

where $\tau = \tau^+ + \tau^-$ is the period of the potential relief alternation, $\beta = (k_B T)^{-1}$ is the reverse thermal energy.

The analysis of the relations (6) for the rotor in the N-well HRP with dichotomous sign fluctuations of the external electric field ($\varphi_+ = \varphi_E$, $\varphi_- = \varphi_E - \pi$) showed that the ratchet effect existed for even values of N, and the average angular velocity was proportional to $\varepsilon^N \sin(N\varphi_E)$ at $\varepsilon = \beta\mu E \ll 1$ and tended to $\left(\frac{2\pi}{\tau}\right)\sin(N\varphi_E)$ at $\frac{\varepsilon}{N^2} \gg 1$. The ratchet effect of the highest intensity was associated with $N = 2$. That is why we will consider just the case $N = 2$ in our analysis of the rotational ratchet with the dichotomous fluctuations of electric-field orientations.

When the inequality $\mu E \ll \Delta U$ is satisfied, we can assume that the values of the angles $\varphi_{\min, n} = (n-1)\pi$ and $\varphi_{\max, n} = \left(n - \frac{1}{2}\right)\pi$ ($n = 1, 2$) approximately correspond to the angular locations of the minima and maxima of the potential (1) with $N = 2$, and

$$v^{\pm}_{\min, n} = -\frac{\Delta U}{2} + (-1)^n \mu E \cos\varphi_{\pm},\ v^{\pm}_{\max, n} = \frac{\Delta U}{2} + (-1)^n \mu E \cos\varphi_{\pm}. \tag{7}$$

Substituting expressions (7) into the relations (6) for $R^{\pm}_{\min,\,n}$ and $R^{\pm}_{\max,\,n}$ with $n = N = 2$ gives

$$R^{\pm}_{\min,\,2} = \left(1 + e^{2\varepsilon\cos\varphi_{\pm}}\right)^{-1},\ R^{\pm}_{\max,\,2} = \left(1 + e^{-2\varepsilon\sin\varphi_{\pm}}\right)^{-1},\ \varepsilon = \beta\mu E. \tag{8}$$

Thus, using (8) and the identity $\left(1 + e^{2a}\right)^{-1} = \dfrac{1 - \tanh a}{2}$, we finally get

$$\Lambda_2 = \frac{1}{4}\left[\tanh\left(\varepsilon\sin\varphi_{+}\right) - \tanh\left(\varepsilon\sin\varphi_{-}\right)\right]\left[\tanh\left(\varepsilon\cos\varphi_{-}\right) - \tanh\left(\varepsilon\cos\varphi_{+}\right)\right], \tag{9}$$

which is the ratchet velocity up to the constant factor $\dfrac{2\pi}{\tau}$.

Note that in the adiabatic mode of the motion, the average angular velocity does not depend on the barrier ΔU of the HRP. Therefore, the result (9), obtained for $\mu E \ll \Delta U$, can be used for both small and large values of the energy parameter ε. The quantity (9) vanishes when either $\sin\varphi_{+} = \sin\varphi_{-}$ or $\cos\varphi_{+} = \cos\varphi_{-}$. This means that the average orientation angle φ_0 is equal to either 0 or $\dfrac{\pi}{2}$; these values coincide with the orientations of the electric field either along the minima or along the maxima of the HRP. This result coincides with the result of the general symmetry analysis carried out at the beginning of our article.

Figure 1 represents two families of functions $\Lambda_2(\varphi_1)$ evaluated for two different values of the average orientation angle φ_0 and corresponding to several values of ε. The highest average angular velocity can be achieved at $\varphi_0 = \dfrac{\pi}{4}$ (solid lines), when this average orientation of the fluctuating electric field provides large simultaneous fluctuations of the maxima and minima of the potential energy. The location of the maxima of each family of functions $\Lambda_2(\varphi_1)$ correspond to the amplitude of the orientation fluctuations $\varphi_1 = \dfrac{\pi}{2}$, i. e. to the sign fluctuations of the electric field.

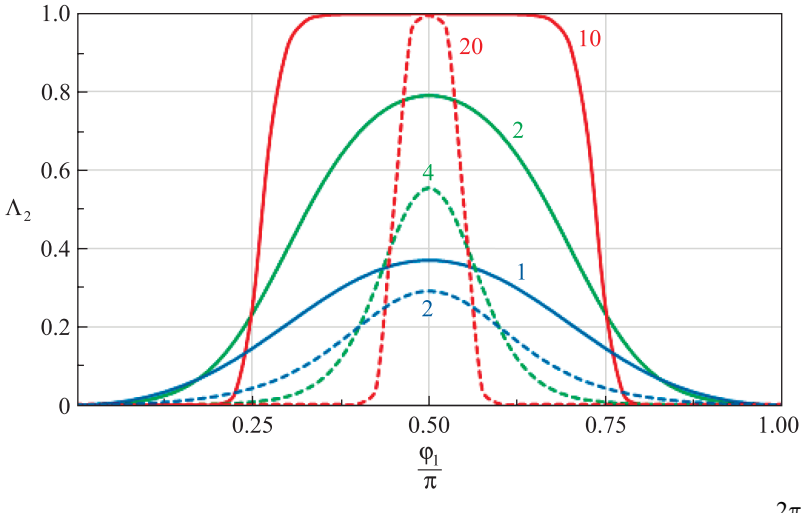

Fig. 1. The dependence of the average velocity Ω of the rotation ratchet (in units $\dfrac{2\pi}{\tau}$) on the amplitude φ_1 of the angular fluctuations of the electric field. The values of ε are indicated near the curves. The solid and dashed curves correspond to the values of the average orientation angle φ_0 equal to $\dfrac{\pi}{4}$ and $\dfrac{\pi}{20}$, respectively

Note that the value of Λ_2 is bounded from above by the value 1, i. e. the maximum possible average angular velocity is equal to $\dfrac{2\pi}{\tau}$. This value is achieved at large ε and $\varphi_1 = \dfrac{\pi}{2}$. The width of the plateau can be tuned with the parameter φ_0. The width of the plateau, which exits at large ε, decreases with the decrease of φ_0 from the value $\dfrac{\pi}{4}$.

The asymptotic behaviour of the average angular velocity at low electric fields follows from the expression (9) at $\varepsilon \ll 1$:

$$\Omega = \frac{\pi}{\tau}\varepsilon^2\sin^2\varphi_1\sin 2\varphi_0. \tag{10}$$

The angular dependences of this asymptotics turn out to be the same as in the high-temperature approximation considered in the next section.

Continuous rotation in the high-temperature mode

The high-temperature approximation implies that the potential energy of a pulsating ratchet fluctuates with coordinate and time such that the fluctuation amplitude is much less than the thermal energy $k_B T$. This helps one to obtain analytical representations for the average velocity of the ratchet in the general case of arbitrary forms of those coordinate and time dependences [32–34]. The choice of the potential energy fluctuations in the form of a spatially harmonic signal, i. e. as

$$w(x) = w_0 \cos\left[2\pi\left(\frac{x}{L} - \lambda_0\right)\right] \tag{11}$$

essentially simplifies the description. Then, assuming (11) and arbitrary functions $u(x)$ and $\sigma(t)$ (with $\langle\sigma(t)\rangle = 0$) in the additive-multiplicative potential energy (2), the average ratchet velocity can be represented as [35]

$$\langle v\rangle = 2\pi\left(\frac{L}{\tau_D}\right)\beta^3 w_0^2 \Psi\left(\frac{\Gamma}{s}\right)\mathrm{Im}\left\{u_2 e^{4\pi i\lambda_0}\right\},\ s = \frac{(2\pi)^2}{\tau_D},$$

$$\Psi\left(\frac{\Gamma}{s}\right) = s\left[\tilde{K}_\Gamma(s) + s\tilde{K}'_\Gamma(s)\right],\ \tilde{K}_\Gamma(s) = \int_0^\infty dt\, K_\Gamma(t) e^{-st},\ K_\Gamma(t) = \langle\sigma(t_0 + t)\sigma(t_0)\rangle, \tag{12}$$

$$u_q = \frac{1}{L}\int_0^L dx\, u(x) e^{-ik_q x},\ k_q = \frac{2\pi}{L}q,\ q = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots.$$

Here $\tau_D = \frac{L^2}{D}$ is the characteristic diffusion time (D is the diffusion coefficient) over the potential energy period L, and $\tilde{K}_\Gamma(s)$ is the Laplace transform of the correlation function $K_\Gamma(t)$, that depends on both the current time t and the inverse correlation time Γ. Due to the spatially harmonic shape of the potential energy fluctuations $w(x)$, the average velocity of such a ratchet depends only on the second harmonic u_2 of the function $u(x)$. The importance of the result (12) is that, within the high-temperature approximation, it is valid for arbitrary time dependences of potential energy fluctuations described by the function $\sigma(t)$.

Note that potential energy fluctuations in the form of a spatially harmonic signal were considered in references [27; 36] to describe ratchets with a sawtooth and step function $u(x)$. In this work, the function $u(\varphi)$ includes the HRP, and the function $w(\varphi)$ (see the expression (3) valid for dichotomous fluctuations of the angular variable) exactly corresponds to the spatially harmonic signal (11) with $x = \varphi$, $L = 2\pi$, $2\pi\lambda_0 = \varphi_0 - \frac{\pi}{2}$, $\cos\left[2\pi\left(\frac{x}{L} - \lambda_0\right)\right] = -\sin(\varphi - \varphi_0)$, and $w_0 = \mu E \sin\varphi_1$. The second harmonic of the function $u(\varphi)$ from equation (3) is equal to $u_2 = -\frac{\Delta U}{4}$, so $\mathrm{Im}\left\{u_2 e^{4\pi i\lambda_0}\right\} = -\frac{\Delta U}{4}\sin(4\pi\lambda_0) = \frac{\Delta U}{4}\sin(2\varphi_0)$. Therefore, the expression (12) for the average angular velocity of the rotational ratchet driven by the dichotomous fluctuations takes on the following form:

$$\Omega = \frac{1}{4}\beta\Delta U\varepsilon^2 s\Psi\left(\frac{\Gamma}{s}\right)\sin^2\varphi_1 \sin 2\varphi_0. \tag{13}$$

This result is valid for $\beta\Delta U \ll 1$ and $\varepsilon \ll 1$. The angular dependence (both on φ_0 and φ_1) coincides with the asymptotic behaviour (10) obtained in the adiabatic approximation.

For symmetric stochastic dichotomous fluctuations with $\langle\sigma(t)\rangle = 0$, we have $K_\Gamma(t) = \exp(-\Gamma t)$ and $\tilde{K}_\Gamma(s) = (\Gamma + s)^{-1}$. Thus,

$$\Psi\left(\frac{\Gamma}{s}\right) = \frac{\frac{\Gamma}{s}}{\left(1 + \frac{\Gamma}{s}\right)^2}. \tag{14}$$

The adiabatic approximation is valid for $\Gamma \ll s$. Then $s\Psi\left(\frac{\Gamma}{s}\right) \approx \Gamma$ and

$$\Omega \approx \frac{\Gamma}{4}\beta\Delta U\varepsilon^2 \sin^2\varphi_1 \sin 2\varphi_0. \tag{15}$$

If we characterise the average durations of the states of the dichotomous process by times τ_+ and τ_-, then the inverse correlation time is $\Gamma = \tau_+^{-1} + \tau_-^{-1}$. For the symmetric process, $\tau_+ = \tau_-$ and $\Gamma = \frac{4}{\tau}$, where $\tau = \tau_+ + \tau_-$ is the average period of the process. Therefore, the expression (15) includes the same factor τ^{-1} as the expression (10) does; this distinguishes the average velocities in the adiabatic approximation. Expression (10) is valid for a hopping rotation, when $\beta\Delta U \gg 1$, while the expression (15) was obtained in the high-temperature approximation with $\beta\Delta U \ll 1$. From the comparison of these expressions we conclude that the average angular velocity is proportional to $\beta\Delta U$ at high temperatures, but it saturates as the temperature decreases, and the factor $\beta\Delta U$ reaches π. That is, for the hopping motion in the adiabatic approximation, the dependence of the average angular velocity on the reorientation barrier ΔU disappears.

Let's consider time-periodic (i. e. deterministic) fluctuations $\sigma(t+\tau) = \sigma(t)$ with the period τ. Due to the periodicity, the function $\sigma(t)$ can be expanded into a Fourier series:

$$\sigma(t) = \sum_j \tilde{\sigma}_j \exp(-i\omega_j t),\ \omega_j = \frac{2\pi j}{\tau},\ j = 0, \pm 1, \ldots . \tag{16}$$

Averaging over the period yields

$$\langle \sigma(t) \rangle = \frac{1}{\tau}\int_0^\tau dt\sigma(t) = \tilde{\sigma}_0 = 0,$$

$$K_\Gamma(t) = \frac{1}{\tau}\int_0^\tau dt_0 \sigma(t_0 + t)\sigma(t_0) = \sum_{j \neq 0} |\tilde{\sigma}_j|^2 \exp(-i\omega_j t), \tag{17}$$

$$\tilde{K}_\Gamma(s) = 2s\sum_{j=1}^{\infty} \frac{|\tilde{\sigma}_j|^2}{s^2 + \omega_j^2},$$

and the desired function $\Psi\left(\frac{\Gamma}{s}\right)$ takes on the following form:

$$\Psi\left(\frac{\Gamma}{s}\right) = 4s^2 \sum_{j=1}^{\infty} \frac{|\tilde{\sigma}_j|^2 \omega_j^2}{\left(s^2 + \omega_j^2\right)^2}. \tag{18}$$

Here and in equations (16), (17) the parameter $\Gamma = \frac{4}{\tau}$ is included in the definition of the frequencies ω_j: $\omega_j = \frac{\pi}{2}\Gamma j$.

From the expression (18) we can obtain $\Psi\left(\frac{\Gamma}{s}\right)$ for a deterministic dichotomous process if we consider a symmetric step function $\sigma(t)$ with the period τ: $\sigma(t) = 1$ for $0 < t < \frac{\tau}{2}$ and $\sigma(t) = -1$ for $\frac{\tau}{2} < t < \tau$. Then $\tilde{\sigma}_j = \frac{i}{\pi j}\left[1 - (-1)^j\right]$ and the summation in the formula (18) over odd j is performed analytically:

$$\Psi\left(\frac{\Gamma}{s}\right) = \frac{\Gamma}{s}\tanh\frac{s}{\Gamma} - \cosh^{-2}\frac{s}{\Gamma}. \tag{19}$$

In the adiabatic approximation $\Gamma \ll s$, the approximate equality $s\Psi\left(\frac{\Gamma}{s}\right) \approx \Gamma$ is again satisfied and we return to the expression (15). This means that in the adiabatic mode, deterministic and stochastic fluctuations lead to the same result. This is explained by the fact that in this mode, the lifetime of each state of the dichotomous process is much longer than the relaxation time τ_D and, in each potential profile, the equilibrium state has time to be established regardless of whether the dichotomous states are switched deterministically or stochastically.

We emphasise that the applicability of the formula (13), which contains the angles φ_0 and φ_1 representing the average over the dichotomous fluctuations and the fluctuation amplitude, strictly speaking, is limited to the consideration of a dichotomous process. At the maximum fluctuation amplitude $\varphi_1 = \frac{\pi}{2}$, the values of the angles φ_+ and φ_- differ by π. Therefore, we can assume that the magnitude of the electric field $E(t)$ itself, oriented at an angle φ_E to the axis x, fluctuates. For a dichotomous process, $E(t) = \pm E$. However, we can consider the general case with $E(t) = E\sigma(t)$, where $\sigma(t)$ is an arbitrary function of time, not necessarily equal to ± 1. For such a case, the formula (13) will be valid for a non-dichotomous process, if we put $\sin\varphi_1 = 1$ and $\sin 2\varphi_0 = -\sin 2\varphi_E$ in it. As the simplest example of a non-dichotomous periodic process, let's consider the sinusoidal periodic function $\sigma(t) = \sin\omega_1 t$, in which the only term with $j = 1$, $|\tilde{\sigma}_1|^2 = \frac{1}{4}$, remains in the sum (18), so that

$$\Psi\left(\frac{\Gamma}{s}\right)=\frac{\left(\frac{\pi\Gamma}{2s}\right)^2}{\left[1+\left(\frac{\pi\Gamma}{2s}\right)^2\right]^2}. \tag{20}$$

Note that the low-frequency asymptotics of the expression (20) is quadratic in Γ, in contrast to the linear asymptotics in (15) for adiabatic dichotomous processes.

Figure 2 represents the graphs of the function $\Psi\left(\frac{\Gamma}{s}\right)$ calculated using relations (14), (19), and (20). The argument of this function determines the dimensionless fluctuation frequency, while the function itself is a factor in the expression (13), and therefore determines the average angular velocity of the rotor in question. The inset represents the low-frequency asymptotics, that are linear and coincident for the deterministic and stochastic dichotomous processes while quadratic for the sinusoidal fluctuations. This clearly demonstrates the advantage of the dichotomous process over the non-dichotomous one: the former provides much higher values of the average angular velocity compared to the latter. The periodic fluctuations lead to the narrow bell-shaped curves with maxima at $\frac{\Gamma}{s}\in(0.61-0.65)$ and the high-frequency asymptotics proportional to $\left(\frac{s}{\Gamma}\right)^2$. The stochastic dichotomous fluctuations correspond to the wide «bells» with the maximum at $\frac{\Gamma}{s}=1$ and the high-frequency asymptotics $\frac{s}{\Gamma}$.

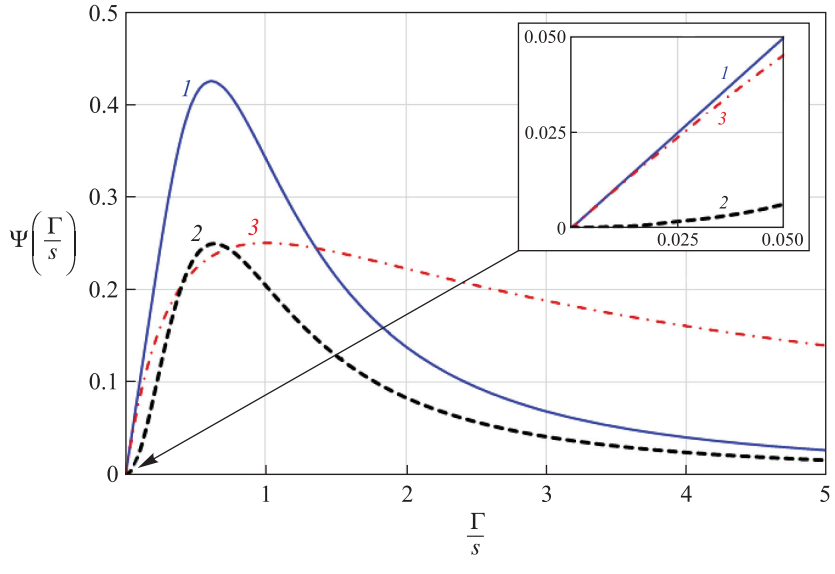

Fig. 2. The dependence of the factor Ψ, which determines, according to equation (13), the average angular velocity Ω of the rotation ratchet, on the dimensionless fluctuation frequency $\frac{\Gamma}{s}$. The curves *1*, *2*, and *3* correspond to the deterministic dichotomous, sinusoidal, and stochastic dichotomous fluctuations, given by equations (19), (18), and (13), respectively. The inset details the low-frequency behaviour of the curves *1*, *2*, and *3*

Discussion and conclusions

This article is the first to consider a rotational ratchet controlled by a dichotomous change in the orientations of the applied electric field. The average angle φ_1, which describes the amplitude of the orientation fluctuations, is an arbitrary-valued parameter, in contrast to the previously considered case with $\varphi_1=\frac{\pi}{2}$ corresponding only to the sign fluctuations of the electric field, i. e. to the angle between the orientations of the fluctuating field equal to π [19; 20]. The ratchet effect is very sensitive to changes in parameters of the ratchet system, so the presence of one more parameter always provides an additional control over the average rotation velocity. The performed symmetry analysis showed that the ratchet effect is absent for an odd number of the wells of the HRP, as well as for an even number of the wells, if the average angle φ_0 of the fluctuating orientations of the electric field

coincides with any symmetry axes of the HRP. The latter result can be associated with the well-known property according to which the existence of the ratchet effect requires synchronous fluctuations of the depths of the wells and the heights of the barriers of the periodic potential relief [3; 19]. Since the symmetry axes of the HRP pass through its minima and maxima, the coincidence of φ_0 with these orientations leads to fluctuations of either only the depths of the wells or only the heights of the barriers. There are no synchronous fluctuations, and therefore no ratchet effect.

Analytical expressions for the average rotation velocity have been obtained in the low-temperature and high-temperature approximations. At low temperatures, when the thermal energy is much less than the reorientation barrier, the hopping rotation occurs. The description of this rotation is the simplest in the adiabatic approximation, i. e. at low-fluctuation frequencies Γ, since in each of the states of the adiabatic process, equilibrium has time to be established. It does not matter whether these states are switched deterministically or stochastically. For the hopping motion, the relaxation time is determined by the inverse rate constant for overcoming the barrier ΔU of the HRP, that, according to the Arrhenius law, is equal to $k = k_0 \exp\left(-\frac{\Delta U}{k_B T}\right)$, where k_0 is the characteristic frequency of the angular oscillations of the rotor in the potential well. Therefore, the applicability of the adiabatic mode of the hopping motion is specified by the inequalities $k_B T < \Delta U$ and $\Gamma \ll k$. In this mode, the average rotation velocity Ω is proportional to Γ and independent of ΔU. The main ratchet parameters are the average angle φ_0 of the field orientations and the amplitude φ_1 of the orientation fluctuations, as well as the dimensionless electric field strength $\varepsilon = \frac{\mu E}{k_B T}$, which can take arbitrary values. Note that the hopping rotation can be considered outside the adiabatic approximation as well, at frequencies Γ satisfying $k \ll \Gamma \ll k_0$. Then Ω will depend on both ΔU and the mechanism of switching the states of the dichotomous process, and the value of Ω will saturate with the growth in Γ and be limited in order of magnitude to the value of k (this follows from the general description of the properties of flashing ratchets within the framework of the kinetic approach [37]). For example, for the hydroxyl groups of an oxide surface, the values k at room temperatures are of the order of 100 GHz [15], which is the upper limit of the rotation frequency of most rotor systems [10; 11]. When $\Gamma \gg k_0$, in the calculations of Ω, one should take into account the intrawell motion, that, when considered correctly, must lead to the general ratchet property: $\Omega \to 0$ when $\Gamma \to \infty$ [2].

Analytical expression (9), obtained for the average hopping-rotation velocity in the low-temperature approximation, and the corresponding families of the dependencies φ_1 of the average velocity show that the maximum ratchet effect is associated with large electric fields fluctuating in sign, i. e. with $\varepsilon \gg 1$ and $\varphi_1 = \frac{\pi}{2}$. In this case, the width of the plateau, that means the largest velocity, is maximum when the average angle φ_0 of the fluctuating orientations of the electric field is the bisector of the angles of the symmetry axes of the HRP, i. e. $\varphi_0 = \frac{\pi}{4}$, and the fluctuations of the barriers and wells of this potential are most correlated.

The high-temperature approximation assumes that the thermal energy is much greater not only than the reorientation barrier of the HRP, but also the interaction energy of the dipole rotor with the electric field μE, i. e. $\varepsilon \ll 1$. Therefore, the angular dependence of the average rotation velocity (13), obtained in this approximation, coincides with the dependence (10), obtained for the adiabatic hopping motion at $\varepsilon \ll 1$. The difference is that the expression (13) contains also the small factor $\beta \Delta U$ and the function $\Psi\left(\frac{\Gamma}{s}\right)$ which distinguishes stochastic and deterministic dichotomous angular fluctuations outside the adiabatic approximation. At the maximum amplitude of dichotomous angular fluctuations ($\varphi_1 = \frac{\pi}{2}$), one can replace these fluctuations by arbitrary-time dependences of the electric field $E(t)$ with $\langle E(t) \rangle = 0$, oriented at the angle φ_E to the axis x. Then the formula (13) with $\varphi_1 = \frac{\pi}{2}$ and $\varphi_0 = \varphi_E - \frac{\pi}{2}$ will be valid for arbitrary fluctuations $E(t)$.

The performed analysis of the dependence of the average rotation velocity Ω on the type of electric-field fluctuations showed that the low-frequency asymptotic behaviour of the velocity is proportional to the fluctuation frequency Γ for a dichotomous process with a jump-like change in either the magnitude or direction of the field. For continuous changes in the field strength with time, the low-frequency asymptotics of the velocity is proportional to the fluctuation frequency squared. Deterministic fluctuations lead to a bell-shaped frequency dependence $\Omega(\Gamma)$, the width of which is much narrower than that for a stochastic dichotomous process. The high-frequency asymptotics of the velocity is proportional to Γ^{-2} for the deterministic fluctuations and to Γ^{-1} for stochastic ones. Both frequency dependences tend to zero in the high-frequency limit, as it should be for ratchet systems.

References

1. Julicher F, Ajdari A, Prost J. Modeling molecular motors. *Reviews of Modern Physics*. 1997;69(4):1269–1281. DOI: 10.1103/RevModPhys.69.1269.

2. Reimann P. Brownian motors: noisy transport far from equilibrium. *Physics Reports*. 2002;361(2–4):57–265. DOI: 10.1016/S0370-1573(01)00081-3.

3. Astumian RD, Hanggi P. Brownian motors. *Physics Today.* 2002;55(11):33–39. DOI: 10.1063/1.1535005.

4. Bressloff PC, Newby JM. Stochastic models of intracellular transport. *Reviews of Modern Physics*. 2013;85(1):135–196. DOI: 10.1103/RevModPhys.85.135.

5. Hoffmann PM. How molecular motors extract order from chaos (a key issues review). *Reports on Progress in Physics*. 2016; 79(3):032601. DOI: 10.1088/0034-4885/79/3/032601.

6. Cubero D, Renzoni F. *Brownian ratchets: from statistical physics to bio- and nano-motors*. Cambridge: Cambridge University Press; 2016. 200 p.

7. Gulyaev YuV, Bugaev AS, Rozenbaum VM, Trakhtenberg LI. Nanotransport controlled by means of the ratchet effect. *Physics – Uspekhi.* 2020;63(4):311–326. DOI: 10.3367/UFNe.2019.05.038570.

8. Dekhtyar ML. Brownian photomotors based on organic compounds: a review. *Theoretical and Experimental Chemistry*. 2022; 58(2):90–104. DOI: 10.1007/s11237-022-09726-5.

9. Pierce S. Life's mechanism. *Life*. 2023;13(8):1750. DOI: 10.3390/life13081750.

10. Kottas GS, Clarke LI, Horinek D, Michl J. Artificial molecular rotors. *Chemical Reviews.* 2005;105(4):1281–1376. DOI: 10.1021/cr0300993.

11. Michl J, Sykes ECH. Molecular rotors and motors: recent advances and future challenges. *ACS Nano*. 2009;3(5):1042–1048. DOI: 10.1021/nn900411n.

12. Yang T, Zhang R. STM studies for surface-mounted molecular rotors: a mini review. *AAPPS Bulletin*. 2024;34:6. DOI: 10.1007/s43673-023-00107-1.

13. Gao L, Liu Q, Zhang YY, Jiang N, Zhang HG, Cheng ZH, et al. Constructing an array of anchored single-molecule rotors on gold surfaces. *Physical Review Letters*. 2008;101(19):197209. DOI: 10.1103/PhysRevLett.101.197209.

14. Stolz S, Groning O, Prinz J, Brune H, Widmer R. Molecular motor crossing the frontier of classical motion to quantum tunneling motion. *PNAS*. 2020;117(26):14838–14842. DOI: 10.1073/pnas.1918654117.

15. Rozenbaum VM, Ogenko VM, Chuiko AA. Vibrational and orientational states of surface atomic groups. *Soviet Physics Uspekhi*. 1991;34(10):883–902. DOI: 10.1070/PU1991v034n10ABEH002525.

16. Rozenbaum VM, Lin SH. *Spectroscopy and dynamics of orientationally structured adsorbates*. Singapure: World Scientific; 2002. 208 p.

17. Koumura N, Zijlstra WJ, van Delden RA, Harada N, Feringa BL. Light-driven monodirectional molecular rotor. *Nature*. 1999; 401(6749):152–155. DOI: 10.1038/43646.

18. Sheng J, Danowski W, Sardjan AS, Hou J, Crespi S, Ryabchun A, et al. Formylation boosts the performance of light-driven overcrowded alkene-derived rotary molecular motors. *Nature Chemistry.* 2024;16(8):1330–1338. DOI: 10.1038/s41557-024-01521-0.

19. Rozenbaum VM, Vovchenko OYe, Korochkova TYe. Brownian dipole rotator in alternating electric field. *Physical Review E*. 2008;77(6):061111. DOI: 10.1103/PhysRevE.77.061111.

20. Shapochkina IV, Rozenbaum VM. Adiabatic discrete ratchet effect of a rotor in the *N*-well potential of hindered rotation. *Nonlinear Phenomena in Complex Systems*. 2024;27(2):199–207. DOI: 10.5281/zenodo.12621736.

21. Zhang J, Con C, Cui B. Electron beam lithography on irregular surfaces using an evaporated resist. *ACS Nano*. 2014;8(4): 3483–3489. DOI: 10.1021/nn4064659.

22. Zharik GA, Dagesyan SA, Soldatov ES, Presnov DE, Krupenin VA. Nanometer scale lithography with evaporated polystyrene. *Moscow University Physics Bulletin*. 2017;72(6):627–632. DOI: 10.3103/S0027134917060224.

23. Rozenbaum VM, Shapochkina IV, Trakhtenberg LI. Green's function method in the theory of Brownian motors. *Physics – Uspekhi*. 2019;62(5):496–509. DOI: 10.3367/UFNe.2018.04.038347.

24. Reimann P. Supersymmetric ratchets. *Physical Review Letters*. 2001;86(22):4992–4995. DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.86.4992.

25. Denisov S, Flach S, Hanggi P. Tunable transport with broken space – time symmetries. *Physics Reports*. 2014;538(3):77–120. DOI: 10.1016/j.physrep.2014.01.003.

26. Rozenbaum VM, Shapochkina IV, Teranishi Y, Trakhtenberg LI. Symmetry of deterministic ratchets. *Physical Review E*. 2019; 100(2):022115. DOI: 10.1103/PhysRevE.100.022115.

27. Shapochkina IV, Savina ND, Rozenbaum VM, Korochkova TYe. Symmetry properties of a Brownian motor with a sawtooth potential perturbed by harmonic fluctuations. *Journal of the Belarusian State University. Physics*. 2021;1:41–49. Russian. DOI: 10.33581/2520-2243-2021-1-41-49.

28. Rozenbaum VM, Yang D-Y, Lin SH, Tsong TY. Catalytic wheel as a Brownian motor. *Journal of Physical Chemistry B*. 2004; 108(40):15880–15889. DOI: 10.1021/jp048200a.

29. Reimann P, Grifoni M, Hanggi P. Quantum ratchets. *Physical Review Letters*. 1997;79(1):10–13. DOI: 10.1103/PhysRevLett.79.10.

30. Rozenbaum VM, Shapochkina IV, Trakhtenberg LI. Tunneling mechanism for changing the motion direction of a pulsating ratchet temperature effect. *JETP Letters*. 2023;118(5):369–375. DOI: 10.1134/S002136402360235X.

31. Rozenbaum VM, Shapochkina IV, Trakhtenberg LI. Adiabatic ratchet effect in systems with discrete variables. *JETP Letters*. 2020;112(5):316–322. DOI: 10.1134/S0021364020170075.

32. Rozenbaum VM. High-temperature Brownian motors: deterministic and stochastic fluctuations of a periodic potential. *JETP Letters*. 2008;88(5):342–346. DOI: 10.1134/S0021364008170128.

33. Shapochkina IV, Rozenbaum VM. High-temperature diffusion transport: transition processes in symmetric deterministic dichotomic fluctuations of a potential energy. *Vestnik BGU. Seriya 1, Fizika. Matematika. Informatika*. 2009;2:43–47. Russian.

34. Shapochkina IV, Rozenbaum VM. High-temperature diffusion transport: asymmetric transition processes in symmetric deterministic dichotomic fluctuations of a potential energy. *Vestnik BGU. Seriya 1, Fizika. Matematika. Informatika*. 2010;2:41–45. Russian.

35. Rozenbaum VM, Shapochkina IV, Teranishi Y, Trakhtenberg LI. High-temperature ratchets driven by deterministic and stochastic fluctuations. *Physical Review E*. 2019;99(1):012103. DOI: 10.1103/PhysRevE.99.012103.

36. Shapochkina IV, Savina ND, Zaytseva EM, Rozenbaum VM, Ikim MI, Bugaev AS. Adiabatic Brownian motor with a stepwise potential perturbed by a dichotomous harmonic signal. *Journal of the Belarusian State University. Physics*. 2021;2:71–80. Russian. DOI: 10.33581/2520-2243-2021-2-71-80.

37. Makhnovskii YuA, Rozenbaum VM, Yang D-Y, Lin SH, Tsong TY. Flashing ratchet model with high efficiency. *Physical Review E*. 2004;69(2):021102. DOI: 10.1103/PhysRevE.69.021102.

Received 23.08.2024 / revised 03.09.2024 / accepted 04.09.2024.

СОДЕРЖАНИЕ

ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ

Се Чжао, Даденков И. Г., Мельникова Е. А., Толстик А. Л. Запись объемных пропускающих голограмм сингулярных пучков в фоторефрактивном кристалле силиката висмута 4

Колодочка П. С., Ходасевич М. А. Классификация географического происхождения лекарственных трав с помощью многопараметрического спектрального анализа 10

НАНОМАТЕРИАЛЫ И НАНОТЕХНОЛОГИИ

Евсейчик М. А., Хорошко Л. С., Гаглоева Д. И., Хубежов С. А., Баглов А. В., Макоед И. И., Маматкулов Ш. И., Печерская М. Д., Якимчук Д. В. Синтез и фотокаталитическая активность гетероструктур TiO_2/Ti 17

ОПТИЧЕСКАЯ ОБРАБОТКА ИНФОРМАЦИИ

Мартинов А. О., Литвинович Г. С., Гуляева С. И., Смоленцева Л. А., Рассказов И. В. Метод математической коррекции эффекта двоения изображения после отражения от светоделительной пластины 25

ЛАЗЕРНАЯ ФИЗИКА

Тимощенко Е. В., Юревич В. А. Режим автоколебаний излучения лазера с резонансной фазовой нелинейностью 41

ФИЗИКА ЯДРА И ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ

Тихомиров В. В., Гавриловец В. В., Лобко А. С., Сочивко Н. С., Черкас С. Л. Моделирование высокоэнергетических электромагнитных ливней в ориентированных кристаллах 50

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

Шапочкина И. В., Розенбаум В. М. Вращательный рэтчет, управляемый дихотомным изменением ориентаций приложенного поля 62

CONTENTS

OPTICS AND SPECTROSCOPY

Xie Zhao, Dadenkov I. G., Melnikova E. A., Tolstik A. L. Recording of a volume transmitting vortex hologram in a photorefractive crystal of bismuth silicate 4

Kolodochka P. S., Khodasevich M. A. Classification of the geographical origin of medicinal herbs using multivariate spectral analysis 10

NANOMATERIALS AND NANOTECHNOLOGIES

Yauseichyk M. A., Khoroshko L. S., Gagloeva D. I., Khubezhov S. A., Baglov A. V., Makoed I. I., Mamatkulov Sh. I., Pecherskaya M. D., Yakimchuk D. V. Synthesis and photocatalytic activity of TiO_2/Ti heterostructures 17

OPTICAL DATA PROCESSING

Martinov A. O., Litvinovich H. S., Guliaeva S. I., Smolentseva L. A., Rasskazov I. V. Method for mathematical correction of ghosts in an image after reflection from the beam splitter plate 25

LASER PHYSICS

Timoshchenko E. V., Yurevich V. A. Self-oscillation mode of laser radiation with resonant phase nonlinearity 41

ATOMIC NUCLEUS AND ELEMENTARY PARTICLE PHYSICS

Tikhomirov V. V., Haurylavets V. V., Lobko A. S., Sachyuka M. S., Cherkas S. L. Simulation of the high-energy electromagnetic showers in oriented crystals 50

THEORETICAL PHYSICS

Shapochkina I. V., Rozenbaum V. M. Rotational ratchet controlled by dichotomous changes in applied field orientations 62

Журнал включен Высшей аттестационной комиссией Республики Беларусь в Перечень научных изданий для опубликования результатов диссертационных исследований по техническим (экспериментальная и прикладная физика; микро- и наноэлектроника) 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. 2024

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. Пишкова*
Корректор *Л. А. Меркуль*

Подписано в печать 30.09.2024.
Тираж 88 экз. Заказ 884.

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

© БГУ, 2024

Journal of the Belarusian State University. Physics. No. 3. 2024

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 30.09.2024.
Edition 88 copies. Order number 884.

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

© BSU, 2024