



ЖУРНАЛ
БЕЛОРУССКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА

ФИЗИКА

JOURNAL
OF THE BELARUSIAN STATE UNIVERSITY

PHYSICS

Издается с января 1969 г.
Выходит три раза в год

Published since January, 1969.
One copy in four months

1

2017

МИНСК
БГУ

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

- | | |
|---|--|
| Главный редактор | АНИЩИК В. М. – доктор физико-математических наук, профессор; декан физического факультета Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь.
E-mail: anishchik@bsu.by |
| Заместитель
главного редактора | ВОРОПАЙ Е. С. – доктор физико-математических наук, профессор; заведующий кафедрой лазерной физики и спектроскопии физического факультета Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь.
E-mail: voropay@bsu.by |
-
- | | |
|-------------------------|--|
| <i>Ануфрик С. С.</i> | Гродненский государственный университет им. Янки Купалы, Гродно, Беларусь. |
| <i>Бондаренко Г. Г.</i> | Московский институт электроники и математики Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики», Москва, Россия. |
| <i>Гусев О. К.</i> | Белорусский национальный технический университет, Минск, Беларусь. |
| <i>Жуковский П. В.</i> | Люблинский технический университет, Люблин, Польша. |
| <i>Казак Н. С.</i> | Институт физики им. Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь. |
| <i>Кишин С. Я.</i> | Национальная академия наук Беларуси, Минск, Беларусь. |
| <i>Кислицин С. Б.</i> | Институт ядерной физики Министерства энергетики Республики Казахстан, Алма-Ата, Казахстан. |
| <i>Кононов В. А.</i> | СП «ЛОТИС ТИИ», Минск, Беларусь. |
| <i>Кучинский П. В.</i> | НИУ «Институт прикладных физических проблем им. А. Н. Севченко» Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь. |
| <i>Максименко С. А.</i> | НИУ «Институт ядерных проблем» Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь. |
| <i>Малый С. В.</i> | Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь. |
| <i>Маларевич А. М.</i> | Белорусский национальный технический университет, Минск, Беларусь. |
| <i>Маскевич С. А.</i> | Международный государственный экологический институт им. А. Д. Сахарова Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь. |
| <i>Машилан М.</i> | Оломоуцкий университет им. Палацкого, Оломоуц, Чехия. |
| <i>Патрин А. А.</i> | Кошалинский технический университет, Кошалин, Польша. |
| <i>Пенязьков О. Г.</i> | Институт тепло- и массообмена им. А. В. Лыкова Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь. |
| <i>Пилипенко В. А.</i> | Государственный центр «Белмикрoанализ» филиала НТЦ «Белмикросистемы» ОАО «Интеграл» – управляющей компании холдинга «Интеграл», Минск, Беларусь. |
| <i>Плетьхов В. А.</i> | Брестский государственный университет им. А. С. Пушкина, Брест, Беларусь. |
| <i>Погребняк А. Д.</i> | Сумский государственный университет, Сумы, Украина. |
| <i>Ремнев Г. Е.</i> | Томский политехнический университет, Томск, Россия. |
| <i>Семченко И. В.</i> | Гомельский государственный университет им. Франциска Скорины, Гомель, Беларусь. |
| <i>Толстик А. Л.</i> | Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь. |
| <i>Федосюк В. М.</i> | ГНПО «Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению», Минск, Беларусь. |
| <i>Хайнцманн Р.</i> | Институт физической химии Йенского университета, Йена, Германия. |
| <i>Шкадаревич А. П.</i> | Научно-производственное унитарное предприятие «Научно-технический центр “ЛЭМТ” БелОМО», Минск, Беларусь. |

EDITORIAL BOARD

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

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

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

ИСТОРИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ

HISTORICAL MATERIALS

УДК 539.1;537.8;538.9

ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ПРОБЛЕМ БГУ: 30 ЛЕТ НАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

В. Г. БАРЫШЕВСКИЙ¹⁾, С. А. МАКСИМЕНКО¹⁾

¹⁾НИУ «Институт ядерных проблем» БГУ, ул. Бобруйская, 11, 220030, г. Минск, Республика Беларусь

НИУ «Институт ядерных проблем» БГУ создан 30 лет назад, в октябре 1986 г. Приведен краткий очерк истории его создания и главных направлений выполняемых научных исследований. Представлен ряд наиболее важных научных результатов, достигнутых в институте за последние годы как в области фундаментальных, так и прикладных исследований.

Ключевые слова: Институт ядерных проблем БГУ; научно-исследовательская работа.

INSTITUTE FOR NUCLEAR PROBLEMS: 30 YEARS OF RESEARCH ACTIVITY

V. G. BARYSHEVSKY^a, S. G. MAKSIMENKO^a

^aResearch Institute for Nuclear Problems of Belarusian State University,
Bobruiskaya street, 11, 220030, Minsk, Republic of Belarus
Corresponding author: sergey.maksimenko@gmail.com

The Institute for Nuclear Problems of Belarusian State University has been founded 30 years ago, in October, 1986. A short introduction into history and main fields of research activity of the Institute is given. A set of most important results achieved in the Institute during past years both in fundamental and applied research is presented.

Key words: Institute for Nuclear Problems of Belarusian State University; scientific research.

Образец цитирования:

Барышевский В. Г., Максименко С. А. Институт ядерных проблем БГУ: 30 лет научных исследований // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2017. № 1. С. 4–13.

For citation:

Baryshevsky V. G., Maksimenko S. G. Institute for Nuclear Problems: 30 years of research activity. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2017. No. 1. P. 4–13 (in Russ.).

Авторы:

Владимир Григорьевич Барышевский – доктор физико-математических наук, профессор; главный научный сотрудник, почетный директор.
Сергей Афанасьевич Максименко – доктор физико-математических наук, профессор; директор.

Authors:

Vladimir Baryshevsky, doctor of science (physics and mathematics), full professor; chief researcher, honorary director.
bar@inp.bsu.by
Sergey Maksimenko, doctor of science (physics and mathematics), full professor; director.
sergey.maksimenko@gmail.com

Осенью 1986 г. на основании постановления ЦК КПСС и Совета Министров СССР и в соответствии с постановлением ЦК КПБ и Совета Министров БССР от 21 мая 1986 г. № 178-8 Министерством образования БССР был издан приказ от 3 ноября 1986 г. № 556 о создании Научно-исследовательского института (НИИ) ядерных проблем Белорусского государственного университета (современное официальное название с 2000 г. – Научно-исследовательское учреждение (НИУ) «Институт ядерных проблем» Белорусского государственного университета, НИИ ЯП БГУ). Образование института в рамках университета на основании постановления партии и правительства, конечно же, было обусловлено вескими причинами, и сейчас, по прошествии 30 лет работы НИИ ЯП БГУ, важно вспомнить о том, что послужило фундаментом его создания.

Средой-инкубатором стала кафедра ядерной физики физического факультета БГУ. Заложенные на этой кафедре ее создателем и руководителем (1961–1970), профессором А. Н. Писаревским, традиции проведения как фундаментальных, так и прикладных исследований, предоставление возможностей для личной инициативы были сохранены и в полной мере реализованы профессором С. С. Шушкевичем, заведовавшим кафедрой в 1971–1990 гг. Под его научным руководством были выполнены многочисленные работы в области научного приборостроения и прикладных исследований, важнейшие из которых были отмечены премиями Совета Министров БССР и медалями ВДНХ СССР. Высокий уровень квалификации сотрудников кафедры и широта их научных исследований снискали им заслуженный авторитет в научной среде и вызвали большой интерес студентов, благодаря чему постоянно поддерживался приток молодых талантливых специалистов.

На кафедре активно велись фундаментальные исследования (научный руководитель – профессор В. Г. Барышевский), положившие начало созданию нового направления – ядерной оптики поляризованных сред [1; 2] и открывшие широкий спектр прикладных разработок в физике высоких энергий, астрофизике и ядерной физике. В частности, В. Г. Барышевским сделаны и зарегистрированы в СССР два открытия [3; 4].

Основополагающими для будущих направлений работ в НИИ ЯП БГУ стали теоретические предсказания явления параметрического рентгеновского излучения (ПРИ), возбуждаемого релятивистскими электронами, пролетающими через кристалл [5; 6], и явления рентгеновского излучения, образованного при каналировании релятивистских электронов и позитронов [7]. В этих работах была построена теория и обоснована возможность создания новых типов рентгеновских источников с плавной перестройкой частоты, а также рентгеновских лазеров на их основе. Эксперименты по обнаружению ПРИ были подготовлены и проведены в 1985 г. в Томске на синхротроне СИРИУС. В результате было доказано существование ПРИ [8].

В конце 1970-х – начале 1980-х гг. на эти работы обратили внимание в Министерстве обороны СССР. Анализ потенциальных возможностей подобных источников, проведенный В. Г. Барышевским, показал, что принципы создания рентгеновских лазеров на основе возбуждения ПРИ имеют общее значение и могут быть использованы для генерации сверхмощного электромагнитного излучения в различных диапазонах длин волн и ускорения пучков частиц [9]. Как следствие, подобные генераторы оказались перспективными для использования в военно-промышленном комплексе при создании различных оборонных систем и оружия. Большую поддержку указанному направлению оказал ректор БГУ академик АН БССР В. А. Белый, который в 1980 г. доложил о результатах исследований первому секретарю ЦК КПБ П. М. Машерову.

Содействие в развертывании работ со стороны П. М. Машерова и секретаря ЦК КПБ А. Т. Кузьмина инициировало более интенсивные исследования в этой области. Меры, принятые ЦК КПСС и ЦК КПБ в связи с важностью возникшего научного направления, способствовали широкому развертыванию научных исследований на кафедре ядерной физики в целях их доведения до стадии разработки экспериментальных макетов и практического использования в опытно-конструкторских работах по созданию



Рис. 1. Заведующий кафедрой ядерной физики БГУ член-корреспондент НАН Беларуси, профессор С. С. Шушкевич (справа) и профессор В. Г. Барышевский. Начало 1970-х гг.
Fig. 1. Head of the nuclear physics department of BSU corresponding member of National Academy of Sciences of Belarus professor S. S. Shushkevich (on right) and professor of V. G. Baryshevsky. Early 1970s

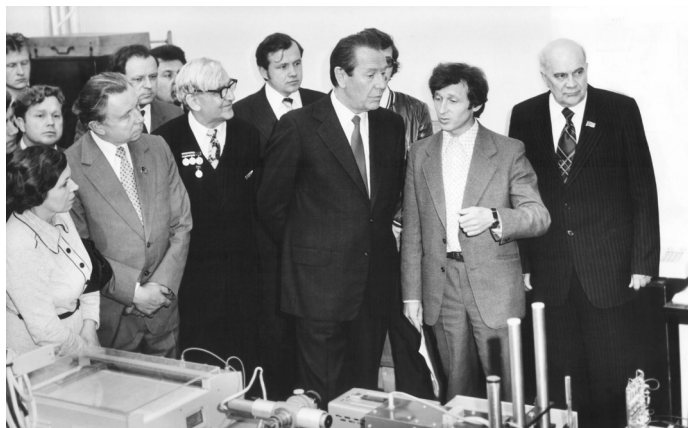


Рис. 2. В. Г. Барышевский (второй справа) докладывает результаты исследований П. М. Машерову (третий справа). На переднем плане академик АН БССР М. А. Ельяшевич и ректор БГУ академик АН БССР В. А. Белый (первый справа)
Fig. 2. V. G. Baryshevsky (second from right) reports to P. M. Masharov (third from right). In the foreground: academician of Academy of Sciences of BSSR M. A. El'yashevich and BSU rector academician AS BSSR V. A. Bely (first from right)

СССР. Причем следует сказать, что долгое время генерация когерентного рентгеновского излучения пучками электронов считалась в принципе невозможной вследствие того, что расстояние между электронами во всех реальных пучках намного больше длины волны рентгеновского излучения. Точка в дискуссии была поставлена в 1984–1985 гг. академиком Ю. Б. Харитоном, член-корреспондентом АН СССР Л. П. Феоктистовым и профессором А. Н. Лебедевым (Физический институт (ФИ) АН СССР), а также на специальном семинаре в ФИ АН СССР. Участие в некоторых дискуссиях высококлассного физика-оптика Л. И. Киселевского, который к тому времени стал ректором БГУ, также способствовало положительному решению вопроса о создании НИИ ЯП именно в Беларуси.

Институт начал функционировать в 1986 г. Очень быстро были развернуты исследования по многим направлениям ядерной физики, которые проводили главным образом сотрудники лаборатории ядерной оптики кафедры ядерной физики, созданной ранее для выполнения этих работ, и выпускники физического факультета БГУ. К работе в аппарате управления были привлечены опытные и энергичные люди: главный бухгалтер А. А. Байраш, главный инженер А. И. Тузин, заместитель директора по общим вопросам В. Г. Путров, заместитель директора по кадрам и режиму А. И. Дикович, на должность заместителя директора по науке был приглашен профессор кафедры теоретической физики Н. М. Шумейко. Возглавлял НИИ ЯП БГУ доктор физико-математических наук, профессор В. Г. Барышевский.

Созданный таким образом очень молодой коллектив к началу 1990-х гг. сумел заложить уникальную экспериментальную базу, в основном разместившуюся в технологическом корпусе Белорусского научно-исследовательского института мелиорации (г. Минск, ул. Богдановича, 153). Белорусская школа научного приборостроения позволила собрать в НИИ ЯП БГУ группу высокопрофессиональных специалистов по разработке ядерно-физической аппаратуры и различных измерительных систем (В. И. Мороз, М. Г. Лифшиц, Э. И. Подольный, Ю. Кононов, В. А. Евдокимов, В. В. Кузьмин, А. М. Белов, А. О. Грубич, Б. А. Тарнопольский, М. В. Батурицкий, В. И. Иванов, А. И. Жидович и др.). Активно включилась в работу и пришедшая с кафедры ядерной физики группа теоретиков (И. Я. Дубовская, В. В. Тихомиров и др.).

Одновременно в НИИ ЯП БГУ очень быстро развивались работы по созданию средств контроля за ядерным оружием и техническому обеспечению программы стратегического разоружения (ответственный исполнитель работ – В. И. Мороз). Большим успехом коллектива было участие в подготовке советско-американского эксперимента на борту крейсера «Слава» в Черном море по обнаружению ядерного оружия (1989), что явилось признанием мирового уровня проводимых в НИИ ЯП БГУ прикладных исследований [12].

Важнейшим направлением работ с начала 1990-х гг. стала деятельность в области преодоления последствий чернобыльской катастрофы. В 1990 г. решением Правительства Беларуси была принята Республиканская научно-техническая программа по созданию и выпуску аппаратуры и оборудования для обеспечения радиометрического и дозиметрического контроля (РНТП 18.02р), рассчитанная на 1991–1995 гг. Главным исполнителем программы был определен НИИ ЯП БГУ. Характеристики основных приборов, разработанных и серийно выпускаемых по заданиям РНТП, приведены в каталоге «Приборы для радиоэкологического мониторинга», изданном в 1996 г. [13].

новых видов источников излучения, получивших впоследствии в научной среде название объемных лазеров на свободных электронах (ОЛСЭ) [10; 11]. В начале 1980-х гг. работы подобного уровня проводились исключительно в России. Благодаря чрезвычайно важным результатам деятельности научного коллектива кафедры было принято не вполне стандартное решение – развивать в Беларуси совместно со специализированными российскими институтами столь важные для страны исследования. Эти работы в значительной мере стимулировал кандидат физико-математических наук Е. Ф. Титков (НИУ «Институт прикладных физических проблем имени А. Н. Севченко» БГУ), активно занимавшийся разработкой лазерных методов дистанционного контроля радиационной обстановки в окружающей среде.

Необходимо отметить, что созданию НИИ ЯП БГУ предшествовала активная научная дискуссия в ведущих физических центрах

Для развития сети радиационного и экологического контроля в соответствии с постановлением Совета Министров Республики Беларусь от 17 января 1997 г. № 7 НИИ ЯП БГУ в качестве головной организации выполнял государственную научно-техническую программу «Разработать и внедрить методы и аппаратные средства для обеспечения радиационной и экологической безопасности» («Радиоэкология») на период 1997–2000 гг.

С начала 1990-х гг. в НИИ ЯП БГУ под руководством доктора физико-математических наук М. В. Коржика были начаты систематические исследования свойств кристаллических соединений с целью создания нового поколения высокоэффективных трансформаторов энергии ионизирующего излучения в свет, в частности сцинтилляторов [14]. Разработан новый класс сцинтилляционных материалов – вольфрамат свинца PWO. На основе тяжелого сцинтиллятора вольфрамата свинца созданы электромагнитные калориметры детекторов CMS и ALICE в Европейской организации ядерных исследований (CERN).

Поскольку фундамент исследовательской программы НИИ ЯП БГУ был заложен еще на кафедре ядерной физики БГУ, их сотрудники и в настоящее время сохраняют тесные научно-педагогические связи. Необходимо отметить выходцев из НИИ ЯП БГУ – ведущих преподавателей кафедры доцентов И. Я. Дубовскую и М. В. Дежурко, а также сотрудников НИИ ЯП БГУ – профессора В. В. Тихомирова, доктора физико-математических наук А. С. Лобко, кандидатов физико-математических наук К. Г. Батракова, Д. С. Быченка, Х. Суареса, научных сотрудников И. В. Мороза, В. А. Мечинского, которые обеспечивают преподавание многих ключевых дисциплин и участвуют в подготовке специалистов для Белорусской АЭС. Совместно с физическим и химическим факультетами БГУ активно ведется разработка учебно-научного электронного портала ядерных знаний учреждений образования Республики Беларусь BelNET¹. Научно-исследовательским институтом ядерных проблем БГУ получена лицензия Госатомнадзора Министерства по чрезвычайным ситуациям (МЧС) Республики Беларусь, позволяющая проведение экспертиз в организациях и учреждениях на право работы с источниками ионизирующего излучения. Подготовлены специалисты и организована работа лаборатории ядерной спектрометрии и экспертиз радиационной безопасности². По договору с Департаментом по ликвидации последствий катастрофы на Чернобыльской АЭС МЧС Республики Беларусь в лаборатории теоретической физики и моделирования ядерных процессов (заведующий лабораторией – кандидат физико-математических наук С. А. Кутень) проведен обзор нормативного и методического обеспечения радиационных измерений в системах радиационного контроля и анализ приборной базы системы радиационного контроля Республики Беларусь и Российской Федерации, даны рекомендации по гармонизации методов и методик исследования системы радиационного контроля в рамках Таможенного союза. Результаты выполнения данного договора внедрены в РУП «Белорусский государственный институт метрологии».

Во второй половине 1990-х гг. в НИИ ЯП БГУ создана и сейчас интенсивно развивается новая исследовательская дисциплина – наноэлектромагнетизм, объединяющая методы классической электродинамики, современной квантовой физики конденсированного состояния и физической электроники в целях моделирования электромагнитных и электронных свойств наноструктур. Выполненные исследования формируют наноэлектромагнетизм как самостоятельное направление, обеспечивающее пионерские результаты по предсказанию физических эффектов в наноструктурах и моделированию отклика наноструктур на электромагнитные воздействия [15–17]. Создана материальная база синтеза

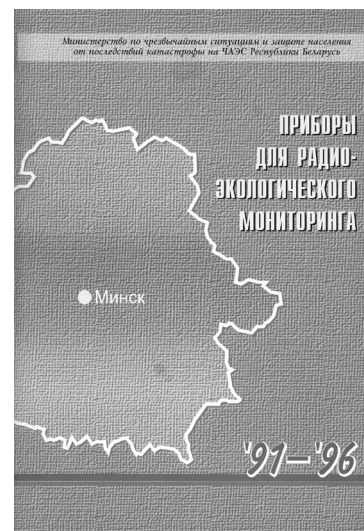


Рис. 3. Обложка каталога «Приборы для радиоэкологического мониторинга» (Минск, 1996)

Fig. 3. Cover of the catalog «Equipment for radiation and ecology monitoring» (Minsk, 1996)

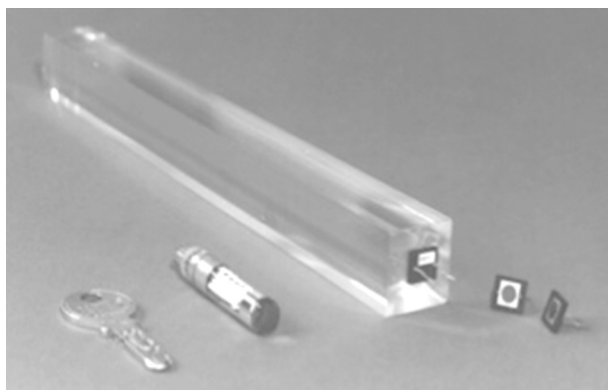


Рис. 4. Элемент электромагнитного калориметра на основе вольфрамата свинца

Fig. 4. Element of the electromagnetic calorimeter on the basis of lead tungstate

¹Электронный портал ядерных знаний учреждений образования Республики Беларусь. URL: <https://bsu.inpnet.net/belnet/> (дата обращения: 02.09.2016).

²Лицензия Госатомнадзора Республики Беларусь на право осуществления деятельности в области использования ядерной энергии и источников ионизирующего излучения от 2 мая 2016 г. № 33134/615-4.

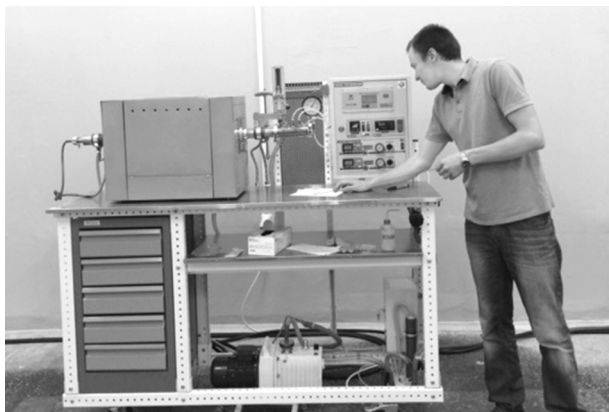


Рис. 5. Старший научный сотрудник лаборатории нанoeлектромагнетизма Д. С. Быченко во время эксплуатации установки CVD-синтеза углеродных нанотрубок, разработанной и изготовленной в Институте неорганической химии Сибирского отделения РАН, г. Новосибирск
Fig. 5. Senior researcher of Laboratory of Nanoelectromagnetics D. S. Bychenok works on the facility for CVD synthesis of carbon nanotubes, developed and manufactured at the Institute of Inorganic Chemistry SB RAS, Novosibirsk

углеродных наноструктур и исследований их свойств, которая включает, в частности, установки CVD-синтеза многостенных углеродных нанотрубок и графеновых слоев большой площади (до 10 см^2), а также терагерцовый спектрометр.

Разработка и изготовление наноструктурированных магнитных материалов выполняются в лаборатории физики перспективных материалов под руководством доктора физико-математических наук Ю. А. Федотовой [18; 19].

За последние десять лет в НИИ ЯП БГУ произошел ряд существенных изменений, среди которых в первую очередь следует отметить присоединение к нему в соответствии с постановлением Совета министров Республики Беларусь от 27 июля 2015 г. № 636 Национального научно-учебного центра физики частиц и высоких энергий (НЦ ФЧВЭ) БГУ. Мы ожидаем от этого события существенного синергетического эффекта. В настоящее время НИИ ЯП БГУ выполняет обязанности по организационному обеспечению научно-исследовательских работ, осуществляемых в Объединенном институте ядерных исследований (ОИЯИ, г. Дубна, Россия) с участием организаций и учреждений Республики Беларусь.

В НИИ ЯП БГУ созданы и активно действуют следующие научные школы:

- **ядерной оптики и физики высоких плотностей энергии.** Основатель и научный руководитель школы – профессор В. Г. Барышевский;

- **электродинамики и электромагнитных свойств наноструктур (нанoeлектромагнетизма),** основоположниками и научными лидерами которой являются профессор С. А. Максименко и доктор физико-математических наук Г. Я. Слепян;

- **физики частиц и высоких энергий.** Образована в результате слияния школы, основанной в НЦ ФЧВЭ профессором Н. М. Шумейко, с аналогичной в этой области, существовавшей в НИИ ЯП БГУ до присоединения к нему НЦ ФЧВЭ (профессора В. Г. Барышевский, В. В. Тихомиров, доктора физико-математических наук М. В. Коржик, А. С. Лобко и др.).

Следует отметить, что на стыке двух школ – ядерной оптики и физики частиц и высоких энергий – развивается новое направление – космофизика (В. В. Тихомиров [20], А. Э. Марголин [21], С. Л. Черкас [22]).

Благодаря пионерским результатам в области исследования углеродных наноструктур, в частности графена, НИИ ЯП БГУ стал одной из двух научных организаций в Беларуси – головных по выполнению проектов Седьмой рамочной программы научных исследований ЕС (координатор – профессор С. А. Максименко) [23], а также единственным научно-исследовательским учреждением за пределами ЕС, вошедшим в качестве исполнителя в европейский мегагрант Graphene Flagship, объединяющий усилия 149 научно-исследовательских организаций Европы для достижения европейского лидерства в исследовании и применении графена (ответственные исполнители – профессор С. А. Максименко и кандидат физико-математических наук П. П. Кужир) [24]. В настоящее время в НИИ ЯП БГУ выполняются четыре проекта программы ЕС «Горизонт-2020».

Согласно рейтингу организаций Беларуси по индексу Хирша НИИ ЯП БГУ занимает 3-е место в таблице «Топ-25 организаций Беларуси по индексу Хирша» и 2-е место в таблице «Рейтинг учреждений образования Республики Беларусь и научно-исследовательских учреждений вузов по индексу Хирша». Личное значение индекса Хирша выше 15 имеют 12 сотрудников НИИ ЯП БГУ.

Благодаря значимым научным результатам НИИ ЯП БГУ имеет весомый авторитет у коллег как внутри страны, так и за ее пределами. Это позволило привлечь к участию в организованных в НИИ ЯП БГУ конференциях и школах высококласных специалистов из различных областей науки. Приведем названия нескольких мероприятий: 64-я Международная конференция «Фундаментальные проблемы ядерной физики, атомной энергетики и ядерных технологий “ЯДРО-2014”» (июль 2014 г.);

4-я и 5-я международные конференции «Инженерия сцинтилляционных материалов и радиационные технологии (ИСМАРТ) – Engineering of Scintillation Materials and Radiation Technologies» (октябрь 2014 и сентябрь 2016 г.); рабочее совещание «Современные ядерно-физические методы исследования в физике конденсированных сред» (сентябрь 2011, 2013 и 2015 гг.); 1-я и 2-я международные конференции «Fundamental and Applied NanoElectroMagnetics» (FANEM, май 2012 и май 2015 г.).

За последние годы сотрудниками НИИ ЯП БГУ получен ряд важных научных результатов как в фундаментальных, так и прикладных исследованиях. Среди них следует отметить следующие.

На разработанном и изготовленном с участием НИИ ЯП БГУ электромагнитном калориметре эксперимента CMS на Большом адронном коллайдере (LHC) в CERN получены результаты, указывающие на существование бозона Хиггса в процессе его распада на два фотона с высоким разрешением по массе. Соавторами первых двух работ, сообщающих об открытии бозона Хиггса, стали 14 сотрудников НИИ ЯП БГУ.

Впервые наблюдался предсказанный В. В. Тихомировым [25] эффект многократного объемного отражения положительно [26] и отрицательно [27] заряженных частиц высоких энергий изогнутыми плоскостями одного кристалла в эксперименте, проведенном на ускорителе SPS совместно с учеными университета Феррары (Италия) при поддержке Итальянского института ядерной физики (INFN). Предсказан [28] и обнаружен на ускорителе SPS (CERN) эффект многократного увеличения интенсивности излучения гамма-квантов расходящимися пучками электронов высоких энергий в условиях многократного объемного отражения в одном кристалле [29]. Предсказан [30] и на микротроне MAMI Майнцского университета (Германия) обнаружен эффект увеличения длины деканалирования электронов, вызываемый их захватом в глубине кристалла [31].

Измерено дифференциальное сечение 3-струйных событий при энергии 7 ТэВ в системе центра масс протонов детектором ATLAS на LHC [32] и дифференциальное сечение процесса Дрелла – Яна при энергии 8 ТэВ в системе центра масс протонов детектором CMS на LHC [33], модернизирован генератор событий LePeProGen для моделирования процесса Дрелла – Яна, создан генератор Монте-Карло для моделирования эксклюзивного рождения электронных пар в электрон-протонном рассеянии как фоновый процесс к рождению «тяжелых» фотонов. Оценен вклад излучения жесткого фотона при измерении зарядовой асимметрии в лептон-протонном рассеянии в ультрарелятивистском приближении [34].

Показано, что при торможении антипротонов в веществе эффект ядерной прецессии позволяет получить сведения о реальной части амплитуды рассеяния антипротона на протоне (ядре) при нулевых энергиях, т. е. в области, недоступной для прямого измерения в стандартных экспериментах по рассеянию [35].

В рамках теории с минимальной длиной предложен новый подход к решению проблем расходимостей в квантовой теории поля, перехода в гравитации из низких энергий в высокие, темной энергии [36].

Выполнены эксперименты на образцах калиброванных по длине нанотрубок, устанавливающих однозначную связь спектрального положения терагерцового пика поглощения тонких пленок из одностенных углеродных нанотрубок (УНТ) с их длиной. Показано, что основным механизмом формирования терагерцового пика является локализованный плазменный (антенный) резонанс в одностенных УНТ. Впервые получено экспериментальное доказательство антенных свойств нанотрубок и подтвержден теоретически предсказанный эффект замедления поверхностного плазмона в нанотрубках [37].

Предложена методика синтеза структур типа сэндвича графен/полимер на диэлектрических подложках. Проведены экспериментальные исследования электромагнитного отклика данных структур в СВЧ-диапазоне. Установлено, что структура графен/полимер может обеспечить до 75 % ослабление электромагнитного сигнала. Разработаны способы увеличения поглощения падающего электромагнитного излучения СВЧ-диапазона в монослоях графена за счет подбора оптимальной толщины и диэлектрических параметров подложки, оптимального угла падения и поляризации падающей волны. На основе данного эффекта сформулирован принцип работы и создана схема эффективного поляризатора электромагнитного излучения в широком диапазоне спектра [38; 39].

Показана принципиальная возможность выращивания кристаллов вольфрамата свинца в установках открытого типа из иридиевых тиглей, что открывает перспективу создания производства этих сцинтилляционных кристаллов для нужд физики высоких энергий [40].

Разработан экспериментальный образец генератора СВЧ-импульса с виртуальным катодом, системой питания, использующей прямое преобразование химической энергии взрыва в электрическую. Созданы и испытаны экспериментальные образцы взрывомагнитных генераторов, позволяющих запустить СВЧ-генератор и обеспечить получение электронных пучков с током до 30 кА. Максимальная мощность СВЧ-излучения, полученная в экспериментах, достигала уровня 500 МВт/м². Проведены испытания экспериментального образца СВЧ-генератора с системой питания, использующей как прямое

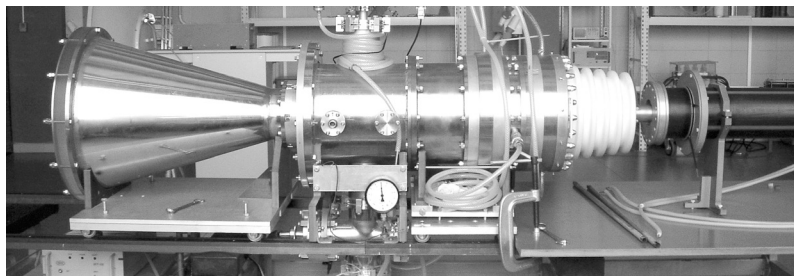


Рис. 6. Экспериментальный образец генератора с виртуальным катодом для получения СВЧ-излучения в диапазоне частот от 2,5 до 5,0 ГГц
Fig. 6. Experimental prototype of virtual cathode oscillator provides microwave radiation in frequency range from 2.5 to 5.0 GHz

преобразование химической энергии взрыва в электрическую, так и от емкостных накопителей энергии [41]. Работы способствуют созданию в стране экспериментальной базы для проведения испытаний электрической техники.

Внесен существенный вклад в разработку и обоснование технических предложений по модернизации торцевых частей электромагнитного калориметра экспериментальной установки коллаборации CMS (CERN) для работы в условиях LHC с увеличенной светимостью. Проведена оценка деградации цилиндрической части калориметра на период до 2018 г. Выявлены границы использования понижения температуры для уменьшения шумов фотоприемников в детекторных ячейках. Установлены ограничения и преимущества различных сцинтилляционных материалов для построения передних калориметров экспериментальных установок на коллайдерах с высокой светимостью. Показана принципиальная возможность использования материалов структурного типа граната на основе иттрия для создания радиационно стойких электромагнитных калориметров [42].

Получено объяснение избыточной радиационной деградации адронного калориметра детектора CMS (LHC) и предложен экономически эффективный метод повышения его радиационной стойкости, позволяющий выдержать весь срок эксплуатации при повышенной светимости коллайдера LHC [43].

Разработаны экспериментальные методики получения магнитоанизотропных наноструктурированных пленок FeCoZr – диэлектрик (CaF_2 , Al_2O_3) [44; 45] и CoPd, CoPt на основе пористых матриц Al_2O_3 и TiO_2 [19] со сложной морфологией и контролируемым комплексом магнитоэлектрических характеристик для применения в микро- и магнитоэлектронике, магнитной сенсорике и перпендикулярной записи информации сверхвысокой плотности.

В испытаниях первого сверхпроводящего ниобиевого резонатора отечественного производства прямым аппаратным методом измерена его добротность в состоянии сверхпроводимости, а также значение добротности $\sim 1,5 \cdot 10^9$ на частоте 1,3 ГГц. Работа проводится по заказу и в тесном сотрудничестве с ОИЯИ совместно с УО «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники», ГНУ «Физико-технический институт» НАН Беларуси и Научно-производственным центром НАН Беларуси по материаловедению [46].

Предложен и экспериментально опробован новый метод измерения компонентного состава спирто-содержащих продуктов, который может быть использован при разработке международных стандартов контроля качества и безопасности алкогольной продукции, автомобильного топлива с использованием этанола и др. [47; 48].

Создан опытный образец комплекса оборудования для обезвреживания фармацевтических отходов и цитостатических фармацевтических препаратов, на котором выполнен большой объем опытно-технологических работ по обезвреживанию последних (РНПЦ детской онкологии, гематологии и иммунологии, РУП «Центр экспертиз и испытаний в здравоохранении» и др.)¹.

Помимо фундаментальных и прикладных исследований, НИИ ЯП БГУ установил прочные договорные связи с предприятиями различных форм собственности и научными организациями по осуществлению научного сопровождения разработок и проведению экспертиз. В частности, ученые и специалисты НИИ ЯП БГУ сотрудничают в области медицинской физики и ядерно-физического приборостроения с НПО «Атомтех», ведущим предприятием в области производства ядерно-физической аппаратуры, а также с Белорусской медицинской академией последипломного образования, РНПЦ онкологии и медицинской радиологии и Госатомнадзором МЧС Республики Беларусь.

¹ Карпович В. А. Комплекс оборудования для обезвреживания фармацевтических отходов и цитостатических фармацевтических препаратов // Золотая медаль за участие в конкурсе «Лучший инновационный проект и лучшая научно-техническая разработка года» на Петербургской технической ярмарке. 2016.

Таким образом, можно утверждать, что в НИИ ЯП БГУ создан высокопрофессиональный творческий коллектив, способный решать самые серьезные задачи современной фундаментальной и прикладной науки и университетского образования. За прошедшие 30 лет институт доказал свою значимость и необходимость в структуре науки и образования в нашей стране и сегодня с уверенностью смотрит в будущее.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

1. Барышевский В. Г. Ядерная оптика поляризованных сред. 2-е изд. Минск, 1995.
2. Baryshevsky V. G. High-Energy Nuclear Optics of Polarized Particles. Singapore, 2012.
3. Барышевский В. Г., Подгорецкий М. И. Явление ядерной прецессии нейтронов // Государственный реестр открытий СССР. № 224 с приоритетом от 3 апреля 1964 г.
4. Явление вращения плоскости поляризации жестких гамма-квантов / В. Г. Барышевский [и др.] // Государственный реестр открытий СССР. № 360 с приоритетом от 12 февраля 1965 г. в части теоретического обоснования и от 28 июля 1971 г. в части экспериментального доказательства явления.
5. Барышевский В. Г. О рассеянии света потоком электронов, проходящих через кристалл // Докл. АН БССР. 1971. Т. 15 (4). С. 306–308.
6. Барышевский В. Г., Феранчук И. Д. О переходном излучении гамма-квантов в кристалле // ЖЭТФ. 1971. Т. 61, № 3 (9). С. 944.
7. Baryshevskii V. G., Dubovskaya I. Ya. Coherent Radiation of the Channelling Positron (Electron) // Phys. Stat. Sol. B. 1997. Vol. 82. P. 403–412.
8. Экспериментальное обнаружение параметрического рентгеновского излучения / Ю. Н. Адисhev [и др.] // Письма в ЖЭТФ. 1985. Т. 41. С. 259.
9. Барышевский В. Г. Неустойчивость волн в периодической среде // Докл. АН БССР. 1987. Т. 31 (12). С. 1089.
10. Baryshevsky V. G., Feranchuk I. D. Parametric beam instability of relativistic charged particles in a crystal // Phys. Lett. A. 1984. Vol. 102 (3). P. 141–144.
11. Барышевский В. Г. Поверхностное параметрическое излучение релятивистских частиц // Докл. АН СССР. 1988. Т. 299. С. 1363.
12. Gamma-ray Measurements of a Soviet Cruise-Missile Warhead / S. Fetter [et al.] // Science. 1990. Vol. 248. P. 828–834.
13. Приборы для радиоэкологического мониторинга. Минск, 1996.
14. Inorganic Scintillators for detector Systems / P. Lecoq [et al.]. Berlin ; Heidelberg, 2006.
15. Electrodynamics of carbon nanotubes: Dynamic conductivity, impedance boundary conditions and surface wave propagation / G. Ya. Slepian [et al.] // Phys. Rev. B. 1999. Vol. 60. P. 17136–17149.
16. Maksimenko S. A., Slepian G. Ya. Nanoelectromagnetics of low-dimensional structures // The Handbook of Nanotechnology: Nanometer Structures, Theory, Modeling, and Simulation / ed. A. Lakhtakia. Bellingham, 2004. P. 145–206.
17. Maffucci A., Maksimenko S. A. Fundamental and Applied Nano-Electromagnetics // NATO Science for Peace and Security Series B: Physics and Biophysics. Dordrecht, 2016.
18. Fedotova J. A. FeCoZr – Al₂O₃ granular nanocomposite films with tailored structural, electric, magnetotransport and magnetic properties // Advances in Nanoscale Magnetism : proc. of the Int. Conf. on Nanoscale Magnetism ICNM-2007 (Istanbul, Turkey, 25–29 June 2007). [Germany], 2008. P. 231–367.
19. Maksimenko A., Fedotova J., Marszalek M. Magnetic characteristics of CoPd and FePd antidot arrays on nanoporous Al₂O₃ templates // J. Magn. Magn. Mater. 2016. Vol. 400. P. 200–205.
20. Tikhomirov V. V., Tselkov Yu. A. How particle collisions increase the rate of accretion from the cosmological background onto primordial black holes in braneworld cosmology // Phys. Rev. D. 2005. Vol. 72. 121301(R).
21. Shalyt-Margolin A. Gravity at All the Energy Levels. Contours of a Future Building. Saarbrücken, 2014.
22. Cherkas S. L., Kalashnikov V. L. Determination of the UV cut-off from the observed value of the Universe acceleration // J. Cosm. Astropart. Phys. 2007. Vol. 01. P. 028.
23. Institutional Development of Applied Nanoelectromagnetics: Belarus in ERA Widening, EU project BY-NanoERA, ID 266529, Call ID FP7-INCO-2010-6, 2010–2013. URL: http://cordis.europa.eu/project/rcn/96756_en.html (date of access: 11.10.2016).
24. Graphene-based revolutions in ICT and beyond, project FP7-ICT, ID 604391 Graphene, Call ID FP7-ICT-2013-FET-F, 2013–2016. URL: http://cordis.europa.eu/project/rcn/109691_en.html (date of access: 11.10.2016).
25. Tikhomirov V. V. Multiple Volume Reflection from Different Planes Inside One Bent Crystal // Phys. Lett. B. 2007. Vol. 655, issue 5/6. P. 217–222.
26. First observation of multiple volume reflection by different planes in one bent silicon crystal for high-energy protons / W. Scandale [et al.] // Phys. Lett. B. 2009. Vol. 682, issue 3. P. 274–277.
27. Observation of multiple volume reflection by different planes in one bent silicon crystal for high-energy negative particles / W. Scandale [et al.] // Europhys. Lett. 2011. Vol. 93, № 5. P. 56002.
28. Guidi V., Bandiera L., Tikhomirov V. V. Radiation generated by single and multiple volume reflection of ultrarelativistic electrons and positrons in bent crystals // Phys. Rev. A. 2012. Vol. 86, issue 4. P. 042903.
29. Broad and Intense Radiation Accompanying Multiple Volume Reflection of Ultrarelativistic Electrons in a Bent Crystal / L. Bandiera [et al.] // Phys. Rev. Lett. 2013. Vol. 111, issue 25. P. 255502.
30. Tikhomirov V. V. Simulation of Multi-GeV electron energy losses in crystals // Nucl. Instrum. Meth. B. 1989. Vol. 36, issue 3. P. 282–285.
31. Steering of a sub-GeV electron beam through planar channeling enhanced by rechanneling / A. Mazzolari [et al.] // Phys. Rev. Lett. 2014. Vol. 112, № 13. Article ID 135503.
32. Measurement of three-jet production cross-sections in *pp* collisions at 7 TeV centre-of-mass energy using the ATLAS detector / G. Aad [et al.] // Eur. Phys. J. C. 2015. Vol. 75. P. 228.
33. Measurement of the differential and double-differential Drell – Yan cross section in *pp* collisions at $\sqrt{s} = 7$ TeV / S. Chatrchyan [et al.] // JHEP. 2013. Vol. 12. P. 030.

34. Radiative corrections beyond the ultra relativistic limit in unpolarized ep elastic and Moller scatterings for the PRad Experiment at Jefferson Laboratory / I. Akushevich [et al.] // Eur. Phys. J. A. 2015. Vol. 51, issue 1. P. 1.
35. Baryshevsky V. G. Growth of nuclear spin precession frequency of antiprotons (negative hyperons) under deceleration in matter with polarized nuclei // Phys. Lett. B. 2012. Vol. 711, issue 5. P. 394–397.
36. Shalyt-Margolin A. E. Probable Entropic Nature of Gravity in Ultraviolet and Infrared Limits. Part I. An Ultraviolet Case // Advances in High Energy Physics. 2013. Vol. 2013. Article ID 384084.
37. Experimental evidence of localized plasmon resonance in composite materials containing single-wall carbon nanotubes / M. V. Shuba [et al.] // Phys. Rev. B. 2012. Vol. 85, issue 16. Article ID 165435.
38. Flexible transparent graphene/polymer multilayers for efficient electromagnetic field absorption / K. Batrakov [et al.] // Sci. Rep. 2014. Vol. 4. P. 7191.
39. Enhanced microwave-to-terahertz absorption in Graphene / K. Batrakov [et al.] // Appl. Phys. Lett. 2016. Vol. 108, issue 12. P. 123101.
40. New crystals for dual-readout calorimetry / N. Akchurin [et al.] // Nucl. Instrum. Meth. A. 2009. Vol. 604, issue 3. P. 512–526.
41. Experimental Study of an Axial Vircator With Resonant Cavity / V. Baryshevsky [et al.] // IEEE Trans. Plasma Sci. 2015. Vol. 43, issue 10. P. 3507–3511.
42. Response of LYSO:Ce scintillation crystals to low energy gamma-rays / K. G. Afanaciev [et al.] // Phys. Part. Nucl. Lett. 2015. Vol. 12, issue 2. P. 319–324.
43. Improvement of radiation hardness of the sampling calorimeters based on plastic scintillators / S. V. Afanasiev [et al.] // Nucl. Instrum. Meth. A. 2013. Vol. 717. P. 11–13.
44. Growth-induced non-planar magnetic anisotropy in FeCoZr – CaF₂ nanogranular films: structural and magnetic characterization / J. V. Kasiuk [et al.] // J. Appl. Phys. 2014. Vol. 116, issue 4. P. 044301.
45. Oxidation controlled phase composition of FeCo(Zr) nanoparticles in CaF₂ matrix / J. V. Kasiuk [et al.] // Mater. Character. 2016. Vol. 113. P. 71–81.
46. Measuring of ultrahigh unloaded Q factor using excitation of a superconducting cavity by the electron beam / N. S. Azaryan [et al.] // Phys. Part. Nucl. Lett. 2013. Vol. 10, issue 7. P. 788–794.
47. Direct Determination of Volatile Compounds in Spirit Drinks by Gas Chromatography / S. V. Charapitsa [et al.] // J. Agric. Food Chem. 2013. Vol. 61, issue 12. P. 2950–2956.
48. Новый метод определения количества примесей в алкогольной продукции методом газовой хроматографии / С. В. Черепица [и др.] // Виноделие и виноградарство. 2015. № 2. С. 12–16.

REFERENCES

1. Baryshevskii V. G. Yadernaya optika polarizovannykh sred. 2nd ed. Minsk, 1995 (in Russ.).
2. Baryshevsky V. G. High-Energy Nuclear Optics of Polarized Particles. Singapore, 2012.
3. Baryshevskii V. G., Podgoretskii M. I. Yavlenie yadernoi pretsessii neitronov. Gosudarstvennyi reestr otkrytii SSSR. No. 224 s prioritom ot 3 aprelya 1964 g. (in Russ.).
4. Baryshevskii V. G., Lobashev V. M., Lyuboshits V. L., et al. Yavlenie vrashcheniya ploskosti polarizatsii zhestkikh gamma-kvantov. Gosudarstvennyi reestr otkrytii SSSR. No. 360 s prioritom ot 12 fevralya 1965 g. v chasti teoreticheskogo obosnovaniya i ot 28 iyulya 1971 g. v chasti eksperimental'nogo dokazatel'stva yavleniya (in Russ.).
5. Baryshevskii V. G. O rasseyanii sveta potokom elektronov, prokhodyashchikh cherez kristall. Dokl. AN BSSR. 1971. Vol. 15 (4). P. 306–308 (in Russ.).
6. Baryshevskii V. G., Feranchuk I. D. O perekhodnom izluchenii gamma-kvantov v kristalle. Zhurnal Eksperimental'noi i Teoreticheskoi Fiz. 1971. Vol. 61, No. 3 (9). P. 944 (in Russ.).
7. Baryshevskii V. G., Dubovskaya I. Ya. Coherent Radiation of the Channelling Positron (Electron). Phys. Stat. Sol. B. 1997. Vol. 82. P. 403–412.
8. Adishchev Yu. N., Baryshevskii V. G., Vorob'ev S. A., et al. Eksperimental'noe obnaruzhenie parametricheskogo rentgenovskogo izlucheniya. Pis'ma v Zhurnal Eksperimental'noi i Teoreticheskoi Fiz. 1985. Vol. 41. P. 259 (in Russ.).
9. Baryshevskii V. G. Neustoiichivost' voln v periodicheskoi srede. Dokl. AN BSSR. 1987. Vol. 31 (12). P. 1089 (in Russ.).
10. Baryshevsky V. G., Feranchuk I. D. Parametric beam instability of relativistic charged particles in a crystal. Phys. Lett. A. 1984. Vol. 102 (3). P. 141–144.
11. Baryshevskii V. G. Poverkhnostnoe parametricheskoe izluchenie relyativistskikh chastits. Dokl. AN SSSR. 1988. Vol. 299. P. 1363 (in Russ.).
12. Fetter S., Cochran T. B., Grodzins L., et al. Gamma-ray Measurements of a Soviet Cruise-Missile Warhead. Science. 1990. Vol. 248. P. 828–834.
13. Pribory dlya radioekologicheskogo monitoringa. Minsk, 1996 (in Russ.).
14. Lecoq P., Annenkov A., Gektin A., et al. Inorganic Scintillators for detector Systems. Berlin ; Heidelberg, 2006.
15. Slepian G. Ya., Maksimenko S. A., Lakhtakia A., et al. Electrodynamics of carbon nanotubes: Dynamic conductivity, impedance boundary conditions and surface wave propagation. Phys. Rev. B. 1999. Vol. 60. P. 17136–17149. DOI: 10.1103/PhysRevB.60.17136.
16. Maksimenko S. A., Slepian G. Ya. Nanoelectromagnetics of low-dimensional structures. The Handbook of Nanotechnology: Nanometer Structures, Theory, Modeling, and Simulation. Ed. A. Lakhtakia. Bellingham, 2004. P. 145–206. DOI: 10.1117/3.537698.ch5.
17. Maffucci A., Maksimenko S. A. Fundamental and Applied Nano-Electromagnetics. NATO Science for Peace and Security Series B: Physics and Biophysics. Dordrecht, 2016. DOI: 10.1007/978-94-017-7478-9.
18. Fedotova J. A. FeCoZr – Al₂O₃ granular nanocomposite films with tailored structural, electric, magnetotransport and magnetic properties. Advances in Nanoscale Magnetism : proc. of the Int. Conf. on Nanoscale Magnetism ICNM-2007 (Istanbul, Turkey, 25–29 June 2007). [Germany], 2008. P. 231–367.
19. Maximenko A., Fedotova J., Marszalek M. Magnetic characteristics of CoPd and FePd antidot arrays on nanoporous Al₂O₃ templates. J. Magn. Magn. Mater. 2016. Vol. 400. P. 200–205.
20. Tikhomirov V. V., Tselkov Yu. A. How particle collisions increase the rate of accretion from the cosmological background onto primordial black holes in braneworld cosmology. Phys. Rev. D. 2005. Vol. 72. 121301(R). DOI: 10.1103/PhysRevD.72.121301.

21. Shalyt-Margolin A. Gravity at All the Energy Levels. Contours of a Future Building. Saarbrücken, 2014.
22. Cherkas S. L., Kalashnikov V. L. Determination of the UV cut-off from the observed value of the Universe acceleration. *J. Cosm. Astropart. Phys.* 2007. Vol. 01. P. 028. DOI: 10.1088/1475-7516/2007/01/028.
23. Institutional Development of Applied Nanoelectromagnetics: Belarus in ERA Widening, EU project BY-NanoERA, ID 266529, Call ID FP7-INCO-2010-6, 2010–2013. URL: http://cordis.europa.eu/project/rcn/96756_en.html (date of access: 11.10.2016).
24. Graphene-based revolutions in ICT and beyond, project FP7-ICT, ID 604391 Graphene, Call ID FP7-ICT-2013-FET-F, 2013–2016. URL: http://cordis.europa.eu/project/rcn/109691_en.html (date of access: 11.10.2016).
25. Tikhomirov V. V. Multiple Volume Reflection from Different Planes Inside One Bent Crystal. *Phys. Lett. B.* 2007. Vol. 655, issue 5/6. P. 217–222.
26. Scandale W., Vomiero A., Bagli E., et al. First observation of multiple volume reflection by different planes in one bent silicon crystal for high-energy protons. *Phys. Lett. B.* 2009. Vol. 682, issue 3. P. 274–277.
27. Scandale W., Vomiero A., Bagli E., et al. Observation of multiple volume reflection by different planes in one bent silicon crystal for high-energy negative particles. *Europhys. Lett.* 2011. Vol. 93, No. 5. P. 56002.
28. Guidi V., Bandiera L., Tikhomirov V. V. Radiation generated by single and multiple volume reflection of ultrarelativistic electrons and positrons in bent crystals. *Phys. Rev. A.* 2012. Vol. 86, issue 4. P. 042903.
29. Bandiera L., Bagli E., Guidi V., et al. Broad and Intense Radiation Accompanying Multiple Volume Reflection of Ultrarelativistic Electrons in a Bent Crystal. *Phys. Rev. Lett.* 2013. Vol. 111, issue 25. P. 255502.
30. Tikhomirov V. V. Simulation of Multi-GeV electron energy losses in crystals. *Nucl. Instrum. Meth. B.* 1989. Vol. 36, issue 3. P. 282–285.
31. Mazzolari A., Bagli E., Bandiera L., et al. Steering of a sub-GeV electron beam through planar channeling enhanced by rechanneling. *Phys. Rev. Lett.* 2014. Vol. 112, No. 13. Article ID 135503. DOI: 10.1103/PhysRevLett.112.135503.
32. Aad G., Abbott B., Abdallah J., et al. Measurement of three-jet production cross-sections in pp collisions at 7 TeV centre-of-mass energy using the ATLAS detector. *Eur. Phys. J. C.* 2015. Vol. 75. P. 228. DOI: 10.1140/epjc/s10052-015-3363-3.
33. Chatrchyan S., Khachatryan V., Sirunyan A. M., et al. Measurement of the differential and double-differential Drell – Yan cross section in pp collisions at $\sqrt{s} = 7$ TeV. *JHEP.* 2013. Vol. 12. P. 030. DOI: 10.1007/JHEP12(2013)030.
34. Akushevich I., Gao H., Ilyichev A., et al. Radiative corrections beyond the ultra relativistic limit in unpolarized ep elastic and Moller scatterings for the PRad Experiment at Jefferson Laboratory. *Eur. Phys. J. A.* 2015. Vol. 51, issue 1. P. 1. DOI: 10.1140/epja/i2015-15001-8.
35. Baryshevsky V. G. Growth of nuclear spin precession frequency of antiprotons (negative hyperons) under deceleration in matter with polarized nuclei. *Phys. Lett. B.* 2012. Vol. 711, issue 5. P. 394–397. DOI: 10.1016/j.physletb.2012.04.031.
36. Shalyt-Margolin A. E. Probable Entropic Nature of Gravity in Ultraviolet and Infrared Limits. Part I. An Ultraviolet Case. *Advances in High Energy Physics.* 2013. Vol. 2013. Article ID 384084. DOI: 10.1155/2013/384084.
37. Shuba M. V., Paddubskaya A. G., Kuzhir P. P., et al. Experimental evidence of localized plasmon resonance in composite materials containing single-wall carbon nanotubes. *Phys. Rev. B.* 2012. Vol. 85, issue 16. Article ID 165435. DOI: 10.1103/PhysRevB.85.165435.
38. Batrakov K., Kuzhir P., Maksimenko S., et al. Flexible transparent graphene/polymer multilayers for efficient electromagnetic field absorption. *Sci. Rep.* 2014. Vol. 4. P. 7191.
39. Batrakov K., Kuzhir P., Maksimenko S., et al. Enhanced microwave-to-terahertz absorption in Graphene. *Appl. Phys. Lett.* 2016. Vol. 108, issue 12. P. 123101. DOI: 10.1063/1.4944531.
40. Akchurin N., Bedeschi F., Cardini A., et al. New crystals for dual-readout calorimetry. *Nucl. Instrum. Meth. A.* 2009. Vol. 604, issue 3. P. 512–526. DOI: 10.1016/j.nima.2009.03.101.
41. Baryshevsky V., Gurinovich A., Gurnevich E., et al. Experimental Study of an Axial Vircator With Resonant Cavity. *IEEE Trans. Plasma Sci.* 2015. Vol. 43, issue 10. P. 3507–3511. DOI: 10.1109/TPS.2015.2439332.
42. Afanaciev K. G., Avrtikov A. M., Baranov V. Yu., et al. Response of LYSO:Ce scintillation crystals to low energy gamma-rays. *Phys. Part. Nucl. Lett.* 2015. Vol. 12, issue 2. P. 319–324. DOI: 10.1134/S1547477115020028.
43. Afanasiev S. V., De Barbaro P., Golutvin I. A., et al. Improvement of radiation hardness of the sampling calorimeters based on plastic scintillators. *Nucl. Instrum. Meth. A.* 2013. Vol. 717. P. 11–13. DOI: 10.1016/j.nima.2013.03.051.
44. Kasiuk J. V., Fedotova J., Przewoznik J., et al. Growth-induced non-planar magnetic anisotropy in FeCoZr – CaF₂ nanogranular films: structural and magnetic characterization. *J. Appl. Phys.* 2014. Vol. 116, issue 4. P. 044301. DOI: 10.1063/1.4891016.
45. Kasiuk J. V., Fedotova J., Przewoznik J., et al. Oxidation controlled phase composition of FeCo(Zr) nanoparticles in CaF₂ matrix. *Mater. Character.* 2016. Vol. 113. P. 71–81. DOI: 10.1016/j.matchar.2016.01.010.
46. Azaryan N. S., Baturitsky M. A., Budagov Yu. A., et al. Measuring of ultrahigh unloaded Q factor using excitation of a superconducting cavity by the electron beam. *Phys. Part. Nucl. Lett.* 2013. Vol. 10, issue 7. P. 788–794. DOI: 10.1134/S1547477114010063.
47. Charapitsa S. V., Kavalenka A. N., Kulevich N. V., et al. Direct Determination of Volatile Compounds in Spirit Drinks by Gas Chromatography. *J. Agric. Food Chem.* 2013. Vol. 61, issue 12. P. 2950–2956. DOI: 10.1021/jf3044956.
48. Cherepitsa S. V., Sytova S. N., Zakharov M. A., et al. New Method of Determining the Amount of Impurities in Alcohol Products by Gas Chromatography. *Vinodelie i vinogradarstvo.* 2015. No. 2. P. 12–16 (in Russ.).

Статья поступила в редколлегию 31.10.2016.
Received by editorial board 31.10.2016.

УДК 517.956.3

К 55-ЛЕТИЮ КАФЕДРЫ ВЫСШЕЙ МАТЕМАТИКИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ ФИЗИЧЕСКОГО ФАКУЛЬТЕТА БГУ

В. Н. РУСАК¹⁾, Н. Г. АБРАШИНА-ЖАДАЕВА¹⁾

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

Приведены основные достижения кафедры высшей математики и математической физики Белорусского государственного университета за 55 лет ее существования. Представлены главные вехи в развитии кафедры – от создания в 1961 г. как общеобразовательной, обеспечивающей чтение лекционных курсов и проведение практических занятий по всем разделам высшей математики на физическом факультете и факультете радиофизики и компьютерных технологий, до становления в качестве одной из ведущих кафедр физического факультета. Указаны приоритеты кафедры в настоящее время, которые во многом связаны с переходом на четырехлетнее образование и невысоким уровнем подготовки абитуриентов, поступающих на физический факультет. Отмечено, что помимо научно-исследовательской деятельности работа кафедры нацелена на поиск новых подходов к преподаванию математики и, как следствие, – на подготовку новых методических разработок и ряда учебных пособий по изучаемым дисциплинам, поиск новых форм организации учебного процесса, проведения экзаменов и зачетов, стимулирования самостоятельной работы студентов.

Ключевые слова: кафедра высшей математики и математической физики; научно-исследовательская работа; учебно-методическая работа; учебные пособия; организация учебного процесса.

55th ANNIVERSARY OF THE DEPARTMENT OF HIGHER MATHEMATICS AND MATHEMATICAL PHYSICS OF THE PHYSICS FACULTY OF BSU

V. N. RUSAK^a, N. G. ABRASHINA-ZHADAIEVA^a

^aBelarusian State University, Nezavisimosti avenue, 4, 220030, Minsk, Republic of Belarus

Corresponding author: zhadaeva@bsu.by

In this paper the attention is given to the main achievements of the department of higher mathematics and mathematical physics of the physics faculty in BSU for a period of 55 years of its existence. The main stages of the development of the department of higher mathematics and mathematical physics are listed below, beginning from the year 1961, when the department was founded as the department of general education for students of all specializations at the physics and the radio-physics and computer technologies faculties, providing numerous lecture courses and practical exercises

Образец цитирования:

Русак В. Н., Абрашина-Жадаева Н. Г. К 55-летию кафедры высшей математики и математической физики физического факультета БГУ // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2017. № 1. С. 14–20.

For citation:

Rusak V. N., Abrashina-Zhadaeva N. G. 55th anniversary of the department of higher mathematics and mathematical physics of the physics faculty of BSU. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2017. No. 1. P. 14–20 (in Russ.).

Авторы:

Валентин Николаевич Русак – доктор физико-математических наук, профессор; профессор кафедры высшей математики и математической физики физического факультета.
Наталья Григорьевна Абрашина-Жадаева – доктор физико-математических наук Российской Федерации, доцент; заведующий кафедрой высшей математики и математической физики физического факультета.

Authors:

Valentin Rusak, doctor of science (physics and mathematics), full professor; professor at the department of higher mathematics and mathematical physics, faculty of physics.
rusak@bsu.by
Natalia Abrashina-Zhadaeva, doctor of science (physics and mathematics) of the Russian Federation, docent; head of the department of higher mathematics and mathematical physics, faculty of physics.
zhadaeva@bsu.by

in all sections of higher mathematics, and finishing with the becoming one of the leading departments of these faculties. The priority of the department is specified: it is largely associated with the transition to a 4-year education and conditioned with an average educational level of the entrants to the faculty of physics. It is also stated, that in addition to the research work, the department focuses on the development of the new approaches of teaching mathematics and, as a consequence, on the preparation of new teaching materials, series of training manuals on studied disciplines, on the search for new forms of organization of educational process, examinations and tests, organization and promotion of the independent work of students.

Key words: the department of higher mathematics and mathematical physics; scientific research; educational and methodological work; teaching aids; organization of educational process.

Кафедра высшей математики и математической физики создана в БГУ в сентябре 1961 г. для обеспечения учебного процесса по математическим дисциплинам на физическом факультете.

Организатором и первым заведующим кафедрой (1961–1968) был доктор физико-математических наук, профессор А. Х. Турецкий. В состав сотрудников кафедры вошли опытные преподаватели математического факультета – профессор А. В. Иванов, доценты Н. И. Бриш, И. А. Соколов, М. С. Гарашук, старший преподаватель Е. А. Мурашко. Профессор А. Х. Турецкий был блестящим педагогом и организатором учебно-методической работы. Его лекции по конструктивной теории функций, отличавшиеся глубиной содержания в сочетании с ясностью и доступностью изложения, всегда собирали широкую аудиторию, их посещали многие студенты-математики других специализаций. А. Х. Турецкий руководил научным семинаром, который имел широкую известность и привлекал внимание сотрудников других вузов и научных учреждений г. Минска. Написанные им учебные пособия по теории интерполирования, имеющие гриф Министерства высшего и среднего специального образования БССР, и сегодня являются для учеников и последователей профессора источником новых постановок аппроксимационных задач.

Благодаря А. Х. Турецкому в Беларуси в XX в. начались и развивались исследования по теории аппроксимации. Творческая деятельность А. Х. Турецкого начиная с 1944 г. связана с Белорусским государственным университетом, здесь им создана научная школа по теории приближения функций. В 1958 г. он защитил докторскую диссертацию и после заведования кафедрой высшей математики и математической физики с 1968 по 1973 г. возглавлял кафедру теории функций и функционального анализа.

Научные интересы профессора А. Х. Турецкого связаны с проблемами суммирования тригонометрических рядов Фурье, экстремальными задачами теории интерполирования и приближенного интегрирования. Широкую известность и признание специалистов получили опубликованные им статьи по классам насыщения методов суммирования тригонометрических рядов [1; 2]. В данных работах получены результаты, наиболее значимые из которых приводим ниже.

Пусть $C_{2\pi}$ – пространство непрерывных 2π -периодических функций. Всякой функции $f(x) \in C_{2\pi}$ ставим в соответствие ряд

$$F(x, \xi, f) = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} \gamma_k(\xi) (a_k \cos kx + b_k \sin kx), \quad (1)$$

где $\{a_k, b_k\}$ – коэффициенты фурье-функции $f(x)$; $(\gamma_k(\xi))$ – последовательность функций, заданных на некотором множестве изменения параметра ξ с точкой сгущения ω . Ряд (1) предполагается равномерно сходящимся относительно x по крайней мере для значений ξ из окрестности ω . Тем самым задается метод суммирования γ , или множество операторов суммирования, действующих из $C_{2\pi}$ в $C_{2\pi}$

$$F : f(x) \rightarrow F(x, \xi, f). \quad (2)$$

Пусть существует положительная функция $\varphi_\gamma(\xi)$, монотонно сходящаяся к нулю при $\xi \rightarrow \omega$, и такая, что для любой $f(x) \in C_{2\pi}$, отличной от тригонометрического полинома порядка v ,

$$\|f(x) - F(x, \xi, f)\| > a \varphi_\gamma(\xi),$$

и существуют отличные от тригонометрических полиномов порядка v функции $f(x) \in C_{2\pi}$, для которых

$$\|f(x) - F(x, \xi, f)\| < b \varphi_\gamma(\xi),$$

где a и b – константы, зависящие от f . Тогда говорят, что метод суммирования γ является насыщенным порядка v с приближением насыщения порядка $O(\varphi_\gamma(\xi))$. Классом насыщения порядка v , относящимся к методу γ , называют множество функций из $C_{2\pi}$, отличных от тригонометрических полиномов порядка v , для которых

$$\|f(x) - F(x, \xi, f)\| = O(\varphi_\gamma(\xi)). \quad (3)$$

Теорема Турецкого. Если для метода суммирования γ , заданного последовательностью $(\gamma_k(\xi))$, существует положительная функция $\varphi_\gamma(\xi)$, монотонно сходящаяся к нулю при $\xi \rightarrow \omega$, а также натуральное число p и константы $d_0 \neq 0, d_1, \dots, d_p$ такие, что для всякого фиксированного $k \in \mathbb{N}$

$$\lim_{\xi \rightarrow \omega} \frac{1 - \gamma_k(\xi)}{\varphi_\gamma(\xi)} = d_0 k^p + \dots + d_p, \quad (4)$$

то метод суммирования γ является насыщенным с приближением насыщения порядка $O(\varphi_\gamma(\xi))$. Из соотношения (3) следует, что при четном p функция $f(x)$ имеет производную порядка $p-1$, удовлетворяющую условию Липшица порядка единицы

$$f^{(p-1)}(x) \in \text{Lip}1, \quad (5)$$

а при нечетном p этим свойством обладает тригонометрически сопряженная функция $\tilde{f}(x)$, т. е.

$$\tilde{f}^{(p-1)}(x) \in \text{Lip}1. \quad (6)$$

Если кроме условия (4) нормы операторов, определяемых соотношениями (1)–(2), равномерно ограничены, то класс насыщения для метода суммирования γ есть множество дифференцируемых функций, удовлетворяющих условиям (5) или (6) в зависимости от четности числа p .

В результате исследований А. Х. Турецкого по приближенному интегрированию были построены квадратурные формулы наивысшего тригонометрического порядка точности, найдены наилучшие квадратурные формулы в классах $W^r L_p[a, b]$.

Под руководством профессора А. Х. Турецкого подготовили и защитили кандидатские диссертации А. К. Покало (1958), В. Н. Русак (1963), М. Б. Аксень (1966), О. А. Чупригин (1966), Н. Н. Владелец (1971), Н. Я. Козловский (1972), И. И. Корзун (1972).

Позже кафедрой высшей математики и математической физики заведовали профессоры Ю. С. Богданов (1968–1973), А. С. Феденко (1973–1976), В. Н. Русак (1976–2002).

В 1968–1976 гг. научно-методическая деятельность сотрудников кафедры была направлена на улучшение методики преподавания математики и методическое обеспечение новых курсов. Профессором Ю. С. Богдановым изданы книги «Лекции по математическому анализу» (Минск, 1974, ч. 1; 1977, ч. 2), «Лекции по дифференциальным уравнениям» (Минск, 1977). Профессором А. С. Феденко совместно с Р. И. Тышкевич опубликовано учебное пособие «Линейная алгебра и аналитическая геометрия» (Минск, 1976).

С 1976 по 2002 г. обязанности заведующего кафедрой исполнял профессор В. Н. Русак. Будучи учеником А. Х. Турецкого, В. Н. Русак возглавил белорусскую научную школу по теории аппроксимации. Рациональная аппроксимация и ее приложения стали основным направлением научных исследований сотрудников и аспирантов кафедры высшей математики и математической физики. В терминах мажорирующих функций, зависящих от полюсов, были доказаны экстремальные неравенства для производных рациональных функций на $\mathbb{R}$ в различных метриках, порядковые неравенства для производных рациональных функций, ограниченных на замкнутых множествах с односвязным дополнением. Разработаны способы построения положительных на $\mathbb{R}$ интегральных операторов с рациональными ядрами, соответствующих любой заданной системе параметров с положительными мнимыми частями, найдены локальные порядковые оценки их уклонений от аппроксимируемых функций. Была решена проблема построения интегрального рационального оператора, осуществляющего для любой функции из пространства $C(\mathbb{R})$ наилучшее рациональное приближение с фиксированными полюсами. Вышла в свет монография В. Н. Русака «Рациональные функции как аппарат приближения» (Минск, 1979).

Указанные выше интегральные операторы и их модификации были применены в рациональной аппроксимации со свободными полюсами, и удалось выделить новые классы аналитических и периодических функций, для которых рациональная аппроксимация дает существенный выигрыш по сравнению

с полиномиальной. Такими классами оказались дифференцируемые в смысле Вейля функции с производной ограниченной вариации $W_{2\pi}^r V$, сопряженные классы $\widetilde{W_{2\pi}^r V}$ и классы аналитических функций $B_r H_1$, причем для классов $W_{2\pi}^r V$ и $\widetilde{W_{2\pi}^r V}$ были определены точные порядковые оценки наилучших рациональных приближений, а найденные оценки для наилучших рациональных приближений на классах $B_r H_1$ отличались от точных на логарифмический множитель [3; 4].

В 1988 г. В. Н. Русак в Институте математики АН Украины защитил докторскую диссертацию на тему «Рациональные функции как аппарат приближения».

Под руководством профессора В. Н. Русака подготовили и защитили кандидатские диссертации Е. А. Ровба (1975), А. А. Пекарский (1980), А. П. Старовойтов (1984), Л. Л. Берёзкина (1988), Та Хонг Куанг (1991), Н. К. Агафонова (Филиппова) (1997), А. С. Ляликов (2003), И. В. Рыбаченко (2005), Н. В. Гриб (2014).

А. А. Пекарский в работе [5] на основе других аппроксимационных соображений нашел точный порядок для наилучших рациональных приближений на классах $B_r H_1$. Им были получены также оптимальные оценки для наилучших рациональных приближений выпуклых функций, абсолютно непрерывных функций с производной из пространства Орлича, найдены точные по порядку оценки для высших производных рациональных функций и установлены соотношения между наилучшими рациональными и кусочно-полиномиальными приближениями в интегральной метрике. В терминах классов Бесова и специальных теорем вложения доказаны прямые и обратные теоремы о скорости рациональных приближений [6; 7].

В 1991 г. А. А. Пекарский защитил докторскую диссертацию в Московском государственном университете имени М. В. Ломоносова на тему «Прямые и обратные теоремы рациональной аппроксимации».

Многие результаты, полученные А. А. Пекарским и В. Н. Русаком, включены в англоязычные монографии:

- Petrushev P. P., Popov V. A. Rational approximation of real functions. Cambridge, 1987.
- Lorentz G. G., Golitscher M., Makovoz Y. I. Constructive approximation. Berlin, 1996.

В исследованиях Е. А. Ровбы разработаны способы построения интерполяционных и сумматорных рациональных операторов в $C(\mathbb{R})$, решена проблема нахождения интерполяционного рационального оператора, осуществляющего приближения порядка наилучшего рационального приближения с фиксированными полюсами [8; 9]. Получены оценки уклонений рациональных операторов Фурье для аналитических функций, представимых интегралом Коши – Стильтеса. Доказано, что при специальном выборе полюсов рациональные операторы типа Валле – Пуссена, действующие в $C(\mathbb{R})$, осуществляют наилучшее по порядку приближение в классе функций, имеющих дробную производную ограниченной вариации на конечном отрезке. Найдены новые подходы к построению квадратурных формул, точных на рациональных функциях. В 1999 г. в БГУ Е. А. Ровба защитил докторскую диссертацию на тему «Интерполяция и ряды Фурье в рациональной аппроксимации».

Длительное время на кафедре высшей математики и математической физики плодотворно работал доцент М. А. Шешко. В 1992 г. в Вычислительном центре Российской академии наук (РАН) он защитил докторскую диссертацию на тему «Приближенное решение сингулярных интегральных уравнений с помощью вычетов» по специальностям «Вычислительная математика» и «Математическая физика».

А. П. Старовойтовым доказано существование функции $f(x) \in C_{2\pi}$ с произвольно заданной строго убывающей к нулю последовательностью наилучших рациональных приближений, решена задача Долженко о плотности индексов, для которых совпадают наилучшие полиномиальные и рациональные приближения [10]. Установлены точные порядки наилучших рациональных приближений на классах функций, представимых в виде свертки ядра Римана – Лиувилля и функции из L_p , в равномерной и интегральной нормах. Определены новые подходы к нахождению асимптотики уклонений рациональных операторов Паде для аналитических функций с правильно убывающими тейлоровскими коэффициентами [11]. В 2003 г. в БГУ А. П. Старовойтов защитил докторскую диссертацию на тему «Рациональная аппроксимация и классы функций».

В 2002 г. в Математическом институте имени В. А. Стеклова РАН защитил докторскую диссертацию на тему «Крамеровские асимптотики в системах с медленными и перемешивающими быстрыми движениями» В. И. Бахтин.

Среди важных достижений в научно-методической деятельности кафедры следует назвать получившие широкую известность в Республике Беларусь учебные пособия по математическому анализу и дифференциальным уравнениям профессора Ю. С. Богданова, аналитической геометрии

и линейной алгебре профессора А. С. Феденко и двухтомник под редакцией профессора В. Н. Русака «Курс вышэйшай матэматыкі» (Минск, 1994, ч. 1; 1997, ч. 2, в соавторстве) с грифом Министерства образования Республики Беларусь.

С 2002 г. и по настоящее время кафедрой заведует Н. Г. Абрашина-Жадаева. Являясь ученицей научной школы академика А. А. Самарского и профессора В. Н. Абрашина по численным методам задач математической физики, она продолжила развитие научного направления этой школы. Приоритеты исследований Н. Г. Абрашиной-Жадаевой начиная с 1980 г. во многом связаны с разработкой и изучением экономичных методов для нестационарных и стационарных многомерных дифференциальных уравнений целых и дробных порядков. В этот период при сотрудничестве с отделом «Численные методы математической физики» Института математики НАН Беларуси, руководимым профессором В. Н. Абрашиным, можно отметить следующие результаты работы кафедры высшей математики и математической физики: построен и обоснован новый класс многокомпонентных методов типа переменных направлений, сохраняющих свойство аппроксимации для каждого разностного уравнения в алгоритме с последовательной и параллельной вычислительными реализациями их для линейных и нелинейных дифференциальных уравнений второго порядка параболического и гиперболического типов; доказаны теоремы о безусловной устойчивости многокомпонентных векторных алгоритмов без ограничений на количество операторов аддитивного расщепления и требования их коммутативности; предложены и обоснованы многокомпонентные итерационные методы с последовательной и параллельной реализациями вычислительных алгоритмов для решения эллиптических уравнений и систем, в том числе и со смешанными производными, доказаны теоремы их сходимости для задач произвольной размерности без обычного в этих случаях требования перестановочности операторов расщепления, получены априорные оценки их сходимости с зависимостью лишь от нижней границы спектра оператора расщепления. На основе развитых многокомпонентных аддитивных методов расщепления полной аппроксимации для решения многомерных задач математической физики изучены алгоритмы метода декомпозиции и расщепления по физическим процессам. А позже получила развитие идея приближенной факторизации на класс 2D дифференциальных уравнений в частных производных дробных порядков по пространству и времени.

В последние годы основные направления научных исследований сотрудников кафедры связаны с решением прикладных задач в различных отраслях народного хозяйства, в частности в области создания и использования математических моделей динамических биосистем. Этой проблемой занимаются Н. Г. Абрашина-Жадаева, В. Н. Русак, И. А. Тимошенко, И. В. Рыбаченко, В. В. Кашевский. В их работах, например, предложена обобщенная модель электродиффузионного процесса, учитывающая аномальную диффузию, где в дифференциальной системе уравнений присутствует дробный оператор Герасимова – Капуто и/или Римана – Лиувилля. Проведено численное моделирование временной эволюции частиц в электродиффузионной системе, изучены возникающие диффузионные процессы, на основе вычислительных экспериментов показано влияние порядков дробной производной на распределение концентраций электролитов. Экспериментально подтверждено поведение решения, которое типично для дробной диффузии: на начальных этапах процесс идет быстрее, чем при обычной диффузии, а затем замедляется тем больше, чем меньше значение порядка дробной производной. Верификация предложенных алгоритмов подтвердила, что распределения концентраций частиц могут быть достаточно точно описаны с использованием уравнений аномальной диффузии [13; 14].

В 2008 г. в Казанском (Приволжском) федеральном университете Н. Г. Абрашина-Жадаева защитила докторскую диссертацию на тему «Многокомпонентные векторные схемы расщепления в методах математической физики» [12].

Отметим, что начало XXI в. стало очередным этапом развития кафедры. Во-первых, усилилась материально-техническая база кафедры, во-вторых, увеличился ее численный состав и, соответственно, существенно расширилась тематика научных исследований: теория аппроксимаций (И. В. Рыбаченко, Н. К. Филиппова), уравнения с частными производными дробного порядка (Н. С. Романова, И. А. Тимошенко), вычислительная математика (А. А. Егоров), краевые задачи (В. В. Кашевский, А. П. Шилин, Т. А. Чехменок и др.). Различными приложениями математических методов наряду с Н. Г. Абрашиной-Жадаевой занимаются старшие преподаватели И. А. Тимошенко, Т. А. Чехменок, М. А. Глецевич, Е. Н. Голубева, Л. Г. Крылова, доценты А. А. Егоров, В. В. Кашевский, И. В. Рыбаченко, А. П. Шилин. В эти же годы начинаются активные исследования в области численного моделирования аномальной диффузии на основе дифференциальных уравнений дробных порядков (Н. Г. Абрашина-Жадаева, В. Н. Русак, Н. С. Романова, И. А. Тимошенко и др.).

В связи со строительством атомной станции в Республике Беларусь возросла необходимость в технических кадрах, которая обусловила создание на физическом факультете новых специальностей.

Это требует от кафедры расширения методического обеспечения с учетом профиля специальностей, поэтому ее сотрудники активизируют учебно-методическую деятельность, которая направлена на совершенствование методики преподавания курсов высшей математики.

Неизменным интересом у студентов пользуются пособия и курсы лекций по аналитической геометрии и линейной алгебре Л. Л. Берёзкиной, математическому анализу В. В. Кашевского, О. А. Чупригина, дифференциальным уравнениям А. П. Ширина, основам векторного и тензорного анализа Н. Г. Абрашиной-Жадаевой, И. А. Тимощенко, методам математической физики В. Н. Русака, А. А. Егорова, И. В. Рыбаченко, Н. К. Филипповой, а также подготовленные коллективом авторов сборники задач по курсам «Аналитическая геометрия», «Математический анализ».

Сотрудники кафедры проделали большую работу по обеспечению преемственности преподавания школьной и вузовской математики, в частности подготовлены и изданы статьи в «Энциклопедии для школьников и студентов», которая популярна и среди педагогов учреждений высшего образования нашей страны. В 2013–2015 гг. сотрудниками кафедры изданы три части учебного пособия «Высшая математика. Сборник задач» (под редакцией Н. Г. Абрашиной-Жадаевой, В. Н. Русака; Минск, 2013, ч. 1; 2014, ч. 2; 2015, ч. 3), объединяющие все изучаемые математические дисциплины, что отвечает духу современной математики.

Для студентов сотрудниками кафедры (В. К. Ахраменко, Н. И. Ильинкова, О. А. Кононова и др.) подготовлены методические пособия и указания по всем разделам изучаемых дисциплин.

Серьезное внимание уделяется поиску новых форм организации учебного процесса, проведения экзаменов и зачетов, стимулирования самостоятельной работы студентов в течение семестра. Например, начиная с 1960-х гг. доцентом О. А. Чупригиным внедрено в практику проведение на физическом факультете письменных экзаменов по математическому анализу, им же начато использование тестирования как действенной формы контроля знаний. Результатом многолетней работы в этом направлении явилось создание О. А. Чупригиным уникального сборника тестов по математическому анализу. Значительный объем тестовых заданий дает возможность объективно оценить степень усвоения изучаемого материала каждым студентом по любой пройденной теме, позволяет проверить, насколько испытуемый овладел основами теории, постиг ли взаимосвязь ее частей, легко ли сможет применять усвоенные истины в простейших случаях. Весьма существенно, что разработанная методика использования тестов не является обременительной по временным затратам преподавателя, а это особенно важно при наличии большого количества испытуемых.

Кафедрой высшей математики и математической физики проделана работа по возможно более полной обеспеченности библиотеки БГУ изданиями по изучаемым темам. Кроме того, на основе разработанных учебных пособий созданы объемные образовательные ресурсы в электронном виде: электронные учебно-методические комплексы по математическому анализу (В. В. Кашевский); аналитической геометрии и линейной алгебре (Н. Г. Абрашина-Жадаева, Л. Л. Берёзкина, М. А. Глецевич, А. А. Егоров); ряд тестов с возможностью дистанционного опроса по курсу «Аналитическая геометрия и линейная алгебра» (Л. Л. Берёзкина); курсы лекций по математическому анализу (И. А. Тимощенко); аналитической геометрии и линейной алгебре с использованием мультимедийных устройств (Л. Л. Берёзкина); электронный лабораторный практикум по отдельным темам математического анализа с применением пакета «Математика» (Л. Г. Крылова). Созданный И. А. Тимощенко сопровождающий онлайн-ресурс по дисциплине «Основы векторного и тензорного анализа» вошел в число призеров конкурса образовательных онлайн-ресурсов БГУ 2016 г.

На кафедре есть достойная смена старшему поколению. Молодые сотрудники – Е. Н. Голубева, М. А. Глецевич, Л. Г. Крылова, И. А. Тимощенко – свои научные исследования оформляют в кандидатские диссертации. Система математического образования, сложившаяся на физическом факультете, имеет все предпосылки для сохранения своих достоинств и преодоления недостатков. Сотрудники кафедры высшей математики и математической физики делают все возможное для повышения уровня математической подготовки студентов на физическом факультете и факультете радиофизики и компьютерных технологий, чтобы обеспечить Республику Беларусь квалифицированными специалистами для наукоемкого и высокотехнологичного производства.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

1. Турецкий А. Х. О классах насыщения в пространстве C // Изв. АН СССР. Сер. матем. 1961. Т. 25, № 3. С. 411–442.
2. Турецкий А. Х. О классах насыщения для некоторых методов суммирования рядов Фурье непрерывных периодических функций // УМН. 1960. Т. 15, № 6. С. 149–156.
3. Русак В. Н. Точные порядки наилучших рациональных приближений на классах функций, представимых в виде свертки // Докл. АН СССР. 1984. Т. 279, № 2. С. 810–812.

4. Русак В. Н. Точные порядковые оценки для наилучших рациональных приближений на классах функций, представимых в виде свертки // Матем. сб. 1985. Т. 128, № 4. С. 492–515.
5. Пекарский А. А. Классы аналитических функций, определяемые наилучшими рациональными приближениями в H_p // Матем. сб. 1985. Т. 127, № 1. С. 3–20.
6. Пекарский А. А. Рациональные приближения абсолютно непрерывных функций с производной из пространства Орлица // Матем. сб. 1982. Т. 117, № 1. С. 114–130.
7. Пекарский А. А. Неравенства типа Бернштейна для производных рациональных функций и обратные теоремы рациональной аппроксимации // Матем. сб. 1984. Т. 124, № 4. С. 571–586.
8. Ровба Е. А. Интерполяционные рациональные операторы типа Фейера и Валле – Пуассена // Матем. заметки. 1993. Т. 53, № 2. С. 114–121.
9. Ровба Е. А. Сумматорные рациональные операторы типа Джексона // Матем. заметки. 1997. Т. 61, № 2. С. 270–277.
10. Старовойтов А. П. К проблеме описания последовательностей наилучших тригонометрических рациональных приближений // Матем. сб. 2000. Т. 191, № 6. С. 145–154.
11. Старовойтов А. П., Русак В. Н. Аппроксимации Паде для целых функций с регулярно убывающими коэффициентами Тейлора // Матем. сб. 2002. Т. 193, № 9. С. 63–92.
12. Многокомпонентные векторные схемы расщепления в методах математической физики : автореф. дис. ... д-ра физ.-матем. наук : 01.01.07 / Н. Г. Абрашина-Жадаева. Казань, 2008.
13. Абрашина-Жадаева Н. Г., Тимошенко И. А. Конечно-разностные методы для уравнения диффузии с производными дробных порядков в многомерной области // Дифференц. уравнения. 2013. Т. 49, № 7. С. 819–825.
14. Создание и использование математических моделей динамических биосистем : подпрограммы «Междисциплинарные естественно-научные исследования как база развития технологий будущего» («Современное естествознание и технологии будущего») государственной программы научных исследований «Конвергенция (междисциплинарные научные исследования, новые зарождающиеся технологии как основа устойчивого инновационного развития)» // Отчет о научно-исследовательской работе (заключительный). Режим доступа: <http://elib.bsu.by/handle/123456789/157491> (дата обращения: 03.10.2016).

REFERENCES

1. Turetzki A. H. Saturation classes in a space C . *Izv. Akad. Nauk SSSR. Ser. Mat.* 1961. Vol. 25, No. 3. P. 411–442 (in Russ.).
2. Turetzki A. H. Saturation classes for certain summation methods of Fourier series of continuous periodic functions. *Usp. Mat. Nauk.* 1960. Vol. 15, No. 6. P. 149–156 (in Russ.).
3. Rusak V. N. Tochnye poryadki nailuchshikh ratsional'nykh priblizhenii na klassakh funktsii, predstavimyykh v vide svertki. *Dokl. Akad. Nauk SSSR.* 1984. Vol. 279, No. 2. P. 810–812 (in Russ.).
4. Rusak V. N. Sharp order estimates for best rational approximations in classes of functions representable as convolutions. *Mat. Sb.* 1985. Vol. 128, No. 4. P. 492–515 (in Russ.).
5. Pekarskii A. A. Classes of analytic functions determined by best rational approximations in H_p . *Mat. Sb.* 1985. Vol. 127, No. 1. P. 3–20 (in Russ.).
6. Pekarskii A. A. Rational approximations of absolutely continuous functions with derivative in an Orlicz space. *Mat. Sb.* 1982. Vol. 117, No. 1. P. 114–130 (in Russ.).
7. Pekarskii A. A. Inequalities of Bernstein type for derivatives of rational functions, and inverse theorems of rational approximation. *Mat. Sb.* 1984. Vol. 124, No. 4. P. 571–586 (in Russ.).
8. Rovba E. A. Interpolation rational operators of Fejér and de la Vallée – Poussin type. *Mat. Zametki.* 1993. Vol. 53, No. 2. P. 114–121 (in Russ.).
9. Rovba E. A. Summation rational operators of the Jackson type. *Mat. Zametki.* 1997. Vol. 61, No. 2. P. 270–277 (in Russ.).
10. Starovoitov A. P. On the problem of the description of sequences of best rational trigonometric approximations. *Mat. Sb.* 2000. Vol. 191, No. 6. P. 145–154 (in Russ.).
11. Starovoitov A. P., Rusak V. N. Padé approximants for entire functions with regularly decreasing Taylor coefficients. *Mat. Sb.* 2002. Vol. 193, No. 9. P. 63–92 (in Russ.).
12. Многокомпонентные векторные схемы расщепления в методах математической физики : автореф. дис. ... доктора физ.-матем. наук : 01.01.07 / Н. Г. Абрашина-Жадаева. Казань, 2008 (in Russ.).
13. Abrashina-Zhadaeva N. G., Timoshchenko I. A. Konechno-raznostnye metody dlya uravneniya diffuzii s proizvodnymi drobnnykh poryadkov v mnogomernoi oblasti. *Differentsial'nye uravn.* 2013. Vol. 49, No. 7. P. 819–825 (in Russ.).
14. Sozdanie i ispol'zovanie matematicheskikh modelei dinamicheskikh biosistem : podprogrammy «Mezhdistsiplinarnye estestvenno-nauchnye issledovaniya kak baza razvitiya tekhnologii budushchego» («Sovremennoe estestvoznaniye i tekhnologii budushchego») gosudarstvennoi programmy nauchnykh issledovaniy «Konvergentsiya (mezhdistsiplinarnye nauchnye issledovaniya, novye zarozhdayushchiesya tekhnologii kak osnova ustoychivogo innovatsionnogo razvitiya)». Otchet o nauchno-issledovatel'skoi rabote (zaklyuchitel'nyi). URL: <http://elib.bsu.by/handle/123456789/157491> (date of access: 03.10.2016) (in Russ.).

Статья поступила в редколлегию 31.10.2016.
Received by editorial board 31.10.2016.

УДК 543.42+541.14:546.791.1

ФОТОХИМИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ В РАСТВОРАХ ПЕРХЛОРАТА УРАНИЛА В АЦЕТОНЕ С УЧАСТИЕМ АТМОСФЕРНОГО КИСЛОРОДА

А. И. КОМЯК¹⁾, Н. П. ВИЛЕЙШИКОВА¹⁾, Е. Н. КОМЯК²⁾, А. П. ЗАЖОГИН¹⁾

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

²⁾Минский государственный колледж электроники, ул. Казинца, 91, 220108, г. Минск, Республика Беларусь

Методами электронного и ИК-поглощения исследованы процессы фотохимического образования нанокластеров комплексов четырех- и пентавалентного урана с органическими лигандами при облучении растворов $\text{UO}_2(\text{ClO}_4) \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ с различным соотношением $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$ и урана при светодиодном облучении (430–450 нм) систем с доступом и без доступа кислорода воздуха. Установлено, что в системах $\text{UO}_2(\text{ClO}_4)_2 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ в ацетоне с добавлением нитрата кальция в ацетоне при облучении их в герметичных кюветах происходит фотополимеризация ацетона, а катализатором процесса являются возбужденные комплексы уранила. В реакциях такого типа возбужденные светом ионы уранила окисляют одну часть органической молекулы, а затем снова окисляются другой ее частью до U(VI). Таким образом, ионы уранила выступают как катализаторы дисмутации, активируемой светом. Реакции обоих типов могут проходить в отсутствие кислорода. В спектрах тех же образцов растворов, облученных в кюветах с доступом кислорода воздуха, наблюдается появление полос, принадлежащих комплексам четырех- и пентавалентного урана, т. е. в присутствии кислорода становится возможной реакция третьего типа – сенсibilizированное автоокисление органического восстановителя и сопутствующее восстановление U(VI) до U(V) и U(IV).

Ключевые слова: перхлорат уранила; ацетон; спектры электронного поглощения; спектры ИК-поглощения; фотохимические процессы; комплексы четырехвалентного урана; комплексы пентавалентного урана; нанокластеры.

Образец цитирования:

Комяк А. И., Вилейшикова Н. П., Комяк Е. Н., Зажогин А. П. Фотохимические процессы в растворах перхлората уранила в ацетоне с участием атмосферного кислорода // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2017. № 1. С. 21–27.

For citation:

Komyak A. I., Vilejshikova N. P., Komyak E. N., Zajogin A. P. Photochemical processes in solutions of uranyl perchlorate in acetone with participation of atmospheric oxygen. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2017. No. 1. P. 21–27 (in Russ.).

Авторы:

Анатолий Иванович Комяк – доктор физико-математических наук, профессор; профессор кафедры лазерной физики и спектроскопии физического факультета.

Наталья Павловна Вилейшикова – инженер кафедры лазерной физики и спектроскопии физического факультета.

Елена Николаевна Комяк – преподаватель.

Анатолий Павлович Зажогин – доктор физико-математических наук; профессор кафедры лазерной физики и спектроскопии физического факультета.

Authors:

Anatolij Komyak, doctor of science (physics and mathematics), full professor; professor at the department of laser physics and spectroscopy, faculty of physics.

Nataliya Vilejshikova, engineer at the department of laser physics and spectroscopy, faculty of physics.

vilejsh@bsu.by

Elena Komyak, lecturer.

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

zajogin_an@mail.ru

PHOTOCHEMICAL PROCESSES IN SOLUTIONS OF URANYL PERCHLORATE IN ACETONE WITH PARTICIPATION OF ATMOSPHERIC OXYGEN

A. I. KOMYAK^a, N. P. VILEJSHIKOVA^a, E. N. KOMYAK^b, A. P. ZAJOGIN^a

^aBelarusian State University, Nezavisimosti avenue, 4, 220030, Minsk, Republic of Belarus

^bMinsk State College of Electronics, Kazintsa street, 91, 220108, Minsk, Republic of Belarus

Corresponding author: zajogin_an@mail.ru

The photochemical formation processes of the nanoclusters of tetra- and pentavalent uranium with organic ligands have been studied by the methods of electron and IR absorption under light-emitting diode irradiation (430–450 nm) of $\text{UO}_2(\text{ClO}_4)_2 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ solutions having different proportions of $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$ and uranium in the presence and in the absence of oxygen. It has been found that in the systems $\text{UO}_2(\text{ClO}_4)_2 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ in acetone, with the addition of calcium nitrate in acetone, their irradiation in sealed cells leads to photopolymerization of acetone, the excited uranyl complexes being catalysts of the process. During such reactions the photoexcited ions of uranyl are oxidizing one part of the organic molecule and then are oxidized by its other part up to U(VI). In this way the uranyl ions are catalysts of the light activated dismutation reaction. The reactions of both types may take place in the absence of oxygen as well. Spectra of the same samples irradiated in the cells with the access of atmospheric oxygen reveal the bands attributed to the tetra- and pentavalent uranium complexes, i. e. in the presence of oxygen there is a possibility for the reaction of the third type – sensilized autooxidation of the organic reducing agent and the accompanying reduction of U(VI) up to U(V) and U(IV).

Key words: uranyl perchlorate; acetone; electron absorption spectra; IR absorption spectra; photochemical processes; tetravalent uranium complexes; pentavalent uranium complexes; nanoclusters.

Введение

Уран, как тяжелый радиоактивный элемент, широко используется в атомной энергетике. При работе атомных реакторов образуется достаточно большое количество радиоактивных отходов, которые подлежат переработке и утилизации. Основную часть составляют жидкие радиоактивные отходы низкого и среднего уровня активности, поэтому их необходимо переводить в твердое состояние, в котором легче утилизировать путем битумирования, остекловывания либо цементирования.

Одним из перспективных способов обезвреживания жидких радиоактивных отходов с органикой (ЖРОО) является их каталитическое окисление до твердых соединений [1; 2], которое отличается простотой, высокой производительностью и использованием сравнительно дешевого и компактного оборудования.

Из разнообразных радио- и физико-химических методов анализа радиоактивных отходов, широко применяемых на практике, наиболее распространенными являются рентгеноструктурный, флуоресцентный, спектрально-эмиссионный и абсорбционный. Оптические методы отличаются простотой и доступностью, обладая при этом высокой точностью и чувствительностью. Проведенные нами исследования подтвердили это на примере изучения процессов образования оксидов и комплексов урана переменной валентности [3–6]. Речь идет о кинетике фотохимических реакций с участием солей уранила в присутствии различных растворителей и фоновых примесей типа ионов металлов 1-й и 2-й групп Периодической системы элементов Д. И. Менделеева и неорганических анионов различных солей (нитраты, фосфаты, перхлораты и др.).

Для разработки экстракционной теории извлечения урана из руд и отработанного ядерного топлива необходимо исследование фотохимических процессов, происходящих в комплексных соединениях урана под воздействием световых потоков различной интенсивности.

Цель настоящей работы – изучение процессов фотополимеризации ацетона и фотохимического образования нанок комплексов урана переменной валентности при облучении чистых растворов $\text{UO}_2(\text{ClO}_4)_2 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ в ацетоне и с добавлением фонового электролита $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$ с доступом и без доступа кислорода воздуха при светодиодном облучении (430–450 нм) систем.

Выбор объектов и методы исследования

Препаратами для облучения ультрафиолетовой радиацией служили растворы солей перхлората уранила $\text{UO}_2(\text{ClO}_4)_2 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ в ацетоне. Внутренняя координационная сфера иона UO_2^{2+} менее прочно связана с ацидолигандами ClO_4^- и может замещаться другими молекулярными группами, в частности ацетоном $(\text{CH}_3)_2\text{CO}$, поэтому были выбраны растворы перхлоратных солей урана в ацетоне. В качестве фоновых добавок применялись нитратные соли кальция. Ионы NO_3^- также могут входить в координационную

сферу иона UO_2^{2+} . Последние использовались в основном для стабилизации нанок комплексов, образующихся в растворе ацетона. В качестве объектов исследования были взяты растворы уранилперхлората в ацетоне (УПХА) с добавлением нитрата кальция (2,5 мл УПХА в концентрации 0,45 моль/л + (500, 250 и 125 мкл) раствора $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$ (2,0 моль/л) в ацетоне).

Влияние кислорода воздуха и физико-химических свойств растворов на процессы фотохимического образования комплексов урана изучалось методами колебательной спектроскопии, в частности с помощью ИК-спектров поглощения, а также электронной спектроскопии.

Спектры электронного поглощения регистрировались в области 335–1000 нм с помощью автоматического спектрофотометра PV 1251 С (изготовитель – СП «Солар ТИИ», г. Минск, Беларусь), спектры ИК-поглощения фиксировались на фурье-спектрометре VERTEX 70.

Результаты исследований и их обсуждение

Для ионов урана различных степеней валентности в [7] приведена схема потенциалов окисления молярного раствора $\text{UO}_2(\text{ClO}_4)$ в воде при комнатной температуре. Ни один из уровней потенциала, соответствующих окислительно-восстановительному процессу, не расположен выше уровня кислорода. В связи с этим среди ионов урана нет сильных окислителей, которые могли бы разлагать воду с выделением кислорода. Самый высокий потенциал пары $\text{UO}_2^+/\text{U}^{4+}$ составляет +0,58 В, который в водном растворе не реализуется ввиду неустойчивости U^{5+} . Более устойчивой в водном растворе является пара $\text{UO}_2^{2+}/\text{U}^{4+}$, так как ее потенциал равен +0,32 В. Системы, имеющие более высокий окислительный потенциал, могут окислять $\text{U}(4+)$ до $\text{U}(6+)$.

Для сравнения приведем окислительный потенциал системы $\text{O}_2/\text{H}_2\text{O}$, равный 1,23 В. Естественно, что указанные соотношения справедливы только в растворе хлорной кислоты в воде концентрацией 1 моль/л, а в общем они будут зависеть от концентрации водородных ионов (рН) в системе. Низкий окислительный потенциал пары $\text{UO}_2^+/\text{U}^{4+}$ приводит к тому, что U^{4+} восстанавливается только под действием сильных восстановителей типа ионов водорода, металлов II группы Периодической системы элементов Д. И. Менделеева либо отдельных соединений сернистой кислоты, потенциалы которых имеют отрицательное значение.

Отсутствие заметных окислительных свойств у ионов уранила UO_2^{2+} приводит к тому, что они представляют собой наиболее устойчивую валентную форму $\text{U}(6+)$.

Если рассмотреть потенциалы двух пар ионов, $\text{UO}_2^+/\text{U}^{4+}$ и $\text{UO}_2^+/\text{UO}_2^{2+}$, то в первой паре ион UO_2^+ является окислителем, а во второй – восстановителем. При этом уровень потенциала пары $\text{UO}_2^+/\text{U}^{4+}$ значительно выше, чем у $\text{UO}_2^{2+}/\text{U}^{4+}$. Это означает, что пентавалентный уран способен окислять самого себя, если следовать схеме $\text{UO}_2^{2+}/\text{U}^{4+}$, где он ведет себя как восстановитель. Значит, ион UO_2^+ способен к самоокислению или самовосстановлению, т. е. диспропорционированию (дисмутации). Реакция диспропорционирования U^{5+} может быть выражена следующим уравнением:



Диспропорционирование U^{4+} невозможно, поскольку U^{4+} как окислитель на схеме уровней $\text{U}^{4+}/\text{U}^{3+}$ находится ниже, чем уран U^{4+} как восстановитель. При этом происходит не реакция диспропорционирования, а обратная ей реакция сопропорционирования:



Областью, наиболее устойчивой для иона U^{5+} , являются растворы с низким значением рН, равным 2,0–2,5. Однако, несмотря на свою термодинамическую неустойчивость, ионы U^{5+} могут играть важную роль в механизме протекания окислительно-восстановительных процессов в ионах U^{4+} и UO_2^{2+} .

Анализ спектров электронного поглощения основан на регистрации и изменении полос, наиболее существенных для иона уранила, и отдельных полос простых ионов U^{4+} и U^{5+} .

Характерные полосы в электронном спектре поглощения перхлората уранила в растворе ацетона (область 350–500 нм), а также участок спектра поглощения иона U^{4+} в комплексах хлорида четырехвалентного урана с диметилсульфоксидом (ДМСО) приведены на рис. 1. Здесь следует отметить характерные полосы в области 620–650 нм.

В области 890–910 нм расположены полосы, соответствующие $\text{U}(3+)$. По величине коэффициента поглощения в этих областях можно судить о присутствии указанных ионов в комплексных системах, в которых, как правило, реализуется наиболее устойчивая форма иона уранила UO_2^{2+} , где уран имеет валентность, равную шести.

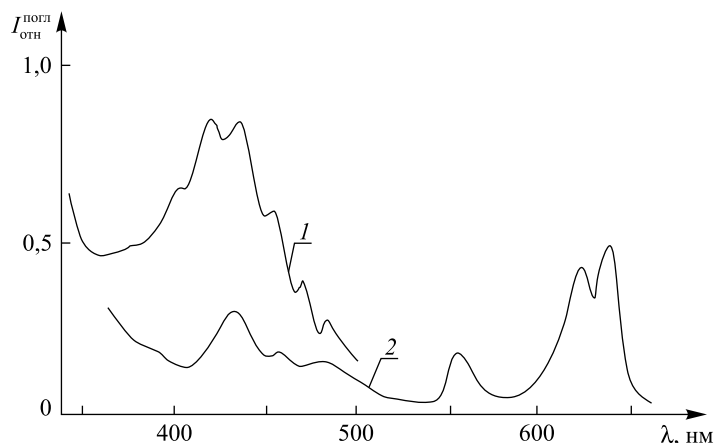


Рис. 1. Электронные спектры поглощения нанокластеров $\text{UO}_2(\text{ClO}_4)_2 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ (1) и $\text{UCl}_4 \cdot 2\text{DMSO}$ (2)
Fig. 1. Electron absorption spectra of $\text{UO}_2(\text{ClO}_4)_2 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ (1) and $\text{UCl}_4 \cdot 2\text{DMSO}$ (2) nanoclusters

Спектры ИК-поглощения растворов уранила перхлората (УПХ) с примесью $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$, которые получены при облучении смеси растворов без доступа воздуха, приведены на рис. 2. Заметные изменения в ИК-спектре происходят в областях $520\text{--}540\text{ см}^{-1}$ и $940\text{--}960\text{ см}^{-1}$. Первая область характерна для либрационных колебаний молекул воды, координированных к иону уранила, а вторая – для антисимметричных колебаний группы UO_2^{2+} . С уменьшением фоновой концентрации ионов NO_3^- происходят заметные изменения в колебаниях молекул воды, входящих в координационную сферу иона уранила.

С помощью флуоресцентных методов анализа в работе [8] показано, что в растворах карбоновых кислот, содержащих ионы уранила, даже при воздействии тепловой энергии 353 К наблюдается интенсивное образование гидроксильных радикалов, причем этот процесс имеет зависимость от концентрации, близкую к экспоненциальной. Таким образом, отмечены проокислительные свойства малых концентраций ионов уранила.

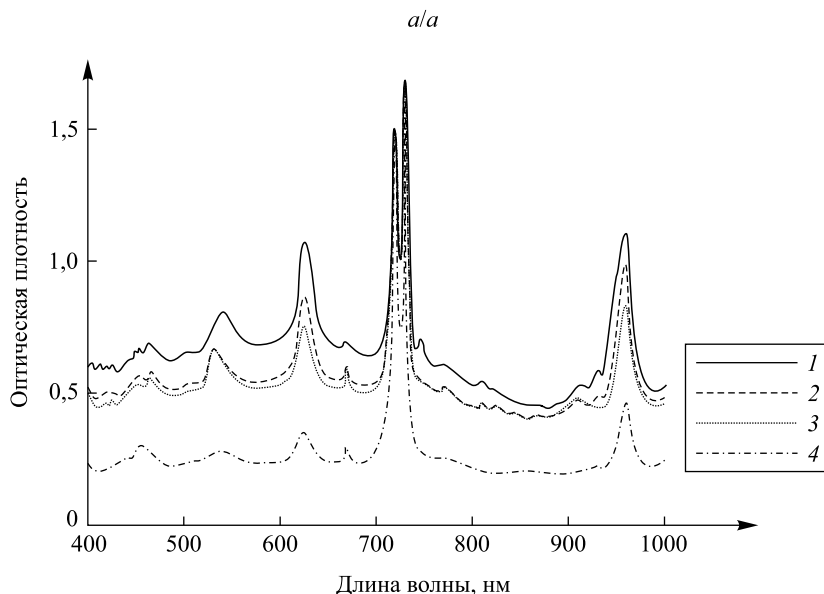


Рис. 2. Спектры ИК-поглощения образцов, облученных в герметичных кюветах (время облучения 90 мин):
а – спектр ИК-поглощения образцов УПХ с примесью $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$ (область $400\text{--}1000\text{ см}^{-1}$);
1 – 2,5 мл УПХ + 0,5 мл $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$; 2 – 2,5 мл УПХ + 0,25 мл $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$;
3 – 2,5 мл УПХ + 0,125 мл $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$; 4 – УПХ (окончание см. на с. 25)

Fig. 2. IR absorption spectra of the samples irradiated in the sealed cells (irradiation time 90 minutes):
а – IR absorption spectrum of the samples containing uranyl perchlorate with the addition of $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$
(in the region $400\text{--}1000\text{ см}^{-1}$); 1 – 2.5 ml of uranyl perchlorate + 0.5 ml of $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$;
2 – 2.5 ml of uranyl perchlorate + 0.25 ml of $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$;
3 – 2.5 ml of uranyl perchlorate + 0.125 ml of $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$;
4 – uranyl perchlorate (ending see on the p. 25)

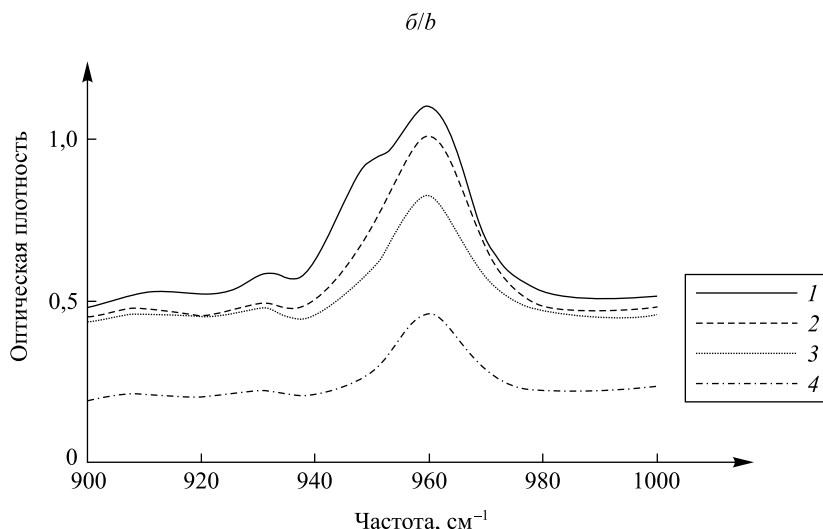


Рис. 2. Окончание (начало см. на с. 24):

δ – фрагмент спектра ИК-поглощения образцов в области антисимметричных колебаний группы UO_2^{2+} ;
1 – 2,5 мл УПХ + 0,5 мл $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$; 2 – 2,5 мл УПХ + 0,25 мл $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$; 3 – 2,5 мл УПХ + 0,125 мл $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$; 4 – УПХ

Fig. 2. Ending (beginning see on the p. 24):

b – fragment of an IR absorption spectrum for the samples in the region of antisymmetric vibrations of the group UO_2^{2+} ;
1 – 2.5 ml of uranyl perchlorate + 0.5 ml of $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$; 2 – 2.5 ml of uranyl perchlorate + 0.25 ml of $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$;
3 – 2.5 ml of uranyl perchlorate + 0.125 ml of $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$; 4 – uranyl perchlorate

В ИК-спектре полоса 540 см^{-1} сдвигается в длинноволновую сторону, свидетельствуя об уменьшении силы связи молекул воды со своим окружением. Это говорит о том, что при увеличении фоновой концентрации нитрата кальция происходит процесс вытеснения молекул воды из координационной сферы иона уранила и замена их ионами NO_3^- . На это указывают изменения ИК-спектра и в области $940\text{--}960\text{ см}^{-1}$. При высокой концентрации соли $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$ (объем 0,5 мл), добавленной в раствор перхлората на широкой полосе 960 см^{-1} , в длинноволновой области появляется перегиб с максимумом 945 см^{-1} , который можно отнести к полосе поглощения ν_3 иона уранила в комплексе типа $\text{UO}_2(\text{NO}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$.

Таким образом, даже без доступа кислорода воздуха при облучении системы ультрафиолетовым светом происходят физико-химические изменения внутри координационной сферы иона уранила.

В спектрах электронного поглощения в видимой области положения полос иона уранила практически не претерпевают изменений, а в длинноволновой области появляются новые полосы. На рис. 3 представлены две группы полос, которые образуются в комплексной системе при облучении светом в присутствии кислорода воздуха и без него.

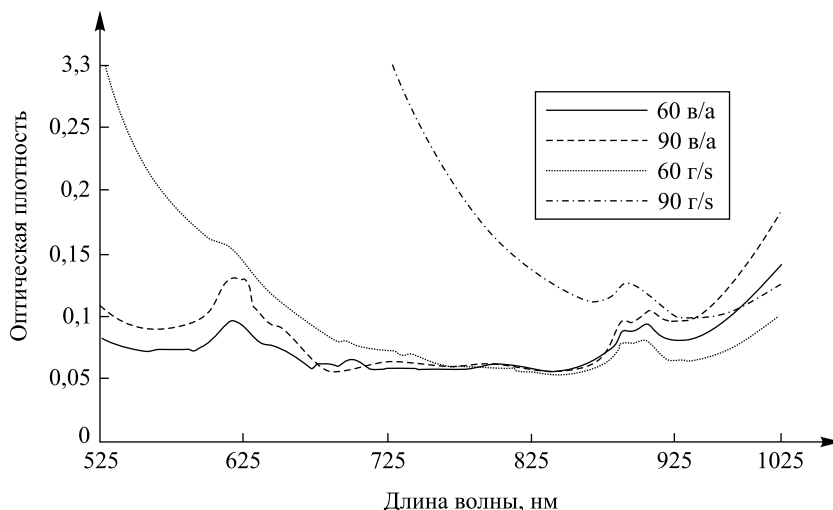


Рис. 3. Длинноволновые участки электронных спектров поглощения в растворах перхлората уранила в ацетоне.

На вставке – время облучения в минутах; в – в присутствии воздуха; г – герметичная кювета

Fig. 3. Long wavelength sections of electron absorption spectra in solutions of uranyl perchlorate in acetone.

The inset gives irradiation time in minutes (a – in the presence of air; s – in the sealed cell)

Процесс образования ионов $U(4+)$, как видно из рис. 3, идет довольно медленно в отсутствие атмосферы и заметно увеличивается в ее присутствии. Полосы области 890–920 нм практически не изменяют своей интенсивности, возрастая со временем облучения.

В ацетоновом растворе УПХ ион уранила окружен молекулами воды, и атом урана в возбужденном ионе уранила восстанавливается до пяти-, а затем и до четырехвалентного состояния. В растворе преимущественно идет процесс фотохимического преобразования уранила в четырехвалентный уран. Побутно образуются другие окислы (например, окись мезитила $C_6H_{10}O$), а затем более сложные продукты полимеризации ацетона, которые включают ионы $U(4+)$ и $U(5+)$.

Сравнение спектров свидетельствует о различии видов образующихся комплексов четырех- и пятивалентного урана и их координационного окружения. В системах с доступом кислорода воздуха при облучении появляются новые полосы с длинами волн 625–650 нм, принадлежащие комплексам четырех- и пятивалентного урана, а в области 890–920 нм обнаруживается поглощение комплексов трехвалентного урана. При этом в фотоокислении солей уранила участвуют не только температура [8] и свет, но и органические и неорганические молекулы и ионы. Возможны два главных механизма реакций [9] электронно-возбужденного иона уранила, обеспечивающих его реакционную способность. Электронно-возбужденный ион уранила UO_2^{2+} реагирует на изменения окружения либо вдоль линии связей «уран – кислород» с присоединением восстановителей (например, ионов H^+), либо в плоскости, перпендикулярной линии связей $U=O$, с участием атома урана и координируемых атомов лигандов.

Первые реакции протекают по межмолекулярному механизму – изменяется окружение кислородов иона UO_2^{2+} , а вторые – по внутримолекулярному механизму, перестраивается внутренняя координационная сфера иона уранила. Для первых реакций характерен переход атома водорода к кислороду иона, а во вторых реакциях происходит перенос электрона от лиганда к центральному атому урана, что приводит к понижению его валентности до $(5+)$. При этом по первому типу осуществляется реакция диспропорционирования урана $(5+)$, в которой возбужденный ион уранила выступает как восстановитель.

В системах $UO_2(ClO_4)_2 \cdot 5H_2O$ в ацетоне с добавлением нитрата кальция в ацетоне при облучении их в герметичных кюветах происходит фотополимеризация ацетона, а катализатором процесса являются возбужденные комплексы уранила. В реакциях такого типа возбужденные светом ионы уранила окисляют одну часть органической молекулы, а затем снова окисляются другой ее частью до $U(VI)$. Таким образом, ионы уранила выступают как катализаторы дисмутации, активируемой светом. Реакции обоих типов могут происходить в отсутствие кислорода. В спектрах тех же образцов растворов, облученных в кюветах с доступом кислорода воздуха, наблюдается появление полос, принадлежащих комплексам четырех- и пятивалентного урана, т. е. в присутствии кислорода становится возможной реакция третьего типа – сенсibilизированное автоокисление органического восстановителя и сопутствующее восстановление $U(VI)$ до $U(V)$ и $U(IV)$.

Заключение

В итоге отметим, что механизмы фотохимических реакций в солях уранила весьма разнообразны и процессы окисления и восстановления ионов урана происходят различными способами. Введение дополнительно к основному электролиту небольших количеств электролитов иной природы и воздуха, по-видимому, позволит влиять на изменение фотохимических свойств системы более тонким смещением равновесия в нужном направлении, что, в свою очередь, может отразиться на расширении возможностей утилизации ЖРОО. Фоновые добавки других солей способны влиять на положение полос в спектрах поглощения, что может быть учтено при спектрохимическом анализе радиоактивных отходов атомных реакторов.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

1. Бернадинер М. Н., Шурыгин А. П. Огневая переработка и обезвреживание промышленных отходов. М., 1990.
2. Карпенко В. И., Шушакова М. В., Ожерельев О. А. Технология каталитической переработки жидких радиоактивных органических отходов // Изв. Том. политехн. ун-та. 2005. Т. 308, № 3. С. 88–91.
3. Фотообразование и фотокаталитическая активность уранила в ацетоновых растворах / А. П. Зажогин [и др.] // Журн. прикл. спектроскопии. 2007. Т. 74, № 5. С. 565–568.
4. Спектры электронного поглощения и фотохимическая активность иона уранила в перхлоратных растворах в ацетоне с добавлением ДМСО и ДМФА при оптическом возбуждении / Д. С. Умрейко [и др.] // Вестн. БГУ. Сер. 1, Физика. Математика. Информатика. 2014. № 2. С. 3–7.
5. Умрейко Д. С., Вилейшикова Е. В., Комяк А. И. Исследование влияния физико-химических свойств растворов Mg, Na и K на процессы фотохимического образования комплексов урана с органическими лигандами // Вестн. БГУ. Сер. 1, Физика. Математика. Информатика. 2014. № 3. С. 7–14.

6. Определение фотохимической активности иона уранила в ацетоне при световом облучении в присутствии примесей катионов металла и анионов / Д. С. Умрейко [и др.] // Журн. прикл. спектроскопии. 2015. Т. 82, № 3. С. 781–783.
7. Жерин И. И., Амелина Г. Н. Химия, теория урана и плутония. Томск, 2010. С. 50–56.
8. Гармаш С. А. Образование активных форм кислорода при совместном действии низких концентраций ионов уранила и ряда физических факторов // Фундам. исслед. 2012. № 9, ч. 4. С. 961–954.
9. Бучаченко А. Л., Худяков И. В. Фотохимия уранила: спиновая селективность и магнитные эффекты // Успехи химии. 1991. Т. 60, № 6. С. 1105–1127.

REFERENCES

1. Bernadiner M. N., Shurygin A. P. Ognevaya pererabotka i obezvrezhivanie promyshlennykh otkhodov. Mosc., 1990 (in Russ.).
2. Karpenko V. I., Shushakova M. V., Ozherel'ev O. A. Tekhnologiya kataliticheskoi pererabotki zhidkikh radioaktivnykh organicheskikh otkhodov [Technology of catalytic processing of liquid radioactive organic wastes]. *Izv. Tomsk. politekhnicheskogo univ.* 2005. Vol. 308, No. 3. P. 88–91 (in Russ.).
3. Zajogin A. P., Zajogin A. A., Komyak A. I., et al. Fotoobrazovanie i fotokataliticheskaya aktivnost' uranila v atsetonovykh rastvorakh [The photoformation and photocatalytic activity of uranyl in acetone solutions]. *Zhurnal prikl. spektrosk.* 2007. Vol. 74, No. 5. P. 565–568 (in Russ.).
4. Umreiko D. S., Vilejshikova E. V., Komyak A. I., et al. Electronic absorption spectra and photochemical (catalytic) activity of uranyl ion in perchlorate solutions in acetone with the addition of DMSO and DMF under optical irradiation. *Vestnik BGU. Ser. 1, Fiz. Mat. Inform.* 2014. No. 2. P. 3–7 (in Russ.).
5. Umreiko D. S., Vilejshikova E. V., Komyak A. I. A study of the effects exerted by the physical and chemical properties of the solutions of Mg, Na, and K on the photochemical formation processes of uranium complexes with organic ligands. *Vestnik BGU. Ser. 1, Fiz. Mat. Inform.* 2014. No. 3. P. 7–14 (in Russ.).
6. Umreiko D. S., Vilejshikova E. V., Zajogin A. P., et al. Opredelenie fotokhimicheskoi aktivnosti iona uranila v atsetone pri svetovom obluchenii v prisutstvii primesei kationov metalla i anionov [Determination photochemical activity of uranyl ion in acetone under light illumination in the presence of the impurities of metal cations and anions]. *Zhurnal prikl. spektrosk.* 2015. Vol. 82, No. 3. P. 781–783 (in Russ.).
7. Zherin I. I., Amelina G. N. Khimiya, teoriya urana i plutoniya [Chemistry, theory of uranium and plutonium]. Tomsk, 2010. P. 50–56 (in Russ.).
8. Garmash S. A. The formed reactiv oxygen species under the combined action of uranyl ions and physical factors. *Fundamental'nye issled.* 2012. No. 9, part 4. P. 961–954 (in Russ.).
9. Buchachenko A. L., Khudyakov I. V. The photochemistry of uranyl: spin selectivity and magnetic effects. *Usp. Khim.* 1991. Vol. 60, No. 6. P. 1105–1127 (in Russ.).

Статья поступила в редакцию 22.08.2016.
Received by editorial board 22.08.2016.

РЕГИСТРАЦИЯ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ ЗОНДОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИМЕТИНОВЫХ КРАСИТЕЛЕЙ В ТКАНЯХ *in vivo*

Е. С. ВОРОПАЙ¹⁾, М. П. САМЦОВ²⁾, Л. С. ЛЯШЕНКО¹⁾

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

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

Отмечено, что высокий уровень рассеяния света и собственная люминесценция биологических тканей *in vivo* создают помехи для корректной регистрации флуоресцентных зондов в таких системах. Осуществлена оптимизация условий регистрации флуоресценции полиметиновых красителей в тканях *in vivo*. Установлено, что для уменьшения влияния собственного свечения биотканей при регистрации флуоресценции в спектральном диапазоне 710–900 нм *in vivo* следует использовать для возбуждения излучение лазерных источников с длиной волны более 676 нм. Показано, что для подавления в спектрометре на три порядка уровня рассеянного света от возбуждающего лазера с длиной волны λ , равной 682 нм, оптимальным является использование абсорбционного светофильтра марки СЗС-20, который не люминесцирует в исследованном спектральном диапазоне. Путем сканирования световодом поверхности опухолевого узла определено, что при наличии некроза тканей сигнал флуоресценции полиметинового красителя в этой области в 3–5 раз меньше по сравнению с остальными частями опухоли.

Ключевые слова: полиметиновые красители; регистрация флуоресценции; *in vivo*; фотоактивность.

RECORDING OF FLUORESCENCE FROM THE PROBES BASED ON POLYMETHINE DYES IN THE TISSUES *in vivo*

E. S. VOROPAY^a, M. P. SAMTSOV^b, L. S. LYASHENKO^a

^aBelarusian State University, Nezavisimosti avenue, 4, 220030, Minsk, Republic of Belarus

^bA. N. Sevchenko Institute of Applied Physical Problems of Belarusian State University,
Kurchatova street, 7, 220108, Minsk, Republic of Belarus

Corresponding author: lyashenko@bsu.by

A high level of light scattering and intrinsic luminescence of biological tissues *in vivo* interfere with correct recording of signals from fluorescent probes in such systems. This work presents the optimized conditions for recording of polymethine dye fluorescence in the tissues *in vivo*. It has been found that, to lower the effect of intrinsic luminescence

Образец цитирования:

Воропай Е. С., Самцов М. П., Ляшенко Л. С. Регистрация флуоресценции зондов на основе полиметиновых красителей в тканях *in vivo* // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2017. № 1. С. 28–33.

For citation:

Voropay E. S., Samtsov M. P., Lyashenko L. S. Recording of fluorescence from the probes based on polymethine dyes in the tissues *in vivo*. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2017. No. 1. P. 28–33 (in Russ.).

Авторы:

Евгений Семенович Воропай – доктор физико-математических наук, профессор; заведующий кафедрой лазерной физики и спектроскопии физического факультета.
Михаил Петрович Самцов – доктор физико-математических наук; заведующий лабораторией спектроскопии.
Людмила Сергеевна Ляшенко – кандидат физико-математических наук; доцент кафедры лазерной физики и спектроскопии физического факультета.

Authors:

Eugene Voropay, doctor of science (physics and mathematics), full professor; head of the department of laser physics and spectroscopy, faculty of physics.
voropay@bsu.by
Michael Samtsov, doctor of science (physics and mathematics); head of the laboratory of spectroscopy.
samtsov@bsu.by
Lyudmila Lyashenko, PhD (physics and mathematics); associate professor at the department of laser physics and spectroscopy, faculty of physics.
lyashenko@bsu.by

of biotissues when fluorescence is recorded *in vivo* over the spectral range 710–900 nm, the wavelength of laser sources used for excitation should be above 676 nm. It has been shown that the use of a C3C-20 absorption light filter revealing no luminescence over the spectral range under study is optimal to lower in a spectrometer a level of scattered light from the excitation laser ($\lambda = 682$ nm) by three orders. By scanning an optical fiber over the surface of the tumor node, it has been demonstrated that in the case of necrotic tissues the fluorescence signal of polymethine dye in this region is lower by a factor of 3–5 as compared to other parts of the tumor.

Key words: polymethine dyes; fluorescence recording; *in vivo*; photoactivity.

Органические соединения, поглощающие и испускающие световое излучение в ближнем инфракрасном диапазоне, в настоящее время все шире применяются в биологии и медицине в качестве флуоресцентных зондов различного назначения. Подобные соединения считаются наиболее перспективными для использования в качестве фотосенсибилизаторов в фотодинамической терапии. Весомым преимуществом фотодинамической терапии перед традиционными методами лечения онкологических заболеваний является целенаправленное воздействие непосредственно на опухолевую ткань.

Среди названных соединений существенный интерес представляют индотрикарбоцианиновые красители, имеющие полосу поглощения в окне прозрачности биотканей и обладающие высоким молярным коэффициентом поглощения в этой полосе [1; 2]. Для применения соединений этого класса в медико-биологических целях требуется проведение анализа их флуоресцентных свойств в биологических системах. При регистрации флуоресценции красителей в биотканях возникают проблемы с достоверностью полученных результатов, поэтому необходимо учитывать особенности оптических характеристик самих биотканей. Трудности с корректной регистрацией флуоресцентных характеристик обусловлены высоким уровнем рассеяния света в биотканях [3], наличием в них эндогенных биомолекул с достаточно интенсивным свечением [4], неравномерным распределением кровеносных сосудов, а также изменениями оптических свойств тканей от усилия, с которым конец световода прикладывается к исследуемому участку биоткани [5].

Цель настоящей работы – определение оптимальных условий, которые обеспечивают возможность корректной регистрации характеристик фотолюминесценции полиметиновых красителей (ПК) в тканях *in vivo* с помощью спектрометра с вводом излучения через световод.

Материалы и методика исследования

Объектами изучения выступали индотрикарбоцианиновые красители, разработанные в лаборатории спектроскопии научно-исследовательского учреждения «Институт прикладных физических проблем имени А. Н. Севченко» БГУ [6]. В качестве лабораторных животных использованы белые беспородные крысы с перевивными опухолями штамма «саркома М-1». Для установления локализации злокачественных новообразований, получения информации о фармакокинетике фотосенсибилизатора необходимо использовать спектрометрическую аппаратуру, которая позволяет регистрировать спектры флуоресценции за 1–2 с. В целях определения относительной интенсивности сигнала свечения и анализа формы спектров флуоресценции *in vivo* использовался разработанный спектрометрический комплекс [7]. Для регистрации спектров флуоресценции фотосенсибилизаторов *in vivo* для возбуждения использовалось несколько источников излучения: HeNe-лазер с $\lambda = 632,8$ нм, криптоновый лазер с длиной волны λ , равной 647 или 676 нм, а также полупроводниковый лазер с $\lambda = 682$ нм. Подвод возбуждающего излучения к исследуемому объекту и регистрация флуоресценции осуществлялись с помощью оптического волокна. Оптическая система состоит из излучателя-светоколлектора, малогабаритного полихроматора и блока фотоприемника. Излучатель-светоколлектор включает в себя систему сбора и подвода излучения на вход полихроматора. Система регистрации спектрометра организована на основе многоканального фотодетектора (3648-канальная ПЗС-линейка) на выходе малогабаритного полихроматора и интерфейсной платы пересылки экспериментальных данных в персональный компьютер. Обратная линейная дисперсия малогабаритного полихроматора составляет 22 нм/мм, спектральный диапазон – 400...950 нм. Дисперсионный элемент в полихроматоре – плоская дифракционная решетка с 600 штрихами на 1 мм и максимумом отражения при $\lambda = 750$ нм.

Результаты экспериментов и их обсуждение

Собственная люминесценция биологических тканей в спектральном диапазоне 700–900 нм искажает форму регистрируемого спектра флуоресценции полиметиновых красителей в биологических системах. Коэффициент поглощения эндогенных молекул, способных флуоресцировать, уменьшается при увеличении длины волны возбуждающего излучения [8], поэтому в случае возрастания длины его волны ожидаемо будет происходить понижение уровня их свечения. Приближение длины волны

возбуждающего излучения к максимуму поглощения ПК способствует росту интенсивности флуоресценции ПК, но уменьшение спектрального интервала между возбуждением и регистрируемой флуоресценцией приводит к увеличению в спектрометре уровня рассеянного света в информационном спектральном диапазоне. Для снижения влияния собственного свечения биотканей проведен поиск оптимальной длины волны возбуждения флуоресценции.

При использовании для возбуждения флуоресценции тканей крысы, которой не вводился фотосенсибилизатор (т. е. интактной), излучения с длиной волны 632,8 или 647,1 нм в спектральной области флуоресценции красителя регистрируется значительный сигнал автолюминесценции тканей мышц, опухоли, кожи и внутренних органов животного. Спектры флуоресценции при возбуждении излучением 632,8 нм представлены на рис. 1 (I – количество квантов света в единицу времени в единичном спектральном интервале, отн. ед.). Видно, что спектр флуоресценции ткани интактной крысы имеет ярко выраженный максимум при длине волны 705 нм. Излучение в данной области обусловлено наличием эндогенных порфиринов [8], молекулы которых достаточно эффективно возбуждаются излучением с длиной волны 632,8 нм. При малых концентрациях фотосенсибилизатора сигнал автолюминесценции тканей имеет примерно такой же уровень, как и флуоресценция красителя.

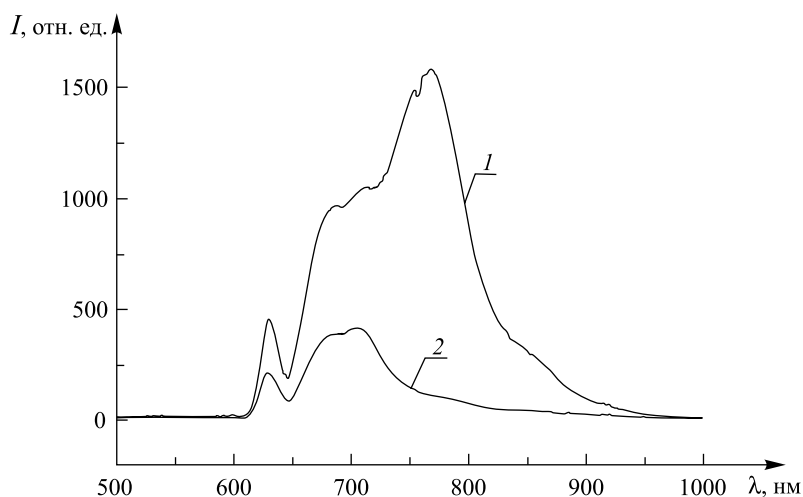


Рис. 1. Спектры флуоресценции ПК *in vivo* (1) и спектр флуоресценции тканей интактных крыс (2) при возбуждении $\lambda = 632,8$ нм

Fig. 1. Fluorescence spectra of PD *in vivo* (1) and a fluorescence spectrum of the intact rat tissues (2) for the excitation wavelength $\lambda = 632.8$ nm

Высокий уровень собственной люминесценции тканей при возбуждении данными источниками регистрируется от поверхности всех тканей внутренних органов крысы. При переходе к источникам излучения с λ , равной 676,4 или 682 нм, интенсивность свечения тканей интактной крысы резко уменьшается. Практически исчезает люминесценция опухоли, а спектр флуоресценции фотосенсибилизатора в опухоли приобретает характерную для ПК форму (рис. 2). Небольшой коротковолновый максимум с $\lambda = 682$ нм обусловлен проявлением в спектрах возбуждающего света лазерного источника.

Таким образом, чтобы уменьшить влияние собственного свечения биотканей при регистрации флуоресценции в спектральном диапазоне 710–900 нм *in vivo*, для возбуждения следует использовать излучение лазерных источников с длиной волны более 676 нм.

В целях снижения уровня рассеянного света на входе спектрометра необходимо устанавливать отсекающие светофильтры. При выборе фильтра важно, чтобы он не оказывал влияния на форму регистрируемого спектра флуоресценции, пропускал излучение в области флуоресценции ПК и подавлял уровень рассеянного света. Приемлемыми для этой цели в спектральной области 700–950 нм являются светофильтры КС-19 и СЗС-20. Поскольку большинство абсорбционных цветных светофильтров обладают фотолюминесценцией, данное свечение может накладываться на спектр регистрируемой флуоресценции. В связи с этим проведен анализ спектров фотолюминесценции использованных светофильтров с помощью спектрофлуориметра Spex Fluorolog. Полуширина полосы излучения полупроводникового лазера с $\lambda = 682$ нм составляет 1,5 нм и расположена в 30 нм от начала пропускания системы фильтров КС-19 и СЗС-20, дополнительных малоинтенсивных полос излучения лазера в области пропускания фильтров не обнаружено. В случае возбуждения фильтра КС-19 излучением лазера с $\lambda = 682$ нм регистрируется достаточно интенсивное свечение, при этом каких-либо полос фотолюминесценции фильтра СЗС-20 не проявляется. На рис. 3 представлены спектры пропускания (T – коэффициент пропускания) и нормированные спектры люминесценции фильтров КС-19 и СЗС-20.

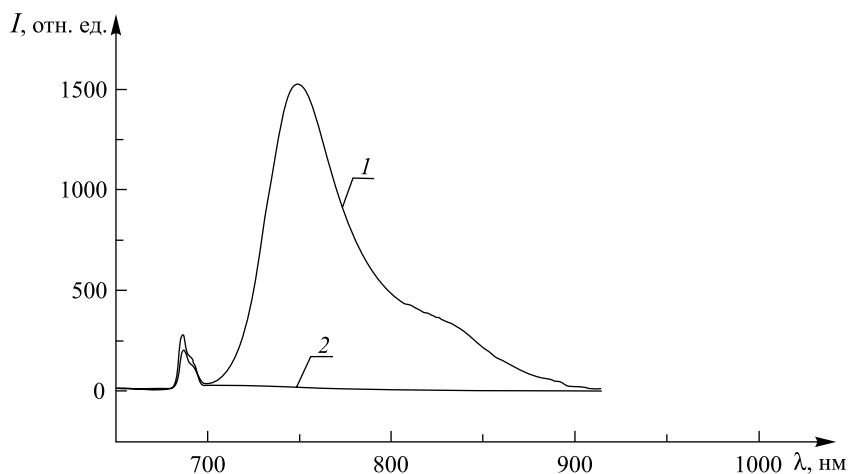


Рис. 2. Спектры флуоресценции ПК *in vivo* (1) и спектры испускания опухолевой ткани интактной крысы (2) при возбуждении $\lambda = 682$ нм

Fig. 2. Fluorescence spectra of PD *in vivo* (1) and emission spectra for tumor tissues of the intact rat (2) at $\lambda = 682$ nm

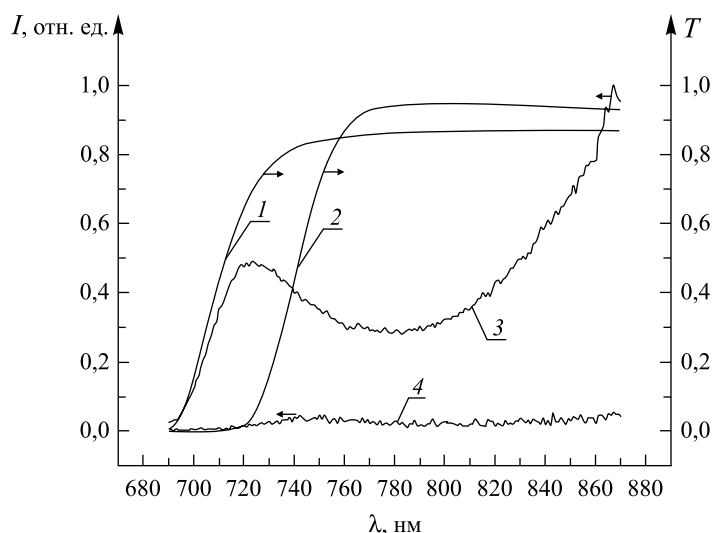


Рис. 3. Спектры пропускания фильтров КС-19 (1) и СЗС-20 (2), спектр фотолуминесценции фильтров КС-19 (3) и СЗС-20 (4)

Fig. 3. Transmission spectra of the filters KC-19 (1) and C3C-20 (2), photoluminescence spectra of the filters KC-19 (3) and C3C-20 (4) in random units

Следовательно, для ограничения уровня рассеянного возбуждающего света полупроводникового лазера с $\lambda = 682$ нм предпочтительнее использовать светофильтр марки СЗС-20.

При проведении сеансов фотодинамической терапии по анализу флуоресценции определяют одну из важнейших характеристик временной зависимости концентрации фотосенсибилизатора в тканях – фармакокинетику препарата. В последнее время также получили распространение методики определения соотношения концентраций фотосенсибилизаторов в различных органах путем сравнения интенсивности их флуоресценции. Естественно, что при использовании таких методик требуется подтверждение линейной зависимости величины сигнала флуоресценции от концентрации фотосенсибилизатора в тканях. Возможным отклонением от данной зависимости при этом может быть проявление тривиального перепоглощения вследствие значительного перекрытия спектров поглощения и флуоресценции ПК. Изменение формы спектра либо сопровождается изменением квантового выхода флуоресценции фотосенсибилизатора, либо свидетельствует о некорректности эксперимента. В таких случаях регистрируемый сигнал флуоресценции не может быть прямо пропорционален концентрации фотосенсибилизатора. Следовательно, без анализа спектров флуоресценции на протяжении всего времени наблюдения нельзя уверенно говорить о пропорциональности уровня сигнала флуоресценции фотосенсибилизатора его концентрации.

Одним из факторов, требующих внимания при регистрации сигнала флуоресценции фотосенсибилизатора *in vivo*, является различная толщина исследуемых образцов. Для определения размеров области, с которой регистрируется флуоресценция красителя в конкретных экспериментальных условиях, проведен анализ влияния толщины образцов тканей на величину сигнала флуоресценции. Экспериментально установлено, что флуоресценция регистрируется от молекул красителя, находящихся не только в коже и непосредственно прилегающих к ней слоях опухолевой ткани, но и на глубине до 1,5 см. На основании теории переноса излучения построена математическая модель процесса регистрации сигнала флуоресценции красителя, находящегося в биологической ткани. Суммарная интенсивность флуоресценции на поверхности ткани в направлении световода рассчитывалась по формуле

$$F(0, \infty) = \varphi_f \int_0^{\infty} E(0, z) \cdot \Phi(z) \mu_{a\Phi C} dz,$$

где $\Phi(z)$ – интегральная интенсивность света на глубине z , определялась из диффузионного уравнения теории переноса; $\mu_{a\Phi C}$ – коэффициент поглощения фотосенсибилизатора; φ_f – квантовый выход флуоресценции фотосенсибилизатора. Доля света флуоресценции, которая достигает поверхности ткани от молекул красителя на глубине z , определялась по формуле

$$E(0, z) = \frac{1}{2} \exp(-\mu_{\text{eff}} z) \cdot \left[1 + \exp\left(-\frac{4A\mu_{\text{eff}}}{3\mu'_t}\right) \right],$$

где $\mu'_t = \mu_s(1 - g) + \mu_a$; $\mu_{\text{eff}} = \sqrt{3\mu_a(\mu_a + \mu_s(1 - g))}$ – коэффициент эффективного ослабления, μ_s – коэффициент рассеяния ткани, μ_a – коэффициент поглощения ткани, g – параметр анизотропии; A – параметр, зависящий от коэффициента преломления ткани и окружающей среды.

Сравнение теоретической функции $F(0, z)$ с экспериментальной зависимостью величины сигнала флуоресценции от толщины образца (Δ , мм) позволило численными методами рассчитать параметры среды, при которых на практике наблюдается их совпадение (рис. 4).

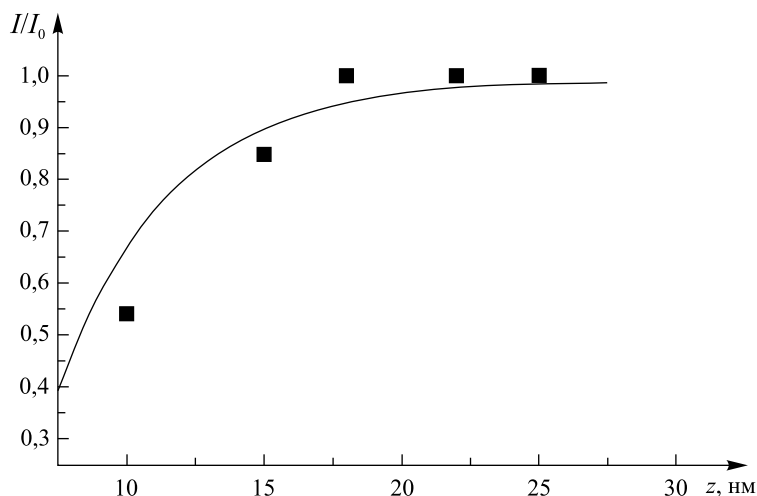


Рис. 4. Зависимости – рассчитанная (сплошная линия) и экспериментальная (точки) – сигнала флуоресценции ПК от толщины опухолевой ткани
Fig. 4. The calculated (solid line) and experimental (points) curves for the PD fluorescence signal as a function of the tumor tissue thickness

Неровности на поверхности опухоли, неоднородности (очаги некрозов ее тканей) могут приводить к значительному разбросу в интенсивности сигнала, фиксируемого с поверхности тела подопытного животного [5]. В целях определения влияния неоднородностей тканей опухолевых узлов на регистрацию сигнала флуоресценции для штамма «саркома М-1» были проведены исследования распределения красителей непосредственно в объеме опухолевой ткани. Для эксперимента отбирались сплошные опухоли, а также опухоли с некрозом тканей и проводилось сканирование сигнала флуоресценции по плоскости срезов опухоли. Эксперимент показал отличие содержания красителя у поверхности и внутри опухоли не более чем на 7 % в сплошных, без спонтанных некрозов, опухолях. Если же в опухоли

содержалась область со спонтанным некрозом, то в этой зоне сигнал флуоресценции красителя был меньше, чем в остальной части опухолевого узла, в 3–5 раз, так как в некротическую область затруднено поступление красителя из-за отсутствия кровотока. Следовательно, сравнение сигнала флуоресценции красителя по нескольким точкам поверхности опухоли свидетельствует о достоверности определения ее интенсивности. Значительные различия (в несколько раз) в величине сигнала являются основанием для отбраковки испытуемых животных.

Заключение

По представленным результатам проведен подбор оптимальных условий для регистрации *in vivo* сигнала флуоресцентных зондов на основе ПК с помощью спектрометрического комплекса. Показано, что оборудование, применяемое для измерений спектров флуоресценции в биологических тканях, должно обеспечивать оперативную регистрацию спектров от биообъектов, ограничивать уровень рассеянного и отраженного тканью света источника возбуждения, а также в максимальной степени уменьшать долю свечения эндогенных биомолекул в регистрируемом спектре.

Исследования выполнены при поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (проекты Ф16Р-131, Ф16Р-209, Ф16МВ-006) и Министерства образования Республики Беларусь.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

1. Фотодинамическая лазерная терапия и диагностика областей локализации на основе новых типов фотосенсибилизаторов / Е. С. Воропай [и др.] // Изв. РАН. Сер. физ. 2007. Т. 71, № 1. С. 145–149.
2. Спектрально-люминесцентные свойства индотрикарбоданинового красителя в биотканях / М. П. Самцов [и др.] // Журн. прикл. спектроскопии. 2010. Т. 77, № 3. С. 438–444.
3. Optical properties of *in vitro* epidermis and their possible relationship with optical properties of *in vivo* skin / R. Marchesini [et al.] // J. Photochem. Photobiol. B. 1992. Vol. 16, No. 2. P. 127–140.
4. Тучин В. В. Лазеры и волоконная оптика в биомедицинских исследованиях. Саратов, 1998.
5. Синичкин Ю. П. *In vivo* отражательная и флуоресцентная спектроскопия кожи человека. Саратов, 2001.
6. Фотосенсибилизатор для фотодинамической терапии злокачественных опухолей : пат. 15767 Респ. Беларусь, С 07 D 209/04, С 09 B 23/06, А 61 P 35/00 / М. Л. Самцов, А. П. Луговский, Е. С. Воропай, П. Т. Петров, А. А. Луговский, Д. И. Демид, Л. С. Ляшенко, Е. Н. Александрова, Ю. П. Истомин ; заявитель Белорус. гос. ун-т. № а 20101007 ; заявл. 30.06.2010 ; опубл. 18.01.2012 // Афіцыйны бюл. 2012. № 2. С. 105.
7. Лазерный спектрометрический комплекс для флуоресцентной диагностики области локализации опухолей / М. П. Самцов [и др.] // Квантовая электроника : материалы V Междунар. науч.-техн. конф. (Минск, 22–25 нояб. 2004 г.). Минск, 2004. С. 20–24.
8. Ramanujam N. Fluorescence spectroscopy *in vivo* // *Encycl. anal. chem.* / ed. by R. A. Meyers. 2000. P. 20–56.

REFERENCES

1. Voropai E. S., Samtsov M. P., Kaplevskii K. N., et al. Fotodinamicheskaya lazernaya terapiya i diagnostika oblastei lokalizatsii na osnove novykh tipov fotosensibilizatorov [Photodynamic laser therapy and diagnostics of tumor localization on the basis of new types of photosensitizers]. *Izv. RAN. Ser. phys.* 2007. Vol. 71, No. 1. P. 145–149 (in Russ.).
2. Samtsov M. P., Voropay E. S., Melnikov D. G., et al. Spektral'no-lyuminestsentnye svoistva indotrikarbotsianinovogo krasitelya v biotkanyakh [Spectral-Fluorescent Properties of an Indotricarbocyanine Dye in Biological Tissues]. *Zhurnal prikl. spektrosk.* 2010. Vol. 77, No. 3. P. 438–444 (in Russ.).
3. Marchesini R., Clemente C., Pignoli E., et al. Optical properties of *in vitro* epidermis and their possible relationship with optical properties of *in vivo* skin. *J. Photochem. Photobiol. B.* 1992. Vol. 16, No. 2. P. 127–140. DOI: 10.1016/1011-1344(92)80004-F.
4. Tuchin V. V. Lazery i volokonnaya optika v biomeditsinskikh issledovaniyakh. Saratov, 1998 (in Russ.).
5. Sinichkin Yu. P. *In vivo* otrazhatel'naya i fluorestsennaya spektroskopiya kozhi cheloveka. Saratov, 2001.
6. Fotosensibilizator dlya fotodinamicheskoi terapii zlokachestvennykh opukholei : pat. 15767 Resp. Belarus', С 07 D 209/04, С 09 B 23/06, А 61 P 35/00 / М. Л. Самцов, А. П. Луговский, Е. С. Воропай, П. Т. Петров, А. А. Луговский, Д. И. Демид, Л. С. Ляшенко, Е. Н. Александрова, Ю. П. Истомин ; заявитель' Belorus. gos. un-t. № а 20101007 ; yayavl. 30.06.2010 ; opubl. 18.01.2012. Afitsyiny byul. 2012. No. 2. S. 105 (in Russ.).
7. Samtsov M. P., Rad'ko A. E., Kaplevskii K. N., et al. Lazernyi spektrometricheskii kompleks dlya fluorestsentnoi diagnostiki oblasti lokalizatsii opukholei. *Kvantovaya elektronika* : materialy V Mezhdunar. nauchn.-tekhnicheskoi konf. (Minsk, 22–25 Novemb. 2004). Minsk, 2004. P. 20–24 (in Russ.).
8. Ramanujam N. Fluorescence spectroscopy *in vivo*. *Encycl. anal. chem.* Ed. by R. A. Meyers. 2000. P. 20–56.

Статья поступила в редакцию 11.05.2016.
Received by editorial board 11.05.2016.

УДК 533.9.082.5;621.373.826;621.793.79

ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ ОБРАЗОВАНИЯ НИТРИДА АЛЮМИНИЯ В ПЛАЗМЕ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ УГЛА ПАДЕНИЯ СДВОЕННЫХ ЛАЗЕРНЫХ ИМПУЛЬСОВ НА МИШЕНЬ ИЗ АЛЮМИНИЕВОГО СПЛАВА Д16Т В АТМОСФЕРЕ ВОЗДУХА

Х. БАЗЗАЛ¹⁾, А. Р. ФАДАИЯН²⁾, А. П. ЗАЖОГИН¹⁾

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

²⁾Частное научно-производственное унитарное предприятие «Лазер Системс инжиниринг групп»,
пр. Независимости, 67, 220013, г. Минск, Республика Беларусь

С помощью метода лазерной искровой спектрометрии изучено влияние угла падения сдвоенных лазерных импульсов на целенаправленное формирование компонентного и зарядового составов приповерхностной лазерной плазмы. Исследованы процессы образования нитрида алюминия при воздействии сфокусированных сдвоенных лазерных импульсов под различными углами на поверхность мишени из алюминиевого сплава Д16Т в атмосфере воздуха. Показана возможность увеличения как доли ионов алюминия различной зарядности в приповерхностной лазерной плазме в режимах абляции, так и нанокластеров AlN и AlO при последовательном воздействии серии сдвоенных импульсов на мишень под углом падения $\approx 75^\circ$. Определены условия влияния параметров лазера и характера процессов на поверхности мишени и в плазме на формирование ионного и молекулярного составов плазмы при воздействии сдвоенных лазерных импульсов.

Ключевые слова: AlN; AlO; импульсное лазерное напыление; приповерхностная лазерная плазма; лазерная искровая спектрометрия; многозарядные ионы; сдвоенные лазерные импульсы.

INVESTIGATION INTO THE FORMATION PROCESSES OF ALUMINIUM NITRIDE IN THE PLASMA DEPENDING ON THE INCIDENCE ANGLE OF DOUBLE LASER PULSES ONTO THE TARGET OF D16T ALUMINIUM ALLOY IN THE AIR

Kh. BAZZAL^a, A. R. FADAEIAN^b, A. P. ZAJOGIN^a

^aBelarusian State University, Nezavisimosti avenue, 4, 220030, Minsk, Republic of Belarus

^b«Laser Systems and Engineering Group» Co., Nezavisimosti avenue, 67, 220013, Minsk, Republic of Belarus

Corresponding author: zajogin_an@mail.ru

The influence of the incidence angle of double laser pulses on the desired formation of a component and charge composition of the surface laser plasma using the laser spark spectrometry method has been studied. The formation processes of aluminium nitride under the effect of focused double laser pulses incident at different angles on the surface

Образец цитирования:

Баззал Х., Фадаиян А. Р., Зажогин А. П. Исследования процессов образования нитрида алюминия в плазме в зависимости от угла падения сдвоенных лазерных импульсов на мишень из алюминиевого сплава Д16Т в атмосфере воздуха // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2017. № 1. С. 34–42.

For citation:

Bazzal Kh., Fadaeian A. R., Zajogin A. P. Investigation into the formation processes of aluminium nitride in the plasma depending on the incidence angle of double laser pulses onto the target of D16T aluminium alloy in the air. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2017. No. 1. P. 34–42 (in Russ.).

Авторы:

Ходор Баззал – аспирант кафедры лазерной физики и спектроскопии физического факультета. Научный руководитель – А. П. Зажогин.

Ахмад Реза Фадаиян – научный сотрудник.

Анатолий Павлович Зажогин – доктор физико-математических наук; профессор кафедры лазерной физики и спектроскопии физического факультета.

Authors:

Khoder Bazzal, postgraduate student at the department of laser physics and spectroscopy, faculty of physics.

bazzal_khoder_88@hotmail.com

Ahmad Reza Fadaeian, researcher.

pcwco@rambler.ru

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

zajogin_an@mail.ru

of the target of D16T aluminium alloy in the air have been analyzed. It has been demonstrated that there is a possibility to increase both the numbers of aluminium ions with different charges in the surface laser plasma in the ablation mode and of AlN and AlO nanoclusters when a series of double pulses sequentially heat the target at the incidence angle about 75° . The conditions associated with the effects exerted by the laser parameters and by the processes on the target surface and within the plasma on the formation of the desired ionic and molecular compositions of the plasma due to double laser pulses have been considered.

Key words: AlN; AlO; pulsed laser deposition; surface laser plasma; laser spark spectrometry; multiply charged ions; double laser pulses.

Введение

Одними из перспективных материалов, применяемых в микро- и оптоэлектронике в качестве диэлектрической теплоотводящей подложки, являются нитрид алюминия (AlN) и керамические материалы на его основе. AlN имеет большую теплопроводность, сравнимую с теплопроводностью меди и серебра (до $260 \text{ Вт/(м} \cdot \text{К)}$), при высоких значениях электрического сопротивления (до $10^{14} \text{ Ом} \cdot \text{см}$). Ширина запрещенной зоны у AlN равна примерно $6,2 \text{ эВ}$ [1].

За последнее десятилетие существенно изменились взгляды на роль азота при горении металлов в воздухе и различных видах пламени. Во многих технологиях азот используется в качестве инертного газа, поскольку возбуждение молекулы азота, ослабляющее связь, требует большой энергии. Вместе с тем в работах [2–4] показано, что азот, как окислитель, может конкурировать с кислородом в области температур, при которых происходит горение металлов.

В ряде областей техники не требуются материалы с высокими теплофизическими характеристиками, как у монокристаллов нитрида алюминия, и поэтому могут быть эффективно использованы полифазные нитридсодержащие виды керамики. При производстве керамических подложек в исходную смесь вводят добавки, поскольку AlN не образует жидкой фазы и практически не спекается. Однако все известные добавки ухудшают электрофизические и теплофизические характеристики AlN.

Известные технологии получения AlN энергозатратны, так как необходим длительный нагрев Al_2O_3 в смеси с графитом в потоке азота высокого давления при 1700°C [3]. Экспериментально показано [4], что синтез нитрида алюминия происходит также при тепловом взрыве нанопорошка алюминия в воздухе, что требует меньших энергетических затрат: энергия расходуется только на инициирование процесса горения. Следует отметить, что механизм формирования AlN при горении нанопорошка алюминия в воздухе и морфология продуктов изучены недостаточно для понимания природы протекающих процессов и управления ими при получении керамических порошков с определенным фазовым составом и морфологией кристаллических фаз.

В настоящее время для получения AlN в виде порошков или в составе тонких пленок и покрытий начинают применяться методы лазерного воздействия на Al в атмосфере активированного азота под давлением [5–7]. Наиболее изучены такие методы активации молекулы азота, как нагревание, ионизирующее излучение, действие катализаторов и электроразряда, а также их сочетания. При тепловой активации молекулярного азота (нагревание до 3000°C) степень его диссоциации достигает только $0,1\%$. Малоэффективны и другие методы активации (КПД процесса не превышает $1\text{--}2\%$). Все это обуславливает поиск специальных условий взаимодействия N_2 , или активированного азотного комплекса, с металлами и представляет большой практический интерес [2].

Анализ и целенаправленное изменение компонентного, зарядового и энергетического распределения состава лазерного факела возможны на основе дополнительного лазерного воздействия на первичную плазму. В случае использования двухимпульсного лазерного воздействия при различных углах падения на мишень и плазму вместе с проведением высокочувствительного спектрального анализа возможны контроль концентрации возбужденных и заряженных частиц плазмы и управление составом плазмы, направляемой на подложку [8; 9].

Цель настоящей работы – определение роли дополнительного лазерного импульса и изменения угла падения лазерного излучения на поверхность многокомпонентной алюминиевой мишени в воздушной атмосфере в процессе формирования нанокластеров AlN и AlO в лазерной плазме для использования их в технологии получения нанокристаллов и напыления тонких пленок.

Методика эксперимента

Для проведения исследований использовали лазерный многоканальный атомно-эмиссионный спектрометр LSS-1 (изготовитель – СП «ЛОТИС ТИИ», г. Минск, Беларусь). Источником возбуждения плазмы в спектрометре является двухимпульсный неодимовый лазер с регулируемой энергией

и интервалом между импульсами (модель LS2131 DM). Лазер может работать с частотой повторения импульсов до 10 Гц на длине волны 1064 нм. Длительность импульсов ≈ 15 нс. Временной сдвиг между сдвоенными импульсами может изменяться от 0 до 100 мкс с шагом 1 мкс. Лазерное излучение фокусировали на образец с помощью ахроматического конденсора с фокусным расстоянием, равным 104 мм. Размер сфокусированного пятна составляет примерно 50 мкм.

Динамика изменения атомного и ионного составов приповерхностной плазмы и образования нанокластеров AlN в глубине кратера исследована при воздействии сдвоенных лазерных импульсов на пластинку алюминиевого сплава Д16Т толщиной, равной 1 мм, в зависимости от энергии импульса (20–60 мДж), временного интервала между ними (0–20 мкс) и угла падения лазерного излучения на мишень ($90-30^\circ$) при атмосферном давлении. Основные компоненты сплава Д16Т: Al – 91...95 %; Cu – 3,8...4,9 %; Mg – 1,2...1,8 % [10].

Процесс образования AlN изучали по эмиссионным спектрам этой молекулы при воздействии серии одиночных и сдвоенных лазерных импульсов на алюминиевую мишень в атмосфере воздуха. Наиболее интенсивной электронно-колебательной полосой в эмиссионных спектрах является полоса с длиной волны, равной 508,05 нм [7; 11].

Результаты эксперимента и их обсуждение

Нами установлено, что наибольшая интенсивность I полос наблюдается при межимпульсном интервале, равном 6–12 мкс. Для интервала 10 мкс изучен процесс образования нанокластеров AlN в зависимости от энергии импульсов. Результаты проведенных исследований представлены на рис. 1.

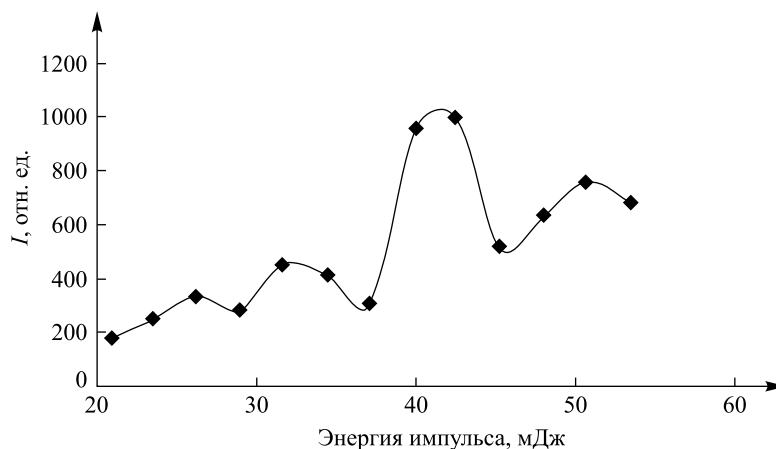


Рис. 1. Зависимость интенсивности полосы AlN в спектрах от энергии импульсов
Fig. 1. The spectral intensity of the band for AlN as a function of the pulse energy

Полученные данные свидетельствуют о том, что процесс образования нанокластеров AlN с возрастанием энергии до 45 мДж увеличивается, достигая максимума при 40–42 мДж, а затем несколько уменьшается. Очевидно, что приведенная плотность энергии оказывает наибольшее влияние в месте воздействия излучения на поверхность.

Для понимания происходящих процессов оценим параметры газовой среды в аблируемом канале, приняв к рассмотрению несколько фаз процесса. Эти фазы включают в себя разлет аблированных и сконденсировавшихся частиц после первого импульса, взаимодействие второго импульса с указанными продуктами, разлет плазменного факела за время лазерного воздействия, дальнейшее расширение плазменной области за счет разницы давлений внутри и снаружи нее и остывание нагретого газа вблизи аблированной поверхности. При дальнейшем увеличении плотности энергии (после 40 мДж) время образования плотной плазмы, экранирующей процесс взаимодействия излучения с мишенью, быстро сокращается, что приводит к некоторому уменьшению количества продуктов абляции, а значит, и интенсивности полос в спектре при увеличении энергии.

Полученные закономерности использовались при исследовании влияния угла падения излучения и интервала между импульсами на интенсивность полос AlN, AlO и линий ионов N II, Al II и Al III (основные прекурсоры для образования AlN и AlO).

На рис. 2 и 3 приведены зависимости изменения интенсивности полос AlN, AlO и линий ионов N II, Al II и Al III от величины угла падения лазерного излучения на мишень и интервала между импульсами для энергий импульсов излучения 40 и 54 мДж, соответствующих максимумам интенсивности полосы AlN (см. рис. 1).

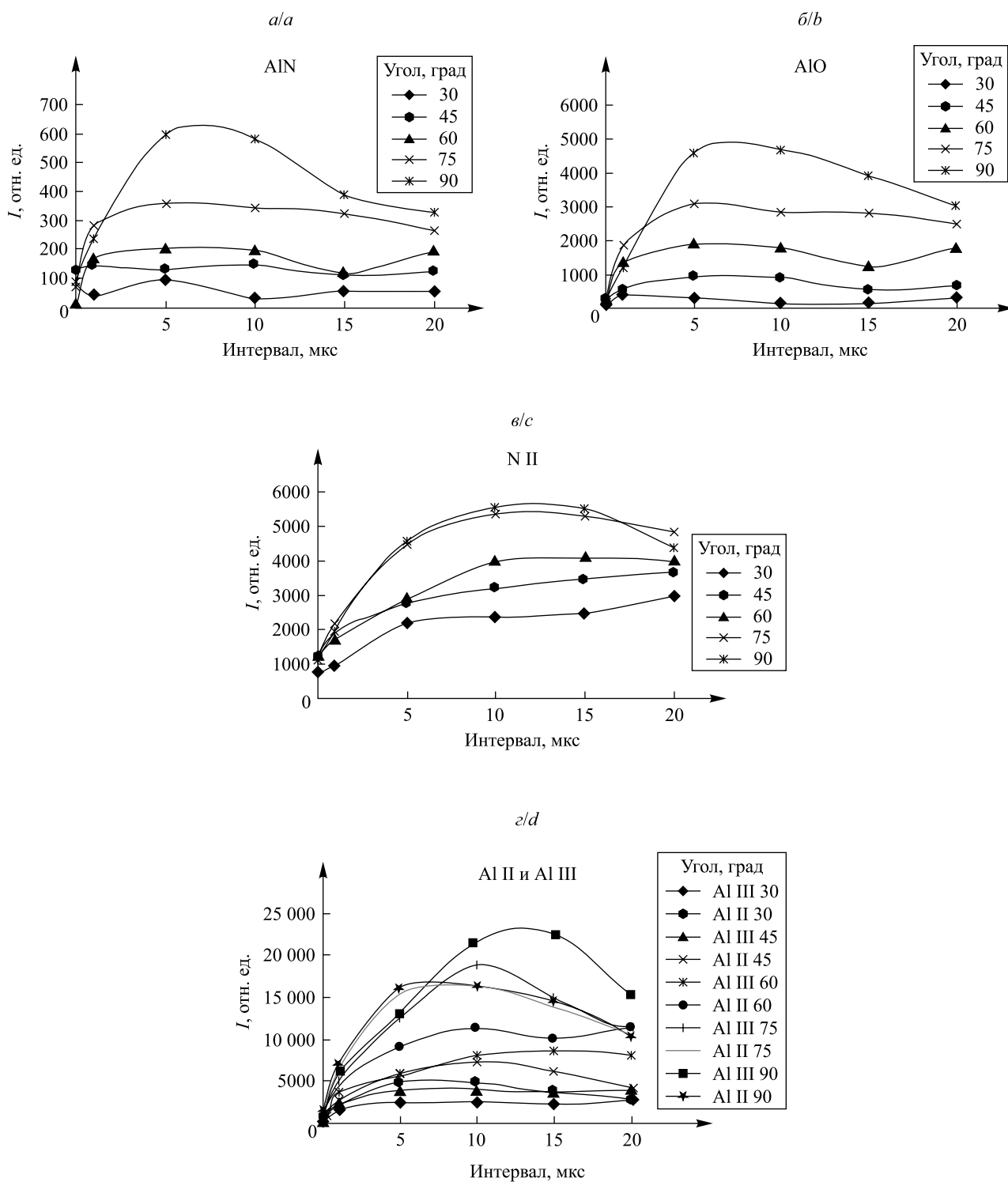


Рис. 2. Зависимость интенсивности полос AIN (508,05 нм) (а); AlO (484,2 нм) (б); линий ионов N II (399,5 нм) (в); Al II (466,3 нм) и Al III (452,92 нм) (г) в спектрах от интервала между импульсами и угла падения излучения (энергия импульсов 40 мДж)
Fig. 2. The spectral intensity of the bands for AIN (508.05 nm) (a), AlO (484.2 nm) (b), and of the lines for the ions N II (399.5 nm) (c), Al II (466.3 nm) and Al III (452.92 nm) (d) as a function of the interpulse time and radiation incidence angle at the pulse energy 40 mJ

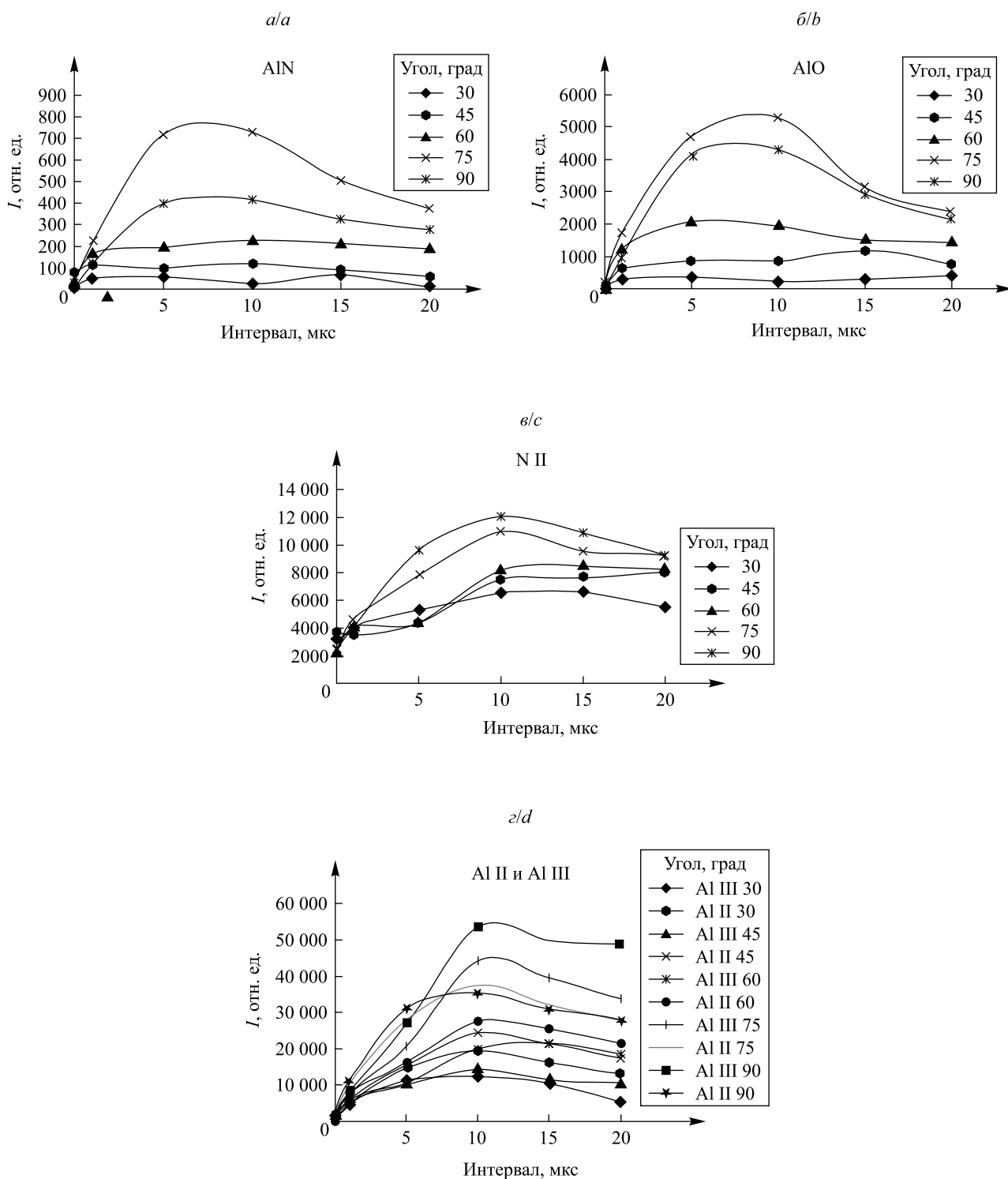


Рис. 3. Зависимость интенсивности полос AlN (508,05 нм) (а); AlO (484,2 нм) (б); линий ионов N II (399,5 нм) (в); Al II (466,3 нм) и Al III (452,92 нм) (г) в спектрах от интервала между импульсами и угла падения излучения (энергия импульсов 54 мДж)

Fig. 3. The spectral intensity of the bands for AlN (508.05 nm) (a), AlO (484.2 nm) (b), and of the lines for the ions N II (399.5 nm) (c), Al II (466.3 nm) and Al III (452.92 nm) (d) as a function of the interpulse time and radiation incidence angle at the pulse energy 54 mJ

Оценивая интенсивности полос AlN и AlO, следует отметить, что при энергии импульсов 54 мДж и интервале между ними 5–15 мкс интенсивность этих полос максимальна, когда угол падающих импульсов составляет 75°. При энергии импульсов 40 мДж интенсивность этих полос больше при угле падающих импульсов 90°.

Проведенные исследования и анализ литературных источников [12–17] позволяют представить следующую картину эволюции плазмы. При воздействии одиночного лазерного импульса после испарения материала мишени передним фронтом импульса и образования плазмы при достаточно высоких интенсивностях излучения условия экранировки в плазме выполняются (посредством обратного тормозного поглощения излучения в первоначальном парогазовом облаке) и абляция поверхности прекращается. Вместе с тем быстрое испарение материала мишени приводит к резкому возрастанию давления, что инициирует ударную волну в окружающей атмосфере, на фронте которой происходит поглощение оставшейся части импульса лазерного излучения. В случае одиночного импульса большой плотности (10^9 – 10^{11} Вт/см²) существенная часть его может экранироваться фронтом ударной волны и не проникать в область плазменного ядра. Все это позволяет при лазерной абляции твердого тела в атмосфере выделить три основные области: поверхность мишени, эрозионную плазму, содержащую значительную часть испаренного материала, и плазменную оболочку (фронт ударной волны) [17; 18].

Распределение температуры показывает, что в период воздействия лазерного излучения наиболее горячая область плазмы находится непосредственно у поверхности и имеет относительно невысокую температуру – около 3 эВ [19]. Как было установлено, именно в этой области происходит выделение энергии лазерного излучения. Нагретая область с высокой плотностью, определяемой вылетающим с поверхности паром, приводит к формированию у поверхности зоны высокого давления, превышающего 1000 атм, значительно замедляющего процесс испарения и обуславливающего небольшое число Маха на дозвуковой стадии испарения. Разлет облака идет преимущественно в перпендикулярном направлении от поверхности. После окончания воздействия ($t = 15$ нс) картина в плазме становится существенно иной. Область с максимальными температурой и давлением смещается от поверхности, и разлет плазмы происходит не только в сторону внешних границ, но и к поверхности мишени.

В случае когда на поверхность мишени воздействуют два импульса с некоторым временным интервалом между ними, ситуация еще более усложняется. После первого импульса плазма расширяется, рекомбинирует и электронная плотность резко уменьшается со временем. Второй лазерный импульс проходит через относительно разреженную плазму, поэтому он способен проникать в нее, эффективнее возбуждать продукты абляции (фракталы и кластеры, остающиеся после охлаждения плазмы [20; 21]) и взаимодействовать с поверхностью. Это приводит к увеличению как количества испаренного материала, так и степени его возбуждения и ионизации. Об этом, в частности, свидетельствует тот факт, что при углах падения излучения 90 и 75° интенсивность ионных линий Al III значительно больше, чем Al II. При меньших углах и межимпульсных интервалах интенсивности этих линий меняются на обратный порядок.

Плазма, создаваемая лазерным пучком, сфокусированным на мишень, неоднородна – ее параметры (плотность, температура) изменяются в пространстве. Взаимодействие лазерного излучения с такой неоднородной плазмой характеризуется рядом специфических особенностей. Основным процессом, определяющим коэффициент поглощения света в плазме, является обратнотормозной эффект [22].

Максимальный коэффициент поглощения света в плазме за счет обратнотормозного эффекта достигается в тех областях неоднородностей плазмы, в которых плотность близка к критической [22]. Реальная плазма практически всегда сильно неоднородна – в ней электронная плотность N_e является функцией координаты; для одномерного случая $N_e = N_e(z)$, где z – координата. Падающая на плазму извне световая волна может проникнуть вглубь только до слоя с критической плотностью. Главный вклад в интегральное поглощение дает слой, непосредственно прилегающий к слою с критической плотностью. Его толщина имеет порядок $L_c = \alpha_c^{-1}$, где α – коэффициент поглощения; s – слой.

Еще одним механизмом поглощения энергии световой волны, проявляющимся при наклонном падении света на неоднородную плазму, является так называемый механизм резонансного поглощения [23], которое происходит благодаря линейной трансформации поперечных электромагнитных волн в продольные плазменные. При наклонном падении всегда имеется продольная (вдоль градиента концентрации) компонента электрического поля световой волны. На определенной глубине, где концентрация плазмы близка к критической для падающего электромагнитного поля, происходит резонансное преобразование энергии лазерного излучения в энергию сильно затухающих собственных плазменных колебаний.

Угол падения, при котором резонансное поглощение максимально, можно определить из следующего соотношения [23]:

$$\sin \theta_{\text{опт}} \approx 0,8 \left(\frac{c}{\omega z_c} \right)^{1/3} \approx 0,8 \left(\frac{\lambda}{2\pi z_c} \right)^{1/3},$$

где c – скорость света; ω – круговая частота; λ – длина волны лазерного излучения; z_c – глубина плазмы до слоя критической плотности. Используя значение $\lambda = 1,06$ мкм, можно упростить это выражение:

$$\sin \theta_{\text{опт}} \approx 0,44 z_c^{-1/3}.$$

На основании экспериментальных результатов, приведенных на рис. 3, оценим значения толщины слоя z_c , соответствующего наблюдаемым максимумам интенсивности полос AlO и AlN для угла 75° . Угол θ , равный 15° , является дополнительным к углу 75° , приведенному на рис. 3. Тогда соответствующее значение z_c составит 4,85 мкм. Согласно [23] здесь доля падающего светового потока, поглощаемая плазмой за счет резонансного механизма, может достигать 50 %.

Следует отметить, что в этом случае в отличие от обратнотормозного механизма нет ограничений на максимальную температуру, достижимую в результате лазерного нагрева плазмы [22; 23]. Резонансное поглощение является основным механизмом нагрева горячей плазмы, в которой обратнотормозное поглощение уже несущественно до температуры в миллионы градусов.

Перенос энергии в глубь плазменного факела может приводить к увеличению абляционной плотности по сравнению с критической. Перенос энергии со скоростью, превышающей скорость переноса гидродинамических возмущений, может осуществляться быстрыми электронами, которые образуются при резонансном поглощении лазерного излучения и собственным излучением плазмы.

В нашем случае измеряемая величина – интенсивность спектральной линии – связана с плотностью пара исследуемого элемента, поэтому желательно создать условия, в какой-то мере стабилизирующие параметры пара.

Одним из возможных методов влияния на темп остывания и скорость изменения плотности пара является создание среды, в которой происходило бы расширение испарившегося вещества. За счет взаимодействия пара с молекулами газа уменьшится скорость расширения пара, т. е. роль адиабатического охлаждения ослабнет. Кроме того, произойдет термализация кинетической энергии частиц вещества мишени, на которую приходится большая часть (до 70 %) поглощенной энергии лазерного излучения [22; 23]. Этот процесс можно рассматривать как источник нагрева расширяющегося вещества, действие которого увеличивает время жизни горячих паров. С другой стороны, при расширении пара в среде какого-либо газа возникают механизмы охлаждения пара за счет столкновения второго рода атомов пара с молекулами среды. Следовательно, скорости остывания пара и изменения его плотности за счет расширения и конденсации в значительной мере определяются величиной давления и составом среды, в которой происходит испарение конденсированного вещества лазерным излучением. Размер частиц конденсата зависит от состава и давления газа, окружающего мишень.

Заключение

Таким образом, выполненные спектроскопические исследования характеристик приповерхностной лазерной плазмы, образуемой вблизи поверхности многокомпонентной мишени при воздействии двух последовательных импульсов на ее поверхность, показали возможность контроля и управления характеристиками плазмы. Определены временные интервалы между импульсами (5–15 мкс), а также энергии и параметры расфокусировки излучения, обеспечивающие возможность получения необходимых концентраций одно- или двукратно ионизированных атомов алюминия для формирования нанокластеров AlN. Показано, что последовательное воздействие на мишень серии сдвоенных лазерных импульсов с временным интервалом между ними 5–15 мкс под определенными углом и энергией приводит к существенному увеличению поступления в плазму радикалов как AlO, так и AlN.

Показана возможность контроля и управления характеристиками плазмы при получении необходимых концентраций радикалов AlO и AlN в плазме при воздействии серий сдвоенных лазерных импульсов на поверхность алюминиевых сплавов в процессе получения нанокластеров и пленок.

Положительные результаты проведенных экспериментов следует рассматривать как основу для дальнейшей работы по усовершенствованию процесса безвакуумного лазерного напыления и оптимизации технологических параметров. Возможно также существенное увеличение числа осаждаемых покрытий, включая, например, такие, как смешанные высокотемпературные соединения нитрид алюминия – нитрид титана, получение которых предполагает химическое взаимодействие испаряемых частиц мишени с окружающим газом.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

1. Неволин В. К., Царик К. А. Формирование и исследование наногетероструктур AlGaIn/GaN с применением атомно-силовой микроскопии // Изв. вузов. Электроника. 2009. № 6. С. 44–49.
2. Ильин А. П., Рот Л. О. К вопросу о механизме высокотемпературного химического связывания азота воздуха // Вестн. науки Сибири. Сер. 3, Химия. 2011. № 1 (1). С. 91–96.
3. Громов А. А., Хабас Т. А., Ильин А. П. Горение нанопорошков металлов / под ред. А. А. Громова. Томск, 2008.
4. Ильин А. П., Громов А. А. Горение алюминия и бора в сверхтонком состоянии. Томск, 2002.
5. Tharea R. K., Sharma A. K. Formation of AlN in laser ablated plasma of Al in nitrogen ambient // Phys. Stat. Sol. 2005. Vol. 2, № 7. P. 2079–2082.
6. Optical emission spectroscopy of Aluminum Nitride thin films deposited by Pulsed Laser Deposition / J. A. Perez [et al.] // J. Phys.: Conf. Ser. 2014. Vol. 511. P. 1–6.
7. Emission and mass spectral analyses of laser ablated AlN plumes / Jin-hai Chen [et al.] // Chin. Phys. B. 1999. Vol. 8, № 3. P. 223–228.
8. Сухов Л. Т. Лазерный спектральный анализ. Новосибирск, 1990.
9. Фадаиян А. Р., Зажогин А. П. Эффекты низкотемпературного прожига металлов одиночными и двойными лазерными импульсами // Вестн. БГУ. Сер. 1, Физика. Математика. Информатика. 2009. № 2. С. 12–14.
10. Материалы в приборостроении и автоматике / под ред. Ю. М. Пятина. М., 1969.
11. Simmons J. D., McDonald J. K. The Emission Spectrum of AlN // J. Mol. Spectrosc. 1972. Vol. 41, № 3. P. 584–594.
12. Изменение ионизационного состояния приповерхностной лазерно-индуцированной плазмы алюминия в двухимпульсных режимах абляции / В. С. Бураков [и др.] // Квантовая электроника. 2003. Т. 33, № 12. С. 1065–1071.
13. Импульсное лазерное напыление твердого углеродного покрытия при атмосферном давлении / Т. В. Кононенко [и др.] // Квантовая электроника. 2003. Т. 33, № 3. С. 189–196.
14. Зажогин А. П., Фадаиян А. Р. Динамика процессов абляции и развития приповерхностной лазерной плазмы сплавов алюминия двойными лазерными импульсами // Вестн. БГУ. Сер. 1, Физика. Математика. Информатика. 2008. № 3. С. 15–18.
15. Исследование процессов формирования наночастиц и фракталов при лазерном напылении многоэлементных тонких пленок на поверхность Al₂O₃ двойными лазерными импульсами / Е. С. Воропай [и др.] // НАНО-2009 : материалы III Всерос. конф. по наноматериалам (Екатеринбург, 20–24 апр. 2009 г.). Екатеринбург, 2009. С. 245–248.
16. Laser ablation for analytical sampling: what can we learn from modeling? / Annemie Bogaerts [et al.] // Spectrochimica Acta. Part B. 2003. Vol. 58. P. 1867–1893.
17. Регистрация аномального самообращения эмиссионных линий в лазерной плазме, генерируемой на поверхности твердых мишеней в нормальной атмосфере / О. А. Букин [и др.] // Квантовая электроника. 1997. Т. 24, № 8. С. 725–726.
18. Биберман Л. М., Мицаканян А. Х., Якубов И. Т. Ионизационная релаксация за сильными ударными волнами в газах // УФН. 1970. Т. 102, вып. 3. С. 430–462.
19. Мажукин В. И., Носов В. В. Поверхностное испарение алюминиевой мишени в вакууме при воздействии лазерного УФ-излучения в условиях образования плазмы // Квантовая электроника. 2005. Т. 35, № 5. С. 454–466.
20. Особенности формирования плазменного факела при гибридной лазерно-дуговой сварке / Г. А. Туричин [и др.] // Теплофизика высоких температур. 2006. Т. 44, № 5. С. 655–663.
21. Гафнер С. Л., Гафнер Ю. Я. Анализ процессов конденсации наночастиц Ni из газовой фазы // ЖЭТФ. 2008. Т. 134, вып. 4. С. 831–844.
22. Коротеев Н. И., Шумай И. Л. Физика мощного лазерного излучения. М., 1991.
23. Дюдерштадт Дж., Мозес Г. Инерциальный термоядерный синтез. М., 1984.

REFERENCES

1. Nevolin V. K., Tsarik K. A. Formirovanie i issledovanie nanogeterostruktur AlGaIn/GaN s primeneniem atomno-silovoi mikroskopii [The formation and study of AlGaIn/GaN nanoheterostructures with the use of atomic force microscopy]. *Izv. vuzov. Elektronika*. 2009. No. 6. P. 44–49 (in Russ.).
2. Il'in A. P., Root L. O. K voprosu o mekhanizme vysokotemperaturnogo khimicheskogo svyazyvaniya azota vozdukh [On the mechanism of high-temperature chemical bonding of nitrogen from the ambient air]. *Vestnik nauki Sibiri. Ser. 3, Khimiya*. 2011. No. 1 (1). P. 91–96 (in Russ.).
3. Gromov A. A., Khabas T. A., Ilyin A. P. Gorenienie nanoporoshkov metallov [Burning of metal nanopowders]. Ed. by A. A. Gromov. Tomsk, 2008 (in Russ.).
4. Il'in A. P., Gromov A. A. Gorenienie alyuminiya i bora v sverkhtonkom sostoyanii [Burning of aluminum and boron in hyperfine state]. Tomsk, 2002 (in Russ.).
5. Tharea R. K., Sharma A. K. Formation of AlN in laser ablated plasma of Al in nitrogen ambient. *Phys. Stat. Sol.* 2005. Vol. 2, No. 7. P. 2079–2082.
6. Perez J. A., Vera I. P., Riascos H., et al. Optical emission spectroscopy of Aluminum Nitride thin films deposited by Pulsed Laser Deposition. *J. Phys.: Conf. Ser.* 2014. Vol. 511. P. 1–6.
7. Chen Jin-hai, Wang Pei-man, Guo Zhao, et al. Emission and mass spectral analyses of laser ablated AlN plumes. *Chin. Phys. B*. 1999. Vol. 8, No. 3. P. 223–228.
8. Sukhov L. T. Lazernyi spektral'nyi analiz [Laser spectral analysis]. Novosibirsk, 1990 (in Russ.).
9. Fadaijan A. R., Zazhogin A. P. The effects of low-threshold breakdown of metals by single and double laser pulses. *Vestnik BGU. Ser. 1, Fiz. Mat. Inform.* 2009. No. 2. P. 12–14 (in Russ.).
10. Materialy v priborostroenii i avtomatike [Materials in instrument-making industry and automatics]. Ed. by Yu. M. Pyatina. Mosc., 1969 (in Russ.).
11. Simmons J. D., McDonald J. K. The Emission Spectrum of AlN. *J. Mol. Spectrosc.* 1972. Vol. 41, No. 3. P. 584–594.

12. Burakov V. S., Bohanov A. F., Nedel'ko M. I., et al. Izmenenie ionizacionnogo sostojanija pri poverhnostnoj lazerno-inducirovannoj plazmy aluminija v dvuhimpul'snyh rezhimah abljacii [Change in the ionisation state of a near-surface laser-produced aluminium plasma in double-pulse ablation modes]. *Kvant. electron.* 2003. Vol. 33, No. 12. P. 1065–1071 (in Russ.).
13. Kononenko T. V., Konov V. I., Lubnin E. N., et al. Impul'snoe lazernoe napylenie tverdogo uglerodnogo pokrytija pri atmosfernom davlenii [Pulsed laser deposition of solid carbonic coatings under atmospheric pressure]. *Kvant. electron.* 2003. Vol. 33, No. 3. P. 189–196 (in Russ.).
14. Zajogin A. P., Fadaeian A. R. Dynamics of ablation processes and evolution of the surface plasma of aluminum alloys generated by double laser pulses. *Vestnik BGU. Ser. 1, Fiz. Mat. Inform.* 2008. No. 3. P. 15–18 (in Russ.).
15. Voropaj E. S., Fadaijan A. R., Ermalickaja K. F., et al. Issledovanie processov formirovanija nanochastic i fraktalov pri lazernom napylenii mnogojelementnyh tonkih plenok na poverhnost' Al_2O_3 sdvoennymi lazernymi impul'sami. *NANO-2009 : materialy III Vseross. konf. po nanomaterialam* (Yekaterinburg, 20–24 April 2009). Yekaterinburg, 2009. P. 245–248 (in Russ.).
16. Annemie Bogaerts, Zhaoyang Chen, Renaat Gijbels, et al. Laser ablation for analytical sampling: what can we learn from modeling? *Spectrochimica Acta. Part B.* 2003. Vol. 58. P. 1867–1893.
17. Bukin O. A., Sviridenkov Je. A., Sushilov N. V., et al. Detection of anomalous self-reversal of emission lines of a laser plasma formed on the surface of a solid target in a normal atmosphere. *Kvant. electron.* 1997. Vol. 24, No. 8. P. 725–726 (in Russ.).
18. Biberman L. M., Miacakanjai A. X., Jakubov I. T. Ionizacionnaja relaksacija za sil'nymi udarnymi volnami v gazah [Surface evaporation of aluminum target in vacuum under the effect of UV laser radiation in the plasma formation conditions]. *Usp. fiz. nauk.* 1970. Vol. 102, issue 3. P. 430–462 (in Russ.).
19. Mazhukin V. I., Nosov V. V. Plasma-mediated surface evaporation of an aluminium target in vacuum under UV laser irradiation. *Kvant. electron.* 2005. Vol. 35, No. 5. P. 454–466 (in Russ.).
20. Turichin G. A., Grigor'ev A. M., Zemljakov E. V., et al. Osobennosti formirovanija plazmennogo fakela pri gibridnoj lazernodugovoj svarke [Special features of formation of plasma torch under conditions of hybrid laser-arc welding]. *Teplofiz. vysok. temperatur.* 2006. Vol. 44, No. 5. P. 655–663 (in Russ.).
21. Gafner S. L., Gafner Yu. Ya. Analiz processov kondensacii nanochastic Ni iz gazovoj fazy [Analysis of gas-phase condensation of nickel nanoparticles]. *JETP.* 2008. Vol. 134, issue 4. P. 831–844 (in Russ.).
22. Koroteev N. I., Shumai I. L. Fizika moshchnogo lazernogo izlucheniya [Physics of high-power laser radiation]. Mosc., 1991 (in Russ.).
23. Dyudershtadt Dzh., Mozes G. Inertsial'nyi termoyadernyi sintez [Inertial thermonuclear fusion]. Mosc., 1984 (in Russ.).

Статья поступила в редакцию 22.06.2016.
Received by editorial board 22.06.2016.

Физика

ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ЯВЛЕНИЙ

PHYSICS

OF ELECTROMAGNETIC PHENOMENA

УДК 537.8

ПОТЕНЦИАЛЫ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ ПРОИЗВОЛЬНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЗАРЯДОВ И ТОКОВ В КАЛИБРОВКЕ КУЛОНА

А. Н. ФУРС¹⁾

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

В калибровке Кулона рассчитаны потенциалы поля произвольного распределения зарядов и токов. Показано, что векторный потенциал определяется не только значениями плотности тока в запаздывающие моменты времени, но и предысторией изменения плотности заряда на временном интервале, ограниченном запаздывающим и текущим моментами. Получены различные представления потенциалов Лиенара – Вихерта в калибровке Кулона. Они применены к случаю равномерно и прямолинейно движущегося точечного заряда.

Ключевые слова: калибровочная инвариантность; калибровки Лоренца и Кулона; запаздывающие потенциалы; потенциалы Лиенара – Вихерта.

Образец цитирования:

Фурс А. Н. Потенциалы электромагнитного поля произвольного распределения зарядов и токов в калибровке Кулона // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2017. № 1. С. 43–51.

For citation:

Furs A. N. The electromagnetic field potentials of an arbitrary charge and current distribution in Coulomb gauge. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2017. No. 1. P. 43–51 (in Russ.).

Автор:

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

Author:

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

THE ELECTROMAGNETIC FIELD POTENTIALS OF AN ARBITRARY CHARGE AND CURRENT DISTRIBUTION IN COULOMB GAUGE

A. N. FURS^a

^aBelarusian State University, Nezavisimosti avenue, 4, 220030, Minsk, Republic of Belarus

The field potentials of an arbitrary charge and current distribution are calculated in Coulomb gauge. It is shown that the vector potential is determined by not only the current density values at the retarded time but also prehistory of the charge density variation over the interval from the retarded time to the current time. Various representations of the Liénard – Wiechert potentials are obtained in Coulomb gauge. They are applied to the case of a uniform rectilinear moving point charge.

Key words: gauge invariance; Lorenz and Coulomb gauge; retarded potentials; Liénard – Wiechert potentials.

Одной из задач классической электродинамики является определение электромагнитного поля заданного распределения электрических зарядов и токов. Известно, что решение системы уравнений Максвелла

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi\rho, \quad \nabla \times \mathbf{B} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}, \quad (2)$$

где $\mathbf{E}$ – напряженность электрического поля; $\mathbf{B}$ – индукция магнитного поля; ρ – объемная плотность заряда; $\mathbf{j}$ – объемная плотность тока; c – скорость света в вакууме, может быть представлено через скалярный и векторный потенциалы φ и $\mathbf{A}$ электромагнитного поля следующим образом:

$$\mathbf{E} = -\nabla\varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}. \quad (3)$$

Уравнения (1) выполняются тождественно при подстановке в них соотношений (3), при этом потенциалы φ и $\mathbf{A}$ определены неоднозначно – согласно (3) совокупность потенциалов

$$\varphi' = \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial \chi}{\partial t}, \quad \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla\chi, \quad (4)$$

где χ – произвольная функция координат и времени, приводит к тем же значениям полей $\mathbf{E}$ и $\mathbf{B}$ (калибровочная инвариантность уравнений электродинамики). Произвольность в выборе потенциалов обычно ограничивают дополнительными условиями, наиболее часто используемое из которых – релятивистски инвариантное условие калибровки Лоренца:

$$\nabla \cdot \mathbf{A} + \frac{1}{c} \frac{\partial \varphi}{\partial t} = 0. \quad (5)$$

Совместное решение уравнений (2), (3) и (5) носит название запаздывающих потенциалов и имеет вид [1–3]

$$\varphi_L(\mathbf{x}, t) = \int d^3\mathbf{x}' \frac{\rho(\mathbf{x}', t - |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|/c)}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}, \quad \mathbf{A}_L(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{c} \int d^3\mathbf{x}' \frac{\mathbf{j}(\mathbf{x}', t - |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|/c)}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}, \quad (6)$$

где $\mathbf{x}$ – радиус-вектор точки наблюдения; t – текущий момент времени; индексы L указывают на то, что потенциалы подчинены условию Лоренца (5).

В ряде случаев используется условие

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0, \quad (7)$$

называемое условием калибровки Кулона (индексы C) и не являющееся релятивистски инвариантным. Оно применяется как при решении некоторых задач классической электродинамики, так и при записи

уравнений электродинамики в гамильтоновой форме и переходе к квантованию электромагнитного поля [4; 5]. Хотя формула для скалярного потенциала в калибровке Кулона хорошо известна

$$\varphi_c(\mathbf{x}, t) = \int d^3\mathbf{x}' \frac{\rho(\mathbf{x}', t)}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}, \quad (8)$$

в литературе отсутствуют соответствующие общие выражения для векторного потенциала в интегральном представлении вида (6). Их вывод методом функций Грина является целью настоящей работы. Существенно, что для поля φ_c (8) в отличие от полей запаздывающих потенциалов (6) характерен мгновенный отклик на изменение плотности заряда ρ в удаленных от точки наблюдения областях. Нами устанавливается, что такая «мгновенность» отклика скалярного потенциала компенсируется в уравнениях (3) соответствующим вкладом векторного потенциала, который, как оказывается, определяется значениями плотности заряда на временном интервале, ограниченном запаздывающим и текущим моментами времени.

Как частный случай полученных в работе общих соотношений в кулоновской калибровке выводятся потенциалы Лиенара – Вихерта для поля точечного заряда, движущегося по заданной траектории. Результаты согласуются с аналогичными результатами работы [6], в которой такие потенциалы были получены более сложным путем (в частности, с использованием разложений по сферическим гармоникам). В заключение вычисляются потенциалы поля равномерно и прямолинейно движущегося точечного заряда.

Отметим, что рассматриваемые здесь электромагнитные потенциалы в классической электродинамике выступают, скорее, как вспомогательные поля. Однако в квантовой теории они играют определяющую роль по сравнению с напряженностями $\mathbf{E}$ и $\mathbf{B}$, входя в основные уравнения теории [7], и в принципе являются наблюдаемыми величинами, имеющими прямой физический смысл (эффект Ааронова – Бома).

Уравнения Максвелла в потенциалах и их решения в кулоновской калибровке

При подстановке соотношений (3) в уравнения Максвелла (2) получается следующая система дифференциальных уравнений для потенциалов:

$$\Delta\varphi + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \nabla \cdot \mathbf{A} = -4\pi\rho, \quad \Delta\mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = -\frac{4\pi}{c} \mathbf{j} + \nabla \left(\nabla \cdot \mathbf{A} + \frac{1}{c} \frac{\partial \varphi}{\partial t} \right).$$

В калибровке Лоренца (5) она принимает вид

$$\Delta\varphi_L - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \varphi_L}{\partial t^2} = -4\pi\rho, \quad \Delta\mathbf{A}_L - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}_L}{\partial t^2} = -\frac{4\pi}{c} \mathbf{j} \quad (9)$$

и имеет решения, даваемые формулами (6). В калибровке Кулона (7) получаем

$$\Delta\varphi_c = -4\pi\rho, \quad \Delta\mathbf{A}_c - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}_c}{\partial t^2} = -\frac{4\pi}{c} \mathbf{j} + \frac{1}{c} \nabla \frac{\partial \varphi_c}{\partial t}. \quad (10)$$

Первое из соотношений (10) – это уравнение Пуассона, а его решением является (8). Дальнейшее рассмотрение касается векторного потенциала $\mathbf{A}_c$, в котором выделим части $\mathbf{A}_L$ (6) и $\mathbf{A}_\parallel$: $\mathbf{A}_c = \mathbf{A}_L + \mathbf{A}_\parallel$. В силу второго из соотношений (9) поле $\mathbf{A}_\parallel$ подчиняется уравнению

$$\Delta\mathbf{A}_\parallel - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}_\parallel}{\partial t^2} = \frac{1}{c} \nabla \frac{\partial \varphi_c}{\partial t},$$

а поле $\nabla \times \mathbf{A}_\parallel$ – однородному волновому уравнению. Исключая волновые решения для свободного пространства, устанавливаем, что $\nabla \times \mathbf{A}_\parallel = 0$, т. е. поле $\mathbf{A}_\parallel$ является потенциальным (продольным) полем и представляется градиентом некоторого скалярного поля ψ : $\mathbf{A}_\parallel = -\nabla\psi$. Таким образом,

$$\mathbf{A}_c = \mathbf{A}_L - \nabla\psi, \quad (11)$$

при этом ψ с точностью до произвольных слагаемых, зависящих только от времени, удовлетворяет уравнению

$$\Delta\psi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \varphi_c}{\partial t}. \quad (12)$$

Решение уравнения (12) с учетом первого из уравнений (10) находим, используя преобразования Фурье входящих в них функций в виде

$$f(\mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d^3\mathbf{k} d\omega e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - i\omega t} \tilde{f}(\mathbf{k}, \omega), \quad \tilde{f}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int_{-\infty}^{+\infty} d^3\mathbf{x}' dt' e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}' + i\omega t'} f(\mathbf{x}', t').$$

В результате

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \frac{4\pi i}{c} \int_{-\infty}^{+\infty} d^3\mathbf{k} d\omega \frac{\omega e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - i\omega t}}{k^2(\omega^2/c^2 - k^2)} \tilde{\rho}(\mathbf{k}, \omega),$$

где $k = |\mathbf{k}|$. Принимая во внимание преобразование Фурье для объемной плотности заряда $\tilde{\rho}(\mathbf{k}, \omega)$, последнее соотношение переписываем следующим образом:

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d^3\mathbf{x}' dt' G(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t - t') \rho(\mathbf{x}', t'), \quad (13)$$

где введена функция Грина

$$G(\mathbf{R}, \tau) = \frac{4\pi i}{(2\pi)^4 c} \int_{-\infty}^{+\infty} d^3\mathbf{k} d\omega \frac{\omega e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R} - i\omega \tau}}{k^2(\omega^2/c^2 - k^2)}. \quad (14)$$

Интегрирования в (14) удобно выполнить в сферических координатах (k, θ, ϕ) , направляя ось системы координат вдоль вектора $\mathbf{R}$. Тогда

$$G(\mathbf{R}, \tau) = \frac{4\pi i}{(2\pi)^4 c} \int_0^{+\infty} dk \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{\omega \sin \theta e^{ikR \cos \theta - i\omega \tau}}{\omega^2/c^2 - k^2},$$

где $R = |\mathbf{R}|$. Интегралы по угловым переменным рассчитываются элементарно. Вводя замену $\omega = c\Omega$, имеем

$$G(\mathbf{R}, \tau) = \frac{ic}{\pi^2 R} \int_0^{+\infty} dk \frac{\sin kR}{k} \int_{-\infty}^{+\infty} d\Omega \frac{\Omega e^{-i\Omega c\tau}}{\Omega^2 - k^2}. \quad (15)$$

Подынтегральное выражение в (15) содержит полюсы в точках $\Omega = \pm k$, поэтому для получения запаздывающей функции Грина смещаем их в нижнюю полуплоскость комплексной плоскости Ω :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\Omega \frac{\Omega e^{-i\Omega c\tau}}{\Omega^2 - k^2} = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \int_C d\Omega \frac{\Omega e^{-i\Omega c\tau}}{(\Omega - k + i\varepsilon)(\Omega + k + i\varepsilon)}. \quad (16)$$

При $\tau < 0$ контур интегрирования C проходит вдоль действительной оси и затем замыкается на бесконечности в верхней полуплоскости комплексной плоскости – интеграл (16) равен нулю. При $\tau > 0$ контур C замыкается в нижней полуплоскости и по теореме о вычетах интеграл равен $-2\pi i \cos(kc\tau)$. Таким образом,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\Omega \frac{\Omega e^{-i\Omega c\tau}}{\Omega^2 - k^2} = -2\pi i \cos kc\tau \Theta(\tau),$$

где $\Theta(\tau)$ – функция Хевисайда, равная нулю при $\tau < 0$ и единице при $\tau > 0$. Для $G(\mathbf{R}, \tau)$ имеем

$$G(\mathbf{R}, \tau) = \frac{c}{\pi R} \Theta(\tau) \int_0^{+\infty} \frac{dk}{k} [\sin k(c\tau + R) - \sin k(c\tau - R)].$$

Проинтегрировав по k , получаем окончательное выражение для функции Грина

$$G(\mathbf{R}, \tau) = \frac{c}{R} \Theta(\tau) \left[1 - \Theta\left(\tau - \frac{R}{c}\right) \right]. \quad (17)$$

Очевидно, что она равна $\frac{c}{R}$ при $0 < \tau < \frac{R}{c}$ и нулевая для остальных значений τ .

Подставляя теперь соотношение (17) в (13), для скалярного поля $\psi(\mathbf{x}, t)$ имеем

$$\psi(\mathbf{x}, t) = c \int d^3 \mathbf{x}' \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \frac{\rho(\mathbf{x}', t')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \Theta(t - t') \left[1 - \Theta\left(\frac{t - t' - |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}{c}\right) \right],$$

$$\psi(\mathbf{x}, t) = c \int d^3 \mathbf{x}' \int_{t - |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|/c}^t dt' \frac{\rho(\mathbf{x}', t')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}. \quad (18)$$

Наконец, согласно (6), (8), (11) и (18) выражения для потенциалов электромагнитного поля произвольного распределения зарядов $\rho(\mathbf{x}, t)$ и токов $\mathbf{j}(\mathbf{x}, t)$ в калибровке Кулона принимают вид

$$\varphi_C(\mathbf{x}, t) = \int d^3 \mathbf{x}' \frac{\rho(\mathbf{x}', t)}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|},$$

$$\mathbf{A}_C(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{c} \int d^3 \mathbf{x}' \frac{\mathbf{j}(\mathbf{x}', t - |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|/c)}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} - c \nabla \int d^3 \mathbf{x}' \int_{t - |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|/c}^t dt' \frac{\rho(\mathbf{x}', t')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}. \quad (19)$$

Как видно из (19), значение скалярного потенциала φ_C в точке наблюдения $\mathbf{x}$ определяется мгновенным распределением объемной плотности заряда $\rho(\mathbf{x}', t)$ в текущий момент времени t . В то же время в выражении для векторного потенциала $\mathbf{A}_C$ присутствуют два слагаемых. Первое из них (как и в лоренцевой калибровке) соответствует вкладу объемной плотности тока $\mathbf{j}$, взятой в запаздывающие моменты времени $t - |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|/c$. При этом величина запаздывания определяется расстоянием $|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|$ между точками $\mathbf{x}$ и $\mathbf{x}'$. Во втором же слагаемом учитывается вся предыстория изменения объемной плотности заряда ρ в точках $\mathbf{x}'$, начиная от запаздывающего момента $t - |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|/c$ и заканчивая текущим моментом t . Таким образом, можно говорить о сверхсветовом влиянии распределения зарядов ρ на формирование полей φ_C и $\mathbf{A}_C$ в точке наблюдения $\mathbf{x}$ (в отличие от полей φ_L и $\mathbf{A}_L$ (6)). Это влияние, впрочем, не сказывается на электрическом и магнитном полях $\mathbf{E}$ и $\mathbf{B}$. Действительно, потенциалы $\mathbf{A}_C$ и $\mathbf{A}_L$ отличаются лишь градиентом функции ψ (11). Поэтому

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}_C = \nabla \times \mathbf{A}_L. \quad (20)$$

Аналогично для электрического поля

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= -\nabla \varphi_C - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}_C}{\partial t} = -\nabla \varphi_C - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}_L}{\partial t} + \frac{1}{c} \nabla \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\nabla \int d^3 \mathbf{x}' \frac{\rho(\mathbf{x}', t)}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}_L}{\partial t} + \\ &+ \nabla \frac{\partial}{\partial t} \int d^3 \mathbf{x}' \int_{t - |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|/c}^t dt' \frac{\rho(\mathbf{x}', t')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} = -\nabla \int d^3 \mathbf{x}' \frac{\rho(\mathbf{x}', t)}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}_L}{\partial t} + \\ &+ \nabla \int d^3 \mathbf{x}' \frac{\rho(\mathbf{x}', t)}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} - \nabla \int d^3 \mathbf{x}' \frac{\rho(\mathbf{x}', t - |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|/c)}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} = -\nabla \varphi_L - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}_L}{\partial t}. \end{aligned} \quad (21)$$

Формулы (20) и (21) показывают, что в силу калибровочной инвариантности «сверхсветовые» потенциалы φ_C и $\mathbf{A}_C$ (19) приводят к тем же значениям полей $\mathbf{E}$ и $\mathbf{B}$, что и запаздывающие потенциалы φ_L и $\mathbf{A}_L$ (6). Переход от калибровки Кулона к калибровке Лоренца можно рассматривать как частный случай общих калибровочных преобразований (4) с функцией χ , равной ψ (18).

Выражение для векторного потенциала $\mathbf{A}_C$ может быть представлено в другом виде, если в (19) вычислить входящий туда градиент:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_C(\mathbf{x}, t) = & \frac{1}{c} \int \frac{d^3 \mathbf{x}'}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \left[\mathbf{j}(\mathbf{x}', t - |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|/c) - c\rho(\mathbf{x}', t - |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|/c) \frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \right] + \\ & + c \int d^3 \mathbf{x}' \int_{t - |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|/c}^t dt' \rho(\mathbf{x}', t') \frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^3}. \end{aligned} \quad (22)$$

Далее, применим полученные общие соотношения (19) и (22) к расчету потенциалов поля произвольно движущегося точечного заряда.

Потенциалы Лиенара – Вихерта в калибровке Кулона

Пусть задан закон движения $\mathbf{r} = \mathbf{r}(t)$ точечного заряда q . Тогда его скорость $\mathbf{v} = \mathbf{v}(t) = \frac{d\mathbf{r}(t)}{dt}$. Плотность заряда и плотность тока определяются выражениями:

$$\rho(\mathbf{x}, t) = q\delta(\mathbf{x} - \mathbf{r}(t)), \quad \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = q\mathbf{v}(t)\delta(\mathbf{x} - \mathbf{r}(t)), \quad (23)$$

где $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{r}(t))$ – дельта-функция. При подстановке формул (23) в (6) получаются потенциалы поля заряда в лоренцевой калибровке, называемые потенциалами Лиенара – Вихерта [1; 2]:

$$\varphi_L(\mathbf{x}, t) = \frac{q}{|\mathbf{x} - \mathbf{r}(t_r)| - \mathbf{v}(t_r) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{r}(t_r))/c}, \quad \mathbf{A}_L(\mathbf{x}, t) = \frac{q\mathbf{v}(t_r)/c}{|\mathbf{x} - \mathbf{r}(t_r)| - \mathbf{v}(t_r) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{r}(t_r))/c}. \quad (24)$$

Правые части формул (24) рассчитываются для запаздывающего (ретардированного) момента времени t_r , который находится из уравнения

$$c(t - t_r) = |\mathbf{x} - \mathbf{r}(t_r)|. \quad (25)$$

Для отыскания потенциалов Лиенара – Вихерта в калибровке Кулона предварительно находим функцию $\psi(\mathbf{x}, t)$ (18)

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{x}, t) &= qc \int d^3 \mathbf{x}' \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \frac{\delta(\mathbf{x}' - \mathbf{r}(t'))}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \Theta(t - t') [1 - \Theta(t - t' - |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|/c)] = \\ &= qc \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt'}{|\mathbf{x} - \mathbf{r}(t')|} \Theta(t - t') [1 - \Theta(t - t' - |\mathbf{x} - \mathbf{r}(t')|/c)] = qc \int_{t_r}^t \frac{dt'}{|\mathbf{x} - \mathbf{r}(t')|}. \end{aligned}$$

Тогда согласно (19) окончательно имеем (см. также [6])

$$\begin{aligned} \varphi_C(\mathbf{x}, t) &= \frac{q}{|\mathbf{x} - \mathbf{r}(t)|}, \\ \mathbf{A}_C(\mathbf{x}, t) &= \frac{q\mathbf{v}(t_r)/c}{|\mathbf{x} - \mathbf{r}(t_r)| - \mathbf{v}(t_r) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{r}(t_r))/c} - qc \nabla \int_{t_r}^t \frac{dt'}{|\mathbf{x} - \mathbf{r}(t')|}. \end{aligned} \quad (26)$$

Скалярный потенциал φ_C представляет собой мгновенный кулоновский потенциал точечного заряда. Векторный же потенциал $\mathbf{A}_C$ определяется состояниями заряда на участке его траектории, ограниченном ретардированным и текущим положениями заряда.

Еще одно представление для $\mathbf{A}_C$ получается из формулы (22):

$$\mathbf{A}_C(\mathbf{x}, t) = \frac{q \left[\frac{\mathbf{v}(t_r)}{c} - \frac{\mathbf{x} - \mathbf{r}(t_r)}{|\mathbf{x} - \mathbf{r}(t_r)|} \right]}{|\mathbf{x} - \mathbf{r}(t_r)| - \mathbf{v}(t_r) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{r}(t_r))/c} + qc \int_{t_r}^t dt' \frac{\mathbf{x} - \mathbf{r}(t')}{|\mathbf{x} - \mathbf{r}(t')|^3}. \quad (27)$$

Простейшим движением заряда является равномерное прямолинейное движение. Потенциалы в калибровке Кулона для этого случая будут рассчитаны далее.

Потенциалы поля равномерно и прямолинейно движущегося точечного заряда

Не теряя общности, будем считать, что в момент времени $t = 0$ равномерно и прямолинейно движущийся заряд находится в начале отсчета, а ось x направлена вдоль вектора его скорости $\mathbf{v}$. Тогда

$$\mathbf{r}(t) = vt\mathbf{e}_x, \quad \mathbf{v}(t) = v\mathbf{e}_x, \quad \mathbf{x} = x\mathbf{e}_x + y\mathbf{e}_y + z\mathbf{e}_z,$$

$$\mathbf{x} - \mathbf{r}(t) = (x - vt)\mathbf{e}_x + y\mathbf{e}_y + z\mathbf{e}_z, \quad |\mathbf{x} - \mathbf{r}(t)| = \sqrt{(x - vt)^2 + y^2 + z^2},$$

где $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$ – орты декартовой системы координат; v – модуль скорости заряда. Уравнение (25) для вычисления запаздывающего момента времени t_r принимает вид

$$c(t - t_r) = \sqrt{(x - vt_r)^2 + y^2 + z^2}, \quad (28)$$

откуда

$$t_r = \gamma^2 \left(t - \frac{vx}{c^2} - \frac{1}{c} \sqrt{(x - vt)^2 + \frac{y^2 + z^2}{\gamma^2}} \right), \quad (29)$$

где $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$. Знаменатели $|\mathbf{x} - \mathbf{r}(t_r)| - \frac{\mathbf{v}(t_r) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{r}(t_r))}{c}$, входящие в (24) и (26), будут равны

$$\begin{aligned} |\mathbf{x} - \mathbf{r}(t_r)| - \frac{\mathbf{v}(t_r) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{r}(t_r))}{c} &= c(t - t_r) - \frac{v}{c}(x - vt_r) = \\ &= c \left[t - \frac{vx}{c^2} - \left(1 - \frac{v^2}{c^2} \right) t_r \right] = \sqrt{(x - vt)^2 + \frac{y^2 + z^2}{\gamma^2}}. \end{aligned}$$

Согласно (24) получаем известные выражения для потенциалов поля точечного заряда в лоренцевой калибровке [1–3]:

$$\Phi_L(\mathbf{x}, t) = \frac{q}{\sqrt{(x - vt)^2 + (1 - v^2/c^2)(y^2 + z^2)}}, \quad (30)$$

$$\mathbf{A}_L(\mathbf{x}, t) = \frac{qv/c}{\sqrt{(x - vt)^2 + (1 - v^2/c^2)(y^2 + z^2)}} \mathbf{e}_x.$$

Для расчета потенциалов в кулоновской калибровке следует найти входящий в (26) интеграл. С учетом уравнения (28) имеем

$$\begin{aligned} - \int_{t_r}^t \frac{dt'}{|\mathbf{x} - \mathbf{r}(t')|} &= - \int_{t_r}^t \frac{dt'}{\sqrt{(x - vt')^2 + y^2 + z^2}} = \\ &= \frac{1}{v} \ln \left[x - vt + \sqrt{(x - vt)^2 + y^2 + z^2} \right] - \frac{1}{v} \ln \left[x - vt_r + c(t - t_r) \right]. \end{aligned}$$

Подставляя сюда значение t_r из (29), получаем

$$\begin{aligned} - \int_{t_r}^t \frac{dt'}{|\mathbf{x} - \mathbf{r}(t')|} &= \frac{1}{v} \ln \left[x - vt + \sqrt{(x - vt)^2 + y^2 + z^2} \right] - \\ &- \frac{1}{v} \ln \left[x - vt + \sqrt{(x - vt)^2 + \frac{y^2 + z^2}{\gamma^2}} \right] + \frac{1}{v} \ln \left(1 - \frac{v}{c} \right). \end{aligned}$$

Компонентами градиента в (26) являются частные производные по декартовым координатам:

$$\begin{aligned} -\frac{\partial}{\partial x} \int_{t_r}^t \frac{dt'}{|\mathbf{x} - \mathbf{r}(t')|} &= \frac{1}{v} \left[\frac{1}{\sqrt{(x-vt)^2 + y^2 + z^2}} - \frac{1}{\sqrt{(x-vt)^2 + (y^2 + z^2)/\gamma^2}} \right], \\ -\frac{\partial}{\partial y} \int_{t_r}^t \frac{dt'}{|\mathbf{x} - \mathbf{r}(t')|} &= \frac{y(x-vt)}{v(y^2 + z^2)} \left[\frac{1}{\sqrt{(x-vt)^2 + (y^2 + z^2)/\gamma^2}} - \frac{1}{\sqrt{(x-vt)^2 + y^2 + z^2}} \right], \\ -\frac{\partial}{\partial z} \int_{t_r}^t \frac{dt'}{|\mathbf{x} - \mathbf{r}(t')|} &= \frac{z(x-vt)}{v(y^2 + z^2)} \left[\frac{1}{\sqrt{(x-vt)^2 + (y^2 + z^2)/\gamma^2}} - \frac{1}{\sqrt{(x-vt)^2 + y^2 + z^2}} \right]. \end{aligned}$$

В результате скалярный потенциал поля точечного заряда, равномерно и прямолинейно движущегося со скоростью v , в калибровке Кулона имеет вид

$$\Phi_C(\mathbf{x}, t) = \frac{q}{\sqrt{(x-vt)^2 + y^2 + z^2}}, \quad (31)$$

а векторный потенциал запишется как

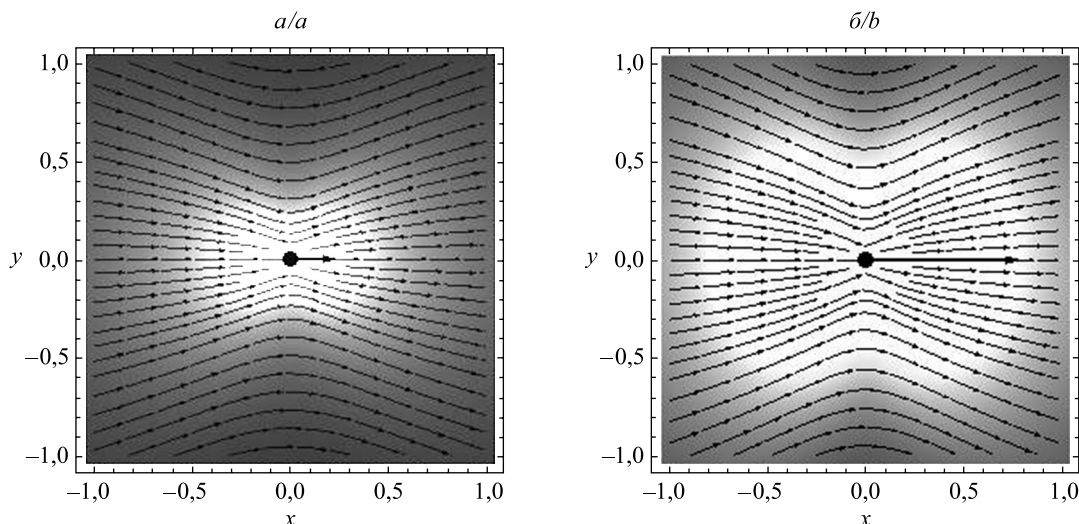
$$\begin{aligned} \mathbf{A}_C(\mathbf{x}, t) &= \frac{qc}{v} \left\{ \mathbf{e}_x \left[\frac{1}{\sqrt{(x-vt)^2 + y^2 + z^2}} - \frac{1-v^2/c^2}{\sqrt{(x-vt)^2 + (1-v^2/c^2)(y^2 + z^2)}} \right] + \right. \\ &\quad \left. + (y\mathbf{e}_y + z\mathbf{e}_z) \frac{x-vt}{y^2 + z^2} \left[\frac{1}{\sqrt{(x-vt)^2 + (1-v^2/c^2)(y^2 + z^2)}} - \frac{1}{\sqrt{(x-vt)^2 + y^2 + z^2}} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (32)$$

Прямым вычислением можно убедиться в том, что потенциал $\mathbf{A}_C$, как и требуется, удовлетворяет условию калибровки (7).

В отличие от потенциала $\mathbf{A}_L$ (30), направленного вдоль скорости v заряда, потенциал $\mathbf{A}_C$ (32) имеет также составляющие, перпендикулярные к v . При этом форма линий тока векторного поля $\mathbf{A}_C$ слабо зависит от значения скорости v (рисунок).

Для скалярного поля Φ_C (31) эквипотенциальными поверхностями являются сферы, в то время как для поля Φ_L (30) – эллипсоиды вращения. Потенциалы как Φ_L , $\mathbf{A}_L$, так и Φ_C , $\mathbf{A}_C$ в соответствии с уравнениями (3) приводят к следующим выражениям для электрического и магнитного полей равномерно и прямолинейно движущегося точечного заряда:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) &= \frac{q(1-v^2/c^2)}{\left[(x-vt)^2 + (1-v^2/c^2)(y^2 + z^2) \right]^{3/2}} \left[(x-vt)\mathbf{e}_x + y\mathbf{e}_y + z\mathbf{e}_z \right], \\ \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) &= \frac{qv(1-v^2/c^2)}{c \left[(x-vt)^2 + (1-v^2/c^2)(y^2 + z^2) \right]^{3/2}} (-z\mathbf{e}_y + y\mathbf{e}_z). \end{aligned}$$



Линии тока поля A_C (32) в плоскости xy при $t = 0$.
Скорость точечного заряда $v = 0,25c$ (a) и $v = 0,8c$ (б).

Светлые тона фона соответствуют большим значениям $|A_C|$, а темные – меньшим

Streamlines of the field A_C (32) in xy -plane at $t = 0$.
Speed of a point charge is $v = 0.25c$ (a) and $v = 0.8c$ (b).

Light background colors correspond to the greater values of $|A_C|$ and dark colors to the smaller ones

В заключение отметим, что соотношения (31), (32) для потенциалов в калибровке Кулона (как и более общие соотношения (19), (22), (26), (27)) верны лишь в одной выделенной инерциальной системе отсчета в отличие от соответствующих соотношений (30), (6), (24) для потенциалов в калибровке Лоренца, выполняющихся во всех инерциальных системах отсчета.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теория поля. М., 1973.
2. Джэксон Дж. Классическая электродинамика. М., 1965.
3. Бредов М. М., Румянцев В. В., Топтыгин И. Н. Классическая электродинамика. М., 1985.
4. Гайтлер В. Квантовая теория излучения. М., 1956.
5. Гинзбург В. Л. Теоретическая физика и астрофизика. Дополнительные главы. М., 1980.
6. Wundt B. J., Jentschura U. D. Sources, potentials and fields in Lorenz and Coulomb gauge: Cancellation of instantaneous interactions for moving point charges // Ann. Phys. 2012. Vol. 327, № 4. P. 1217–1230.
7. Ахизер А. И., Берестецкий В. Б. Квантовая электродинамика. М., 1969.

REFERENCES

1. Landau L. D., Lifshits E. M. Teoriya polya. Mosc., 1973 (in Russ.).
2. Dzheksun Dzh. Klassicheskaya elektrodinamika. Mosc., 1965 (in Russ.).
3. Bredov M. M., Rumyantsev V. V., Topotygin I. N. Klassicheskaya elektrodinamika. Mosc., 1985 (in Russ.).
4. Gaitler V. Kvantovaya teoriya izlucheniya. Mosc., 1956 (in Russ.).
5. Ginzburg V. L. Teoreticheskaya fizika i astrofizika. Dopolnitel'nye glavy. Mosc., 1980 (in Russ.).
6. Wundt B. J., Jentschura U. D. Sources, potentials and fields in Lorenz and Coulomb gauge: Cancellation of instantaneous interactions for moving point charges. Ann. Phys. 2012. Vol. 327, No. 4. P. 1217–1230.
7. Akhiezer A. I., Berestetskii V. B. Kvantovaya elektrodinamika. Mosc., 1969 (in Russ.).

Статья поступила в редколлегию 02.09.2016.
Received by editorial board 02.09.2016.

СФЕРИЧЕСКИЕ БЕССЕЛЕВЫ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ МАКСВЕЛЛА В НЕОДНОРОДНЫХ ВРАЩАТЕЛЬНО-СИММЕТРИЧНЫХ СРЕДАХ

А. В. НОВИЦКИЙ¹⁾, Р. Х. АЛЬВАРЕС РОДРИГЕС¹⁾, В. М. ГАЛЫНСКИЙ¹⁾

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

Для неоднородных бианизотропных сред обобщен матричный подход, применявшийся ранее для описания электромагнитных волн в однородных вращательно-симметричных средах. Предложен общий способ определения материальных параметров неоднородных сред в зависимости от профиля электромагнитной волны в среде. Рассмотрено решение обратной задачи, заключающейся в поиске материальных тензоров неоднородных вращательно-симметричных сред, в которых электрическое и магнитное поля волн описываются сферическими функциями Бесселя. Результативность матричного подхода продемонстрирована на конкретном примере. Данный подход может использоваться для создания требуемого отклика искусственной среды (метаматериала) на внешнее излучение.

Ключевые слова: анизотропная среда; метаматериалы; распространение электромагнитных волн.

SPHERICAL BESSEL SOLUTIONS OF MAXWELL'S EQUATIONS IN INHOMOGENEOUS ROTATIONALLY SYMMETRIC MEDIA

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

^aBelarusian State University, Nezavisimosti avenue, 4, 220030, Minsk, Republic of Belarus

Corresponding author: galynsky@bsu.by

Matrix approach applied earlier for description of electromagnetic waves in homogeneous rotationally symmetric media is generalized to inhomogeneous bianisotropic media. We propose the general method to determine material parameters of inhomogeneous media depending on the electromagnetic wave's profile. We consider an inverse problem which is the search of the material tensors of inhomogeneous rotationally symmetric media with predetermined electric and magnetic wave's fields in the form of spherical Bessel functions. Functioning of the approach is demonstrated with a particular example. The approach can be applied to create the required response of the artificial medium (metamaterial) on the external radiation.

Key words: anisotropic medium; metamaterials; propagation of electromagnetic waves.

Образец цитирования:

Новицкий А. В., Альварес Родригес Р. Х., Галынский В. М. Сферические бесселевы решения уравнений Максвелла в неоднородных вращательно-симметричных средах // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2017. № 1. С. 52–60.

For citation:

Novitsky A. V., Alvarez Rodriguez R. J., Galynsky V. M. Spherical Bessel solutions of Maxwell's equations in inhomogeneous rotationally symmetric media. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2017. No. 1. P. 52–60 (in Russ.).

Авторы:

Андрей Викторович Новицкий – доктор физико-математических наук, доцент; профессор кафедры теоретической физики и астрофизики физического факультета.

Ричард Хосе Альварес Родригес – аспирант кафедры теоретической физики и астрофизики физического факультета. Научный руководитель – А. В. Новицкий.

Владимир Михайлович Галынский – кандидат физико-математических наук; доцент кафедры теоретической физики и астрофизики физического факультета.

Authors:

Andrey Novitsky, doctor of science (physics and mathematics), docent; professor at the department of theoretical physics and astrophysics, faculty of physics.

novitsky@bsu.by

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

richardfby@gmail.co

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

galynsky@bsu.by

Введение

В последние годы электромагнитная теория получила новые объекты изучения – метаматериалы, представляющие собой искусственные периодические среды с периодом решетки, намного меньшим, чем длина волны взаимодействующего с ней излучения [1]. В узлах решетки метаматериала находятся рассеиватели, так называемые метаатомы, которые могут иметь разнообразные геометрические формы. Метаатом чаще всего производят из металла для того, чтобы среда обладала не только диэлектрической проницаемостью, но и искусственной магнитной проницаемостью благодаря наведенным электрическим токам. Метаматериал с поляризуемостью и намагниченностью может иметь отрицательный показатель преломления [2], теоретически описанный в [3]. Для приобретения этого свойства среда должна одновременно обладать отрицательными значениями диэлектрической и магнитной проницаемостей. Сложность структуры метаатома может приводить к разнообразным и необычным явлениям, аналогов которым нет в природе, таким как планарная киральность [4], волновое обтекание объектов электромагнитным излучением [5–8], необычные законы отражения света от структурированных поверхностей (метаповерхностей) [9; 10] и др. Несколько лет назад началось интенсивное изучение сильно анизотропных гиперболических метаматериалов, получивших свое название благодаря форме изочастотной дисперсионной кривой плоской электромагнитной волны, распространяющейся в них [11]. Свойствами гиперболических метаматериалов обладают многослойная металлodieлектрическая структура и решетка металлических проволок, встроенных в диэлектрическую матрицу. Обе формы достаточно просты для производства, в том числе и в наномасштабах, т. е. они могут использоваться и в оптическом диапазоне длин волн. Гиперболические метаматериалы применяются для создания гиперболических линз высокой разрешающей способности [12] и сильного магнитного отклика в диэлектрических структурах [13; 14], увеличения локальной плотности оптических состояний, что повышает скорость спонтанного излучения [15] и приводит к отклонениям от планковской теории черного излучения [16]. Вблизи топологического перехода от эллиптической дисперсии к гиперболической метаматериал обладает диэлектрической проницаемостью, равной нулю [17].

Цель настоящей работы – построение метода аналитического нахождения распределений электромагнитных полей при распространении в сложных неоднородных сферически-симметричных средах и решение обратной задачи – поиска структуры материальных тензоров по заданной топологии поля, что может быть использовано при моделировании взаимодействия неоднородных сферических частиц в узлах метаматериала с излучением. Возможность моделирования взаимодействия отдельных частиц с полем позволит разрабатывать метаматериалы с необходимыми электрическими и магнитными мультипольными моментами.

Достижение указанной цели определяет ряд задач. Во-первых, необходимо найти аналитические решения уравнений Максвелла для неоднородных сред в виде сферических функций Бесселя, т. е. в таком же виде, как для однородных сред. Во-вторых, нужно определить классы сред, дающих такие решения. В-третьих, следует продемонстрировать работу предлагаемого алгоритма решения на конкретном примере. Несмотря на то что задачу о распространении волн в неоднородных средах можно решать численными методами, ценность аналитических решений состоит в том, что они позволяют в дальнейшем получать рассеянный на сферических частицах свет с требуемыми характеристиками, а также вычислять значения мультипольных моментов для таких частиц. Известно, что последовательный подход к изучению волн в неоднородных бианизотропных вращательно-симметричных средах отсутствует. Существуют частные решения, полученные для целей геофизики и оптики атмосферы [18; 19], приближенные решения в геометрической оптике [20], а также решения с равными тензорами диэлектрической и магнитной проницаемостей в трансформационной оптике [21].

Матричный метод решения уравнений Максвелла

Для решения поставленной задачи воспользуемся матричным (операторным) методом решения уравнений Максвелла, который применялся для плоскостойких [22], цилиндрически-слоистых [23] и сферически-слоистых систем [24]. Общая идея состоит в сведении уравнений Максвелла в частных производных к системе обыкновенных уравнений первого порядка с помощью разделения переменных. Затем определяются операторы пространственной эволюции волн и тензоры поверхностных импедансов, позволяющие решить проблему рассеяния света. В настоящей работе решаются лишь уравнения Максвелла, но не граничная задача.

Условие вращательной симметрии сред [24; 25] подразумевает возможность разделения переменных в напряженностях стационарных электрического и магнитного полей

$$\mathbf{E}(r, \theta, \varphi, t) = \exp(-i\omega t) F_m(\theta, \varphi) \mathbf{E}(r);$$

$$\mathbf{H}(r, \theta, \varphi, t) = \exp(-i\omega t) F_{lm}(\theta, \varphi) \mathbf{H}(r)$$

с помощью тензорных функций углов

$$F_{lm} = Y_{lm}(\theta, \varphi) \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r + X_{lm}(\theta, \varphi) \otimes \mathbf{e}_r + (\mathbf{e}_r \times X_{lm}) \otimes \mathbf{e}_\varphi,$$

где r, θ и φ – сферические координаты; $\mathbf{e}_r, \mathbf{e}_\theta$ и $\mathbf{e}_\varphi$ – базисные векторы сферической системы координат; ω – круговая частота; $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ и $X_{lm}(\theta, \varphi)$ – скалярные и векторные сферические гармоники (l и m – целые числа); знак $\otimes$ – прямое (тензорное) произведение векторов, которые выделены жирным шрифтом. Тензоры диэлектрической ϵ и магнитной μ проницаемостей, а также псевдотензоры гирации α и κ коммутируют с F_{lm} и задаются следующим образом:

$$\xi(r) = \xi_1(r) \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r + \xi_2(r) I + i\chi_\xi \mathbf{e}_r^\times,$$

где ξ принимает значение ϵ, μ, α или κ ; $I = 1 - \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r$ – проектор на плоскость, ортогональную $\mathbf{e}_r$; $\mathbf{e}_r^\times$ – тензор, дуальный вектору $\mathbf{e}_r$ ($\mathbf{e}_r^\times \mathbf{a} = \mathbf{e}_r \mathbf{a}^\times = \mathbf{e}_r \times \mathbf{a}$) [26]. Тогда уравнения Максвелла для полей $\mathbf{E}(r)$ и $\mathbf{H}(r)$ принимают вид

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_r^\times \frac{d\mathbf{H}}{dr} + \frac{1}{r} \mathbf{e}_r^\times \mathbf{H} - \frac{i\sqrt{l(l+1)}}{r} \mathbf{e}_\varphi^\times \mathbf{H} &= -ik_0(\epsilon \mathbf{E} + \alpha \mathbf{H}); \\ \mathbf{e}_r^\times \frac{d\mathbf{E}}{dr} + \frac{1}{r} \mathbf{e}_r^\times \mathbf{E} - \frac{i\sqrt{l(l+1)}}{r} \mathbf{e}_\varphi^\times \mathbf{E} &= -ik_0(\mu \mathbf{E} + \kappa \mathbf{H}), \end{aligned}$$

где $k_0 = \frac{\omega}{c}$ – волновое число в вакууме. Отметим используемые в правой части уравнений материальные соотношения, в которых индукции электрического и магнитного полей выражаются не только через напряженности электрического и магнитного полей соответственно, но и через перекрестные слагаемые магнитоэлектрической связи [22–24].

Выделим продольные E_r, H_r и поперечные $\mathbf{E}_t = I\mathbf{E}, \mathbf{H}_t = I\mathbf{H}$ составляющие полей. Первые выражаются через вторые посредством алгебраических соотношений и потому могут быть исключены из системы дифференциальных уравнений. Поперечные составляющие удовлетворяют матрично-векторному уравнению, аналогичному системе четырех обыкновенных дифференциальных уравнений, которое в дальнейшем и будет решаться:

$$\frac{d\mathbf{W}}{dr} = ik_0 M(r) \mathbf{W}(r), \quad (1)$$

где

$$\begin{aligned} M(r) &= \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}, \quad \mathbf{W}(r) = \begin{pmatrix} \mathbf{H}_t \\ \mathbf{E}_t \end{pmatrix}; \\ A &= \frac{i}{k_0 r} I + \mathbf{e}_r^\times \alpha I - \kappa_1 \delta \frac{l(l+1)}{k_0^2 r^2} \mathbf{e}_\varphi \otimes \mathbf{e}_\theta, \quad B = \mathbf{e}_r^\times \epsilon I - \epsilon_1 \delta \frac{l(l+1)}{k_0^2 r^2} \mathbf{e}_\varphi \otimes \mathbf{e}_\theta; \\ C &= -\mathbf{e}_r^\times \mu I + \mu_1 \delta \frac{l(l+1)}{k_0^2 r^2} \mathbf{e}_\varphi \otimes \mathbf{e}_\theta, \quad D = \frac{i}{k_0 r} I - \mathbf{e}_r^\times \kappa I + \alpha_1 \delta \frac{l(l+1)}{k_0^2 r^2} \mathbf{e}_\varphi \otimes \mathbf{e}_\theta; \\ \delta &= (\epsilon_1 \mu_1 - \alpha_1 \kappa_1)^{-1}. \end{aligned}$$

Однородные среды с постоянными значениями ξ_1, ξ_2 и χ_ξ рассматривались в [24]. В настоящей работе нас будет интересовать случай зависящих от радиальной координаты r компонент тензоров. Для этого модифицируем метод решения, применявшийся для однородных сред. Представим матрицу $M(r)$ в виде суммы трех слагаемых:

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

причем в случае однородных сред матрицы $M^{(0)}$, $M^{(1)}$, $M^{(2)}$ становятся постоянными, а зависимость M от радиальной координаты определяется функциями при этих матрицах. $M^{(0)}$, $M^{(1)}$ и $M^{(2)}$ записываются в виде

$$M^{(0)}(r) = M_{\theta\theta}^{(0)}(r)I + M_{\varphi\theta}^{(0)}(r)e_r^\times; \quad M^{(1)}(r) = \frac{i}{k_0} M_{\theta\theta}^{(1)}(r)I; \quad M^{(2)}(r) = \frac{l(l+1)}{k_0^2} M_{\varphi\theta}^{(2)}(r)I,$$

где

$$M_{\theta\theta}^{(0)} = i \begin{pmatrix} -\chi_\alpha(r) & -\chi_\varepsilon(r) \\ \chi_\mu(r) & \chi_\kappa(r) \end{pmatrix}; \quad M_{\varphi\theta}^{(0)} = i \begin{pmatrix} \alpha_2(r) & \varepsilon_2(r) \\ -\mu_2(r) & -\kappa_2(r) \end{pmatrix};$$

$$M_{\theta\theta}^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad M_{\varphi\theta}^{(2)} = \delta(r) \begin{pmatrix} -\kappa_1(r) & -\varepsilon_1(r) \\ \mu_1(r) & \alpha_1(r) \end{pmatrix}.$$
(2)

Из системы уравнений (1) можно исключить φ -компоненты и получить дифференциальное уравнение второго порядка для неизвестного вектора с двумя θ -компонентами магнитного и электрического полей

$$\frac{d^2}{dr^2} \begin{pmatrix} H_\theta \\ E_\theta \end{pmatrix} + \left(Q_1(r) + \frac{2}{r} \right) \frac{d}{dr} \begin{pmatrix} H_\theta \\ E_\theta \end{pmatrix} + \left(Q_2(r) + \frac{1}{r} Q_1(r) + \frac{1}{r^2} Q_3(r) \right) \begin{pmatrix} H_\theta \\ E_\theta \end{pmatrix} = 0. \quad (3)$$

В (3) двумерные матрицы Q выражаются через матрицы M следующим образом:

$$Q_1 = -ik_0 \left(M_{\theta\theta}^{(0)} + M_{\varphi\theta}^{(0)} M_{\theta\theta}^{(0)} M_{\varphi\theta}^{(0)-1} \right) - \frac{dM_{\varphi\theta}^{(0)}}{dr};$$

$$Q_2 = -k_0^2 M_{\varphi\theta}^{(0)} \left(M_{\varphi\theta}^{(0)} + M_{\theta\theta}^{(0)} M_{\varphi\theta}^{(0)-1} M_{\theta\theta}^{(0)} \right) - ik_0 \left(\frac{dM_{\theta\theta}^{(0)}}{dr} - \frac{dM_{\varphi\theta}^{(0)}}{dr} M_{\varphi\theta}^{(0)-1} M_{\theta\theta}^{(0)} \right);$$

$$Q_3 = -l(l+1) M_{\varphi\theta}^{(0)} M_{\varphi\theta}^{(2)}.$$
(4)

После решения уравнения (3) φ -компоненты полей вычисляются по известным θ -компонентам согласно

$$\begin{pmatrix} H_\varphi \\ E_\varphi \end{pmatrix} = \hat{Z} \begin{pmatrix} H_\theta \\ E_\theta \end{pmatrix}; \quad \hat{Z} = -M_{\varphi\theta}^{(0)-1} \left(\frac{1}{ik_0} \frac{d}{dr} - \frac{i}{k_0 r} - M_{\theta\theta}^{(0)} \right),$$

где $\hat{Z}$ – дифференциальный матричный оператор. Таким образом, тангенциальные составляющие полей, как сумма φ - и θ -компонент, могут быть представлены в виде

$$\mathbf{W}(r) = S(r) \mathbf{C}, \quad S(r) = \begin{pmatrix} \eta_1(r) & \eta_2(r) \\ \zeta_1(r) & \zeta_2(r) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{C} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}, \quad (5)$$

где матрицы $\eta_{1,2}$ и $\zeta_{1,2}$ относятся к двум независимым решениям для магнитного и электрического полей соответственно, а вектор $\mathbf{C}$ в качестве компонент имеет четыре постоянных интегрирования матричного уравнения (3). Решение (5) может быть переписано в эволюционном виде, когда оператор эволюции $\Omega(r, r_0)$ (матрица 4×4), воздействуя на начальный вектор полей $\mathbf{W}(r_0)$, дает вектор полей в другой точке пространства:

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

где $\Omega(r, r_0) = S(r) S^{-1}(r_0)$. Эволюционные операторы и тензоры импеданса для независимых волн $\Gamma_{1,2}(r) = \zeta_{1,2}(r) \eta_{1,2}^{-1}(r)$ играют важную роль при решении граничной задачи.

Неоднородные среды

Для того чтобы найти среды, в которых электромагнитные поля описываются заданной функцией радиальной координаты, требуется решить обратную задачу. Сначала выбираем матричные функции $Q_{1,2,3}(r)$ таким образом, чтобы уравнение (3) имело наперед заданное решение. Затем решаем три дифференциальных матричных уравнения (4) относительно $M_{\theta\theta}^{(0)}(r)$, $M_{\phi\theta}^{(0)}(r)$ и $M_{\phi\phi}^{(2)}(r)$ при заданных $Q_{1,2,3}(r)$. Последний этап – восстановление материальных параметров по известным матрицам M . Таким образом можно найти все типы вращательно-симметричных сред, допускающие данное аналитическое решение. Проблема, однако, в том, что дифференциальные матричные уравнения (4) – нелинейные, а их решение представляет сложную задачу, требующую глубокого анализа. Поэтому мы используем дополнительные ограничения, которые позволят найти некоторые (но не все) решения поставленной задачи.

Будем считать, что матрицы $M_{\theta\theta}^{(0)}(r)$, $M_{\phi\theta}^{(0)}(r)$, $M_{\phi\phi}^{(2)}(r)$, $\frac{dM_{\theta\theta}^{(0)}}{dr}$ и $\frac{dM_{\phi\theta}^{(0)}}{dr}$ коммутируют, т. е. имеют одинаковый набор собственных векторов. Поскольку производные матриц входят в группу коммутирующих матриц, собственные векторы удобно выбрать постоянными, а матрицы представить в виде спектрального разложения

$$M_{\theta\theta}^{(0)} = \sum_{i=1}^2 f_i(r) \mathbf{a}_i \otimes \tilde{\mathbf{a}}_i; \quad M_{\phi\theta}^{(0)} = \sum_{i=1}^2 g_i(r) \mathbf{a}_i \otimes \tilde{\mathbf{a}}_i; \quad M_{\phi\phi}^{(2)} = \sum_{i=1}^2 h_i(r) \mathbf{a}_i \otimes \tilde{\mathbf{a}}_i, \quad (6)$$

где $f_i(r)$, $g_i(r)$ и $h_i(r)$ – собственные значения матриц; $\mathbf{a}_i$ и $\tilde{\mathbf{a}}_i$ – правые и левые собственные векторы, определяемые уравнениями $M_{\theta\theta}^{(0)} \mathbf{a}_i = f_i \mathbf{a}_i$ и $\tilde{\mathbf{a}}_i M_{\theta\theta}^{(0)} = \tilde{\mathbf{a}}_i f_i$ соответственно. Для них выполняются соотношения $\mathbf{a}_i \tilde{\mathbf{a}}_j = \delta_{ij}$, где δ_{ij} – символ Кронекера. Подставляем (6) в (4):

$$\begin{aligned} Q_1 &= -\sum_{i=1}^2 (2ik_0 f_i + g_i') \mathbf{a}_i \otimes \tilde{\mathbf{a}}_i; \\ Q_2 &= \sum_{i=1}^2 \left(-k_0^2 (f_i^2 + g_i^2) - ik_0 f_i' + ik_0 \frac{f_i g_i'}{g_i} \right) \mathbf{a}_i \otimes \tilde{\mathbf{a}}_i; \\ Q_3 &= -l(l+1) \sum_{i=1}^2 g_i h_i \mathbf{a}_i \otimes \tilde{\mathbf{a}}_i, \end{aligned}$$

где штрих обозначает производную по радиальной координате. Будем искать решения в виде сферических функций Бесселя. Для этого перепишем уравнение (3) с использованием подстановки

$$\begin{pmatrix} H_\theta(r) \\ E_\theta(r) \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{\pi}{2r}} \exp\left(-\frac{1}{2} \int Q_1(r) dr\right) \begin{pmatrix} y_1(r) \\ y_2(r) \end{pmatrix}; \quad \begin{pmatrix} y_1(r) \\ y_2(r) \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^2 y^{(i)}(r) \mathbf{a}_i. \quad (7)$$

Второе соотношение в (7) показывает, что новый, неизвестный, вектор может быть также разложен по введенным собственным векторам. Тогда для неизвестного вектора получаем из (3) уравнение

$$\frac{d^2}{dr^2} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} + \left(Q_2 - \frac{1}{4} Q_1^2 - \frac{1}{2} Q_1' + \frac{1}{r^2} \left(Q_3 - \frac{1}{4} \right) \right) \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = 0, \quad (8)$$

представляющее собой два независимых дифференциальных уравнения второго порядка, из которых находим $y^{(1)}$ и $y^{(2)}$. Выражение (8) будет уравнением Бесселя, лишь если слагаемое в скобках можно представить в виде

$$Q_2 - \frac{1}{4} Q_1^2 - \frac{1}{2} Q_1' + \frac{1}{r^2} \left(Q_3 - \frac{1}{4} \right) = A + \frac{B}{r^2}, \quad (9)$$

поэтому следует искать функции f_i , g_i и h_i в виде разложения по степеням радиальной координаты вида

$$f_i = \sum_{j=-\infty}^{\infty} F_j^{(i)} r^j; \quad g_i = \sum_{j=-\infty}^{\infty} G_j^{(i)} r^j; \quad h_i = \sum_{j=-\infty}^{\infty} H_j^{(i)} r^j.$$

Исследования показали, что, для того чтобы выполнялось соотношение (9), необходимо выбрать $g_i(r) = G_0^{(i)}$ и $h_i(r) = H_0^{(i)} + H_2^{(i)}r^2$, в то время как $f_i(r)$ остается произвольной. Тогда решением уравнения

$$\frac{d^2}{dr^2} y^{(i)} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} y^{(i)} + \left(-k_0^2 G_0^{(i)2} - l(l+1) G_0^{(i)} H_2^{(i)} - \frac{1 + 4l(l+1) G_0^{(i)} H_0^{(i)}}{4r^2} \right) y^{(i)} = 0$$

является цилиндрическая функция Бесселя или Ханкеля $y^{(i)} = B_{\nu_i}(\lambda_i r) c^{(i)}$ порядка $\nu_i = \sqrt{l(l+1) G_0^{(i)} H_0^{(i)} + \frac{1}{4}}$, причем $\lambda_i = \sqrt{-k_0^2 G_0^{(i)2} - l(l+1) G_0^{(i)} H_2^{(i)}}$, а $c^{(i)}$ – постоянная интегрирования. Стоит отметить существенное отличие от случая однородных сред, заключающееся в зависимости λ от целого числа l . При больших значениях l зависимость λ станет пропорциональной этому числу. Далее, θ -компоненты полей, согласно (7), равны:

$$\begin{pmatrix} H_\theta(r) \\ E_\theta(r) \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^2 e^{(ik_0 \int f_i(r) dr)} b_{\nu_i-1/2}(\lambda_i r) c^{(i)} \mathbf{a}_i,$$

где введены сферические функции $b_{\nu_i-1/2}(\lambda_i r) = \sqrt{\frac{\pi}{2r}} B_{\nu_i}(\lambda_i r)$. Получение тангенциальных компонент полей (5) является чисто технической задачей. Ее решение не требуется сейчас, но понадобится в будущем при рассмотрении рассеяния света на неоднородной сферической частице.

Пример восстановления материальных параметров

Материальные параметры неоднородных бианизотропных сред, имеющих распределение полей в виде сферической функции Бесселя, могут быть найдены из соотношений (2), так как матрицы M заданы выражениями (6). Единственная трудность состоит в определении $\delta(r)$, но она легко разрешается благодаря тому, что δ^{-1} – определитель матрицы, стоящей за ней в формулах (2). Тогда, вычисляя определитель правой и левой частей, получаем $\delta(r) = \det(M_{\phi\theta}^{(2)})$. Материальные тензоры имеют вид

$$\begin{aligned} \epsilon(r) &= -\frac{(e_1 M_{\phi\theta}^{(2)} e_2)}{\det(M_{\phi\theta}^{(2)})} e_r \otimes e_r + (e_1 M_{\phi\theta}^{(0)} e_2) I + i(e_1 M_{\theta\theta}^{(0)} e_2) e_r^\times; \\ \mu(r) &= \frac{(e_2 M_{\phi\theta}^{(2)} e_1)}{\det(M_{\phi\theta}^{(2)})} e_r \otimes e_r - (e_2 M_{\phi\theta}^{(0)} e_1) I - i(e_2 M_{\theta\theta}^{(0)} e_1) e_r^\times; \\ \alpha(r) &= \frac{(e_2 M_{\phi\theta}^{(2)} e_2)}{\det(M_{\phi\theta}^{(2)})} e_r \otimes e_r + (e_1 M_{\phi\theta}^{(0)} e_1) I + i(e_1 M_{\theta\theta}^{(0)} e_1) e_r^\times; \\ \kappa(r) &= -\frac{(e_1 M_{\phi\theta}^{(2)} e_1)}{\det(M_{\phi\theta}^{(2)})} e_r \otimes e_r - (e_2 M_{\phi\theta}^{(0)} e_2) I - i(e_2 M_{\theta\theta}^{(0)} e_2) e_r^\times, \end{aligned} \tag{10}$$

где e_1 и e_2 – единичные вектор-столбцы (1; 0) и (0; 1) соответственно.

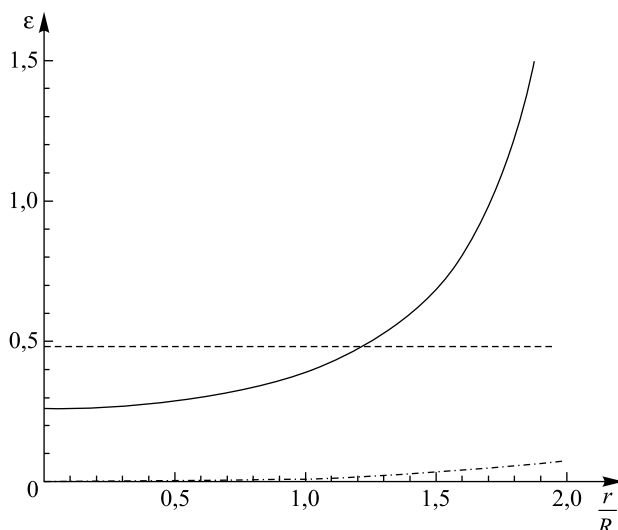
Рассмотрим пример материальных параметров, приводящих к решению в виде сферической функции Бесселя. Выберем произвольные собственные векторы в виде $\mathbf{a}_1 = \tilde{\mathbf{a}}_1 = \frac{1}{5} \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix}$, $\mathbf{a}_2 = \tilde{\mathbf{a}}_2 = \frac{1}{5} \begin{pmatrix} 4 \\ -3 \end{pmatrix}$, а собственные значения матриц M – как функции $f_1(r) = A_0 r^3$, $f_2(r) = \exp(\beta r)$, $g_1(r) = 2$, $g_2(r) = 1$, $h_1(r) = 1 + B_0 r^2$, $h_2(r) = 2$. Тогда решение для θ -компонент полей выражается, например, через сферическую функцию Бесселя j_ν

$$\begin{pmatrix} H_\theta(r) \\ E_\theta(r) \end{pmatrix} = \frac{1}{5} \begin{pmatrix} 3c^{(1)} \exp\left(\frac{ik_0 A_0 r^4}{4}\right) j_v(\lambda r) + 4c^{(2)} \exp\left(\frac{ik_0 \exp(\beta r)}{\beta}\right) j_v(ik_0 r) \\ 4c^{(1)} \exp\left(\frac{ik_0 A_0 r^4}{4}\right) j_v(\lambda r) - 3c^{(2)} \exp\left(\frac{ik_0 \exp(\beta r)}{\beta}\right) j_v(ik_0 r) \end{pmatrix},$$

где $v = \sqrt{2l(l+1) + \frac{1}{4}} - \frac{1}{2}$; $\lambda = \sqrt{-4k_0^2 - 2l(l+1)B_0}$. Тензор диэлектрической проницаемости (10) ра-

вен $\epsilon(r) = \frac{25(1-B_0 r^2)}{96(1+B_0 r^2)} \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r + \frac{12}{25} I - \frac{12(A_0 r^3 - \exp(\beta r))}{25} \mathbf{e}_r^\times$. Аналогично определяются и другие мате-

риальные тензоры. На рисунке представлены результаты расчета компонент тензора диэлектрической проницаемости, найденные в рассмотренном выше примере при параметрах $A_0 = 0,02R^3$, $B_0 = -0,2R^2$, $\beta = -1000R$. Параметр киральности χ_ϵ может быть сделан сколь угодно малым, а компонента ϵ_1 – как положительной (см. рисунок), так и знакопеременной. При разных знаках компонент ϵ_1 и ϵ_2 реализуется случай сферически-симметричного гиперболического метаматериала [11].



Зависимость компонент тензора диэлектрической проницаемости
от безразмерной радиальной координаты $\frac{r}{R}$ (R – масштабный множитель):

———— $\epsilon_1(r)$; - - - - - $\epsilon_2(r)$; - · - · - $\chi_\epsilon(r)$

Dependence of the permittivity tensor components on the dimensionless radial coordinate $\frac{r}{R}$ (R is the scale factor):

———— $\epsilon_1(r)$; - - - - - $\epsilon_2(r)$; - · - · - $\chi_\epsilon(r)$

Заключение

С помощью матричного (операторного) метода найден класс вращательно-симметричных сред, электрическое и магнитное поля в которых записываются в виде сферических функций Бесселя и Ханкеля. В связи с этим решалась обратная задача, позволившая восстановить тензоры диэлектрической и магнитной проницаемостей и псевдотензоры гирации по наперед заданным решениям. Отметим, что, для того чтобы восстановить диагональные материальные тензоры, нужно просто выбрать функции $f_{1,2}(r) = 0$ ($M_{\theta\theta}^{(0)} = 0$), которые сделают равными нулю все χ . Для исключения тензоров псевдогирации требуется наложить условие отсутствия диагональных элементов у матриц $M_{\theta\theta}^{(0)}$ и $M_{\phi\phi}^{(2)}$. Таким образом, решения (10) обеспечивают описание рассеивателя общего вида, создание которого в принципе осуществимо благодаря развитию физики метаматериалов. Данные рассеиватели могут быть встроены

в узлы метаповерхности для управления фазой отраженного света. Устройства, построенные на их основе, способны составить конкуренцию тем, которые используются в трансформационной оптике [21] для волнового обтекания объектов [8] и концентрации энергии. Благодаря своей неоднородности частицы могут обладать уникальными оптомеханическими свойствами, которые будут изучены в последующих работах.

Авторы благодарят Белорусский республиканский фонд фундаментальных исследований (грант Ф16Р-049) за финансовую поддержку.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

1. Sarychev A. K., Shalaev V. M. *Electrodynamics of metamaterials*. Singapore, 2007.
2. Composite medium with simultaneously negative permeability and permittivity / D. R. Smith [et al.] // *Phys. Rev. Lett.* 2000. Vol. 84, issue 18. P. 4184–4187.
3. Веселаго В. Г. Электродинамика веществ с одновременно отрицательными значениями ϵ и μ // *УФН*. 1967. Т. 92. С. 517–526.
4. Asymmetric propagation of electromagnetic waves through a planar chiral structure / V. A. Fedotov [et al.] // *Phys. Rev. Lett.* 2006. Vol. 97, issue 16. Article ID 167401.
5. Pendry J. B., Schurig D., Smith D. R. Controlling electromagnetic fields // *Science*. 2006. Vol. 312, issue 5781. P. 1780–1782.
6. Leonhardt U. Optical conformal mapping // *Science*. 2006. Vol. 312, issue 5781. P. 1777–1780.
7. Capturing photons with transformation optics / J. B. Pendry [et al.] // *Nat. Phys.* 2013. Vol. 9. P. 518–522.
8. Accessing extreme spatiotemporal localization of high-power laser radiation through transformation optics and scalar wave equations / V. Yu. Fedorov [et al.] // *Phys. Rev. Lett.* 2016. Vol. 117, issue 4. Article ID 043902.
9. Light propagation with phase discontinuities: generalized laws of reflection and refraction / N. Yu [et al.] // *Science*. 2011. Vol. 334, issue 6054. P. 333–337.
10. Chen H.-T., Taylor A. J., Yu N. A review of metasurfaces: physics and applications // *Rep. Prog. Phys.* 2016. Vol. 79, № 7. Article ID 076401.
11. Hyperbolic metamaterials / A. Poddubny [et al.] // *Nat. Photonics*. 2013. Vol. 7. P. 958–967.
12. Repan T., Lavrinenko A. V., Zhukovsky S. V. Dark-field hyperlens: Super-resolution imaging of weakly scattering objects // *Opt. Express*. 2015. Vol. 23, issue 19. P. 25350–25364.
13. Magnetic hyperbolic optical metamaterials / S. S. Kruk [et al.] // *Nat. Commun.* 2016. Vol. 7. Article ID 11329.
14. Mirmoosa M. S., Kosulnikov S. Yu., Simovski C. R. Magnetic hyperbolic metamaterial of high-index nanowires // *Phys. Rev. B*. 2016. Vol. 94, issue 7. Article ID 075138.
15. Purcell effect in hyperbolic metamaterial resonators / A. P. Slobozhanyuk [et al.] // *Phys. Rev. B*. 2015. Vol. 92, issue 19. Article ID 195127.
16. Blackbody theory for hyperbolic materials / S.-A. Biehs [et al.] // *Phys. Rev. Lett.* 2015. Vol. 115, issue 17. Article ID 174301.
17. Javani M. H., Stockman M. I. Real and imaginary properties of epsilon-near-zero materials // *Phys. Rev. Lett.* 2016. Vol. 117, issue 10. Article ID 107404.
18. Frazer L. N. Use of the spherical layer matrix in inhomogeneous media // *Geophys. J. Int.* 1977. Vol. 50, № 3. P. 743–749.
19. Babenko V. A., Astaghyeva L. G., Kuzmin V. N. *Electromagnetic scattering in disperse media: Inhomogeneous and anisotropic particles*. Chichester, 2003.
20. Кравцов Ю. А., Кравцов Ю. И. *Геометрическая оптика неоднородных сред*. М., 1980.
21. Leonhardt U., Philbin T. G. Transformation optics and the geometry of light // *Prog. Opt.* 2009. Vol. 53. P. 69–152.
22. Barkovskii L. M., Borzdov G. N., Lavrinenko A. V. Fresnel's reflection and transmission operators for stratified gyroanisotropic media // *J. Phys. A: Math. Gen.* 1987. Vol. 20, № 5. P. 1095–1106.
23. Novitsky A. V., Barkovskii L. M. Operator matrices for describing guiding propagation in circular bianisotropic fibres // *J. Phys. A: Math. Gen.* 2005. Vol. 38, № 2. P. 391–404.
24. Novitsky A. V., Barkovsky L. M. Matrix approach for light scattering from a multilayered rotationally symmetric bianisotropic sphere // *Phys. Rev. A*. 2008. Vol. 77, № 2. Article ID 033849.
25. Scattering by rotationally symmetric anisotropic spheres: Potential formulation and parametric studies / C.-W. Qiu // *Phys. Rev. E*. 2007. Vol. 75, issue 2. Article ID 026609.
26. Федоров Ф. И. *Теория гиротропии*. Минск, 1976.

REFERENCES

1. Sarychev A. K., Shalaev V. M. *Electrodynamics of metamaterials*. Singapore, 2007.
2. Smith D. R., Padilla W. J., Vier D. C., et al. Composite medium with simultaneously negative permeability and permittivity. *Phys. Rev. Lett.* 2000. Vol. 84, issue 18. P. 4184–4187.
3. Veselago V. G. Elektrodinamika veshchestv s odnovremenno otritsatel'nymi znacheniyami ϵ i μ [The electrodynamics of substances with simultaneously negative values of ϵ and μ]. *Usp. fiz. nauk*. 1967. Vol. 92. P. 517–526 (in Russ.).
4. Fedotov V. A., Mlyadonov P. L., Prosvirnin S. L., et al. Asymmetric propagation of electromagnetic waves through a planar chiral structure. *Phys. Rev. Lett.* 2006. Vol. 97, issue 16. Article ID 167401. DOI: 10.1103/PhysRevLett.97.167401.
5. Pendry J. B., Schurig D., Smith D. R. Controlling electromagnetic fields. *Science*. 2006. Vol. 312, issue 5781. P. 1780–1782.
6. Leonhardt U. Optical conformal mapping. *Science*. 2006. Vol. 312, issue 5781. P. 1777–1780.
7. Pendry J. B., Fernández-Domínguez A. I., Luo Y., et al. Capturing photons with transformation optics. *Nat. Phys.* 2013. Vol. 9. P. 518–522.
8. Fedorov V. Yu., Chanal M., Grojo D., et al. Accessing extreme spatiotemporal localization of high-power laser radiation through transformation optics and scalar wave equations. *Phys. Rev. Lett.* 2016. Vol. 117, issue 4. Article ID 043902.

9. Yu N., Genevet P., Kats M. A., et al. Light propagation with phase discontinuities: generalized laws of reflection and refraction. *Science*. 2011. Vol. 334, issue 6054. P. 333–337.
10. Chen H.-T., Taylor A. J., Yu N. A review of metasurfaces: physics and applications. *Rep. Prog. Phys.* 2016. Vol. 79, No. 7. Article ID 076401.
11. Poddubny A., Iorsh I., Belov P., et al. Hyperbolic metamaterials. *Nat. Photonics*. 2013. Vol. 7. P. 958–967. DOI: 10.1038/nphoton.2013.243.
12. Repan T., Lavrinenko A. V., Zhukovsky S. V. Dark-field hyperlens: Super-resolution imaging of weakly scattering objects. *Opt. Express*. 2015. Vol. 23, issue 19. P. 25350–25364. DOI: 10.1364/OE.23.025350.
13. Kruk S. S., Wong Z. J., Pshenay-Severin E., et al. Magnetic hyperbolic optical metamaterials. *Nat. Commun.* 2016. Vol. 7. Article ID 11329. DOI: 10.1038/ncomms11329.
14. Mirmoosa M. S., Kosulnikov S. Yu., Simovski C. R. Magnetic hyperbolic metamaterial of high-index nanowires. *Phys. Rev. B*. 2016. Vol. 94, issue 7. Article ID 075138. DOI: 10.1103/PhysRevB.94.075138.
15. Slobozhanyuk A. P., Ginzburg P., Powell D. A., et al. Purcell effect in hyperbolic metamaterial resonators. *Phys. Rev. B*. 2015. Vol. 92, issue 19. Article ID 195127. DOI: 10.1103/PhysRevB.92.195127.
16. Biehs S.-A., Lang S., Petrov A. Yu., et al. Blackbody theory for hyperbolic materials. *Phys. Rev. Lett.* 2015. Vol. 115, issue 17. Article ID 174301. DOI: 10.1103/PhysRevLett.115.174301.
17. Javani M. H., Stockman M. I. Real and imaginary properties of epsilon-near-zero materials. *Phys. Rev. Lett.* 2016. Vol. 117, issue 10. Article ID 107404. DOI: 10.1103/PhysRevLett.117.107404.
18. Frazer L. N. Use of the spherical layer matrix in inhomogeneous media. *Geophys. J. Int.* 1977. Vol. 50, No. 3. P. 743–749. DOI: 10.1111/j.1365-246X.1977.tb01345.x.
19. Babenko V. A., Astagiyeva L. G., Kuzmin V. N. Electromagnetic scattering in disperse media: Inhomogeneous and anisotropic particles. Chichester, 2003.
20. Kravtsov Yu. A., Kravtsov Yu. I. Geometricheskaya optika neodnorodnykh sred. Mosc., 1980 (in Russ.).
21. Leonhardt U., Philbin T. G. Transformation optics and the geometry of light. *Prog. Opt.* 2009. Vol. 53. P. 69–152.
22. Barkovskii L. M., Borzdov G. N., Lavrinenko A. V. Fresnel's reflection and transmission operators for stratified gyroanisotropic media. *J. Phys. A: Math. Gen.* 1987. Vol. 20, No. 5. P. 1095–1106.
23. Novitsky A. V., Barkovskii L. M. Operator matrices for describing guiding propagation in circular bianisotropic fibres. *J. Phys. A: Math. Gen.* 2005. Vol. 38, No. 2. P. 391–404.
24. Novitsky A. V., Barkovsky L. M. Matrix approach for light scattering from a multilayered rotationally symmetric bianisotropic sphere. *Phys. Rev. A*. 2008. Vol. 77, No. 2. Article ID 033849.
25. Qiu C.-W., Li L.-W., Yeo T.-S., et al. Scattering by rotationally symmetric anisotropic spheres: Potential formulation and parametric studies. *Phys. Rev. E*. 2007. Vol. 75, issue 2. Article ID 026609.
26. Fedorov F. I. Teoriya girotropii. Minsk, 1976 (in Russ.).

Статья поступила в редколлегию 02.09.2016.
Received by editorial board 02.09.2016.

ФОРМАЛИЗОВАННОЕ ОПИСАНИЕ ЛАВИНЫ ЭЛЕКТРОНОВ В КАНАЛЕ МИКРОКАНАЛЬНОЙ ПЛАСТИНЫ

Е. А. ЧУДОВСКАЯ¹⁾

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

Приведено формализованное описание образования и движения лавины вторичных электронов в канале микроканальной пластины, расположенном перпендикулярно ее входной поверхности. В функциональное уравнение (полученное ранее), описывающее этот процесс, добавлен коэффициент вторичной эмиссии покрытия канала, благодаря чему появилась возможность связать выходной импульс пластины с ее полупроводниковыми параметрами. Представлены математические выражения, описывающие движение каждого электрона как в формирующейся лавине, так и на выходе канала, и их вывод. Полученные таким образом формулы образуют уравнение, или аналитическую модель, формирования выходного сигнала. Его решения при разных исходных данных позволяют учесть практически все внутренние характеристики полупроводникового эмиттера и исследовать их влияние на такой выходной параметр пластины, как ее коэффициент усиления по току. Представлены вычисленные графики зависимости коэффициента усиления канала от глубины полупроводникового эмиттера и величины его запрещенной зоны. Кроме того, описаны результаты вычислений при предположении распределенного по глубине слоя эмиттера. Все выводы не противоречат экспериментальным данным.

Ключевые слова: канал микроканальной пластины; функциональное уравнение; плотности вероятности пролета электрона; уравнения движения частицы в электрическом поле; глубина слоя эмиттера; ширина запрещенной зоны полупроводника.

FORMAL DESCRIPTION OF ELECTRON AVALANCHE IN THE CHANNEL OF MICROCHANNEL PLATE

Е. А. TCHOUDOVSKAJA^a

^aBelarusian State University, Nezavisimosti avenue, 4, 220030, Minsk, Republic of Belarus

This article is the formalization description of the secondary emission electron avalanche creation and moving in the channel of the microchannel plate. The position of that channel is perpendicular to the input surface of the plate. There was added the secondary emission coefficient of the semiconductive coverage of the channel to the equation which was received early. This parameter has allowed connecting the output characteristic of the channel with initial parameters of the semiconductive layer. Then, there are the descriptions of the mathematical equations, which have received to describe every electron moving in the avalanche as well inside as outside of the channel. All of those formulas construct the resulting equation, or the analytical model, of the output signal of the MCP. The solution of this equation at the different input data allowed taking into account practically all inside characteristics of the semiconductive emitter and investigating their influence on the output current coefficient. As a result there are offered the calculated graphics of the output gain coefficient in dependence of the layer depth and the gain parameter. There are the calculation results for the distributed cover emitter depth. All the results do not contradict to the experimental data.

Key words: channel of a microchannel plate; functional equation; the electron transit probability density; equation of motion of particles in the electric field; emitter layer depth; bandgap.

Образец цитирования:

Чудовская Е. А. Формализованное описание лавины электронов в канале микроканальной пластины // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2017. № 1. С. 61–66.

For citation:

Tchoudovskaja E. A. Formal description of electron avalanche in the channel of microchannel plate. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2017. No. 1. P. 61–66 (in Russ.).

Автор:

Елена Аркадьевна Чудовская – кандидат физико-математических наук; доцент кафедры телекоммуникаций и информационных технологий факультета радиоп физики и компьютерных технологий.

Author:

Elena Tchoudovskaja, PhD (physics and mathematics); associate professor at the department of telecommunications and information technologies, faculty of radiophysics and computer technologies.
chudovskaja@bsu.by

При теоретическом исследовании работы канала микроканальной пластины (МКП) одной из основных задач является изучение процессов формирования его выходного сигнала, описать которые можно как методом имитационного моделирования, построив дискретно-событийную модель, так и аналитически. Сделаем это вторым способом.

Математической моделью образования лавины электронов в канале МКП является ветвящийся случайный процесс: любой электрон, вылетевший из его поверхности с некоторой начальной скоростью, движется вдоль тянущего поля до попадания либо на противоположную стенку, где он, обладая полученной дополнительной энергией, способен выбить вторичные электроны, либо на выход канала. Каждый из образованных таким образом вторичных электронов внутри канала становится первичным по отношению к новым вторичным. Этот процесс продолжается, пока все электроны в образовавшейся лавине не достигают конца канала.

В работе [1] предложена аналитическая модель процессов каскадного электронного умножения, построенная на представлении о последовательном умножении электронов в виде процесса рождения и гибели точек с использованием аппарата производящих функционалов. Полученное в [1] функциональное уравнение связывает характеристики результирующего потока электронов на выходе канала и потока, получающегося при взаимодействии одного электрона со стенкой канала в линейном режиме:

$$\lambda(v_1/\mu_1) = \int_G \lambda_0(\mu/\mu_1) \cdot \lambda(v_1/\mu) d\mu + \lambda'_0(v_1/\mu_1), \quad (1)$$

где $\lambda(v_1/\mu_1)$ и $\lambda'_0(v_1/\mu_1)$ – условные интенсивности потока обобщенных координат электронов соответственно после бесконечного числа каскадов умножения и одного каскада на выходе канала, если в точке с координатой μ_1 родился один электрон; $\lambda_0(\mu/\mu_1)$ – условная интенсивность потока обобщенных координат электронов внутри канала после одного каскада умножения; G – область задания потока пространственных координат электронов, находящихся в канале.

Преобразуем это уравнение для нашего случая и добавим коэффициент вторичной эмиссии поверхности канала пластины. Введение этой характеристики позволит учитывать физические параметры материала покрытия канала [2].

Перейдем от обобщенных координат к пространственным и временной. При этом в силу симметрии условий оставляем одну пространственную координату, направленную вдоль оси канала, и временную. Считаем, что электрон, вылетевший из точки внутри канала с координатами (y, τ) , попадает на продолжение стенки канала за его пределами в точку с координатами (x, t) . Тогда уравнение (1) можно переписать в следующем виде:

$$\lambda(x, t/y, \tau) = \int_y^x \int_\tau^t \lambda_0(z, \xi/y, \tau) \cdot \lambda(x, t/z, \xi) dz d\xi + \lambda'(x, t/y, \tau), \quad (2)$$

где (z, ξ) – координаты произвольной точки внутри канала, лежащей между точками рождения электрона и его гибели. Предполагаем, что все процессы, происходящие внутри канала, идентичны. В этом случае условные интенсивности в уравнении (1) можно заменить на разностные:

$$\lambda(t - \tau/x - y) = \int_y^x \int_\tau^t \lambda_0(\xi - \tau, z - y) \cdot \lambda(t - \xi/x - z) dz d\xi + \lambda'(t - \tau/x - y). \quad (3)$$

Добавим в полученное уравнение число вторичных электронов, рожденных от одного первичного, которые зависят от места его рождения в канале пластины. Для этого введем величину $\delta(z)$ вторичных электронов, рожденных от одного первичного, или $\delta(z)$ – коэффициент вторичной эмиссии в точке z канала МКП. Учтем это и, кроме того, сделаем замену переменных:

$$\begin{aligned} \xi - \tau &= \varphi, \quad d\xi = d\varphi; \\ \xi &= t : \varphi = t - \tau; \\ \xi &= \tau : \varphi = 0, \end{aligned} \quad (4)$$

тогда уравнение (3) с учетом (4) примет следующий вид:

$$\lambda(t - \tau/x - y) = \int_y^x \int_0^{t-\tau} \lambda_0(\varphi, z - y) \cdot \delta(z) \cdot \lambda(t - \varphi - \tau/x - z) d\varphi dz + \lambda'(t - \tau/x - y).$$

Обозначим $t - \tau = \vartheta$ и зафиксируем $x \equiv L$, где L – длина канала,

$$\lambda(\vartheta/L - y) = \int_0^{L-y} \int_0^{\vartheta} \lambda_0(\varphi, z - y) \cdot \delta(z) \cdot \lambda(\vartheta - \varphi/L - z) d\varphi dz + \lambda'(\vartheta/L - y).$$

Далее, произведем замену переменных: $z - y = v$; $dz = dv$ и обозначим $L - y = p$. Тогда уравнение (1) будет выглядеть следующим образом:

$$\lambda(\vartheta/p) = \int_0^p \int_0^{\vartheta} \lambda_0(\varphi, v) \cdot \delta(v + L - p) \cdot \lambda(\vartheta - \varphi/p - v) d\varphi dv + \lambda'(\vartheta/p), \quad (5)$$

где $0 \leq p \leq L$ – пространственный параметр; $0 \leq \vartheta \leq \infty$ – временной параметр.

Выразим условные интенсивности $\lambda_0(\varphi, v)$ и $\lambda'(\vartheta/p)$ через совместную плотность вероятности $w_2(x, t)$ пролета электроном расстояния x за время t внутри канала (координаты x и t независимы) и через условную плотность вероятности $w_1(t/L - x)$ достижения электроном конца канала за время t в случае, если он пролетел расстояние x соответственно. Кроме того, можно записать, что $\delta(v + L - p) \equiv \delta(x)$. Тогда уравнение (5) перепишется следующим образом:

$$l_1(t/L - x) = \int_0^x \int_0^t W_2(x, t) \cdot l_1(t - \xi/x - z) dz d\xi + w_1(t/L - x); \quad (6)$$

$$0 \leq x \leq L, \quad 0 \leq t \leq \infty,$$

где $W_2(x, t) = w_2(x, t)\delta(x)$.

Полученное функциональное уравнение (6) описывает одновременно создание и движение вторичной эмиссионной лавины в канале МКП вдоль его оси с учетом изменяющегося коэффициента вторичной эмиссии. В этом уравнении $l_1(t/L - x)$ – результирующая условная интенсивность потока электронов после бесконечного числа каскадов умножения; $l_1(t - \xi/x - z)$ – условная интенсивность после одного каскада умножения внутри канала. Иными словами, на основании физики описываемого процесса $l_1(t/L - x)$ – распределенный по времени коэффициент усиления канала пластины, или число электронов на выходе канала при условии, что на его вход попал один электрон, вызвавший бесконечное число каскадов умножения электронов внутри канала.

Для решения уравнения (6) с учетом конкретных интенсивностей пролета электронов в электрическом поле канала определяем явный вид функций $W_2(x, t)$ и $w_1(t/L - x)$.

Любой электрон, появившийся на полупроводниковой поверхности эмиттера канала, обладает случайной начальной скоростью $\vec{v}_0$. Это есть вектор, значение которого $|v_0|$ определяется случайной энергией вылета электрона с поверхности, а направление его можно описать случайными углами вылета α_1 и α_2 вдоль и перпендикулярно образующей канала соответственно.

Совместная плотность вероятности $w_2(x, t)$ по расстоянию и времени пролета электрона в электрическом поле до соударения со стенкой канала при наличии нескольких ветвей решения [3] запишется как

$$w_2(x, t) = \sum_{k=1}^n J \cdot w_3(E_k, \alpha_{1k}, \alpha_{2k}),$$

где $w_3(E_k, \alpha_{1k}, \alpha_{2k})$ – совместная плотность распределения по энергии и двум углам вылета вдоль и перпендикулярно оси канала соответственно; $J = \frac{\partial(E_k, \alpha_{1k}, \alpha_{2k})}{\partial(x, t, \alpha_{1k})}$ – якобиан обратного преобразования исходных и искомых случайных величин; n – число ветвей этого преобразования.

Считаем, что составляющие вектора скорости вылета электрона взаимно независимы [4], каждый из них определяется лишь свойствами материала поверхности эмиттера, а углы распределены по закону косинусов

$$w_i(\alpha_i) = \frac{1}{2} \cos(\alpha_i), \quad i = 1, 2,$$

с максимумом, соответствующим нормальному углу вылета по отношению к поверхности эмиттера. Для получения значения энергии E вылета электрона из поверхности используем закон распределения Рэлея, представляющий собой суперпозицию двух нормальных распределений во взаимно перпендикулярных плоскостях [3]:

$$w_1(E) = \frac{E}{\sigma^2} \exp\left\{-\frac{E^2}{2\sigma^2}\right\},$$

где σ – дисперсия в нем, и она связана со средней энергией вылета электрона с поверхности как [5]

$$\sigma = E \sqrt{\frac{2}{\pi}}.$$

Тогда совместная плотность распределения по углам и энергии вылета электрона есть произведение плотностей по каждой из этих величин:

$$w_3(E, \alpha_1, \alpha_2) = \frac{E}{4\sigma^2} \cos \alpha_1 \cos \alpha_2 \exp\left\{-\frac{E^2}{2\sigma^2}\right\}.$$

Далее, рассмотрим канал, расположенный под прямым углом к торцам пластины. В этом случае напряженность поля, обусловленная приложенной к пластине разностью потенциалов, направлена только вдоль оси канала. При таком расположении удобно исследовать ток термоэмиссии [6] и его зависимость от высоты и формы потенциального барьера поверхности. На рис. 1 представлены проекции начальной скорости вылетающего из поверхности канала электрона.

Для описания движения заряженной частицы в электрическом поле внутри канала (см. рис. 1) составим систему двух уравнений на основании того, что вдоль оси канала электрон пролетает расстояние x за время t , необходимое для достижения поверхности канала по его диаметру:

$$\begin{cases} x = v_x t + \frac{at^2}{2}, \\ t = \frac{D \cos \alpha_1}{v_e}, \end{cases}$$

где v_x и v_e – проекции скорости вылетающего электрона, определяемые как

$$v_x = \frac{v_0 \cdot \operatorname{tg} \alpha_2}{\sqrt{1 + \operatorname{tg}^2 \alpha_1 + \operatorname{tg}^2 \alpha_2}},$$

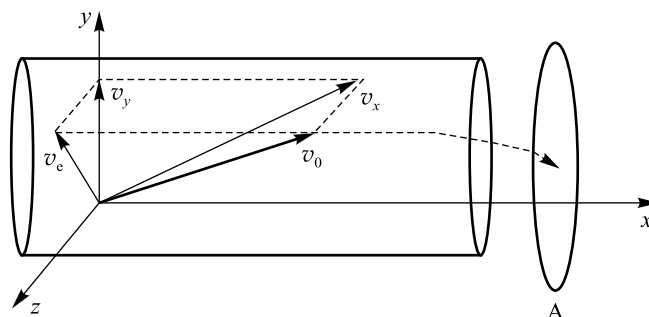


Рис. 1. Проекция скорости вылета электрона из поверхности канала
(A – анодная система прибора)

Fig. 1. The projections of the outfly electron velocity from the channel surface
(A is the device anode system)

$$v_e = \frac{v_x}{\cos \alpha_1 \cdot \operatorname{tg} \alpha_2},$$

где $v_0 = \sqrt{2 \left(\frac{q}{m_0} \right) u_0}$ – модуль скорости вылета вторичного электрона из эмиттерной поверхности, выраженный через энергию вылета u_0 , задаваемую в электронвольтах; $a = \frac{qU}{m_0 L}$ – ускорение, сообщаемое электрону постоянной напряженностью поля вдоль оси канала; L и D – длина канала и его диаметр соответственно; m_0 и q – масса и заряд свободного электрона соответственно.

Учитывая приведенные ранее рассуждения, получаем конкретный вид интересующих нас плотностей распределения электронов для канала, расположенного перпендикулярно торцевым поверхностям пластины:

$$w_2(x, t) = \frac{D^3}{\sigma_{ef} t^5} \int_0^{\pi/2} \frac{\cos^3 \alpha_1 (1 + \alpha_{ef})^2}{\left(1 + \frac{\alpha_{ef}}{\cos^2 \alpha_1} \right)^{3/2}} \exp \left\{ - \frac{D^4 \cos^4 \alpha_1 (1 + \alpha_{ef})^2}{\sigma_{ef} t^4} \right\} d\alpha_1, \quad (7)$$

где

$$\sigma_{ef} = \left(2\sigma \frac{q}{m_0} \right)^2, \quad \alpha_{ef} = \frac{(x - (at^2/2))^2}{D^2 \cos^2 \alpha_1};$$

$$w_1(t/L - x) = \int_0^D \frac{y^2 ((L - x) + (at^2/2))}{\sigma_{ef} t^5} \int_0^{\pi/2} \frac{\cos^3 \alpha_1 (1 + \alpha_{ef})^2}{\left(1 + \frac{\alpha_{ef}}{\cos^2 \alpha_1} \right)^{3/2}} \times \\ \times \exp \left\{ - \frac{y^4 \cos^4 \alpha_1 (1 + \alpha_{ef})^2}{2\sigma_{ef} t^4} \right\} d\alpha_1 dy. \quad (8)$$

Подставляя выражения (7) и (8) в уравнение (6) и решая его, получаем аналитическое описание, или модель, создания и движения лавины вторичных электронов в канале МКП, расположенном под прямым углом к торцевым поверхностям пластины, при условии рождения одного электрона на входе канала.

Полученная аналитическая модель позволяет учесть практически все внутренние характеристики полупроводникового эмиттера и исследовать их влияние на такой выходной параметр пластины, как ее коэффициент усиления по току. Для примера, на рис. 2 и 3 представлены результаты вычисления коэффициента усиления канала МКП в зависимости от глубины (толщины) слоя эмиттера и величины его запрещенной зоны. Из рис. 2 и 3 видно, что даже небольшие колебания этих величин ведут к сильному изменению значений коэффициента усиления канала. На рис. 2 показано, что при толщине эмиттера, превышающей 500 Å, усиление канала практически равно нулю. Это можно объяснить тем, что на глубине эмиттера свыше 500 Å не происходит процесс полной генерации электронно-дырочных пар. Иными словами, при таких глубинах эмиттера для построения модели необходимо учитывать длину свободного пробега электрона в полупроводниковом слое. При толщине эмиттера менее 200 Å может не хватать электронов, обладающих энергией, достаточной для образования вторично-эмиссионной лавины.

С помощью полученных в настоящей работе выражений также вычислялось влияние распределенного по глубине слоя эмиттера на коэффициент усиления канала. Расчеты показали, что при изменении толщины эмиттера от 200 Å в начале канала до 500 Å на его конце коэффициент усиления достигает $\sim 10^7$, тогда как изменение этой величины от 200 до 700 Å уменьшает значение коэффициента до $\sim 10^4$ электронов. Если же в начале канала положить слой эмиттера глубже, чем на его конце, то коэффициент усиления

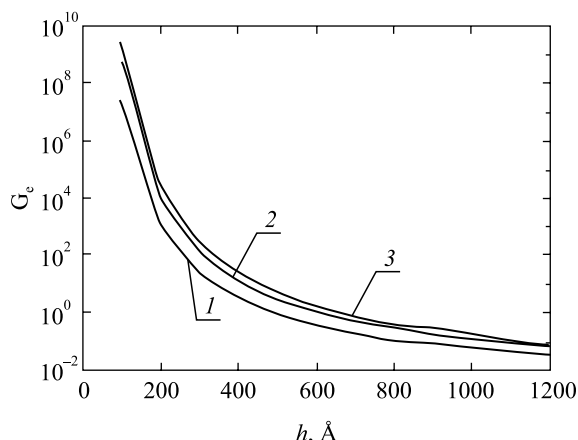


Рис. 2. Зависимость коэффициента усиления канала МКП G_e от глубины слоя полупроводникового эмиттера (h , Å) при различных напряжениях питания на пластине: $U = 900$ В (1); $U = 1000$ В (2); $U = 1100$ В (3)

Fig. 2. The dependence of the MCP channel gain factor on the semiconductive emitter depth (h , Å): $U = 900$ В (1); $U = 1000$ В (2); $U = 1100$ В (3)

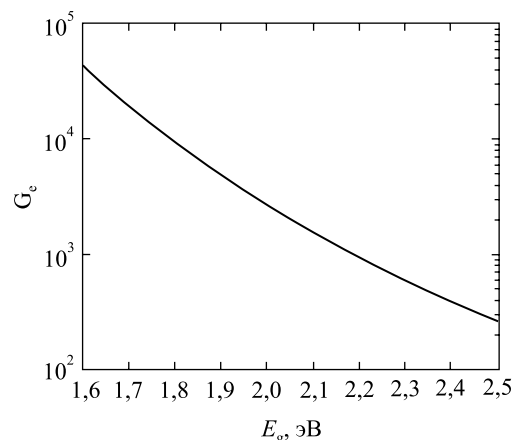


Рис. 3. Зависимость коэффициента усиления канала МКП G_e от ширины запрещенной зоны эмиттера E_g , эВ

Fig. 3. The dependence of the MCP channel gain factor on the emitter bandgap E_g , eV

канала можно свести практически к нулю. Чем тоньше слой эмиттера (в разумных пределах), тем больше коэффициент вторичной эмиссии, и наоборот. Наши исследования показали, что на коэффициент усиления канала большое влияние оказывает коэффициент вторичной эмиссии на начальных стадиях усиления. Этот результат подтверждается и экспериментальными данными. Распределенный по толщине эмиттер (тонкий в начале канала и более глубокий к концу) позволяет увеличить ток натекания электронов от источника питания, что уменьшает время восстановления и лишь незначительно снижает коэффициент усиления канала.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

1. Apanasovich V. V., Novikov E. G. Mathematical Model of the Microchannel Plate Single Electron Impulse Formation // IEEE Trans. Electr. Dev. 1995. Vol. 42, № 12. P. 2231–2235.
2. Чудовская Е. А. Процесс вторичной электронной эмиссии в канале микроканальной пластины // Вестн. БГУ. Сер. 1, Физика. Математика. Информатика. 2014. № 3. С. 34–38.
3. Левин Б. Р. Теоретические основы статистической радиотехники. М., 1974.
4. Бронштейн И. М., Фрайман Б. С. Вторичная электронная эмиссия. М., 1969.
5. Гихман И. И., Скороход А. В., Ядренко М. И. Теория вероятностей и математическая статистика. Киев, 1979.
6. Чудовская Е. А. Темновой ток канала микроканальной пластины // Вестн. БГУ. Сер. 1, Физика. Математика. Информатика. 2014. № 1. С. 39–43.

REFERENCES

1. Apanasovich V. V., Novikov E. G. Mathematical Model of the Microchannel Plate Single Electron Impulse Formation. IEEE Trans. Electr. Dev. 1995. Vol. 42, No. 12. P. 2231–2235.
2. Chudovskaja E. A. The Secondary Emission Process in a Channel of the Micro Channel Plate. Vestnik BGU. Ser. 1, Fiz. Mat. Inform. 2014. No. 3. P. 34–38 (in Russ.).
3. Levin B. R. Teoreticheskie osnovy statisticheskoi radiotekhniki. Mosc., 1974 (in Russ.).
4. Bronshtein I. M., Fraiman B. S. Vtorichnaya elektronnaya emissiya. Mosc., 1969 (in Russ.).
5. Gikhman I. I., Skorokhod A. V., Yadrenko M. I. Teoriya veroyatnostei i matematicheskaya statistika. Kiev, 1979 (in Russ.).
6. Chudovskaja E. A. The Dark Current of a Channel in the Micro Channel Plate. Vestnik BGU. Ser. 1, Fiz. Mat. Inform. 2014. No. 1. P. 39–43 (in Russ.).

Статья поступила в редколлегию 30.09.2016.
Received by editorial board 30.09.2016.

ФИЗИКА ЯДРА И ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ

ATOMIC NUCLEUS AND ELEMENTARY PARTICLE PHYSICS

УДК 539.12.01

ИССЛЕДОВАНИЕ ФЕРМИОНОВ РАЗЛИЧНЫХ ПОКОЛЕНИЙ В ПРОЦЕССАХ СТОЛКНОВЕНИЯ С ФОТОНАМИ ВЫСОКОЙ ЭНЕРГИИ

И. А. ШЕРШЕНЬ¹⁾, Т. В. ШИШКИНА¹⁾

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

Получены лоренц-инвариантные дифференциальные и полные сечения рассеяния фотонов на лептонах различных поколений. Проведены численный расчет и исследование рассеяния фотонов на лептонах различных поколений. Показано, что сечение рассеяния фотон-фермионных процессов уменьшается с увеличением массы ферми-частиц. Исследования процессов такого типа планируется проводить на Международном линейном коллайдере для проверки теории электрослабого взаимодействия, поиска эффектов за пределами Стандартной модели, а также конструирования неминимальных калибровочных теорий.

Ключевые слова: сечение; рассеяние; Стандартная модель; линейные коллайдеры.

Образец цитирования:

Шершень И. А., Шишкина Т. В. Исследование фермионов различных поколений в процессах столкновения с фотонами высокой энергии // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2017. № 1. С. 67–72.

For citation:

Shershan I. A., Shishkina T. V. The different generations fermions investigation in it scattering by high energy photon beams. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2017. No. 1. P. 67–72 (in Russ.).

Авторы:

Иван Андреевич Шершень – магистрант кафедры теоретической физики и астрофизики физического факультета. Научный руководитель – Т. В. Шишкина.

Татьяна Викентьевна Шишкина – доктор физико-математических наук, профессор; профессор кафедры теоретической физики и астрофизики физического факультета.

Authors:

Ivan Shershan, master's degree student at the department of theoretical physics and astrophysics, faculty of physics. undershroud@gmail.com

Tatiana Shishkina, doctor of science (physics and mathematics), full professor; professor at the department of theoretical physics and astrophysics, faculty of physics.

THE DIFFERENT GENERATIONS FERMIONS INVESTIGATION IN IT SCATTERING BY HIGH ENERGY PHOTON BEAMS

I. A. SHERSHAN^a, T. V. SHISHKINA^a

^aBelarusian State University, Nezavisimosti avenue, 4, 220030, Minsk, Republic of Belarus

Corresponding author: undershroud@gmail.com

The paper is devoted to the investigation of differential and total cross sections of photon-fermion processes and calculation of the amplitudes of such processes. The cross sections for the scattering of photons by leptons of different generations were calculated and investigated in Lorentz-invariant form. It was discovered that the scattering cross section of photon-fermion processes decreases when the fermion's masses were grows. These processes will be investigated on the planned International Linear Collider to test the theory of electroweak interaction to discover the effects beyond Standard Model and to construct of nonminimal gauge theory.

Key words: scattering; cross section; Standard Model; International Linear Collider.

После открытия бозона Хиггса основные надежды на быстрое развитие экспериментальной ситуации в физике высоких энергий принято связывать с программой исследований на линейных коллайдерах, позволяющих изучать процессы e^+e^- , $e\gamma$, $\gamma\gamma$ -рассеяний при предельно высоких энергиях, достижимых в современной науке. Поскольку максимальная энергия на коллайдерах новых поколений будет достигать нескольких тераэлектронвольт, требуется не только высокая точность измерений, но и исключительное внимание к прецизионному расчету и анализу значений измеряемых величин. Вот почему проблема получения точных выражений, учитывающих высшие порядки теории возмущений, является важной задачей [1, 2]. Такая точность при проведении теоретических и экспериментальных исследований в сочетании с предельно высокими энергиями обуславливает возможность решения одной из принципиальных задач физики элементарных частиц – обнаружение проявлений и конструирование расширенной калибровочной группы электрослабого взаимодействия.

Процессы взаимодействия элементарных частиц, рассмотренные в настоящей работе, планируется экспериментально изучать на линейных коллайдерах новых поколений [3]. Опыты, проводимые на коллайдерах такого типа, имеют ряд существенных преимуществ перед выполняемыми на других моделях. Поскольку рассеяние фотонов высокой энергии обладает большим поперечным сечением по сравнению с лептон-лептонными взаимодействиями, фотонные пучки предоставляют уникальную возможность для исследования физики электрослабого взаимодействия и квантовой хромодинамики [4–7]. Вопросы использования фотонных пучков (в том числе и циркулярно поляризованных) подробно обсуждаются при планировании экспериментальных программ Международного линейного коллайдера (International Linear Collider, ILC) [8; 9].

Лептонные столкновения обладают значительными эффектами, связанными с излучением частиц высоких энергий. Для преодоления возникающих проблем приходится корректировать форму этих пучков, уменьшая достигаемую светимость. В случае фотонных коллайдеров эти проблемы отсутствуют и можно использовать более плотные пучки указанных частиц, сохраняя высокую светимость.

В работе рассмотрены процессы лептон-фотонного взаимодействия

$$l^\pm(p) + \gamma(k) \rightarrow l^\pm(p') + \gamma(k'),$$

где p и k – 4-векторы импульса начальных лептона и фотона соответственно; p' и k' – 4-импульсы конечных частиц (лептона и фотона). При этом $p = (p^0, \vec{p})$.

Диаграммы Фейнмана, описывающие рассматриваемый процесс в борновском порядке, приведены на рис. 1. Следует отметить, что их связывает друг с другом кроссинг-симметрия.

Соответствующие данным диаграммам ковариантные выражения дифференциального и полного сечений рассеяния могут быть записаны следующим образом:

$$\frac{d\sigma}{dQ^2} = \frac{32\pi\alpha^2}{(s-m^2)^2} \left\{ \frac{1}{4} \left(\frac{m^2 - s + Q^2}{s - m^2} + \frac{s - m^2}{m^2 - s + Q^2} \right) - \left(\frac{m^2}{s - m^2} + \frac{m^2}{m^2 - s + Q^2} \right)^2 - \left(\frac{m^2}{s - m^2} + \frac{m^2}{m^2 - s + Q^2} \right) \right\};$$

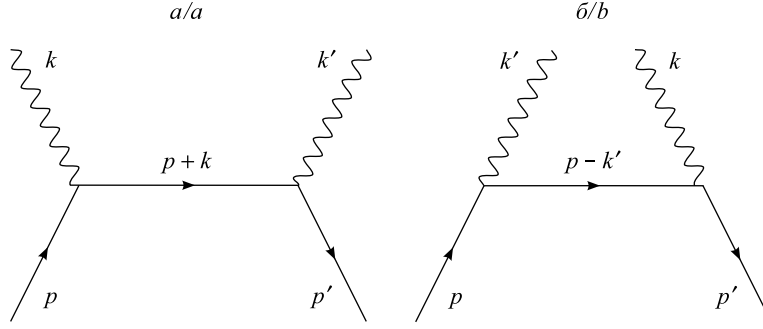


Рис. 1. Диаграммы процесса $l^-\gamma \rightarrow l^-\gamma$ в борновском приближении:

a – исходная диаграмма; b – кроссинг-симметричная диаграмма

Fig. 1. Diagrams of $l^-\gamma \rightarrow l^-\gamma$ process in the Born approximation:

a – original diagram; b – crossing symmetric diagram

$$\sigma = \frac{8\pi\alpha^2}{s-m^2} \left\{ \frac{1}{2} + \frac{8m^2}{s-m^2} - \frac{m^4}{2s^2} + \left(1 - \frac{8m^4}{(s-m^2)^2} - \frac{4m^2}{s-m^2} \right) \ln \left[\frac{s}{m^2} \right] \right\},$$

где m – масса начального лептона; s и Q^2 – лоренц-инвариантные величины, выражающиеся следующим образом:

$$s = (p+k)^2, \quad Q^2 = -(p-p')^2.$$

При этом s характеризует общую энергию системы частиц, а Q^2 – передачу энергии-импульса от начальных частиц к конечным.

Цель настоящей работы – исследование процессов фотонного рассеяния лептонами различных поколений. Рассмотрим сначала рассеяние фотона на электроне.

На рис. 2 приведены графики зависимости дифференциального (см. рис. 2, a) и полного (см. рис. 2, b) сечений от инварианта s при различных значениях $\sqrt{Q^2}$ (от 800 ГэВ до 3 ТэВ). Очевидно, что дифференциальное сечение резко убывает с ростом s . Можно заметить, что при энергии начальных частиц $E = 20$ ГэВ полное сечение рассеяния не превышает 0,5 фб.

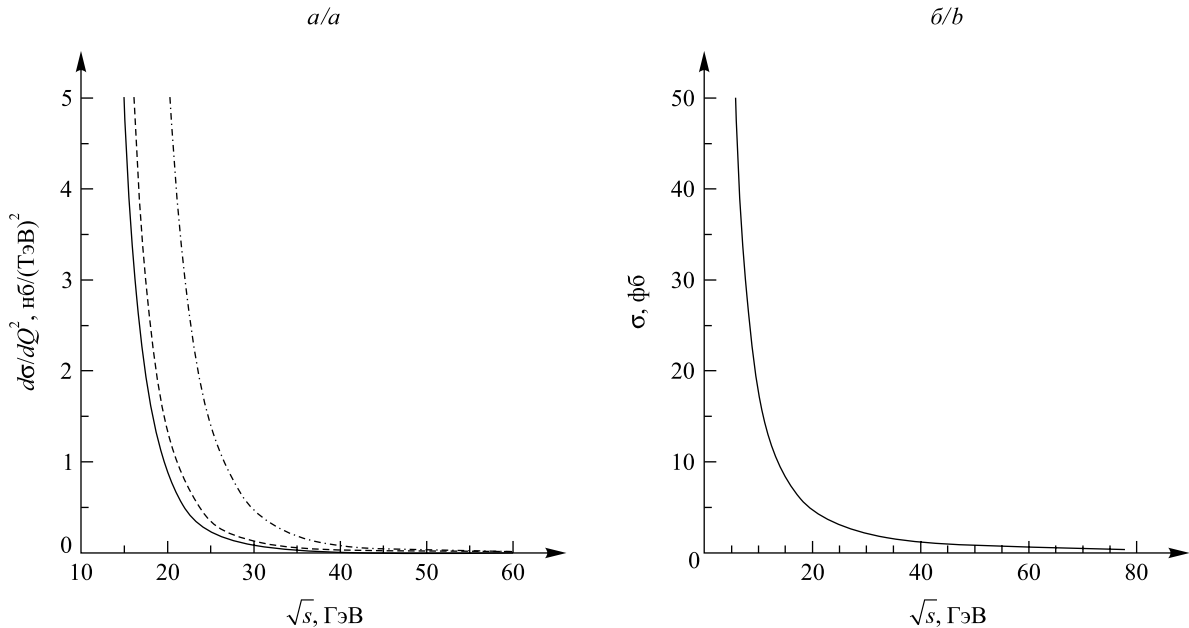


Рис. 2. Сечения рассеяния $d\sigma/dQ^2$ (a), σ (b) при следующих значениях $\sqrt{Q^2}$:
——— 800 МэВ; - - - - - 1 ТэВ; ····· 3 ТэВ

Fig. 2. Scattering cross sections $d\sigma/dQ^2$ (a), σ (b) for the following values of $\sqrt{Q^2}$:
——— 800 MeV; - - - - - 1 TeV; ····· 3 TeV

С изменением значения переданного импульса сечения определяются в разных кинематических областях. Чем больше переданный импульс, тем меньше кинематическая область изменения соответствующего сечения (как дифференциального, так и полного). Дифференциальное сечение увеличивается в значительной мере с ростом значения переданного импульса, что позволяет использовать процессы рассеяния частиц различных энергий для подробного анализа взаимодействий в разных частях кинематической области.

График, представленный на рис. 3, свидетельствует о том, что кинематическая область процесса ограничена с двух сторон: есть минимальное и максимальное допустимые значения для Q^2 . Причем абсолютная величина максимального значения Q^2 растет при увеличении энергии начальных фотонов, в то время как с ростом энергии фотона значения сечений уменьшаются. Наиболее вероятным исходом рассеяния при фиксированной энергии начальных частиц будет передача фотоном минимально возможной энергии частице. При этом чем меньше энергия начальных частиц, тем больше вероятность передачи фотоном минимально возможной энергии частице.

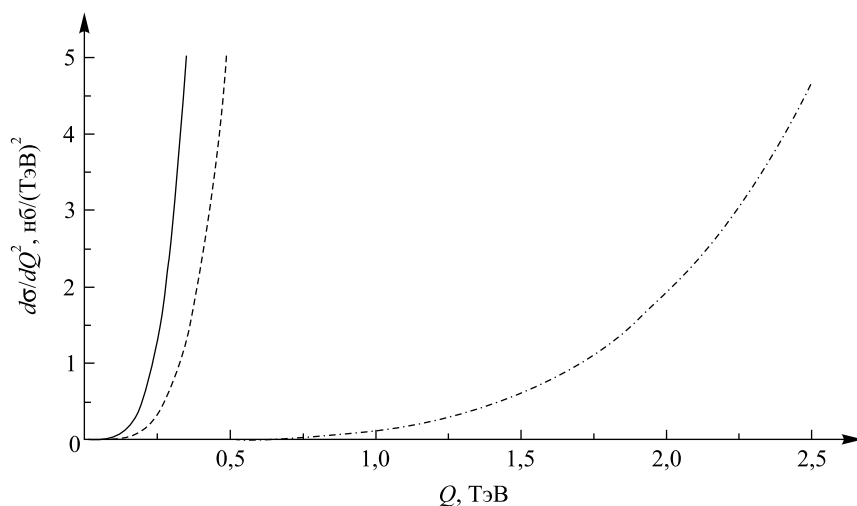


Рис. 3. Сечение рассеяния $d\sigma/dQ^2$ при следующих значениях энергии взаимодействия:
——— 800 МэВ; - - - - - 1 ТэВ; - · - · - 3 ТэВ

Fig. 3. Scattering cross sections $d\sigma/dQ^2$ for the following values of the interaction energy:
——— 800 MeV; - - - - - 1 TeV; - · - · - 3 TeV

С увеличением энергии дифференциальное и полное сечения рассеяния уменьшаются, таким образом, возникают дополнительные возможности исследования эффектов, определяемых «слабой» частью электрослабого взаимодействия. При росте энергии также увеличивается развертка сечений, которые охватывают все большую кинематическую область, что открывает новые перспективы экспериментального исследования. Эти выводы справедливы и для других видов лептонов.

Рассмотрим теперь зависимость дифференциального сечения рассеяния от массы частиц, участвующих во взаимодействии. На рис. 4 приведены дифференциальные и полные сечения рассеяния для различных типов лептонов – электрона (см. рис. 4, а), мюона (см. рис. 4, б), τ -лептона (см. рис. 4, в).

Здесь инварианты $\sqrt{s}$ и $\sqrt{Q^2}$ в системе центра масс (СЦМ) могут быть записаны следующим образом:

$$\sqrt{s} = E_{\text{СЦМ}} = \epsilon + \omega;$$

$$\sqrt{Q^2} = \omega \sqrt{1 - \cos \theta},$$

где $E_{\text{СЦМ}}$ – энергия взаимодействия частиц в СЦМ; ω – энергия начального фотона; $\epsilon = \sqrt{\omega^2 - m^2}$ – энергия начального лептона; m – масса лептона.

В зависимости от вида частиц изменяется кинематическая область протекания реакций, поскольку минимальная энергия системы фотон – лептон не может быть меньше квадрата массы самого лептона. Это позволит в будущем выбирать адекватную область исследования с точки зрения поиска и идентификации эффектов, выходящих за рамки Стандартной модели.

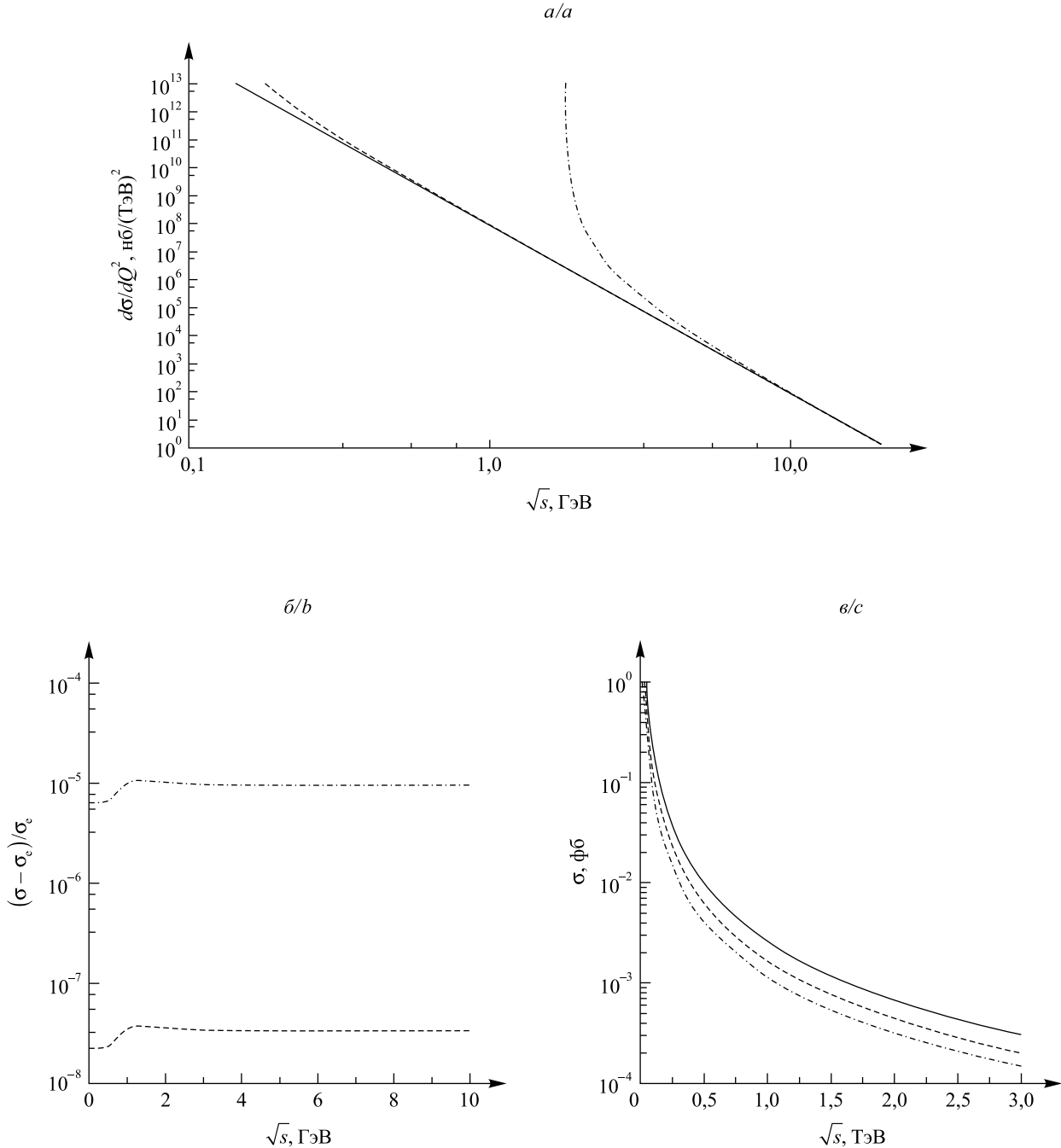


Рис. 4. Сечения рассеяния $d\sigma/dQ^2$ (a), $(\sigma - \sigma_e)/\sigma_e$ (б), σ (в) фотонов на различных типах лептонов:

————— электроны; - - - - - мюоны; - · - · - · - τ -лептоны

Fig. 4. The cross sections $d\sigma/dQ^2$ (a), $(\sigma - \sigma_e)/\sigma_e$ (b), σ (c) for the photon scattering on leptons of different types:

————— electron; - - - - - muon; - · - · - · - τ -lepton

Не менее важной особенностью является и то, что с увеличением массы частиц уменьшается сечение процесса. Рассеяние фотонов более легкими лептонами характеризуется сечениями с большими значениями, и в процессе поиска отклонений от общепринятых теорий и гипотез его использование оптимально. Однако рассеяния на тяжелых лептонах расширяют круг экспериментально измеряемых величин, что позволяет увеличить число последних для изучения важных проблем физики высоких энергий.

Значительные величины приведенных сечений, а также высокая точность измерений в современных экспериментах требуют учета эффектов, выходящих за рамки низшего порядка теории возмущений. Описание и расчет этих эффектов усложняются нетривиальным интегрированием, в процессе которого возникают нефизические ультрафиолетовые и инфракрасные расходимости, впоследствии взаимно

сокращающиеся [10]. Учет подобных эффектов дает возможность оценивать экспериментальные данные с точностью, соответствующей измерениям современных и планируемых экспериментов.

Полученные в настоящей работе графики демонстрируют изменения дифференциальных сечений рассеяния фотон-фермионных процессов в зависимости от ряда параметров: передачи импульса частиц, полной энергии процесса взаимодействия и массы лептона. Обнаружено, что качественных отличий при рассеянии на различных типах фермионов в древесном приближении не возникает. Однако процессы рассеяния на тяжелых лептонах расширяют круг исследуемых величин и, следовательно, важны при поиске и идентификации эффектов «новой физики», особенно учитывая тот факт, что радиационные эффекты будут искажать рассмотренные величины в значительно меньшей степени.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

1. Denner A. Techniques for the Calculation of Electroweak Radiative Corrections at the One-Loop Level and Results for W -physics at LEP 200 // *Fortschr. Phys.* 1993. Vol. 41, № 4. P. 307–420.
2. Passarino G., Veltman M. One-loop corrections for e^+e^- annihilation into $\mu^+\mu^-$ in the Weinberg model // *Nucl. Phys. B.* 1979. Vol. 160, № 1. P. 151–207.
3. The International Linear Collider Technical Design Report, 2013 [Electronic resource] / H. Baer. URL: <https://www.linearcollider.org/ILC/Publications/Technical-Design-Report> (date of access: 15.01.2016).
4. Denner A., Dittmaier S. Production of light fermion-antifermion pairs in $\gamma\gamma$ collisions // *Eur. Phys. J. C.* 1999. P. 425–435.
5. Moretti M. Four-fermion productions at a $\gamma\gamma$ collider // *Nucl. Phys. B.* 1997. Vol. 484. P. 3–16.
6. Carimalo C., da Silva W., Kapusta F. Towards a complete $\gamma\gamma \rightarrow 4$ leptons Monte Carlo // *Nucl. Phys. Suppl.* 2000. Vol. 82. P. 391–393.
7. Shishkina T. V. Boson Birth in Linear Photon Collider. Etudes on theoretical Physics // *Études on theoretical physics : Collection of Works Dedic. to 65th Anniv. of the Dep. of theor. Phys. of Belarus. State Univ.* Singapore, 2004.
8. Кураев Э. А., Галынский М. В., Левчук М. И. О принципах и физической программе $\gamma\gamma$ -коллайдеров // *ЭЧАЯ.* 2000. № 31. С. 155–201.
9. Makarenko V., Möning K., Shishkina T. Measuring the luminosity of a $\gamma\gamma$ collider with $\gamma\gamma \rightarrow l^+l^-$ events // *Eur. Phys. J. C.* 2003. Vol. 32. P. 142–150.
10. Шершень И. А., Шишкина Т. В. Исследование фермионов различных поколений с использованием пучков фотонов высокой энергии // Сборник работ 72-й науч. конф. студентов и аспирантов БГУ (Минск, 11–12 мая 2015 г.) : в 3 т. Минск, 2015. Т. 1. С. 223–228.

REFERENCES

1. Denner A. Techniques for the Calculation of Electroweak Radiative Corrections at the One-Loop Level and Results for W -physics at LEP 200. *Fortschr. Phys.* 1993. Vol. 41, No. 4. P. 307–420. DOI: 10.1002/prop.2190410402.
2. Passarino G., Veltman M. One-loop corrections for e^+e^- annihilation into $\mu^+\mu^-$ in the Weinberg model. *Nucl. Phys. B.* 1979. Vol. 160, No. 1. P. 151–207. DOI: 10.1016/0550-3213(79)90234-7.
3. Baer H., Barklow T., Fujii K., et al. The International Linear Collider Technical Design Report, 2013 [Electronic resource]. URL: <https://www.linearcollider.org/ILC/Publications/Technical-Design-Report> (date of access: 15.01.2016).
4. Denner A., Dittmaier S. Production of light fermion-antifermion pairs in $\gamma\gamma$ collisions. *Eur. Phys. J. C.* 1999. P. 425–435. DOI: 10.1007/s100529900049.
5. Moretti M. Four-fermion productions at a $\gamma\gamma$ collider. *Nucl. Phys. B.* 1997. Vol. 484. P. 3–16.
6. Carimalo C., da Silva W., Kapusta F. Towards a complete $\gamma\gamma \rightarrow 4$ leptons Monte Carlo. *Nucl. Phys. Suppl.* 2000. Vol. 82. P. 391–393.
7. Shishkina T. V. Boson Birth in Linear Photon Collider. Etudes on theoretical Physics. *Études on theoretical physics : Collection of Works Dedic. to 65th Anniv. of the Dep. of theor. Phys. of Belarus. State Univ.* Singapore, 2004.
8. Kuraev E. A., Galynskii M. V., Levchuk M. I. About Principles and the Physical Program of Photon-Photon Colliders. *Fiz. elementarnykh chastiits at. yadra.* 2000. No. 31. P. 155–201 (in Russ.).
9. Makarenko V., Möning K., Shishkina T. Measuring the luminosity of a $\gamma\gamma$ collider with $\gamma\gamma \rightarrow l^+l^-$ events. *Eur. Phys. J. C.* 2003. Vol. 32. P. 142–150. DOI: 10.1140/epjd/s2003-01-011-7.
10. Shershan I. A., Shishkina T. V. Issledovanie fermionov razlichnykh pokolenii s ispol'zovaniem puchkov fotonov vysokoi energii. *Sb. rab. 72-i nauchn. konf. stud. i aspir. BGU* (Minsk, 11–12 May 2015) : in 3 vol. Minsk, 2015. Vol. 1. P. 223–228 (in Russ.).

Статья поступила в редколлегию 19.02.2016.
Received by editorial board 19.02.2016.

УДК 538.9

EFFECT OF PRESSURE ON ELECTRONIC AND OPTICAL PROPERTIES OF MAGNESIUM SILICIDE AND GERMANIDE¹

V. L. SHAPOSHNIKOV^a, A. V. KRIVOSHEEVA^a, V. E. BORISENKO^a

^aBelarusian State University of Informatics and Radioelectronics,
P. Brovki street, 6, 220013, Minsk, Republic of Belarus

Corresponding author: victor.shaposhnikov@gmail.com

A detailed theoretical study of electronic and optical properties of magnesium silicide Mg_2Si and germanide Mg_2Ge under hydrostatic and uniaxial pressure has been performed by means of linearized augmented plane wave method. It has been found that the direct gap at the Γ -point increases linearly with the rise of the pressure, while the indirect one decreases becoming zero under the hydrostatic pressure of about 10 GPa. The decrease of the static dielectric constant with the rise of the pressure reflects the changes in the direct gap. Quite different results were observed for uniaxial deformation of the lattice. Either compression or tension of the lattice strongly decreases the indirect band gap. The direct gap depends linearly on the both types of deformations, but dependencies have different slopes.

Key words: magnesium silicide; magnesium germanide; hydrostatic pressure; uniaxial deformation; isotropic deformation.

¹Статья публикуется в авторской редакции.

Образец цитирования:

Шапошников В. Л., Кривошеева А. В., Борисенко В. Е. Влияние давления на электронные и оптические свойства силицида и германида магния // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2017. № 1. С. 73–81.

For citation:

Shaposhnikov V. L., Krivosheeva A. V., Borisenko V. E. Effect of pressure on electronic and optical properties of magnesium silicide and germanide. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2017. No. 1. P. 73–81 (in Engl.).

Авторы:

Виктор Львович Шапошников – кандидат физико-математических наук; старший научный сотрудник кафедры микро- и наноэлектроники факультета радиотехники и электроники.

Анна Владимировна Кривошеева – кандидат физико-математических наук; старший научный сотрудник кафедры микро- и наноэлектроники факультета радиотехники и электроники.

Виктор Евгеньевич Борисенко – доктор физико-математических наук, профессор; заведующий кафедрой микро- и наноэлектроники факультета радиотехники и электроники.

Authors:

Victor Shaposhnikov, PhD (physics and mathematics); senior researcher at the department of micro- and nanoelectronics, faculty of radioengineering and electronics.

victor.shaposhnikov@gmail.com

Anna Krivosheeva, PhD (physics and mathematics); senior researcher at the department of micro- and nanoelectronics, faculty of radioengineering and electronics.

anna@nano.bsuir.edu.by

Victor Borisenko, doctor of science (physics and mathematics), full professor; head of the department of micro- and nanoelectronics, faculty of radioengineering and electronics.

borisenko@bsuir.by

ВЛИЯНИЕ ДАВЛЕНИЯ НА ЭЛЕКТРОННЫЕ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СИЛИЦИДА И ГЕРМАНИДА МАГНИЯ

В. Л. ШАПОШНИКОВ¹⁾, А. В. КРИВОШЕЕВА¹⁾, В. Е. БОРИСЕНКО¹⁾

¹⁾Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,
ул. П. Бровки, 6, 220013, г. Минск, Республика Беларусь

Представлены результаты детальных теоретических исследований электронных и оптических свойств силицида магния Mg_2Si и германида магния Mg_2Ge , подвергнутых воздействию гидростатического и одноосного давления, выполненных с помощью метода линеаризованных присоединенных плоских волн. Определено, что прямой переход в Γ -точке линейно возрастает с увеличением давления, в то время как непрямой переход уменьшается до нуля при гидростатическом давлении 10 ГПа. Уменьшение статической диэлектрической проницаемости с повышением давления отражает изменения в прямом переходе. При одноосной деформации как сжатие, так и растяжение решетки значительно уменьшают непрямой переход. Зависимости изменения прямого перехода при двух типах деформации имеют линейный характер, но разный угол наклона.

Ключевые слова: силицид магния; германид магния; гидростатическое давление; одноосная деформация; изотропная деформация.

Introduction

Last years the interest to Mg_2X compounds and also their ternary alloys reappeared as to ecologically clean semiconductors, which consist of non-toxic materials and possess high value of the power factor and thermoelectric figure of merit as compared with GeSi alloys and $\beta\text{-FeSi}$ [1; 2]. Magnesium silicide (Mg_2Si) together with isostructural magnesium germanide (Mg_2Ge) are well known as promising materials for thermoelectric energy conversion applications [3–6] because of large Seebeck coefficient, low electrical resistivity, and low thermal conductivity [7]. Moreover, practical interest to Mg_2Si is explaining by their attractive properties and good compatibility with the conventional silicon technology [8]. The quality of semiconductor devices strongly depends on structural matching between the substrate and the epitaxial film. The lattice mismatch leads to uniaxial and isotropic deformations at the interface, which may influence their fundamental properties and lead to considerable difference from the relaxed materials. A range of physical properties of Mg_2Si and Mg_2Ge depend on its lattice behavior. The high symmetry of the structure implies that external impact like pressure or electric field could lead to appearance of piezoelectric effects or possible degeneration of bands with negative masses [9]. Therefore, it is important to understand the effect of lattice distortion on its electronic and optical properties, while further investigations could lead to enhancement of thermoelectric efficiency [10].

Mg_2Si has been an object of intensive experimental studies since the 1960s [4; 11–17]. However, bulk single crystals, rather than thin films have been examined experimentally owing to difficulties of thin film formation. That is caused by low condensation coefficient and high vapour pressure of magnesium. Even less experimental results can be found for Mg_2Ge . According to the resistivity measurements both compounds were found to be semiconductors with the band gap of 0.80 and 0.69 eV for Mg_2Si and Mg_2Ge , respectively [4; 12; 13]. The low- and room-temperature optical measurements report Mg_2Si to have an indirect gap of 0.60–0.74 eV and a direct one of 0.83–2.17 eV. For Mg_2Ge these values are 0.70 eV and 1.60–1.67 eV for the indirect and direct band gap, respectively [11; 15].

Both semiconductors received a good deal of attention from theoretical point of view [7; 10; 18–29]. According to the calculations performed, Mg_2Si is an indirect-gap semiconductor with the fundamental energy gap of 0.12–1.30 eV. The first direct gap transition is estimated to be 1.55–2.84 eV. Depending on the chosen theoretical approximation the band structure calculations performed for Mg_2Ge give the indirect gap of 0.165–1.60 eV and a direct one of 1.30–2.51 eV [18; 19; 23; 24].

In this paper, we present the dependence of the electronic band gap and optical properties of Mg_2Si and Mg_2Ge on isotropic and anisotropic deformation of their lattices caused by hydrostatic and uniaxial pressure, respectively. It has been obtained by *ab initio* electronic property calculations for pressures up to 12 GPa, that corresponds to 5 % reduction of the lattice parameter.

Computational details

The simulation of the electronic band structure has been carried out by means of the self-consistent full-potential linearized-augmented-plane-wave method in its scalar-relativistic version using WIEN2k package [30].

The generalized gradient approximation (GGA) has been applied in the calculations of the exchange-correlation potential [31; 32]. We used 104 and 220 sampling $\mathbf{k}$ -points in the irreducible Brillouin zone for the self-consistent procedure and for the calculations of the momentum matrix element in the dielectric function, respectively. The real part of the dielectric function has been obtained from the imaginary one through the Kramers – Kronig relation.

Mg_2Si and Mg_2Ge belong to so-called electron-deficient semiconductors [20]. They crystallize in the face-centred-cubic (f. c. c.) CaF_2 -type lattice with $Fm3m$ space group. In the present calculations the lattice parameters of 0.6382 and 0.6435 nm are used for Mg_2Si and Mg_2Ge , respectively. These values are in rather good agreement with experimental ones (0.6338 and 0.6388 nm for Mg_2Si and Mg_2Ge , respectively [4]), with the discrepancy 0.8 %, which occurs due to GGA overestimation of lattice parameters if compare with those obtained from experiment [33; 34]. With the local density approximation (LDA) [35] the larger discrepancies from the experimental values were observed, thus for the compounds considered GGA was chosen as more appropriate.

The hydrostatic pressure has been modelled by reducing the lattice parameter in the range of 0–5 % from the equilibrium value without changing the symmetry of the structure. The corresponding hydrostatic pressure occurred in the system has been calculated as a first volume derivative of the energy. However, when the pressure is applied along one axis ((001) in our case), the change of the symmetry from f. c. c. to tetragonal type structure takes place. The lattice parameters along (100) and (010) directions have been varied in the range of ± 5 % with the step of 1 % from the value of unstressed materials. The lattice parameter along (001) axis

has been calculated using elastic theory by equation: $a_{\perp} = a_{\text{bulk}} \left[1 - \frac{2C_{12}}{C_{11}} \frac{a_{\parallel}}{a_{\text{bulk}} - 1} \right]$, where a_{bulk} is the lattice parameter of unstressed cubic structure; $a_{\perp}$ and $a_{\parallel}$ are the lattice parameters within and perpendicular the plane (001); C_{11} and C_{12} are the elastic constants, taken from experiments [36]. For Mg_2Si they were chosen as 121.0 and 22.0 GPa [37], for Mg_2Ge – 117.9 and 23.0 GPa [38] for C_{11} and C_{12} , respectively.

Results and discussion

The calculated band structures of unstressed Mg_2Si and Mg_2Ge (solid lines) are shown in fig. 1 in comparison with the materials under the hydrostatic pressure (dashed lines) for the case of 5 % reducing of the lattice parameter. In unstressed magnesium compounds the valence band maximum (VBM) locates at the Γ -point, whereas the conduction band minimum (CBM) is at the X-point.

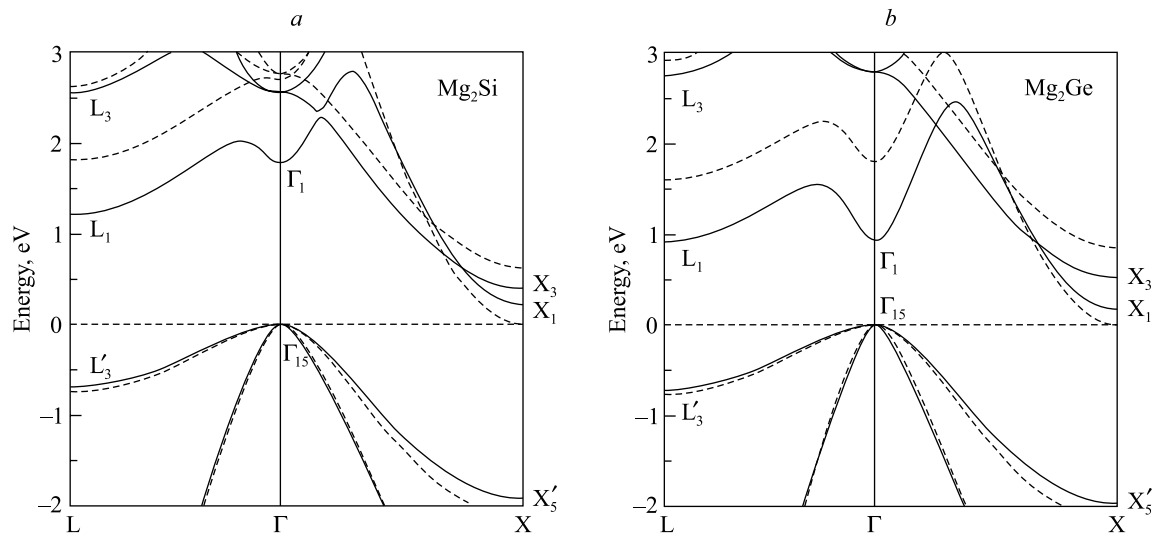


Fig. 1. Electronic band structures of Mg_2Si (a) and Mg_2Ge (b) along the main high-symmetry directions $L-\Gamma-X$. Solid lines correspond to unstressed compounds; dashed ones – to 5 % hydrostatic compression of the lattice. Zero at the energy scale corresponds to the Fermi energy

The first direct transition occurs in the centre of the Brillouin zone. Qualitatively, the band structures obtained are in good agreement with the results of theoretical calculations [18; 19; 21; 23; 24]. Table 1 compares the values of the main interband transitions in Mg_2Si and Mg_2Ge with the theoretical and experimental data.

Table 1

Calculated interband transition energies, eV, in Mg_2Si and Mg_2Ge .
The symbols (*d*) and (*i*) are used for direct or indirect gaps, respectively

Transition	Mg_2Si			Mg_2Ge		
	Our calculations	Theory ¹	Experiment ²	Our calculations	Theory ¹	Experiment ²
$\Gamma_{15} \rightarrow X_1$	0.22 (<i>i</i>)	0.14–1.30	0.60–0.74	0.17 (<i>i</i>)	0.92–1.60	0.70
$\Gamma_{15} \rightarrow \Gamma_1$	1.79 (<i>d</i>)	1.90–2.84	2.10–2.27	0.91 (<i>d</i>)	1.49–2.51	1.60–1.67
$L'_3 \rightarrow L_1$	1.90	1.97–3.18	–	1.64	1.99–3.20	2.10
$X'_5 \rightarrow X_1$	2.14	2.13–3.10	2.50–2.85	2.14	3.01–3.26	2.57
$X'_5 \rightarrow X_3$	2.32	2.36–3.77	–	2.49	2.84–4.04	–

¹[12; 14; 16];

²[11; 14; 17].

The energy dependencies of the dielectric function for both magnesium compounds are similar in general. The main peaks in the range of 0–5 eV characterize the interband transitions between the two highest valence and the two lowest conduction bands. All the features of the experimental spectra are reproduced by the calculations, in spite of some underestimation of the energy position of the theoretical peaks. The comparison of the static dielectric constant (ϵ_0) (16.2 and 12.9 for Mg_2Si and Mg_2Ge , respectively) with experimental (12.9 and 13.3 [11]; 20.0 and 21.7 [39]) and theoretical (16.2 and 16.4 [24]) data show quite good correlation.

The differences in band spectra between materials with the ideal crystal lattice and under the hydrostatic pressure (fig. 1) can be found in both valence and conduction bands. The behaviour of the top valence and the two lowest conduction band states at some high-symmetry points (HSP) under the hydrostatic pressure is demonstrated in fig. 2. The values are given relatively to $2s(3s)$ -states of Si (Ge) for Mg_2Si (Mg_2Ge). The energy values were shifted so that the top valence band states at the Γ -point in unstressed material are set to zero. For Mg_2Si the VBM moves down with the increase of the pressure, while it remains practically flat for Mg_2Ge . The opposite situation is observed for the second conduction band, which is flat for Mg_2Si and moves up with an increase of the pressure for Mg_2Ge . The behaviour of the first conduction band for both compounds is similar for the high-symmetry points considered.

The calculated indirect and direct transitions as a function of the hydrostatic pressure are plotted in fig. 3.

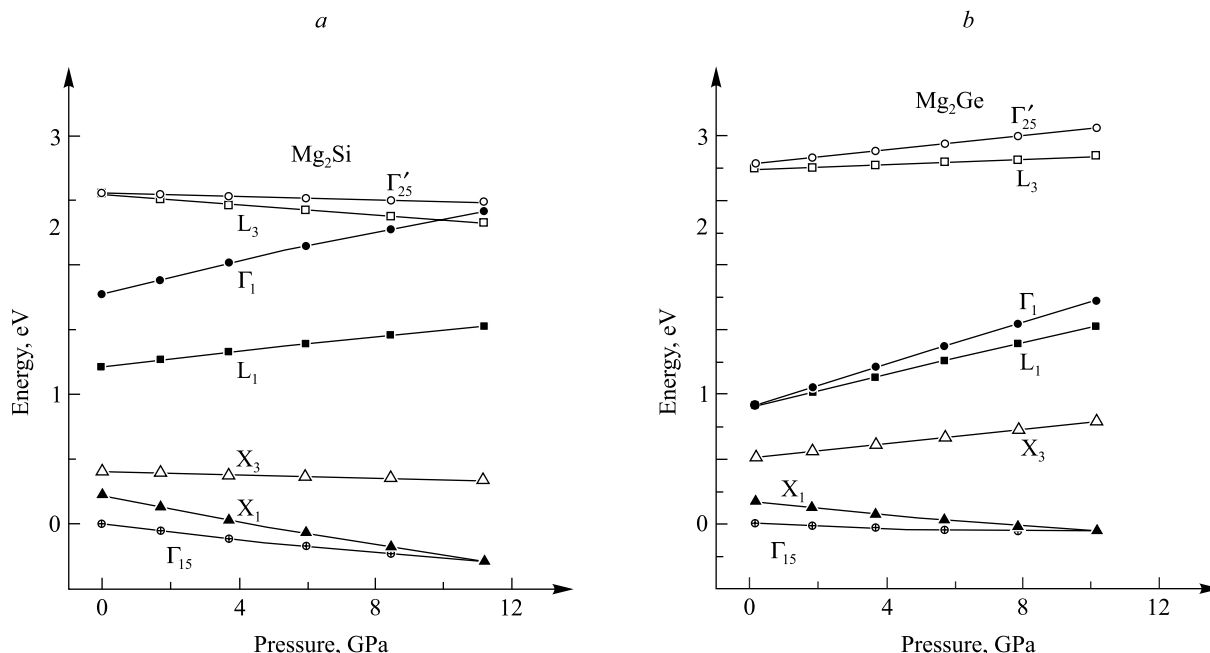


Fig. 2. Energies of the top valence and the two lowest conduction states of Mg_2Si (a) and Mg_2Ge (b) at some k -points as a function of hydrostatic pressure

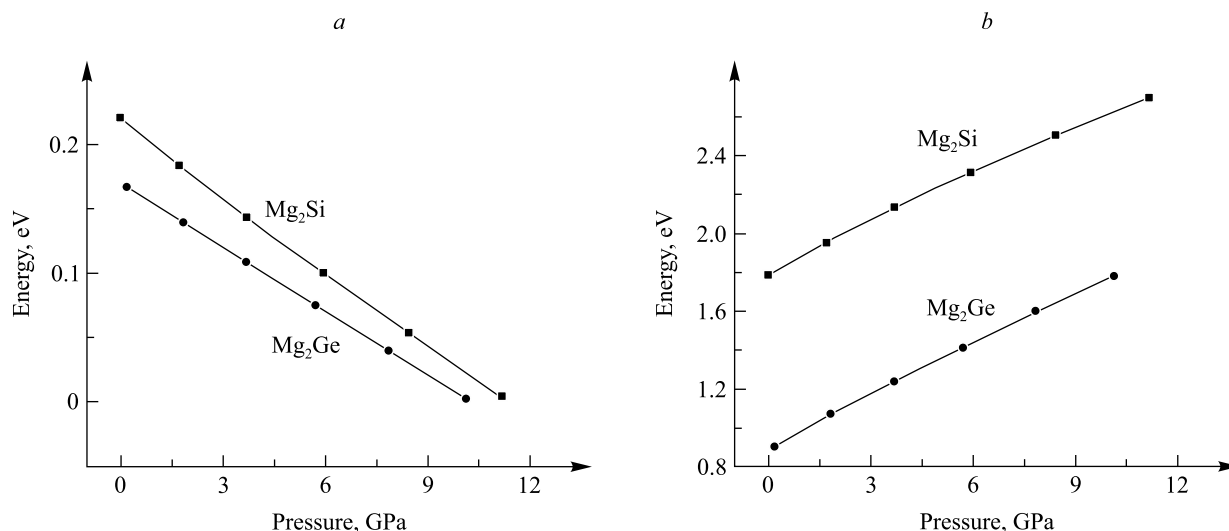


Fig. 3. The behaviour of the main interband transitions in Mg_2Si and Mg_2Ge under the hydrostatic pressure:
a – for indirect gap; b – for direct gap

Both compounds show similar pressure dependence of the transitions. The gap for the direct transition at the Γ -point increases with the rise of the pressure, while the indirect one decreases. The value of conduction band minimum at the Γ -point increases and the value of valence band maximum decreases with the rise of the pressure that leads to the higher values of the first direct transition. In case of the indirect transition between the Γ - and the X-points, both bands move down with the rise of the pressure, so that the band gap becomes smaller. The change rate of the direct and indirect gaps remains practically the same for both magnesium compounds.

The calculated dependencies of the transition energies on the pressure for Mg_2Si and Mg_2Ge can be fitted as $E(P) = E + aP + bP^2$ with the coefficients listed in the table 2.

Table 2

The coefficients describing the dependence of the main transitions
on the hydrostatic pressure $E(P) = E + aP + bP^2$

Compound	Transition			
	$\Gamma-\Gamma$		$\Gamma-X$	
	Coefficient			
	a , meV/GPa	b , meV/GPa ²	a , meV/GPa	b , meV/GPa ²
Mg ₂ Si	99.35	−1.58	−21.34	0.19
Mg ₂ Ge	98.41	−1.05	−16.79	0.03

It was proved by some additional calculations that the coefficients obtained are also valid for the crystal structure being stretched out. Moreover, it was found that when the Mg_2Ge structure is 6 % stretched of its equilibrium lattice parameter, the direct gap at the Γ -point appears to be lower in energy than the indirect one at the X-point. It means, Mg_2Ge becomes a direct-gap semiconductor, though the physical realization of such experiment seems to be limited. When both magnesium compounds considered are compressed for about 5 % of their lattice parameters they were observed to become gapless semiconductors.

It is interesting to take into account the results of the calculations performed for Si and Ge under the pressure. These compounds also possess f.c.c. crystal structure. There is a good correlation between the pressure behaviour of the electronic and optical properties and the results obtained in [40]. That allows us to assume the general tendency of the gap behaviour under the pressure for magnesium compounds to be correct.

The changes in the band structure of the compounds due to the hydrostatic pressure of the lattice are reflected in the optical properties. The dielectric function spectra of both materials are plotted in fig. 4.

It is observed that all peaks of the dielectric function move towards higher energies when the pressure increases. Since the origins of the peaks in $\mathbf{k}$ -space remains unchanged under the hydrostatic pressure, these shifts of the peaks are the result of the increase of the direct gaps. The interesting feature of the optical properties is the disappearance of the first peak at about 2 eV for Mg_2Ge (which is present in unstressed compound). Figure 5 presents the dependence of the static dielectric function ϵ_0 on the hydrostatic pressure. It is obvious that its values decrease with the pressure due to the rise of the direct gap for both magnesium compounds considered.

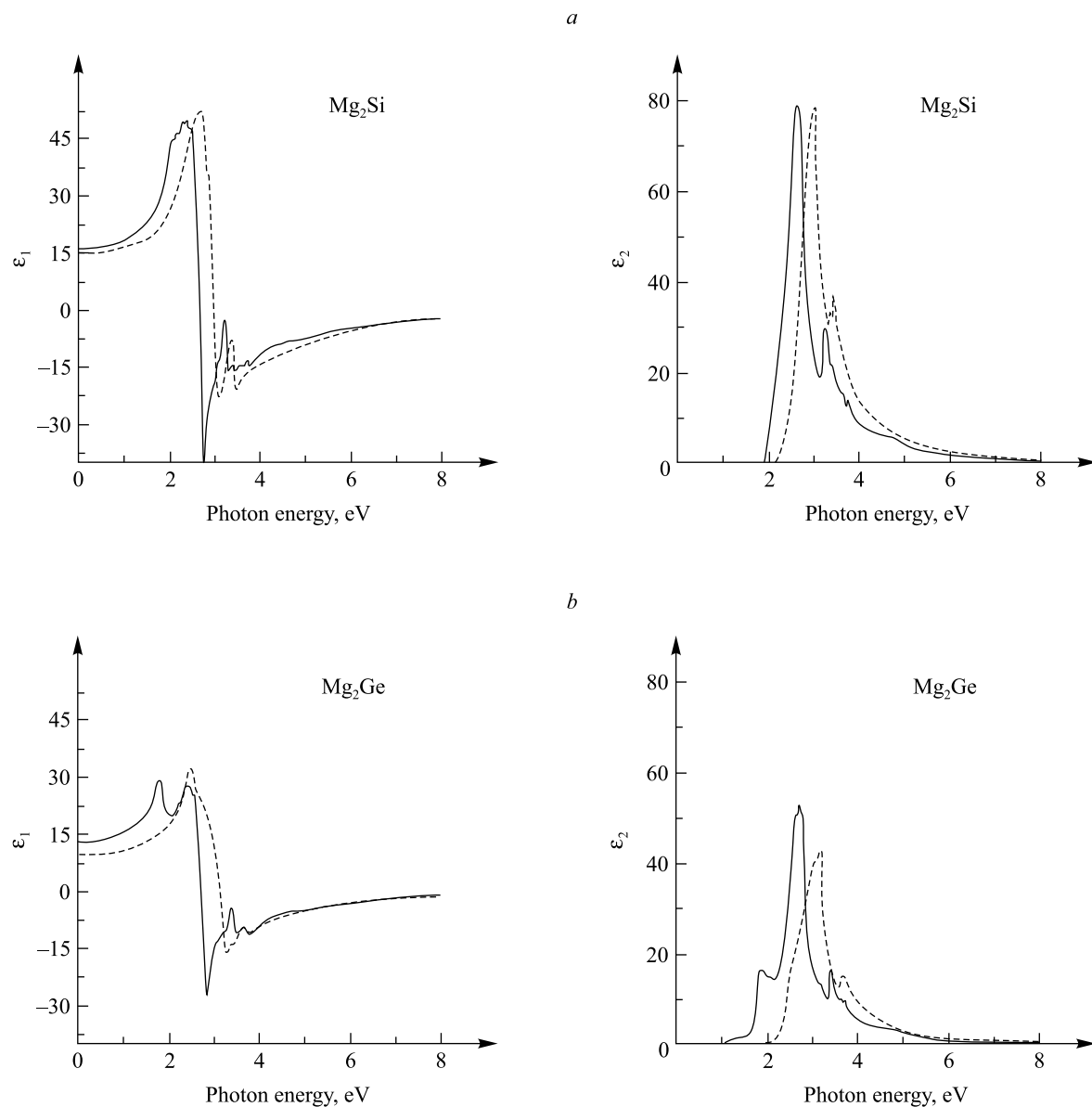


Fig. 4. The real (ϵ_1) and imaginary (ϵ_2) parts of dielectric function of Mg_2Si (a) and Mg_2Ge (b). Solid lines correspond to unstressed compounds; dashed ones – to 5 % hydrostatic compression of the lattice

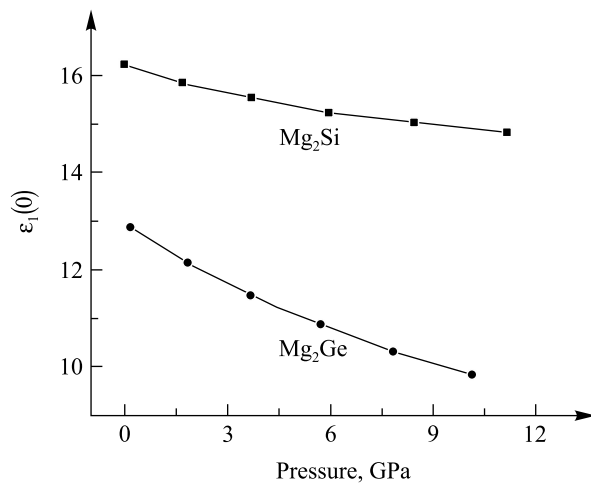


Fig. 5. Static dielectric function ϵ_0 of Mg_2Si and Mg_2Ge as a function of the hydrostatic pressure

The quite different picture was observed for the uniaxial pressure. Figure 6 shows the band structures of Mg_2Si for $\pm 5\%$ variation of the lattice parameter. The similar dependence was observed for Mg_2Ge . For that type of deformation the crystal structure symmetry is changed from f. c. c. to base-centred-tetragonal (b. c. t.) with a quite different Brillouin zone. Thus, the projections of extreme points in f. c. c. may correspond to different points in b. c. t. The VBM is still at the Γ -point, while CBM is located at the X- and Z-points for compression and tension, respectively. The distinctive feature of the uniaxial deformation is the disappearance of the degeneracy at the HSP near the band gap. Moreover, this degeneracy might be reserved at the Γ -point for some bands depending on which uniaxial deformation (compression or tension) is applied.

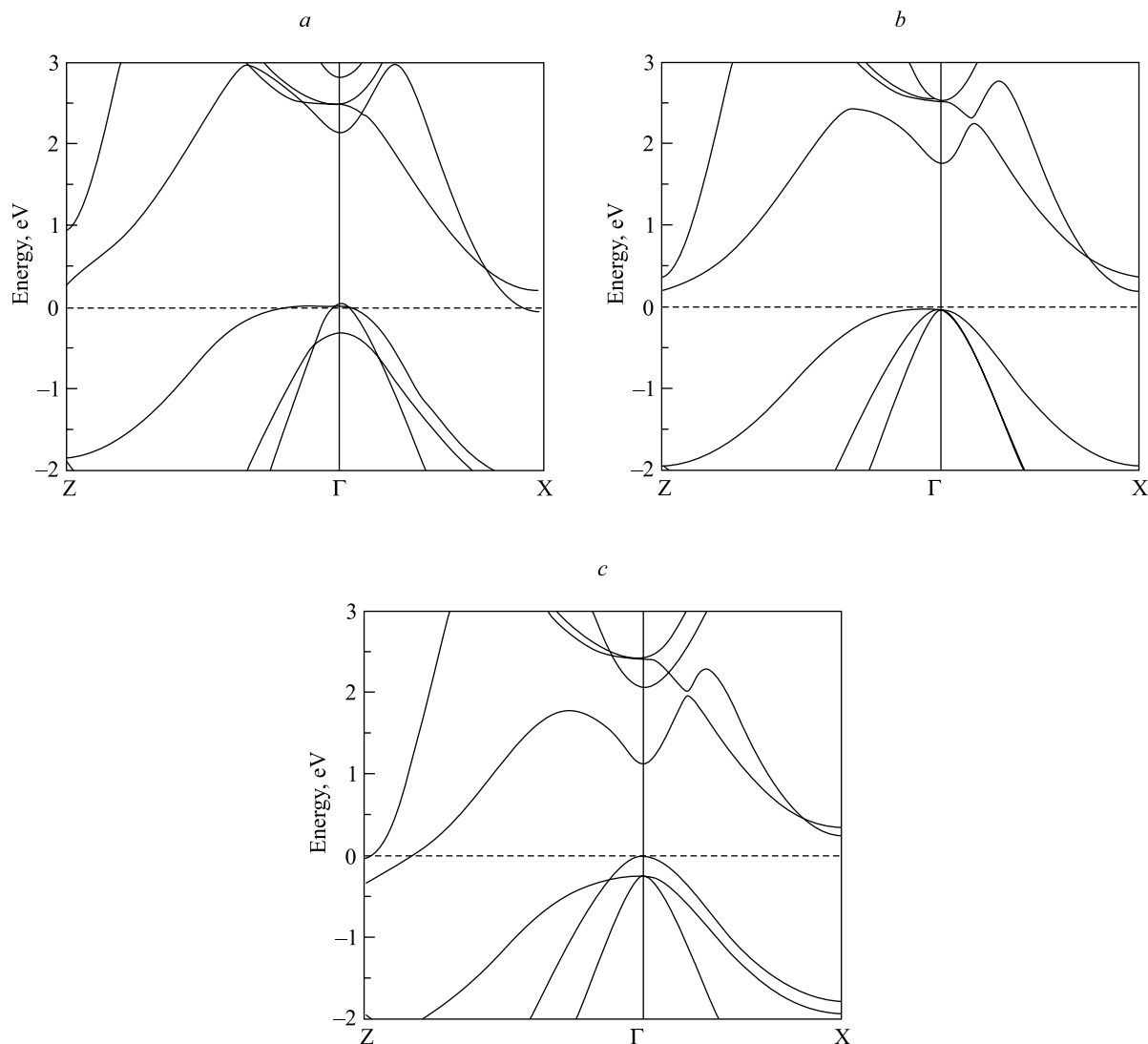


Fig. 6. Electronic band structures of Mg_2Si along the main high-symmetry directions when the 5 % uniaxial compression (a) and tension (c) is applied in comparison with unstressed structure (b). Zero at the energy scale corresponds to the Fermi energy

The influence of the uniaxial deformation on the main interband transitions is shown in fig. 7. As it is hard to determine the real pressure occurred in the system, the energy values are plotted versus the change of the lattice parameter. The behaviour of the energy transitions is quite different in comparison with the hydrostatic pressure case, i. e. the rate of the band gap changes is different. The strong decrease of the band gap is observed for uniaxial compression and tension of the lattice with practically similar rates. Thus, both materials become gapless semiconductors at about 3 % uniaxial deformation of their structures. That can be explained by the fact, that compression along (100) axis decreases the band gap in this direction more rapidly than the CBM is moved to the high-energy region due to the tension in the plane perpendicular to this axis. The first direct gap at the Γ -point increases under uniaxial compression of the lattice and decreases when the lattice is stretched. The rate of the direct gap increase is somewhat lower than that of the decrease.

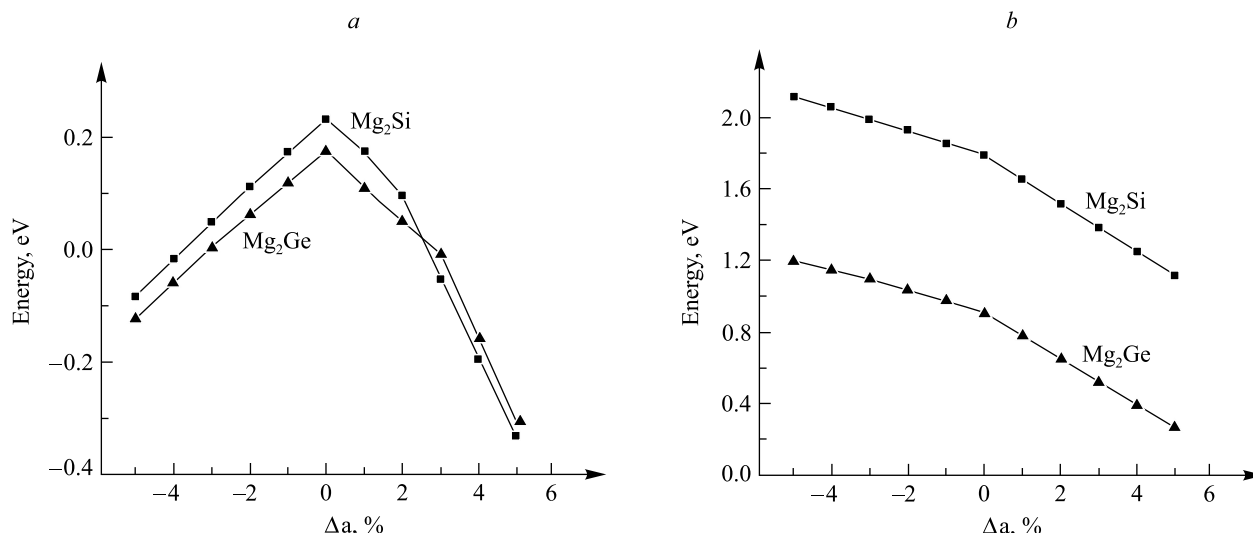


Fig. 7. The behaviour of the main interband transitions in Mg_2Si and Mg_2Ge under the uniaxial deformation: a – for indirect gap; b – for direct gap

It is well known that band gap values calculated within LDA are underestimated with respect to experimental data. The situation is especially crucial in case of sp -bonding semiconductors, the considered compounds belong to. The underestimation depends on the shift of eigenvalues in the energy range analysed via the so-called correlation effects. For the situation considered, the VBM is found to be mainly composed by p -electrons of either Si or Ge (depending on the compound). The orbital composition of the first conduction band for both Γ - and X-points is characterized practically completely by s -electrons of Si (Ge) with small contribution of other states. As a result, conduction and valence band edges undergo different shifts. However, band gap predictions obtained within DFT approaches for transition metal silicides are often quantitatively correct. For example, in the case of semiconducting iron disilicide we obtained very good agreement between theoretically predicted and experimental values [41] due to almost equal shift of corresponding eigenfunctions at the extreme points, which are mainly composed of d -electron states of iron atoms. To solve the problem of the band-gap underestimation one of the simplest ways is the use of so-called «scissors-operator» shift (SOS), which in present work was equal to 0.38 and 0.53 eV for Mg_2Si and Mg_2Ge , respectively, if one takes experimental values from [11] as a true reference. The orbital composition analysis of the extreme points of the band spectra shows it practically not to depend on the pressure applied. That allows us to suppose that the SOS-parameter will be a constant value in the range of the pressure considered. The results obtained here for the magnesium compounds are in good agreement with the experimental data.

Conclusions

The *ab initio* calculations of electronic and optical properties of Mg_2Si and Mg_2Ge performed within the FLAPW method show dramatic influence of the isotropic and anisotropic lattice distortion on resulting spectra. The direct transition in the Γ -point demonstrates a linear increase with the rise of the hydrostatic pressure, while the indirect one decreases and becomes zero at about 5 % compression of the material lattices. When the lattice of Mg_2Ge is 6 % stretched, it becomes a direct gap semiconductor. The static dielectric constant decreases with the rise of the pressure directly reflecting the changes in the direct gap values. In case of uniaxial deformation the indirect band gap strongly decreases at both types of strains applied, making the Mg_2X materials to be gapless at about 3 % strains. The direct gap depends linearly on the both types of deformation but with the different rates.

The authors would like to thank doctors A. N. Kholod, N. N. Dorozhkin and D. B. Migas for helpful discussion of the results obtained.

REFERENCES

1. Galkin N. G., Galkin K. N., Goroshko D. L., et al. Non-doped and doped Mg stannide films on Si(111) substrates: formation, optical, and electrical properties. *Jpn. J. Appl. Phys.* 2015. Vol. 54. 07JC06. DOI: 10.7567/JJAP.54.07JC06.
2. Chuang L., Savvides N., Tan T. T., et al. Thermoelectric properties of Ag-doped Mg_2Ge thin films prepared by magnetron sputtering. *J. Electron. Mater.* 2010. Vol. 39, issue 9. P. 1971–1974. DOI: 10.1007/s11664-009-1052-4.
3. Kajikawa T., Shida K., Shiraishi K., et al. Thermoelectric figure of merit of impurity doped and hot-pressed magnesium silicide elements. *XVII Int. Conf. on Thermoelectrics*: proc. ICT'98 (Nagoya, 24–28 May 1998). Nagoya, 1998. P. 362–369.
4. LaBotz R. J., Mason D. R., O'Kane D. F. The thermoelectric properties of mixed crystals of $\text{Mg}_2\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$. *J. Electrochem. Soc.* 1963. Vol. 110, No. 2. P. 127–134.
5. Noda Y., Kon H., Furukawa Y., et al. Preparation and thermoelectric properties of $\text{Mg}_2\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ ($x = 0.0 \sim 0.4$) solid solution semiconductors. *Mater. Trans.* 1992. Vol. 33, No. 9. P. 845–850.

6. Kaibe H. T., Noda Y., Isoda Y., et al. Temperature dependence of thermal conductivity for $\text{Mg}_x\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ solid solution. *XVI Int. Conf. on Thermoelectrics* : proceedings (Piscataway, 26–29 August 1997). Piscataway, 1997. P. 279–282.
7. Tani J.-I., Kido H. Lattice dynamics of Mg_2Si and Mg_2Ge compounds from first-principles calculations. *Comput. Mater. Sci.* 2008. Vol. 42. P. 531–536. DOI: 10.1016/j.commatsci.2007.08.018.
8. Semiconducting Silicides. Ed. by V. E. Borisenko. Berlin, 2000.
9. Kroemer H., Day G. F., Fairman R. D., et al. Preparation and some properties of Mg_2Ge single crystals and of $\text{Mg}_2\text{Ge } p-n$ junctions. *J. Appl. Phys.* 1965. Vol. 36, issue 8. P. 2461–2470. DOI: 10.1063/1.1714512.
10. Bessas D., Simon R. E., Frieze K., et al. Lattice dynamics in intermetallic Mg_2Ge and Mg_2Si . *J. Phys. : Condens. Matter.* 2014. Vol. 26, No. 48. Article ID 485401. DOI: 10.1088/0953-8984/26/48/485401.
11. Scouler W. J. Optical properties of Mg_2Si , Mg_2Ge , and Mg_2Sn from 0.6 to 11.0 eV at 77 K. *Phys. Rev.* 1969. Vol. 178, issue 3. P. 1353–1357. DOI: 10.1103/PhysRev.178.1353.
12. Morris R. G., Redin R. D., Danielson G. C. Semiconducting properties of Mg_2Si single crystals. *Phys. Rev.* 1958. Vol. 109, issue 6. P. 1909–1915. DOI: 10.1103/PhysRev.109.1909.
13. Redin R. D., Morris R. G., Danielson G. C. Semiconducting properties of Mg_2Ge single crystals. *Phys. Rev.* 1958. Vol. 109, issue 6. P. 1916–1920. DOI: 10.1103/PhysRev.109.1916.
14. Mahan J. E., Vantomme A., Langouche G., et al. Semiconducting Mg_2Si thin films prepared by molecular-beam epitaxy. *Phys. Rev. B.* 1996. Vol. 54, issue 23. P. 16965–16971. DOI: 10.1103/PhysRevB.54.16965.
15. Vazquez F., Forman R. A., Cardona M. Electorelectance measurements on Mg_2Si , Mg_2Ge , and Mg_2Sn . *Phys. Rev.* 1968. Vol. 176, issue 3. P. 905–908.
16. Stella A., Lynch D. W. Photoconductivity in Mg_2Si and Mg_2Ge . *J. Phys. Chem. Solids.* 1964. Vol. 25, No. 11. P. 1253–1259. DOI: 10.1016/0022-3697(64)90023-X.
17. Stella A., Brothers A. D., Hopkins R. H., et al. Pressure coefficient of the band gap in Mg_2Si , Mg_2Ge , and Mg_2Sn . *Phys. Stat. Solidi.* 1967. Vol. 23, issue 2. P. 697–702. DOI: 10.1002/pssb.19670230231.
18. Au-Yang M. Y., Cohen M. L. Electronic structure and optical properties of Mg_2Si , Mg_2Ge , and Mg_2Sn . *Phys. Rev.* 1969. Vol. 178, issue 3. P. 1358–1364. DOI: 10.1103/PhysRev.178.1358.
19. Viennois R., Jund P., Colinet C., Tédénac J.-C. Defect and phase stability of solid solutions of Mg_2X with an antifluorite structure: an ab initio study. *J. Solid State Chem.* 2012. Vol. 193. P. 133–136. DOI: 10.1016/j.jssc.2012.04.048.
20. Meloni F., Mooser E., Baldereschi A. Bonding nature of conduction states in electron-deficient semiconductors: Mg_2Si . *Physica B + C.* 1983. Vol. 117/118. P. 72–74. DOI: 10.1016/0378-4363(83)90444-8.
21. Wood D. M., Zunger A. Electronic structure of generic semiconductors: antifluorite silicide and III–V compounds. *Phys. Rev. B.* 1986. Vol. 34, issue 6. P. 4105–4120.
22. Folland N. O. Self-consistent calculations of the energy band structure of Mg_2Si . *Phys. Rev.* 1967. Vol. 158. P. 764–775. DOI: 10.1103/PhysRev.158.764.
23. Lee P. M. Electronic structure of magnesium silicide and magnesium germanide. *Phys. Rev.* 1964. Vol. 135. P. A1110–A1114. DOI: 10.1103/PhysRev.135.A1110.
24. Benhelal O., Chahed A., Laksari S., et al. First-principles calculations of the structural, electronic and optical properties of IIA–IV antifluorite compounds. *Phys. Stat. Solidi (b).* 2005. Vol. 242, issue 10. P. 2022–2032. DOI: 10.1002/pssb.200540063.
25. Bashenov V. K., Mutal A. M., Timofeenko V. V. Valence-band density of states for Mg_2Si from pseudopotential calculation. *Phys. Stat. Solidi (b).* 1978. Vol. 87, issue 2. P. K77–K79. DOI: 10.1002/pssb.2220870247.
26. Arnaud B., Alouani M. All-electron projector-augmented-wave GW approximation: application to the electronic properties of semiconductors. *Phys. Rev. B.* 2000. Vol. 62, issue 7. P. 4464–4476. DOI: 10.1103/PhysRevB.62.4464.
27. Arnaud B., Alouani M. Electron-hole excitations in Mg_2Si and Mg_2Ge compounds. *Phys. Rev. B.* 2001. Vol. 64, issue 3. Article ID 033202. DOI: 10.1103/PhysRevB.64.033202.
28. Chen Q., Xie Q., Zhao F.-J., et al. First-principles calculations of electronic structure and optical properties of strained Mg_2Si . *Chin. Sci. Bull.* 2010. Vol. 55, issue 21. P. 2236–2242. DOI: 10.1007/s11434-010-3280-7.
29. Krivosheeva A. V., Kholod A. N., Shaposhnikov V. L., et al. Band structure of Mg_2Si and Mg_2Ge semiconducting compounds with a strained crystal lattice. *Semiconductors.* 2002. Vol. 36, issue 5. P. 496–500. DOI: 10.1134/1.1478538.
30. Blaha P., Schwarz K., Madsen G. K. H., et al. WIEN2k, An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program For Calculating Crystal Properties. Wien, 2001.
31. Perdew J. P., Chevary J. A., Vosko S. H., et al. Atoms, molecules, solids, and surfaces: Applications of the generalized gradient approximation for exchange and correlation. *Phys. Rev. B.* 1992. Vol. 46, issue 11. P. 6671–6687. DOI: 10.1103/PhysRevB.46.6671.
32. Perdew J. P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple. *Phys. Rev. Lett.* 1996. Vol. 77, issue 18. P. 3865–3868. DOI: 10.1103/PhysRevLett.77.3865.
33. Lee I.-H., Martin R. M. Applications of the generalized-gradient approximation to atoms, clusters, and solids. *Phys. Rev. B.* 1997. Vol. 56, issue 12. P. 7197–7205. DOI: 10.1103/PhysRevB.56.7197.
34. Dal Corso A., Pasquarello A., Baldereschi A., et al. Generalized-gradient approximations to density-functional theory: A comparative study for atoms and solids. *Phys. Rev. B.* 1996. Vol. 53, issue 3. P. 1180–1185. DOI: 10.1103/PhysRevB.53.1180.
35. Perdew J. P., Wang Y. Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy. *Phys. Rev. B.* 1992. Vol. 45, issue 23. P. 13244–13249. DOI: 10.1103/PhysRevB.45.13244.
36. Jain S. C., Willis J. R., Bullough R. A review of theoretical and experimental work on the structure of $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ strained layers and superlattices, with extensive bibliography. *Adv. Phys.* 1990. Vol. 39. P. 127–190. DOI: 10.1080/00018739000101491.
37. Whitten W. B., Chung P. L., Danielson G. C. Elastic constants and lattice vibration frequencies of Mg_2Si . *J. Phys. Chem. Solids.* 1965. Vol. 26, issue 1. P. 49–56. DOI: 10.1016/0022-3697(65)90071-5.
38. Chung P. L., Whitten W. B., Danielson G. C. Lattice dynamics of Mg_2Ge . *J. Phys. Chem. Solids.* 1965. Vol. 26, issue 12. P. 1753–1760. DOI: 10.1016/0022-3697(65)90206-4.
39. Madelung O. Semiconductors: Data handbook. 3rd ed. Berlin, 2004. P. 465–470.
40. Alouani M., Wills J. M. Calculated optical properties of Si, Ge, and GaAs under hydrostatic pressure. *Phys. Rev. B.* 1996. Vol. 54, issue 4. P. 2480–2490. DOI: 10.1103/PhysRevB.54.2480.
41. Filonov A. B., Migas D. B., Shaposhnikov V. L., et al. Electronic and related properties of crystalline semiconducting iron disilicide. *J. Appl. Phys.* 1996. Vol. 79, issue 10. P. 7708–7712. DOI: 10.1063/1.362436.

Received by editorial board 06.07.2016.

УДК 538.97

ПОГЛОЩЕНИЕ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ПРИ АНАЛИЗЕ ОСТАТОЧНЫХ НАПРЯЖЕНИЙ В ОБРАЗЦАХ С ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ ГЕОМЕТРИЕЙ

С. В. ВЛАСЕНКО¹⁾, А. И. БЕНЕДИКТОВИЧ¹⁾

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

Исследовано влияние геометрии образца на учет поглощения рентгеновского излучения по мере его прохождения через образец. Рассмотрен случай цилиндрической геометрии, для которого выполнено теоретическое описание поглощения в образцах с такой геометрией. Полученные теоретические выражения использовались для учета поглощения рентгеновского излучения в железных проволоках при анализе остаточных напряжений. С помощью рентгеновской дифрактометрии установлены дифракционные профили при различных углах наклона и поворота вектора дифракции относительно нормали к поверхности образца. Экспериментальные данные были фитированы линейной зависимостью, так как в данном исследовании образцы предполагаются изотропными. На основании результатов процедуры фитирования определены значения компонент тензора напряжений. Установлено, что присутствуют отклонения от линейной зависимости. Это может быть связано с наличием анизотропии образца за счет присутствия текстуры или зависящего от направления взаимодействия зерен, из чего следует, что для более строгого описания полученных экспериментальных зависимостей нужно считать образцы анизотропными и дополнить анализ остаточных напряжений соответствующей теорией.

Ключевые слова: рентгеновская дифрактометрия; поглощение; остаточные напряжения; цилиндрическая геометрия; фитирование данных.

X-RAY ABSORPTION IN THE ANALYSIS OF RESIDUAL STRESSES IN SAMPLES WITH CYLINDRICAL GEOMETRY

S. V. VLASENKO^a, A. I. BENEDIKTOVITCH^a

^aBelarusian State University, Nezavisimosti avenue, 4, 220030, Minsk, Republic of Belarus

Corresponding author: svetlana.vlasenko.bsu@gmail.com

In this paper the influence of sample geometry on taking into account the X-ray absorption when passing through the sample is investigated. The paper deals with the case of cylindrical geometry. For this case the theoretical description of absorption in the samples with such a geometry is carried out. The obtained theoretical expressions were used for taking into account the absorption of X-rays in iron wires in the analysis of residual stresses. With the help of X-ray diffractometry diffraction profiles under various tilt and rotation angles of diffraction vector with respect to sample normal were obtained. The experimental profiles were fitted by the linear dependence since in this investigation the samples are supposed to be isotropic. On the basis of the results of fitting procedure the components of stress tensor were determined.

Образец цитирования:

Власенко С. В., Бенедиктович А. И. Поглощение рентгеновского излучения при анализе остаточных напряжений в образцах с цилиндрической геометрией // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2017. № 1. С. 82–87.

For citation:

Vlasenko S. V., Benediktovitch A. I. X-ray absorption in the analysis of residual stresses in samples with cylindrical geometry. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2017. No. 1. P. 82–87 (in Russ.).

Авторы:

Светлана Владимировна Власенко – аспирантка кафедры теоретической физики и астрофизики физического факультета. Научный руководитель – А. И. Бенедиктович.
Андрей Игоревич Бенедиктович – кандидат физико-математических наук; доцент кафедры теоретической физики и астрофизики физического факультета.

Authors:

Svetlana Vlasenko, postgraduate student at the department of theoretical physics and astrophysics, faculty of physics.
svetlana.vlasenko.bsu@gmail.com
Andrei Benediktovitch, PhD (physics and mathematics); associate professor at the department of theoretical physics and astrophysics, faculty of physics.

It was established that there exist some deviations from linear dependence. It can be related to the presence of anisotropy of the sample because of texture or direction dependent grain interaction. It follows that for more rigorous description of the experimentally obtained dependencies it is necessary to consider the samples anisotropic and to supply the analysis of residual stresses with corresponding theory.

Key words: X-ray diffractometry; absorption; residual stresses; cylindrical geometry; data fitting.

Введение

Вследствие различных технологических процессов в поверхностных слоях материалов возникают остаточные напряжения [1–3]. Их анализ представляет собой важную задачу, поскольку они могут ухудшать физические свойства материала. Определение остаточных напряжений обеспечивает возможность их уменьшения, что позволяет изменить условия создания и обработки материалов в целях улучшения их свойств.

Один из методов определения остаточных напряжений – рентгеновская дифрактометрия [4; 5]. Важным аспектом анализа с помощью рентгеновских методов является поглощение излучения по мере его прохождения через вещество. Учет поглощения зависит от геометрии образца. Для ряда образцов (например, проволоки) нельзя считать их геометрию плоской и необходимо учитывать наличие кривизны [6; 7].

В настоящей работе выполнен анализ остаточных напряжений в железных проволоках с использованием метода $\sin^2\psi$. При обработке рентгенодифракционных данных этих образцов учитываются особенности геометрии (цилиндрическая) в описании поглощения рентгеновского излучения по мере прохождения через вещество. На основе фитирования зависимостей $d_{\phi\psi}(\sin^2\psi)$ линейной функцией были получены компоненты тензора напряжения.

Теоретические основы

Метод $\sin^2\psi$. Данный метод является одним из наиболее распространенных при определении остаточных напряжений [4]. В настоящем исследовании будем считать образцы изотропными. В этом случае можно записать закон Гука, который связывает тензоры деформации $\langle \epsilon_{ij}^S \rangle$ и напряжения $\langle \sigma_{ij}^S \rangle$ в системе отсчета образца

$$\langle \epsilon_{ij}^S \rangle = S_{ijkl}^S \langle \sigma_{kl}^S \rangle,$$

где S_{ijkl}^S – тензор податливости в системе отсчета образца (S).

В случае измерения при помощи рентгеновского излучения получаем только одну компоненту тензора деформации $\langle \epsilon_{33}^L \rangle$ относительно лабораторной (L) системы отсчета:

$$\epsilon_{\phi\psi}^{hkl} = \langle \epsilon_{33}^L \rangle.$$

Связать тензор деформации в лабораторной системе и системе отсчета образца можно посредством единичного вектора

$$m^S = (\sin\psi \cos\phi, \sin\psi \sin\phi, \cos\psi),$$

где ψ – угол наклона нормали к поверхности образца по отношению к вектору дифракции; ϕ – угол, описывающий вращение образца относительно нормали. Тогда получим следующее выражение:

$$\begin{aligned} \epsilon_{\phi\psi}^{hkl} = \langle \epsilon_{33}^L \rangle &= m_i \langle \epsilon_{ij}^S \rangle m_j; \\ \epsilon_{\phi\psi}^{hkl} &= \frac{1}{2} S_2 \sin^2\psi \left[\langle \sigma_{11}^S \rangle \cos^2\phi + \langle \sigma_{12}^S \rangle \sin(2\phi) + \langle \sigma_{22}^S \rangle \sin^2\phi \right] + S_1 \left[\langle \sigma_{11}^S \rangle + \langle \sigma_{22}^S \rangle + \langle \sigma_{33}^S \rangle \right] + \\ &+ \frac{1}{2} S_2 \left[\langle \sigma_{13}^S \rangle \cos\phi \sin(2\psi) + \langle \sigma_{23}^S \rangle \sin\phi \sin(2\psi) + \langle \sigma_{33}^S \rangle \cos^2\psi \right]. \end{aligned} \quad (1)$$

Уравнение (1) называют законом $\sin^2\psi$.

Поглощение рентгеновского излучения. По мере прохождения рентгеновского излучения через вещество происходит ослабление интенсивности излучения:

$$I = I_0 \int_0^t \exp[-\tau(l_1 + l_2)] dV,$$

где l_1 и l_2 – пути падающего и дифрагированного рентгеновских излучений при прохождении через вещество; τ – коэффициент поглощения; I_0 – интенсивность падающей волны; t – толщина образца.

Метод измерения, используемый в настоящем исследовании для определения остаточных напряжений, предполагает наклон и вращение образца, при этом плоскость дифракции пересекает образец по эллипсу. В данном случае нельзя использовать выражения для плоского образца, поэтому пути, которые проходит излучение, должны быть рассчитаны в соответствии с особенностями геометрии (рис. 1).

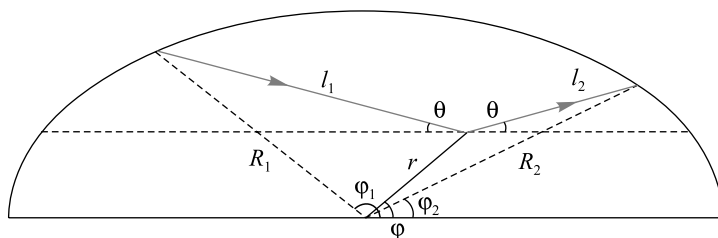


Рис. 1. Описание поглощения в образцах с цилиндрической геометрией:

θ – угол дифракции; φ – полярные координаты; R – радиус эллипса

Fig. 1. The description of absorption in samples with cylindrical geometry:

θ – diffraction angle; φ – polar coordinate; R – ellipse axis

В случае эллиптического сечения величины l_2 , r и R_2 связаны следующим соотношением:

$$\frac{l_2}{\sin(\varphi - \varphi_2)} = \frac{r}{\sin(\varphi_2 - \theta)} = \frac{R_2}{\sin(\varphi - \theta)}, \quad (2)$$

где R_2 можно записать как

$$R_2 = \frac{b}{\sqrt{1 - e^2 \cos^2 \varphi_2}},$$

$$b = \frac{d}{2 \cos \psi}, \quad e = \sqrt{1 - \frac{b^2}{a^2}}, \quad a = \frac{d}{2 \cos \varphi},$$

где d – диаметр проволоки.

Тогда путь l_2 , который проходит дифрагированный пучок, запишется как

$$l_2 = \frac{r \sin(\varphi - \varphi_2)}{\sin(\varphi_2 - \theta)}. \quad (3)$$

Используя равенства (2), можно получить выражение для угла φ_2

$$\varphi_2 = \arccos \left[\sqrt{\frac{-2mn + p^2 + \sqrt{p^2(-4m^2 - 4mn + p^2)}}{2(n^2 + p^2)}} \right], \quad (4)$$

где m , n и p выражаются следующим образом:

$$m = s^2 \cos^2 \theta - r^2, \quad n = r^2 e^2 - s^2 \cos(2\theta), \quad p = s^2 \sin(2\theta), \quad s = \frac{b}{\sin(\varphi - \theta)}.$$

Для частного случая, когда $\varphi = \theta$, l_2 имеет вид

$$l_2 = \frac{b}{\sqrt{1 - e^2 \cos^2 \theta}} - r.$$

Таким образом, подставляя соотношение (4) в формулу (3), получим выражение для l_2 как функции r и φ . Зависимость функции l_2 от r при $\varphi = \frac{\pi}{5}$ представлена на рис. 2. Аналогичным образом может быть получена зависимость $l_1(r, \varphi)$.

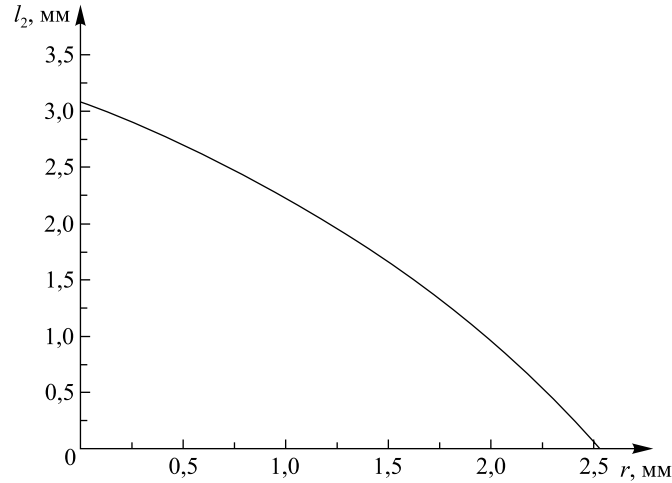


Рис. 2. Изменение пути l_2 дифрагированного пучка при изменении глубины проникновения r при $\varphi = \frac{\pi}{5}$ для $d = 1,97$ мм

Fig. 2. The change of path of the diffracted beam l_2 with the change of the penetration depth r for $\varphi = \frac{\pi}{5}$ and $d = 1.97$ mm

С учетом поглощения рентгеновского излучения полученные на основании измерений межплоскостные расстояния $d_{\varphi\psi}$ представляют собой усредненные величины по отношению к глубине проникновения рентгеновского излучения z :

$$\varepsilon_{\varphi\psi}(\tau) = \frac{d_{\varphi\psi}(\tau) - d_0}{d_0} = \frac{\int \varepsilon_{\varphi\psi}(z) e^{-z/\tau} dz}{\int e^{-z/\tau} dz},$$

где d_0 – межплоскостное расстояние при отсутствии напряжений.

Эксперимент

Измерения остаточных напряжений были выполнены на дифрактометре Ultima IV с использованием параллельного пучка ($\text{CuK}\alpha$, $\lambda = 0,154\,056$ нм). Поскольку в состав образцов входит железо, то наблюдается флуоресценция. Для ее уменьшения был использован монохроматор дифрагированного пучка, который улучшает соотношение «сигнал – шум» для таких материалов, а также щели Соллера – 5° и щель, ограничивающая расходимость, – 10 мм.

Получены дифракционные профили для железных проволок диаметрами d_1 , равным $1,97$ мм, и d_2 , равным $1,2$ мм, в диапазоне углов $-75^\circ \leq \psi \leq 0^\circ$ для случаев $\varphi = 0^\circ$ и $\varphi = 45^\circ$.

Определение остаточных напряжений

На основе полученных выражений был проведен анализ остаточных напряжений в проволоках с использованием предложенного способа описания поглощения рентгеновского излучения в образцах с цилиндрической геометрией.

В настоящем исследовании предполагается, что тензор напряжения обладает аксиальной симметрией (на основе способа получения и обработки проволок). С учетом аксиальной симметрии задачи удобно использовать цилиндрическую систему координат для записи компонент тензора напряжений. В этой системе координат тензор напряжений будет иметь только две, не равные нулю, компоненты: σ_r и σ_θ .

Построены зависимости деформации $\varepsilon_{\varphi\psi}$ от $\sin^2\psi$ для фиксированных значений φ . Поскольку в рамках нашей модели образцы рассматриваются как изотропные, то зависимость $\varepsilon_{\varphi\psi}(\sin^2\psi)$ должна быть линейной и экспериментальные данные фитируются линейной зависимостью. Результаты фитирования приведены на рис. 3 и 4. Получены значения компонент для тензора напряжений с учетом поглощения рентгеновского излучения. Для образца диаметром $d = 1,97$ мм были получены значения $\sigma_r = 0,71$ и $\sigma_\theta = 0,53$ ГПа; для образца диаметром $d = 1,2$ мм – $\sigma_r = 0,96$ и $\sigma_\theta = 0,61$ ГПа.

На рис. 3 и 4 видны отклонения от линейной зависимости, что может быть связано с анизотропией, например, вследствие наличия текстуры.

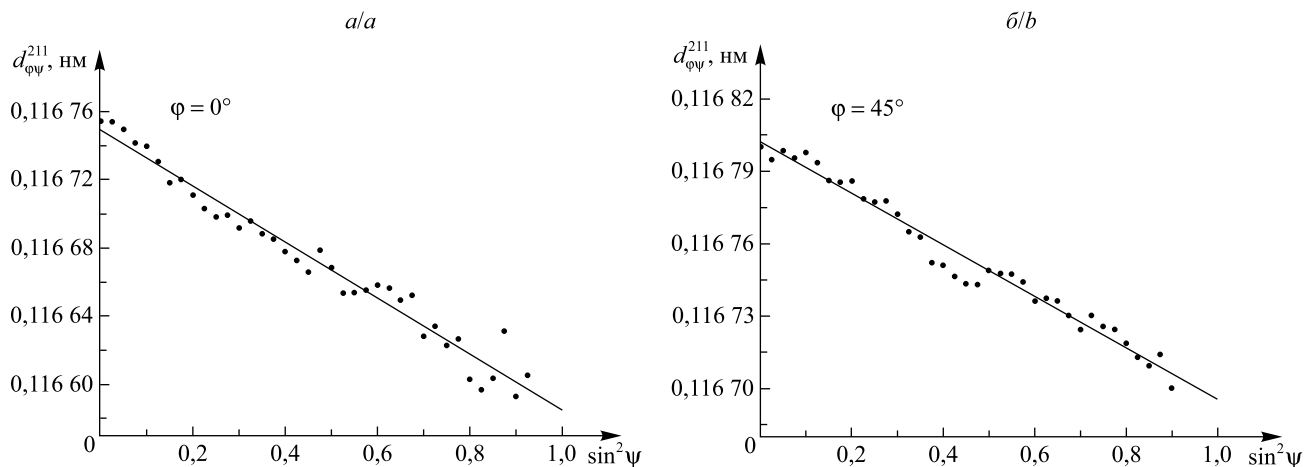


Рис. 3. Экспериментальные зависимости $d_{\varphi\psi}^{211}(\sin^2\psi)$ и результаты их фитирования линейной функцией в образце с $d = 1,97$ мм для рефлекса 211 в случае углов $\varphi = 0^\circ$ (а) и $\varphi = 45^\circ$ (б):
— кривая фитирования; • экспериментальные данные

Fig. 3. Experimental dependencies $d_{\varphi\psi}^{211}(\sin^2\psi)$ and the results of fitting with the linear function for the sample with $d = 1.97$ mm for 211 reflection for the angles $\varphi = 0^\circ$ (a) and $\varphi = 45^\circ$ (b):
— fitting curve; • experimental data

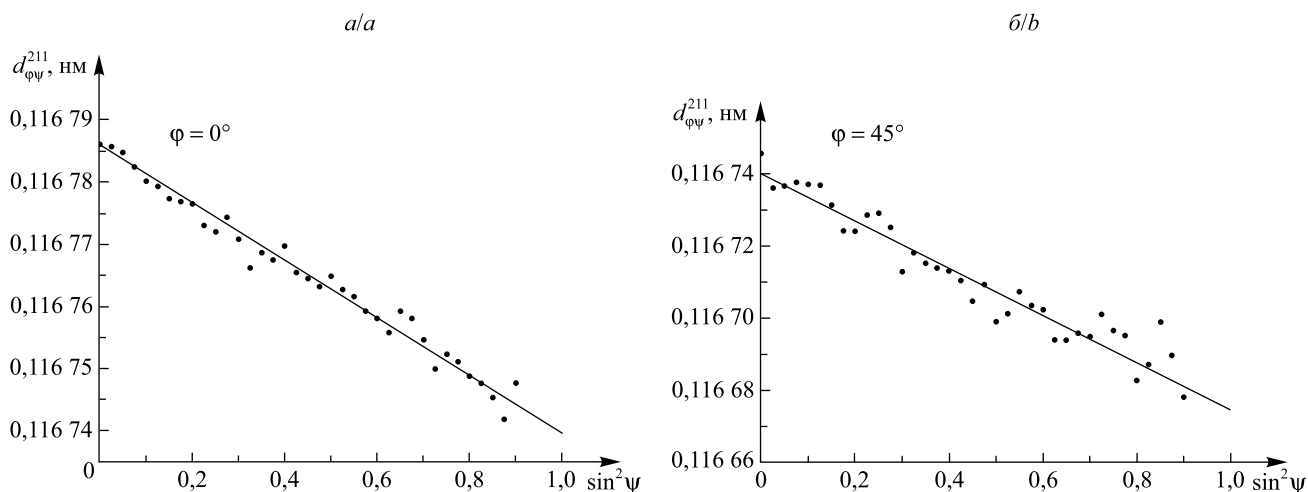


Рис. 4. Экспериментальные зависимости $d_{\varphi\psi}^{211}(\sin^2\psi)$ и результаты их фитирования линейной функцией в образце с $d = 1,2$ мм для рефлекса 211 в случае углов $\varphi = 0^\circ$ (а) и $\varphi = 45^\circ$ (б):
— кривая фитирования; • экспериментальные данные

Fig. 4. Experimental dependencies $d_{\varphi\psi}^{211}(\sin^2\psi)$ and the results of fitting with the linear function for the sample with $d = 1.2$ mm for 211 reflection for the angles $\varphi = 0^\circ$ (a) and $\varphi = 45^\circ$ (b):
— fitting curve; • experimental data

Заключение

Таким образом, был выполнен анализ остаточных напряжений в проволоках с учетом поглощения рентгеновского излучения. Поглощение излучения описано с учетом особенностей геометрии образцов (цилиндрическая геометрия). С использованием метода $\sin^2\psi$ определены компоненты тензора напряжения. В результате процедуры фитирования экспериментальных данных линейной функцией видно, что присутствуют отклонения от линейной зависимости для $d_{\varphi\psi}^{211}(\sin^2\psi)$, что может быть связано с наличием анизотропии (например, присутствие текстуры). Из этого можно сделать вывод о том, что для более строгого описания полученных экспериментальных зависимостей следует считать образцы анизотропными и дополнить анализ остаточных напряжений соответствующей теорией.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

1. Residual stresses in cold drawn ferritic rods / J. M. Atienza [et al.] // *Scripta Mater.* 2005. Vol. 52, issue 4. P. 305–309.
2. Experimental and numerical study of residual stress evolution in cold spray coating / R. Ghelichi [et al.] // *Appl. Surf. Sci.* 2014. Vol. 288. P. 26–33.
3. Elices M. Influence of residual stresses in the performance of cold-drawn pearlitic wires // *J. Mater. Sci.* 2004. Vol. 39, issue 12. P. 3889–3899.
4. Stress analysis of polycrystalline thin films and surface regions by X-ray diffraction / U. Welzel [et al.] // *J. Appl. Cryst.* 2005. Vol. 38, part 1. P. 1–29.
5. Welzel U., Mittemeijer E. J. Diffraction stress analysis of macroscopically elastically anisotropic specimens: on the concepts of diffraction elastic constants and stress factors // *J. Appl. Phys.* 2003. Vol. 93, issue 11. P. 9001–9011.
6. The influence of cylindrical geometry on X-ray stress tensor analysis. General formulation / M. Francois [et al.] // *J. Appl. Cryst.* 1995. Vol. 28, part 6. P. 761–767.
7. The influence of cylindrical geometry on X-ray stress tensor analysis. Applications / B. Dionnet [et al.] // *J. Appl. Cryst.* 1999. Vol. 32, part 5. P. 883–891.

REFERENCES

1. Atienza J. M., Martinez-Perez M. L., Ruiz-Hervias J., et al. Residual stresses in cold drawn ferritic rods. *Scripta Mater.* 2005. Vol. 52, issue 4. P. 305–309. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2004.10.010.
2. Ghelichi R., Bagherifard S., MacDonald D., et al. Experimental and numerical study of residual stress evolution in cold spray coating. *Appl. Surf. Sci.* 2014. Vol. 288. P. 26–33. DOI: 10.1016/j.apsusc.2013.09.074.
3. Elices M. Influence of residual stresses in the performance of cold-drawn pearlitic wires. *J. Mater. Sci.* 2004. Vol. 39, issue 12. P. 3889–3899. DOI: 10.1023/B:JMSC.0000031470.31354.b5.
4. Welzel U., Ligot J., Lamparter P., et al. Stress analysis of polycrystalline thin films and surface regions by X-ray diffraction. *J. Appl. Cryst.* 2005. Vol. 38, part 1. P. 1–29. DOI: 10.1107/S0021889804029516.
5. Welzel U., Mittemeijer E. J. Diffraction stress analysis of macroscopically elastically anisotropic specimens: on the concepts of diffraction elastic constants and stress factors. *J. Appl. Phys.* 2003. Vol. 93, issue 11. P. 9001–9011. DOI: 10.1063/1.1569662.
6. Francois M., Dionnet B., Sprauel J. M., et al. The influence of cylindrical geometry on X-ray stress tensor analysis. General formulation. *J. Appl. Cryst.* 1995. Vol. 28, part 6. P. 761–767. DOI: 10.1107/S0021889895006868.
7. Dionnet B., Francois M., Sprauel J. M., et al. The influence of cylindrical geometry on X-ray stress tensor analysis. Applications. *J. Appl. Cryst.* 1999. Vol. 32, part 5. P. 883–891. DOI: 10.1107/S0021889899003829.

Статья поступила в редколлегию 30.06.2016.
Received by editorial board 30.06.2016.

УДК 520.874.7

ВЛИЯНИЕ МАТРИЦЫ НА ХАРАКТЕРИСТИКИ КВАЗИТРЕХУРОВНЕВОГО НЕОДИМОВОГО ЛАЗЕРА ПРИ СТАЦИОНАРНОЙ ГЕНЕРАЦИИ

И. В. СТАШКЕВИЧ¹⁾, В. И. ГЕРАСИМЕНКО¹⁾

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

Проанализированы генерационные характеристики неодимового лазера с квазитрехуровневой схемой для наиболее распространенных кристаллических матриц. Матрица, в которой находятся ионы неодима, определяет основные параметры активной среды – величину штарковского расщепления уровней, время жизни возбужденного состояния, концентрацию ионов неодима, сечений поглощения и излучения. Теоретическое исследование энергетических характеристик излучения такого лазера с различными матрицами проведено для стационарного режима генерации. Анализ выполнялся для модели лазера с продольной диодной накачкой. Показано, что максимальный КПД имеет неодимовый лазер с матрицей калий-гадолиниевого вольфрамата (KGW), следующие по эффективности матрицы – ванадат гадолиния и ванадат иттрия. Наиболее низкую эффективность демонстрируют матрицы из оксида иттрия, иттриево-алюминиевого перовскита (YAP) и гадолиниево-галлиевого граната (GGG). Самый низкий порог генерации имеют лазеры с матрицами иттриево-алюминиевого граната (YAG) и ванадата гадолиния (GVO).

Ключевые слова: неодимовый лазер; квазитрехуровневая схема; эффективность; порог генерации; Nd : KGW; Nd : GVO; Nd : YVO; Nd : YAG; Nd : YAP; Nd : GGG; Nd : Y₂O₃.

Образец цитирования:

Сташкевич И. В., Герасименко В. И. Влияние матрицы на характеристики квазитрехуровневого неодимового лазера при стационарной генерации // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2017. № 1. С. 88–94.

For citation:

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

Авторы:

Игорь Вячеславович Сташкевич – кандидат физико-математических наук, доцент; доцент кафедры лазерной физики и спектроскопии физического факультета.

Валерия Игоревна Герасименко – студентка физического факультета.

Authors:

Ihar Stashkevich, PhD (physics and mathematics), docent; associate professor at the department of laser physics and spectroscopy, faculty of physics.

stashkevitch@bsu.by

Valeryja Herasimenka, student at the faculty of physics.

gerasimenkovaleriya.i@gmail.com

THE MATRIX EFFECT ON THE QUASI-THREE-LEVEL NEODYMIUM LASER PARAMETERS IN THE STATIONARY REGIME

I. V. STASHKEVICH^a, V. I. HERASIMENKA^a

^aBelarusian State University, Nezavisimosti avenue, 4, 220030, Minsk, Republic of Belarus

Corresponding author: stashkevitch@bsu.by

The analysis of the output characteristics of a neodymium laser with a quasi-three-level scheme for most common crystalline matrices is presented. The matrix containing neodymium ions governs the basic parameters of an active medium: the value of Stark level splitting, lifetime of the excited state, maximal concentration of neodymium ions, absorption and emission cross-sections. The energy characteristics of radiation from such a laser with different matrices in the stationary mode of generation have been studied theoretically. The modeling has been performed for an end-pumped laser. It has been shown that the efficiency is at maximum for a neodymium laser with potassium-gadolinium tungstate (KGW) matrix, it is lowering for gadolinium and yttrium vanadates, being minimal for the matrices of yttrium oxide, yttrium aluminium perovskite (YAP), and gadolinium gallium garnet (GGG). The lowest lasing threshold is characteristic for lasers with yttrium aluminium garnet (YAG) and gadolinium vanadate (GVO) matrices.

Key words: neodymium laser; quasi-three-level scheme; efficiency; lasing threshold; Nd : KGW; Nd : GVO; Nd : YVO; Nd : YAG; Nd : YAP; Nd : GGG; Nd : Y₂O₃.

Твердотельные лазеры с диодной накачкой, обладающие высокой энергетической эффективностью, компактностью, большим КПД и стабильностью частоты генерации, нашли широкое применение в науке и производстве. Наиболее часто используются лазеры на основе ионов неодима Nd³⁺. Существующие нелинейные кристаллы позволяют получать преобразование частоты инфракрасного (ИК) излучения в видимый диапазон с высокой эффективностью при мощностях ИК-излучения 0,1–1,0 Вт и, таким образом, расширять область применения твердотельных лазеров с диодной накачкой. Одной из актуальных задач является получение лазерной генерации в синей области спектра. Такое излучение востребовано в сфере информационных технологий и связи, записи голограмм, медицине и зондировании атмосферы. Наиболее часто с этой целью используются неодимовые лазеры с квазитрехуровневой схемой, работающие на переходе иона неодима ${}^4F_{3/2} - {}^4I_{9/2}$. При удвоении частоты здесь можно, используя различные матрицы, получить когерентное излучение в диапазоне 450–470 нм. Матрица, в которой находятся ионы неодима, определяет основные параметры активной среды – величину штарковского расщепления уровней, время жизни возбужденного состояния, концентрацию ионов неодима, сечений поглощения и излучения.

Цель настоящей работы – сравнить генерационные характеристики квазитрехуровневого неодимового лазера при работе с различными широко используемыми кристаллическими матрицами и дать рекомендации по выбору матриц с наилучшими показателями эффективности генерации и ее порога.

Анализ проводился для модели лазера, работающего в стационарном режиме. Схема энергетических уровней и переходов иона неодима в лазере с квазитрехуровневой схемой генерации представлена на рис. 1. При накачке ион переходит с нижнего подуровня Z_1 основного состояния на уровень ${}^4F_{5/2}$. Время жизни его в этом состоянии – менее 10 нс, и в результате безызлучательных переходов осуществляется быстрая релаксация на уровень ${}^4F_{3/2}$. Генерация происходит на переходах между нижним подуровнем ${}^4F_{3/2}$ (R_1) и верхним подуровнем расщепленного основного состояния ${}^4I_{9/2}$ (Z_5). Общий вид схемы одинаковый для всех кристаллов, изменяются только значения энергий подуровней состояний ${}^4F_{3/2}$ и ${}^4I_{9/2}$.

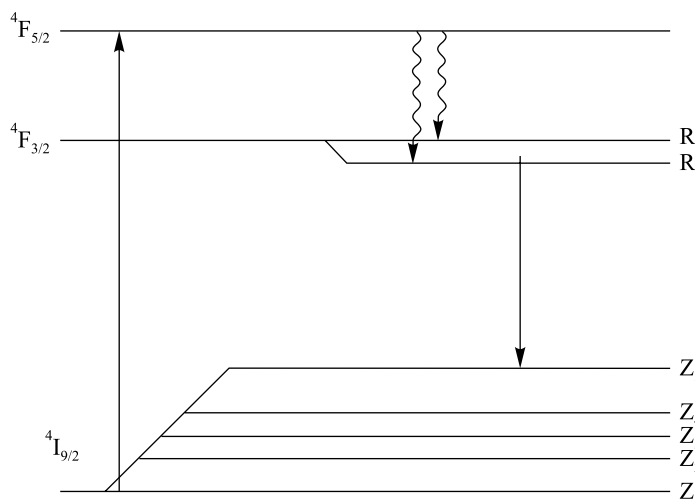


Рис. 1. Схема уровней энергии и переходов иона неодима в квазитрехуровневом лазере

Fig. 1. Scheme of energy levels and transitions of neodymium ions in quasi-three-level laser

Процесс генерации анализировался в рамках точечной модели активной среды (пространственное изменение переменных не рассматривалось) на основе балансных уравнений [1]. Предполагалось также, что в каждый момент времени населенность подуровней системы удовлетворяет распределению Больцмана, так что все подуровни будут частично заселены [2].

В системе балансных уравнений для стационарного режима производные по всем переменным приравнивались к нулю. В итоге для схемы энергетических уровней и переходов, приведенной на рис. 1, получена система однородных линейных алгебраических уравнений:

$$\begin{aligned}\mu v_c \sigma_e S (c_2 n_1 - n_0) - S r_{ic} &= 0, \\ \frac{a_1}{\tau_1} n_1 + a_1 \sigma_e S (c_2 n_1 - n_0) - S_{\text{нак}} \sigma_a a n_0 &= 0, \\ -\frac{n_1}{\tau_1} + \frac{n_2}{\tau_2} + \sigma_e S (n_0 - c_2 n_1) &= 0, \\ -\frac{n_2}{\tau_2} + S_{\text{нак}} \sigma_a c_2 \frac{a}{a_1} n_0 &= 0,\end{aligned}$$

где σ_e – сечение излучения; σ_a – сечение поглощения; n_i и τ_i ($i = 0, 1, 2$) – плотности населенности и время жизни нижнего лазерного уровня (Z_5), уровней ${}^4F_{3/2}$ и ${}^4F_{5/2}$ соответственно; S – плотность потока фотонов в резонаторе; $S_{\text{нак}}$ – плотность потока фотонов накачки, определяемая мощностью накачки; величины μ и r_{ic} характеризуют степень заполнения резонатора активной средой и обратное время жизни фотона в резонаторе соответственно [2]; v_c – скорость света в среде. Коэффициенты a , a_1 , c_2 описывают относительное число частиц на подуровне, с которого проводится накачка (Z_1), на нижнем (Z_5) и верхнем (R_1) лазерных подуровнях соответственно.

Эта система имеет два решения. Первое из них – тривиальное, при котором мощности накачки не хватает для возникновения генерации:

$$\begin{cases} S = 0, \\ n_0 = \frac{N_s}{1 + S_{\text{нак}} \sigma_a (\tau_1 + \tau_2)}, \\ n_1 = \frac{N_s S_{\text{нак}} \sigma_a \tau_1}{1 + S_{\text{нак}} \sigma_a (\tau_1 + \tau_2)}, \\ n_2 = \frac{N_s S_{\text{нак}} \sigma_a \tau_2}{1 + S_{\text{нак}} \sigma_a (\tau_1 + \tau_2)}. \end{cases}$$

Второе – нетривиальное, описывающее генерацию лазерного излучения в стационарном режиме:

$$\begin{cases} S = \frac{-r_{ic} (1 + S_{\text{нак}} \sigma_a (\tau_1 + \tau_2)) + \mu v_c N_s \sigma_e (-c_2 + S_{\text{нак}} \sigma_a \tau_1)}{r_{ic} \cdot \sigma_e \tau_1 (1 + c_2 + S_{\text{нак}} \sigma_a \tau_2)}, \\ n_0 = \frac{r_{ic} - \mu v_c N_s \sigma_e}{\mu v_c \sigma_e + c_2 \mu v_c \sigma_e + \mu v_c S_{\text{нак}} \sigma_a \sigma_e \tau_2}, \\ n_1 = \frac{r_{ic} + S_{\text{нак}} r_{ic} \cdot \sigma_a \tau_2 + c_2 \mu v_c N_s \sigma_e}{\mu v_c \sigma_e + c_2 \mu v_c \sigma_e + \mu v_c S_{\text{нак}} \sigma_a \sigma_e \tau_2}, \\ n_2 = \frac{S_{\text{нак}} \sigma_a \tau_2 (-r_{ic} + \mu v_c N_s \sigma_e)}{\mu v_c \sigma_e (1 + c_2 + S_{\text{нак}} \sigma_a \tau_2)}. \end{cases}$$

Анализ второго решения показывает, что зависимость плотности потока фотонов в резонаторе от величины накачки $S(S_{\text{нак}})$ хорошо аппроксимируется линейной функцией вида $S = a + bS_{\text{нак}}$, где с учетом того, что время $\tau_1 \gg \tau_2$,

$$a = \frac{r_{lc} + c_2 \mu v_c \sigma_e N_s}{r_{lc} \sigma_e \tau_1 (1 + c_2)},$$

$$b = \frac{\sigma_a (-r_{lc} + \mu v_c \sigma_e N_s)}{\sigma_e r_{lc} (1 + c_2)},$$

где σ_e – сечение излучения; σ_a – сечение поглощения. Параметр b зависит от таких спектроскопических характеристик матриц, как сечения поглощения и излучения и объемная плотность ионов. Чем больше отношение сечения поглощения к сечению излучения для некоторой матрицы и объемная плотность ионов, тем больше параметр b , который является показателем эффективности генерации или дифференциальным КПД.

Пороговая плотность фотонов накачки $S_{\text{нп}}$ будет определяться выражением

$$S_{\text{нп}} = \frac{a}{b} = \frac{r_{lc} + c_2 \mu v_c \sigma_e N_s}{\sigma_e \tau_1 (-r_{lc} + \mu v_c \sigma_e N_s)},$$

из которого видно, что наибольшее влияние на порог генерации оказывает время жизни возбужденного состояния. Чем оно больше, тем ниже порог, что хорошо согласуется с общей теорией генерации. Пороговая мощность накачки соответственно определяется по следующей формуле:

$$P_{\text{пор}} = S_{\text{нп}} \cdot S_{\text{аз}} \cdot h\nu_{\text{погл}},$$

где $S_{\text{аз}}$ – площадь активной зоны; $h\nu_{\text{погл}}$ – энергия поглощаемого средой фотона.

Численные расчеты проводились для лазера с продольной диодной накачкой, параметры которого соответствовали реально существующему лазеру: длина активного элемента 2 мм, длина резонатора 200 мм, диаметр области, на которую фокусируется излучение накачки, 0,3 мм. Коэффициент отражения выходного зеркала составляет 0,98, коэффициент неактивных потерь в резонаторе – $0,002 \text{ см}^{-1}$. Следует отметить, что получение генерации по квазитрехуровневой схеме значительно сложнее, чем по четырехуровневой, и здесь необходимо соответствующим образом подбирать параметры резонатора. Для сравнения брались матрицы с оптимальными концентрациями ионов неодима, когда еще не происходит концентрационного тушения и эффективность генерации максимальна. Основные характеристики рассматриваемых матриц приведены в табл. 1.

Зависимость плотности потока фотонов в резонаторе от мощности накачки для различных матриц приведена на рис. 2. Прямые с наибольшей эффективностью соответствуют матрицам KGW, GVO и YVO.

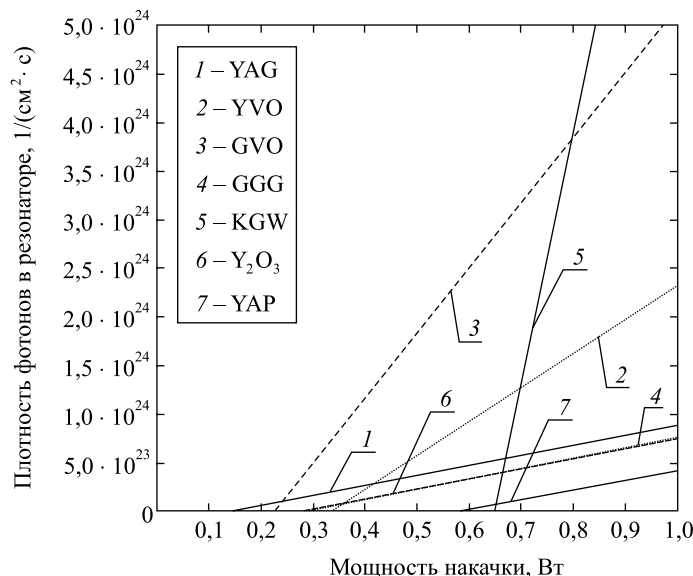


Рис. 2. Зависимость плотности потока фотонов в резонаторе от мощности накачки для различных матриц

Fig. 2. The dependence of the photon flux density in the cavity of the pump power for various matrices

Таблица 1

Параметры основных матриц, используемых в квазитрехуровневом неодимовом лазере

Table 1

The main parameters of the matrices used in the quasi-three-level neodymium laser

Матрица	Химическая формула	Показатель преломления n	Концентрация ионов Nd^{3+} , см^{-3}	$\lambda_{\text{св}}$, нм	$\sigma_{\text{e}} \cdot 10^{20}$, см^2	τ_2 , мкс	$\lambda_{\text{сп}}$, нм	$\sigma_{\text{a}} \cdot 10^{20}$, см^2	Эnergии подуровней $4\text{I}_{9/2}$, см^{-1}	Эnergии подуровней $4\text{F}_{3/2}$, см^{-1}	Источник
YAG	$\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$	1,83	1,0 % $1,38 \cdot 10^{20}$	946,0	6,4	220	808,0	7,0	857, 312, 199, 133, 0	11 512 11 427	[3–5]
YVO	YVO_4	$n_1 = 2,16$ $n_o = 1,95$	1,0 % $1,25 \cdot 10^{20}$	915,0	5,0	110	808,5	27,0	439, 226, 173, 108, 0	11 384 11 366	[3–5]
GVO	GdVO_4	$n_1 = 2,19$ $n_o = 1,97$	1,0 % $1,25 \cdot 10^{20}$	912,0	7,0	94	808,4	52,0	409, 267, 173, 107, 0	11 375	[4; 5]
GGG	$\text{Gd}_3\text{Ga}_5\text{O}_{12}$	1,94	1,6 % $2,0 \cdot 10^{20}$	937,0	2,95	250	808,0	4,8	772, 253, 178, 93, 0	11 485 11 442	[3; 6; 7]
Y_2O_3	Y_2O_3	1,89	1,0 % $2,68 \cdot 10^{20}$	914,3	2,6	378	820,0	3,87	643, 447, 267, 29, 0	11 404 11 208	[8]
YAP	YAlO_3	$n_{\alpha} = 1,914$ $n_{\beta} = 1,925$ $n_{\gamma} = 1,940$	1,0 % $1,9 \cdot 10^{20}$	930,0	5,3	150	794,5	5,0	670, 499, 208, 115, 0	11 545 11 421	[3; 4]
KGW	$\text{KGd(WO}_4)_2$	2,014	8,0 % $11,0 \cdot 10^{20}$	911,2	7,0	90	810,6	23,0	340, 295, 150, 102, 0	11 417 11 315	[3; 9]

Значения эффективности генерации и пороговой мощности накачки для исследуемых матриц в стационарном режиме приведены в табл. 2.

Таблица 2

Значения пороговой мощности и эффективности генерации для различных кристаллических матриц в стационарном режиме работы лазера

Table 2

Values of threshold power and generation efficiency for different crystalline matrices in stationary mode lasing

Матрица	Пороговая мощность накачки, мВт	Эффективность генерации $S/S_{\text{нак}}$
YAG	153	182,6
YVO	337	607,9
GVO	226	1164
GGG	280	179,4
Y ₂ O ₃	321	192,3
YAP	579	176,6
KGW	650	4472

Максимальный КПД, как видно из рис. 2 и табл. 2, имеет неодимовый лазер с матрицей KGW, следующие по эффективности матрицы – GVO и YVO. Наихудшим вложением энергии будут матрицы из оксида иттрия, YAP и GGG.

Следует отметить, что хотя матрица KGW с неодимом дает максимальную эффективность генерации, однако она имеет высокое значение пороговой мощности возбуждения. Поэтому при проектировании непрерывных лазеров с небольшой выходной мощностью предпочтительнее выбирать матрицы GVO, YVO и YAG. При возможности обеспечить достаточно высокую мощность возбуждения предпочтительна матрица KGW. Компромиссным вариантом с достаточно низким порогом и высокой эффективностью генерации по квазитрехуровневой схеме является матрица GVO.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

1. Храмов В. Ю. Расчет элементов лазерных систем для информационных и технологических комплексов. СПб., 2008.
2. Сташкевич И. В., Кореновская Ю. В. Влияние температуры на генерационные характеристики неодимового лазера с квазитрехуровневой схемой // Вестн. БГУ. Сер. 1, Физика. Математика. Информатика. 2016. № 1. С. 68–74.
3. Kaminskii A. A. Laser crystals, their physics and properties. Berlin, 1990.
4. Mikhailov V. A., Zagumennyi A. I., Sherbakov I. A. Diode-Pumped Lasers Based on GdVO₄ Crystal // Laser Phys. 2003. Vol. 13, № 3. P. 311–318.
5. Diode-pumped quasi-three-level 456 nm Nd : GdVO₄ laser / Yu. D. Zavartsev [et al.] // Quantum. Electron. 2003. Vol. 33, № 7. P. 651–654.
6. Diode-pumped Nd : GGG laser at 937 nm under direct pumping / K. N. He [et al.] // Laser Phys. 2011. Vol. 21, № 10. P. 1745–1749.
7. Ground- and excited-state absorption and emission spectroscopy of Nd : GGG / R. Soulard [et al.] // J. Lumin. 2012. Vol. 132, № 10. P. 2521–2524.
8. Spectroscopic characterization of Nd : Y₂O₃: application toward a differential absorption lidar system for remote sensing of ozone / B. Walsh [et al.] // J. Opt. Soc. Am. B. 2002. Vol. 19, № 12. P. 2893–2903.
9. Сташкевич И. В., Новицкая Р. И. Генерационные характеристики квазитрехуровневого Nd : KGW лазера с диодным возбуждением // Вестн. БГУ. Сер. 1, Физика. Математика. Информатика. 2016. № 3. С. 71–75.

REFERENCES

1. Khranov V. Yu. Raschet elementov lazernykh sistem dlya informatsionnykh i tekhnologicheskikh kompleksov. Saint Petersburg, 2008 (in Russ.).
2. Stashkevich I. V., Karanouskaya Y. V. Temperature dependence generation of quasi-three-level Nd laser. Vestnik BGU. Ser. 1, Fiz. Mat. Inform. 2016. No. 1. P. 68–74 (in Russ.).
3. Kaminskii A. A. Laser crystals, their physics and properties. Berlin, 1990.

4. Mikhailov V. A., Zagumennyi A. I., Sherbakov I. A. Diode-Pumped Lasers Based on GdVO₄ Crystal. *Laser Phys.* 2003. Vol. 13, No. 3. P. 311–318.
5. Zavartsev Yu. D., Zagumennyi A. I., Zerrouk F., et al. Diode-pumped quasi-three-level 456 nm Nd : GdVO₄ laser. *Quantum. Electron.* 2003. Vol. 33, No. 7. P. 651–654. DOI: 10.1070/QE2003v033n07ABEH002473.
6. He K. N., Wei Z. Y., Li D. H., et al. Diode-pumped Nd : GGG laser at 937 nm under direct pumping. *Laser Phys.* 2011. Vol. 21, No. 10. P. 1745–1749.
7. Soulard R., Xu B., Doualan J. L., et al. Ground- and excited-state absorption and emission spectroscopy of Nd : GGG. *J. Lumin.* 2012. Vol. 132, No. 10. P. 2521–2524. DOI: 10.1016/j.jlumin.2012.03.061.
8. Walsh B., McMahon J., Edwards W., et al. Spectroscopic characterization of Nd : Y₂O₃: application toward a differential absorption lidar system for remote sensing of ozone. *J. Opt. Soc. Am. B.* 2002. Vol. 19, No. 12. P. 2893–2903. DOI: 10.1364/JOS-AB.19.002893.
9. Stashkevich I. V., Navitskaya P. I. Lasing characteristics of quasi-three-level diode-pumped Nd : KGW laser. *Vestnik BGU. Ser. 1, Fiz. Mat. Inform.* 2016. No. 3. P. 71–75 (in Russ.).

Статья поступила в редколлегию 30.09.2016.
Received by editorial board 30.09.2016.

ФИЗИКА И ТЕХНИКА ПОЛУПРОВОДНИКОВ

SEMICONDUCTOR PHYSICS AND ENGINEERING

УДК 621.382

ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ ГЕНЕРАТОРНЫХ ДИОДОВ ДЛЯ СОЗДАНИЯ ШИРОКОПОЛОСНОГО ШУМА

**В. В. БУСЛЮК¹⁾, И. Ю. НЕРОДА¹⁾, А. Н. ПЕТЛИЦКИЙ²⁾,
В. С. ПРОСОЛОВИЧ³⁾, Ю. Н. ЯНКОВСКИЙ²⁾, Р. А. ЛАНОВСКИЙ³⁾**

¹⁾Научно-исследовательское унитарное предприятие «СКБ “Запад”»,
ул. Суворова, 96/1, 224022, г. Брест, Республика Беларусь

²⁾Государственный центр «Белмикроанализ» филиала НТЦ «Белмикросистемы»
ОАО «Интеграл», ул. Казинца, 121А, 220108, г. Минск, Республика Беларусь

³⁾Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Республика Беларусь

Исследованы вольт-амперные и вольт-фарадные характеристики кремниевых диодов – генераторов шума, изготовленных по планарной технологии формирования цилиндрических $p-n$ -переходов малого диаметра (менее 10 мкм) на основе подложек монокристаллического кремния ориентации (111) с удельным сопротивлением ρ ,

Образец цитирования:

Буслюк В. В., Нерода И. Ю., Петлицкий А. Н., Просолович В. С., Янковский Ю. Н., Лановский Р. А. Электрофизические параметры генераторных диодов для создания широкополосного шума // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2017. № 1. С. 95–99.

For citation:

Busliuk V. V., Neroda I. Y., Pyatlitski A. N., Prasolovich U. S., Yankouski Y. N., Lanouski R. A. Electrophysical parameters of the diodes for broadband noise generation. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2017. No. 1. P. 95–99 (in Russ.).

Авторы:

Виктор Вячеславович Буслюк – главный инженер.

Илона Юрьевна Нерода – инженер-технолог.

Александр Николаевич Петлицкий – кандидат физико-математических наук; директор.

Владислав Савельевич Просолович – кандидат физико-математических наук, доцент; заведующий научно-исследовательской лабораторией спектроскопии полупроводников кафедры физики полупроводников и наноэлектроники физического факультета.

Юрий Николаевич Янковский – кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник научно-исследовательской лаборатории спектроскопии полупроводников кафедры физики полупроводников и наноэлектроники физического факультета.

Роман Андреевич Лановский – студент физического факультета.

Authors:

Viktar Busliuk, chief engineer.

skbwest@rambler.ru

Ilona Neroda, process engineer.

i_neroda@mail.ru

Aliaksandr Pyatlitski, PhD (physics and mathematics); director.
petan@tut.by

Uladzislau Prasolovich, PhD (physics and mathematics), docent; leading researcher at the research laboratory of spectroscopy of the department of semiconductor physics and nanoelectronics, faculty of physics.

prosolovich@bsu.by

Yuri Yankouski, PhD (physics and mathematics); head of the research laboratory of spectroscopy of the department of semiconductor physics and nanoelectronics, faculty of physics.

yankouski@bsu.by

Raman Lanouski, student at the faculty of physics.

rommel81227@mail.ru

равным $0,03 \text{ Ом} \cdot \text{см}$ (ND102 – ND104), и ρ , равным $0,005 \text{ Ом} \cdot \text{см}$ (ND201). Глубина $p-n$ -перехода, сформированного диффузией фосфора, составляет $\sim 6 \text{ мкм}$. При обратном включении напряжение пробоя для всех диодов возрастает с увеличением температуры измерений, что обусловлено уменьшением длины свободного пробега носителей заряда. Вольт-амперные характеристики при обратном смещении имеют активационный характер. Анализ показал, что во всех случаях зависимость более сильная, чем $I_{\text{обр}} \sim U^n$, $n \approx 1$. Энергия активации данного процесса составляет $0,25\text{--}0,45 \text{ эВ}$. Это характерно для термической ионизации с глубоких примесных центров технологических (фоновых) примесей, таких как Cu и Fe. Вольт-фарадные характеристики очень слабо зависят от температуры, это свидетельствует о том, что концентрация данных центров в области объемного заряда $p-n$ -перехода невелика по сравнению с уровнем легирования. Сделан вывод о том, что лавинный пробой $p-n$ -перехода сильно локализован, носит микроплазменный характер и обусловлен ионизацией технологических примесей, распределенных неоднородно по объему кристалла и составляющих основу микроплазм.

Ключевые слова: диоды – генераторы шума; электрофизические параметры; микроплазмы.

ELECTROPHYSICAL PARAMETERS OF THE DIODES FOR BROADBAND NOISE GENERATION

V. V. BUSLIUK^a, I. Y. NERODA^a, A. N. PYATLITSKI^b,
U. S. PRASALOVICH^c, Y. N. YANKOUSKI^b, R. A. LANOUSKI^c

^aScience-Production Enterprise «SKB “West”»,

Suvorova street, 96/1, 224022, Brest, Republic of Belarus

^bJSC «Integral», Kazintsa street, 121A, 220108, Minsk, Republic of Belarus

^cBelarusian State University, Nezavisimosti avenue, 4, 220030, Minsk, Republic of Belarus

Corresponding author: yankouski@bsu.by

The volt-ampere and volt-farad characteristics of silicon diodes – noise generators fabricated by the planar technology for the formation of small diameter ($<10 \text{ }\mu\text{m}$) cylindrical $p-n$ -junctions on the basis of the (111) orientation monocrystal silicon substrates with $\rho = 0.03 \text{ }\Omega\cdot\text{cm}$ (ND102 – ND104) and $\rho = 0.005 \text{ }\Omega\cdot\text{cm}$ (ND201) are analyzed. A depth of the $p-n$ -junction formed by diffusion of phosphorus is $\sim 6 \text{ }\mu\text{m}$. On reverse switching, the breakdown voltage for all diodes is growing with the increased measuring temperature due to a decrease in the mean free path of the charge carriers. With the reverse bias possess, the volt-ampere characteristics are activation in nature. As shown by the analysis performed, in all cases the dependence is stronger than $I_{\text{rev}} \sim U^n$, $n \approx 1$. The activation energy of the process under study is within the range $0.25\text{--}0.45 \text{ eV}$. This is peculiar for thermal ionization from deep impurity centers of the technological (background) impurities such as Cu and Fe. The capacitance-voltage characteristics are insignificantly dependant on temperature pointing to the fact that the concentration of these centers in the vicinity of the $p-n$ -junction volume charge is minor as compared with the doping level. It may be concluded that avalanche breakdown of the $p-n$ -junction is strongly localized, microplasmic in its nature, and determined by ionization of the technological impurities which form the base of microplasmas inhomogeneously distributed over the crystal bulk.

Key words: diodes – noise generators; electrophysical parameters; microplasmas.

Воздействие шума на линейные диагностические системы генерирует принципиально новые эффекты, которые не могут быть реализованы в его отсутствие [1]. Применение физических источников шума перспективно для создания случайных числовых последовательностей в целях защиты информации, а также диагностики оборудования методами модального анализа [2]. Для конкретного практического применения обязательным условием является наличие шума качественного с точки зрения случайности и оптимального по амплитудным и частотным характеристикам. Однако получение широкополосного шума со спектром, наиболее близким к однородному, определяется прежде всего режимом работы диодов-генераторов.

Основа работы современных полупроводниковых стабилитронов и генераторных диодов – ударная ионизация и лавинный пробой $p-n$ -перехода [3], который сильно локализован и носит микроплазменный характер. Микроплазмы (МП), как правило, располагаются в местах скопления различного рода структурных дефектов и несовершенств. Надежность лавинных диодов и их способность выдерживать кратковременные перегрузки в обратном направлении целиком определяются совокупностью МП-прибора. Поэтому примесная атмосфера и структурные дефекты микроплазменных каналов являются основополагающими факторами при разработке генераторных диодов в связи с их возможным влиянием на основные параметры вольт-амперных характеристик диодов. Если в микроплазменном

канале имеются глубокие центры (ГЦ), то эмиссия с них носителей заряда существенно влияет на параметры пробоя даже в тех случаях, когда концентрация ГЦ значительно меньше концентрации легирующих примесей. Для существования МП необходимо наличие структурных несовершенств, либо вызывающих локальные искажения электрического поля в области, на которой падение напряжения составляет около 1 В, либо содержащих ловушки с высокой плотностью заряда, создающего внутреннее электрическое поле [4; 5]. В связи с этим для разработки и корректировки топологической структуры и технологических параметров изготовления приборов актуально исследование электрофизических параметров генераторных диодов.

Исследованы электрофизические параметры кремниевых диодов – генераторов шума *ND102* – *ND104*, изготовленных по планарной диффузионной технологии формирования цилиндрических *p-n*-переходов малого диаметра (менее 10 мкм) с защитой от поверхностного пробоя [3] на основе подложек монокристаллического кремния марки 3А2яКДБ0,03(111)4⁰-460, и диодов – генераторов шума *ND201*, созданных по аналогичной технологии на основе подложек монокристаллического кремния марки 3А2яКДБ0,005(111)4⁰-460. Глубина *p-n*-перехода, сформированного диффузией фосфора, составляла ~6 мкм. Амплитуда шумов в области лавинного пробоя достигала ~100 мВ при токе 50 мкА, верхняя граница однородных шумов ≤3 МГц. Измерения вольт-амперных характеристик (ВАХ) и вольт-фарадных характеристик (ВФХ) диодов в целях определения влияния глубоких центров на электрофизические параметры приборов проводились с помощью измерителя параметров полупроводниковых приборов Agilent B1500A и зондовой станции Cascade Summit11000 в интервале температур от –60 до 125 °С. Структурные дефекты подложки выявлялись путем травления в селективном хромовом травителе.

Исследования прямых ветвей ВАХ показали, что для всех диодов они имеют экспоненциальную зависимость, а напряжение открывания диодов увеличивается с уменьшением температуры. Это обусловлено тем, что ток в прямом направлении определяется его диффузионной составляющей, зависящей как от величины концентрации неосновных носителей заряда, так и от температурного изменения ширины запрещенной зоны.

Из представленных на рис. 1 ВАХ при обратном включении диодов видно, что для всех диодов с увеличением температуры напряжение пробоя возрастает, что обусловлено уменьшением длины свободного пробега носителей заряда вследствие уменьшения энергии, которую носитель может приобрести на длине свободного пробега в электрическом поле.

Обратные ветви ВАХ имеют активационный характер: при увеличении обратного напряжения $U_{обр}$ ток диода I не остается постоянным и равным току насыщения I_0 . Одной из причин увеличения обратного тока с ростом обратного напряжения является расширение области пространственного заряда, в результате чего увеличивается количество центров, с которых происходит генерация носителей заряда. Исследования ВФХ показали, что зависимость емкости от приложенного обратного смещения имеет вид $C \sim U_{обр}^{-1/3}$, что характерно для плавного *p-n*-перехода. В данном случае зависимость обратного тока от напряжения должна иметь следующий вид [6]: $I_{обр} \sim U_{обр}^n$, где показатель степени $n \approx 1$. Однако проведенный анализ показал, что во всех случаях имеется более сильная зависимость. Существенную роль поверхностной составляющей тока в данном эффекте следует исключить, поскольку, как сказано ранее, исследуемые диоды были изготовлены по планарной диффузионной технологии формирования цилиндрических *p-n*-переходов малого диаметра (<10 мкм) с защитой от поверхностного пробоя по методике [3]. Это позволяет сделать следующий вывод: в формировании обратного тока диодов существенную роль играет термическая генерация носителей с глубоких примесных уровней в области пространственного заряда *p-n*-перехода, расширяющейся с увеличением обратного напряжения. По измерениям температурных зависимостей обратного тока установлено, что энергия активации проводимости, в соответствии с величиной приложенного к *p-n*-переходу обратного напряжения, имеет значения в диапазоне 0,25–0,45 эВ. Такие глубокие примесные уровни характерны для технологических фоновых примесей железа и меди. При этом, как видно из рис. 1, а, для диодов *ND102* на кривых ВАХ имеет место резкое увеличение $I_{обр}$ при $U_{обр} \sim 3$ В. Это обусловлено, вероятно, термической генерацией носителей с глубоких уровней, связанных с ГЦ, при попадании их в область пространственного заряда и смещением уровня Ферми вследствие расширения области пространственного заряда при увеличении напряжения. Данный факт также позволяет говорить о неоднородном распределении технологических примесей с глубокими энергетическими уровнями в запрещенной зоне по объему кристалла.

Следует отметить, что величины обратных токов для диодов *ND201* (см. рис. 1, в) во всех случаях меньше, чем для диодов *ND102* (см. рис. 1, а) и *ND104* (см. рис. 1, б). Это обусловлено различием в уровнях основного легирования и длинах экранирования Дебая, определяющих размеры области пространственного заряда, в которых происходит генерация носителей заряда, определяющих обратный ток диодов.

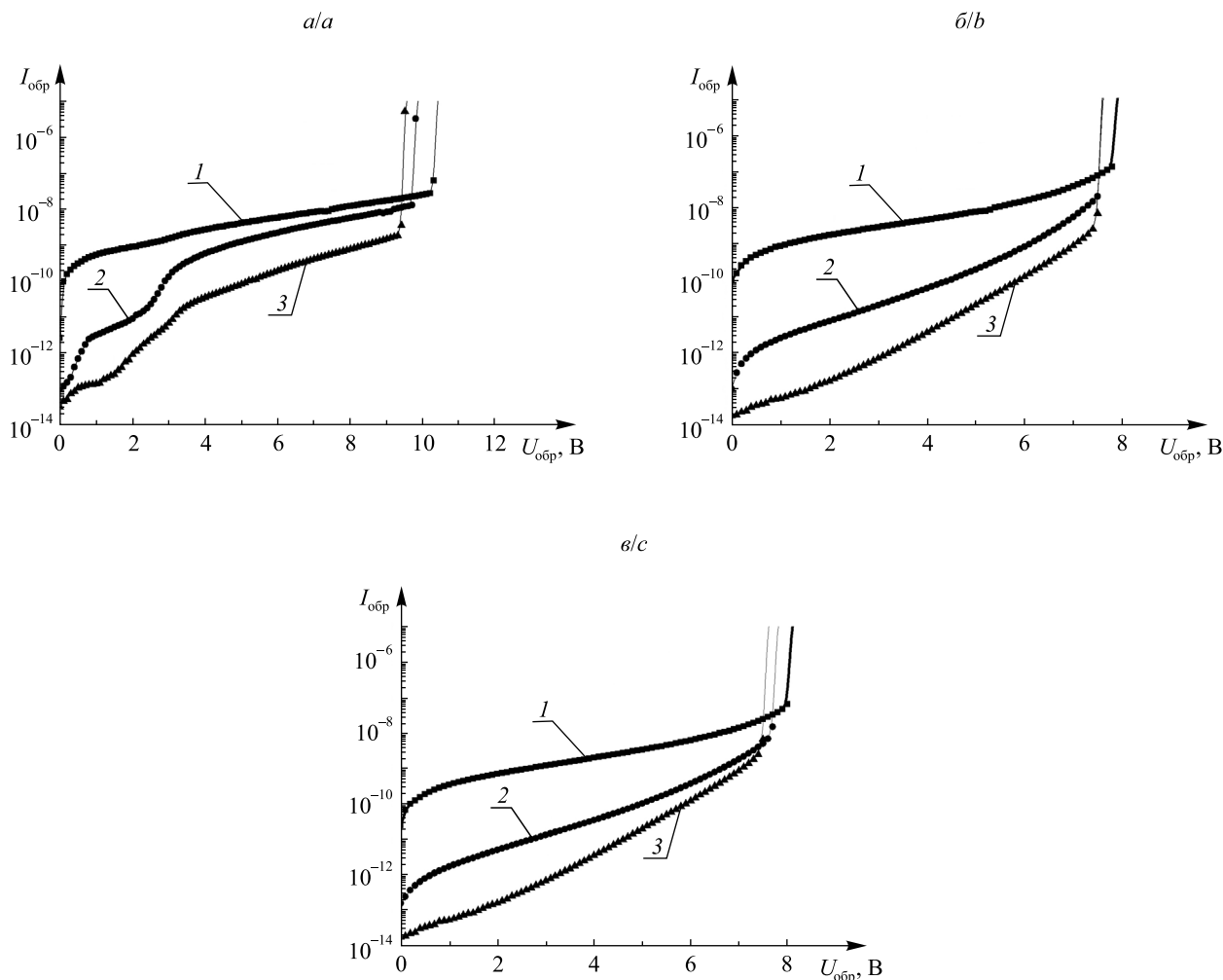


Рис. 1. Обратные ВАХ диодов: а – ND102; б – ND104; в – ND201.
Температура измерений: 125 °C (1); 20 °C (2); -40 °C (3)
Fig. 1. Reverse I - V characteristics of diodes: а – ND102; б – ND104; в – ND201.
Temperature of measuring: 125 °C (1); 20 °C (2); -40 °C (3)

Представленным на рис. 2 ВФХ диодов свойственна слабая зависимость емкости C от температуры, свидетельствующая о том, что концентрация глубоких центров невелика по сравнению с уровнем легирования и определяется структурными дефектами и технологическими (фоновыми) примесями в области объемного заряда p – n -перехода.

Полученные экспериментальные значения ВАХ и ВФХ свидетельствуют о том, что лавинный пробой p – n -перехода генераторных диодов не может быть обусловлен его «проколом» вследствие «шнурования» тока по пронизывающим его дислокациям. Действительно, как показали структурные исследования, плотность дислокаций в подложке невелика и не превышает значения 100 см^{-2} . После селективного травления поверхность подложки имеет «развитый» характер (рис. 3), обусловленный локальными микроскопическими неоднородностями распределения концентрации основной легирующей примеси бора, что характерно для сильнолегированных полупроводников.

На основании полученных результатов можно сделать вывод о том, что лавинный пробой p – n -перехода обусловлен включением МП. Это происходит в результате локального увеличения напряженности электрического поля на неоднородностях легирования кристалла и ионизации глубоких примесных центров в области пространственного заряда. Как основные легирующие, так и технологические примеси могут осаждаться на структурных несовершенствах кристаллической решетки в виде примесных атмосфер либо включений второй фазы. Присутствие примесных атмосфер легирующих примесей может приводить к локальному сужению области пространственного заряда и увеличению в этих местах напряженности электрического поля. Глубокие уровни, которые остаются заполненными в пределах области пространственного заряда, могут обуславливать также пробой p – n -перехода при их ионизации вследствие локального увеличения напряженности электрического поля.

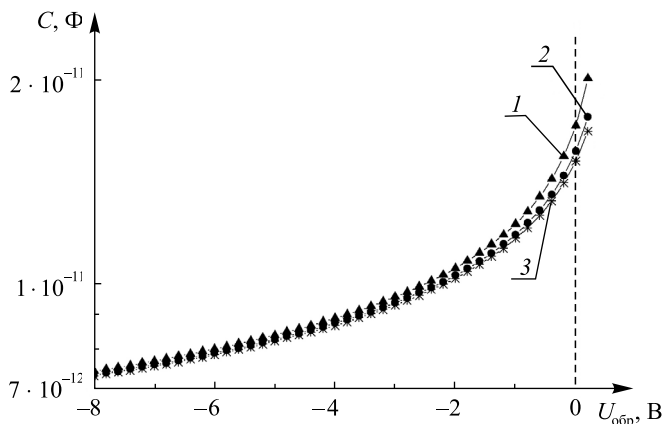


Рис. 2. Типичные ВФХ $p-n$ -переходов диодов
ND102 – ND104, ND201.

Температура измерений: 125 °C (1); 20 °C (2); –60 °C (3)

Fig. 2. Typical C - V characteristics of $p-n$ junctions diodes:
ND102 – ND104, ND201.

Temperature of measuring: 125 °C (1); 20 °C (2); –60 °C (3)



Рис. 3. Структура поверхности
кремниевой подложки марки

3A2яКДБ0.03(111)4⁰-460 после обработки
в селективном хромовом травителе

Fig. 3. The structure of the surface of a silicon
substrate brand 3A2яКДБ0.03(111)4⁰-460
after treatment with selective chrome etchant

Таким образом, экспериментально установлено, что лавинный пробой $p-n$ -перехода генераторных диодов обусловлен, вероятно, включением МП, связанных с локальными неоднородностями легирования материала подложки, а также электрической ионизацией глубоких примесных центров технологических (фоновых) примесей (медь, железо), попадающих в монокристалл как при выращивании слитков по методу Чохральского, так и при технологическом процессе формирования диодной структуры. Величина обратного тока и, соответственно, пробой в генераторных диодах обусловлены ионизацией легирующих примесей, распределенных неоднородно по объему кристалла, составляющих основу МП. Форма обратной ветви ВАХ в области напряжений, предшествующих пробивному, существенно влияет на режим (вероятность) микроплазменного пробоя [7]. Точка наибольшей кривизны ВАХ, вероятно, определяет нижнюю границу диапазона напряжений эффективного образования и развития МП.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

1. Стохастический резонанс как индуцированный шумом эффект увеличения степени порядка / В. С. Анищенко [и др.] // УФН. 1999. Т. 169, № 1. С. 7–38.
2. Кремниевые диоды – генераторы шумовых импульсных последовательностей / О. К. Барановский [и др.] // Материалы и структуры современной электроники : материалы II Междунар. конф. (Минск, 5–6 окт. 2006 г.). Минск, 2006. С. 58–61.
3. Булярский С. В., Грушко Н. С. Генерационно-рекомбинационные процессы в активных элементах. М., 1995.
4. Грехов И. В., Серезжин Ю. Н. Лавинный пробой $p-n$ -перехода в полупроводниках. Л., 1980.
5. Шокли У. Проблемы, связанные с $p-n$ -переходами в кремнии // УФН. 1962. Т. 77, № 1. С. 161–196.
6. Зи С. Физика полупроводниковых приборов : в 2 т. М., 1984. Т. 1.
7. Флуктуации лавинного тока на нерегулярностях структур диодного типа / С. С. Дереченик [и др.] // Международная конференция, посвященная 50-летию МРТИ – БГУИР : материалы конф. (Минск, 18–19 марта 2014 г.). Минск, 2014. С. 109–112.

REFERENCES

1. Anishchenko V. S., Neiman A. B., Moss F., et al. Stochastic resonance: noise-enhanced order. *Usp. fiz. nauk.* 1999. Vol. 169, No. 1. P. 7–38 (in Russ.). DOI: 10.3367/UFNr.0169.199901c.0007.
2. Baranovskii O. K., Kuchinskii P. V., Buslyuk V. V., et al. Kremnievye diody – generatory shumovykh impul'snykh posledovatel'nostei. *Materialy i struktury sovremennoi elektroniki : materialy II Mezhdunar. konf.* (Minsk, 5–6 Oct. 2006). Minsk, 2006. P. 58–61 (in Russ.).
3. Bulyarskii S. V., Grushko N. S. Generatsionno-rekombinatsionnye protsessy v aktivnykh elementakh [Generation-recombination processes in the active elements]. Mosc., 1995 (in Russ.).
4. Grekhov I. V., Serezhin Yu. N. Lavinni proboi $p-n$ -perekhoda v poluprovodnikakh [Avalanche breakdown $p-n$ -junction in semiconductors]. Leningr., 1980 (in Russ.).
5. Shokli U. Problemy, svyazannye s $p-n$ -perekhodami v kremnii [Problems related to $p-n$ -junction in silicon]. *Usp. fiz. nauk.* 1962. Vol. 77, No. 1. P. 161–196 (in Russ.). DOI: 10.3367/UFNr.0077.196205d.0161.
6. Zi S. Fizika poluprovodnikovyykh priborov [Physics of semiconductor devices] : in 2 vol. Mosc., 1984. Vol. 1 (in Russ.).
7. Derechenik S. S., Buslyuk V. V., Yankovskii Yu. N., et al. Fluktuatsii lavinnogo toka na neregulyarnostyakh struktur diodnogo tipa [Fluctuations in the avalanche current on the irregularities of the structures of the diode type]. *Mezhdunarodnaya konferentsiya, posvyashchennaya 50-letiyu MRTI – BGUIR : materialy konf.* (Minsk, 18–19 March 2014). Minsk, 2014. P. 109–112 (in Russ.).

Статья поступила в редакцию 03.10.2016.
Received by editorial board 03.10.2016.

НАНОМАТЕРИАЛЫ И НАНОТЕХНОЛОГИИ

NANOMATERIALS AND NANOTECHNOLOGIES

УДК 537.868.4

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ СВОЙСТВ СЕРЕБРЯНЫХ НАНОСТРУКТУР НА ПОДЛОЖКЕ В АТМОСФЕРЕ ВОЗДУХА

Е. П. МИКИТЧУК¹⁾, К. В. КОЗАДАЕВ²⁾

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

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

Методом конечного интегрирования в рамках программного пакета *CST Studio* рассчитаны оптические спектры экстинкции и пространственные распределения составляющих электромагнитного поля в двумерных серебряных наноструктурах с наночастицами Ag на стеклянной подложке в атмосфере воздуха. Предложены рекомендации для управления характеристиками оптических спектров двумерных массивов наночастиц Ag на стеклянной подложке, основанные на подборе формы, плотности заполнения поверхности и аспектного отношения наночастиц. Установлено, что управление спектральным положением полосы поверхностного плазмонного резонанса в широком диапазоне длин волн от 350 до 750 нм возможно на этапе синтеза наноструктуры путем вариации формы наночастиц, а более тонкое управление спектральной формой полосы поверхностного плазмонного резонанса – путем изменения линейных размеров и плотности заполнения поверхности наночастицами.

Ключевые слова: двумерный массив; наночастицы Ag; спектр экстинкции оптического излучения; поверхностный плазмонный резонанс.

Образец цитирования:

Микитчук Е. П., Козадаев К. В. Моделирование электромагнитных свойств серебряных наноструктур на подложке в атмосфере воздуха // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2017. № 1. С. 100–107.

For citation:

Mikitchuk A. P., Kozadaev K. V. Simulation of the electromagnetic properties of silver nanostructures on the solid substrate in the air atmosphere. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2017. No. 1. P. 100–107 (in Russ.).

Авторы:

Елена Петровна Микитчук – аспирантка кафедры интеллектуальных систем факультета радиофизики и компьютерных технологий. Научный руководитель – К. В. Козадаев.

Константин Владимирович Козадаев – кандидат физико-математических наук, доцент; заведующий кафедрой интеллектуальных систем факультета радиофизики и компьютерных технологий.

Authors:

Alena Mikitchuk, postgraduate student at the department of intelligent systems, faculty of radiophysics and computer technologies.

helenay@yandex.by

Konstantin Kozadaev, PhD (physics and mathematics), docent; head of the department of intelligent systems, faculty of radiophysics and computer technologies.

kozadaeff@mail.ru

SIMULATION OF THE ELECTROMAGNETIC PROPERTIES OF SILVER NANOSTRUCTURES ON THE SOLID SUBSTRATE IN THE AIR ATMOSPHERE

A. P. MIKITCHUK^a, K. V. KOZADAEV^b

^aBelarusian State University, Nezavisimosti avenue, 4, 220030, Minsk, Republic of Belarus

^bA. N. Sevchenko Institute of Applied Physical Problems of Belarusian State University,
Kurchatova street, 7, 220108, Minsk, Republic of Belarus

Corresponding author: kozadaeff@mail.ru

Optical spectrum and electromagnetic field distribution for 2D-array of silver nanoparticles on the solid substrate of glass are simulated by means of *CST Studio* software. Design considerations based on the matching of nanoparticle shape, aspect ratio and surface occupation density are formulated for control optical extinction spectrum. It is shown, that surface plasmon resonance peak position can be controlled in the range from 350 to 750 nm by means of nanoparticle shape variation. Fine control of the spectral shape of surface plasmon resonance peak can be realized by variation of nanoparticle aspect ratio and surface occupation density. An approach to simulation of the 2D silver nanostructures on the solid substrate surface is proposed on the basis of the finite integral technique. Simulation of the 2D-array of silver nanoparticles on the solid substrate is performed. Simulation of both the macroscopic (optical extinction spectra) and microscopic (spatial distributions of an electromagnetic field within the nanostructure) properties of the 2D-array of silver nanoparticles is illustrated by several examples. The optical properties, spatial distributions of an electromagnetic field within nanoparticles of different shapes (in the form of sphere, cone, and cylinder) are compared for the nanostructures on the glass substrate in the air atmosphere. Interrelation between the electromagnetic field structure and the surface occupation density or the aspect ratio of a nanoparticle is investigated in detail. The spatial distribution of an electromagnetic field within the nanostructure is studied for different spectral positions on the surface plasmon resonance peak. Also, the nanostructures without interparticle interactions are studied. The influence of the nanoparticle aspect ratio on the properties of optical extinction spectra for the 2D-nanoarray is examined. In general, the possibility to vary the optical spectral properties by controlling shapes, surface occupation density, and aspect ratio of nanoparticles is demonstrated.

Key words: 2D-array; silver nanoparticles; optical extinction spectrum; surface plasmon resonance.

Введение

Стремительный рост числа исследований металлических наноструктур связан с их уникальными оптическими свойствами, которые определяются плазмонами, т. е. собственными коллективными колебаниями электронов металла относительно ионного остова. Резонансное возбуждение плазмонов оптическим излучением проявляется в спектрах экстинкции (поглощение и рассеяние) в виде одного или нескольких резонансных пиков, называемых пиками поверхностного плазмонного резонанса (ППР). Именно параметры спектра экстинкции во многом определяют возможность применения конкретных наноструктур в составе оптических приборов и препаратов нового поколения [1–4].

Как показывает практика [5–8], спектральным положением и формой полосы ППР можно управлять в широком диапазоне длин волн путем выбора морфологии наночастиц (НЧ), а также изменением расположения НЧ и типа подложки. Многообразие типов поверхностных наноструктур настолько велико, что затруднительно экспериментально получить и измерить все возможные комбинации параметров НЧ на подложке, поэтому очень важно комплексно использовать взаимодополняющие экспериментальные данные и численные модели подобных структур. Для этого необходима адекватная реальности модель, которая позволит понять основные физические процессы, происходящие при взаимодействии электромагнитного излучения с такими структурами.

В настоящей работе проведено сравнительное теоретическое исследование электромагнитных свойств наноструктур, представляющих собой двумерные слои наночастиц Ag различной формы (сфера, конус, цилиндр) на стеклянной подложке в атмосфере воздуха. Большое внимание уделено особенностям оптических спектров экстинкции двумерных слоев и влиянию аспектного отношения наночастиц (высоты НЧ к радиусу ее основания) на характеристики спектра экстинкции. Изучение пространственного распределения характеристик электромагнитного поля в наноструктуре при воздействии на нее оптического излучения проводилось путем моделирования с помощью метода конечных интегралов. Предлагаемый подход является развитием предыдущих работ авторов [6] и демонстрирует хорошее соответствие экспериментальным данным.

Моделирование электромагнитных свойств двумерного массива наночастиц на подложке

Все макроскопические электромагнитные явления, наблюдаемые на практике, могут быть математически описаны полным набором уравнений Максвелла, которые применительно к наноструктурам можно численно решить с помощью нескольких методов, например метода конечного интегрирования (МКИ) либо его частного случая – метода конечных разностей во временной области. Данный метод позволяет эффективнее моделировать поверхностные металлические наноструктуры с высоким аспектным отношением [9; 10]. МКИ основан на дискретной формулировке уравнений Максвелла в интегральной форме [10; 11], для численного решения которых сначала определяется область расчета, содержащая моделируемую структуру в виде набора элементарных ячеек [10]. При этом данная область разбивается на конечное число соприкасающихся ячеек, играющих роль расчетной сетки. Важно, что грани ячеек являются двусторонними ориентированными поверхностями (выбранное направление нормали на всей протяженности поверхности остается непрерывным), причем в процессе дискретизации ориентация отдельных ячеек должна совпадать с ориентацией исходной поверхности. В общем случае размеры отдельной ячейки необходимо выбирать исходя из соотношения неопределенностей Гейзенберга. На построенной сетке дискретизируются операторы ротора и дивергенции (закон Фарадея и закон отсутствия магнитных зарядов), в результате дискретные уравнения принимают следующий вид [11]:

$$\mathbb{C}\vec{e} = -\frac{d}{dt}\vec{b}, \quad (1)$$

$$\mathbb{S}\vec{b} = 0, \quad (2)$$

где $\mathbb{C}$ – дискретный матричный оператор ротора; $\mathbb{S}$ – дискретный матричный оператор дивергенции в построенной расчетной сетке. Матричные операторы содержат топологическую информацию об отдельных связях ребер ячейки из расчетной сетки и о взаимной ориентации (состоят из коэффициентов $\{-1, 0, 1\}$); $\vec{e}$ – вектор-столбец электрических напряжений на всех ребрах расчетной сетки; $\vec{b}$ – вектор-столбец магнитных потоков через все ребра расчетной сетки.

Дискретизация двух других уравнений Максвелла в МКИ требует построения дуальной сетки, такой, что каждую грань ячейки основной сетки пересекает только одно ребро дуальной сетки и каждая ячейка основной сетки содержит одну и только одну вершину дуальной сетки. На дуальной сетке рассматриваемые уравнения Максвелла принимают следующий вид:

$$\tilde{\mathbb{C}}\vec{h} = \frac{d}{dt}\vec{d} + \vec{j}, \quad (3)$$

$$\tilde{\mathbb{S}}\vec{d} = q, \quad (4)$$

где дискретные матричные операторы ротора и дивергенции $\tilde{\mathbb{C}}$ и $\tilde{\mathbb{S}}$ в построенной дуальной сетке содержат топологическую информацию об отдельных связях ребер ячейки из расчетной дуальной сетки и об их ориентации (состоят из коэффициентов $\{-1, 0, 1\}$); $\vec{h}$ – вектор-столбец магнитодвижущих сил; $\vec{d}$ – вектор-столбец электрических индукций; $\vec{j}$ – вектор-столбец плотностей тока; q – заряд. На построенных сетках матричное представление оператора дискретного градиента совпадает с отрицательным транспонированным матричным представлением дуального дискретного оператора дивергенции.

Конкретный вид матричных операторов не несет в себе значимого физического смысла и в основном зависит от геометрии задачи и используемой расчетной схемы. В МКИ система уравнений (1)–(4) дополняется соответствующими дискретными матричными материальными уравнениями [11]. В целях преодоления проблемы ступенчатой аппроксимации криволинейных граничных поверхностей в МКИ для улучшения качества геометрической аппроксимации и материального усреднения внутри ячеек применяется метод идеальной аппроксимации границы (*Perfect Boundary Approximation*) [9; 11]. Следствием пространственной дискретизации для уравнений Максвелла является автоматическое выполнение уравнения непрерывности, гарантирующее отсутствие фиктивных зарядов.

Компьютерная модель МКИ реализована в коммерческом программном пакете *CST Microwave Studio*, в котором алгоритмы уточнения дискретизации применительно к НЧ позволяют достаточно точно решать уравнения Максвелла даже на криволинейных поверхностях. Представленная схема вычисления параметров воспроизведена в рамках *CST Microwave Studio* при использовании в качестве наиболее простой модели поверхностной наноструктуры на подложке двумерного массива монодисперсных монометаллических НЧ, расположенных периодически в двух измерениях на поверхности

стеклянной подложки в атмосфере воздуха. Модельная элементарная ячейка (минимальная ячейка, отвечающая единичной решеточной точке структуры с трансляционной симметрией в двух измерениях; здесь и далее не следует путать с элементарной ячейкой дискретизации) такой наноструктуры включает два соприкасающихся параллелепипеда, один состоит из материала подложки, а второй содержит НЧ и окружающую ее атмосферу воздуха. При этом НЧ располагаются на границе раздела параллелепипедов, основанием касаясь подложки. Важно, что при выборе размеров элементарных ячеек необходимо проводить итерационные расчеты с увеличением густоты сетки до тех пор, пока их результаты не станут эргодичными.

Пример графического представления моделируемой наноструктуры для конических НЧ Ag приведен на рис. 1. Бесконечно плоская структура в направлениях x и y реализуется с помощью граничных условий элементарной ячейки, когда трансляция осуществляется в двух измерениях до бесконечности [10]. Полубесконечные (в направлении, перпендикулярном границе раздела) слои подложки и воздуха моделируются посредством поглощающих граничных условий, в данном случае реализованных с помощью портов Флоке, представляющих собой в программном пакете *CST Microwave Studio* идеально согласованные слои (за пределами моделируемого объема добавляются несколько слоев дополнительных ячеек, поля в которых вычисляются с учетом больших виртуальных потерь). При расчетах применяется прямоугольная сетка пространственной дискретизации, являющаяся наиболее точной при использовании прямоугольных модельных элементарных ячеек.

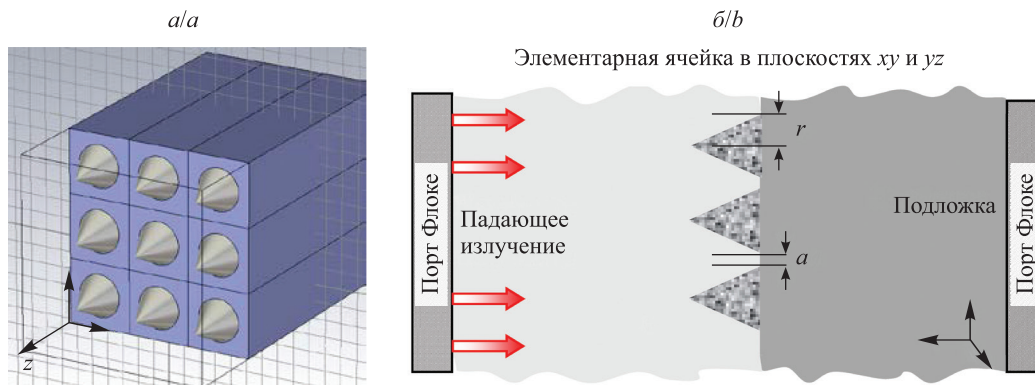


Рис. 1. Моделируемая наноструктура для конических НЧ Ag:
а – набор 3×3 элементарных ячеек; б – моделирование электромагнитных свойств
двумерного слоя конических НЧ Ag на стеклянной подложке в атмосфере воздуха

Fig. 1. Nanostructure simulated for the case of cone nanoparticles:
а – simulation layout of 3×3 unit cells; б – simulation scheme of the 2D-array
of cone nanoparticles on the glass substrate in the air

В предлагаемой модели применяется приближение линейно поляризованного (вектор поляризации направлен вдоль оси y) излучения с плоским фронтом (основные моды – TE_{00} и TM_{00}), распространяющегося перпендикулярно границе раздела воздух/подложка. В такой схеме моделирования исследовался процесс прохождения оптического излучения через наноструктуру, а также пространственное распределение напряженности электрического поля внутри наноструктуры. В модели использовались следующие входные данные: тип материала, форма и размеры НЧ, тип материала подложки и атмосферы, а также $\rho = \frac{S_{NP}}{S_{US}}$ – степень заполнения поверхности, равная отношению площади горизонтальной

проекции НЧ S_{US} к площади основания ячейки S_{NP} , например для конических НЧ $\rho = \frac{\pi}{(2 + a/r)^2}$,

где обозначения приведены в соответствии с рис. 1 [6].

Оптические свойства наноструктур с наночастицами различной формы

В настоящей работе теоретическое исследование наноструктур проводится в целях установления взаимосвязи их оптических характеристик с микроскопическими параметрами размера, формы, а также степени заполнения поверхности НЧ. На рис. 2, а, показаны типичные оптические спектры для наноструктур с НЧ Ag различной формы (сфера, конус, цилиндр) на стеклянной подложке (показатель преломления подложки – 1,52) в атмосфере воздуха (показатель преломления воздуха – 1). Видно, что при одинаковой степени заполнения поверхности в случае сферических НЧ длина волны пика ППП

составляет около 400 нм, цилиндрических – 530 нм, а конических НЧ – 650 нм. Из рис. 2, а, также следует, что грубое управление спектральным положением полосы ППР в широком диапазоне длин волн от 350 до 750 нм возможно на этапе синтеза наноструктуры путем вариации формы наночастиц. Необходимо отметить, что для каждой из приведенных форм НЧ более тонкое управление спектральной формой полосы ППР достигается путем изменения параметров НЧ: линейных размеров r (нм) и плотности заполнения поверхности ρ (%).

Спектры экстинкции для сферических НЧ Ag радиусом $r = 25$ нм на стеклянной подложке в атмосфере воздуха и с различной плотностью заполнения поверхности приведены на рис. 2, б. Из данного рисунка видно, что при уменьшении расстояния между НЧ (увеличении степени заполнения поверхности) полоса ППР в спектре экстинкции сдвигается в длинноволновую область спектра, при этом ширина полосы ППР на полувысоте увеличивается [12]. Следует отметить, что изменение степени заполнения поверхности позволяет перестраивать спектральное положение полосы ППР более чем на 50 нм.

Оптические спектры экстинкции для наноконусов и наноцилиндров с радиусом основания Ag $r = 25$ нм, высотой $h = r$ в двумерном массиве на стеклянной подложке в атмосфере воздуха для

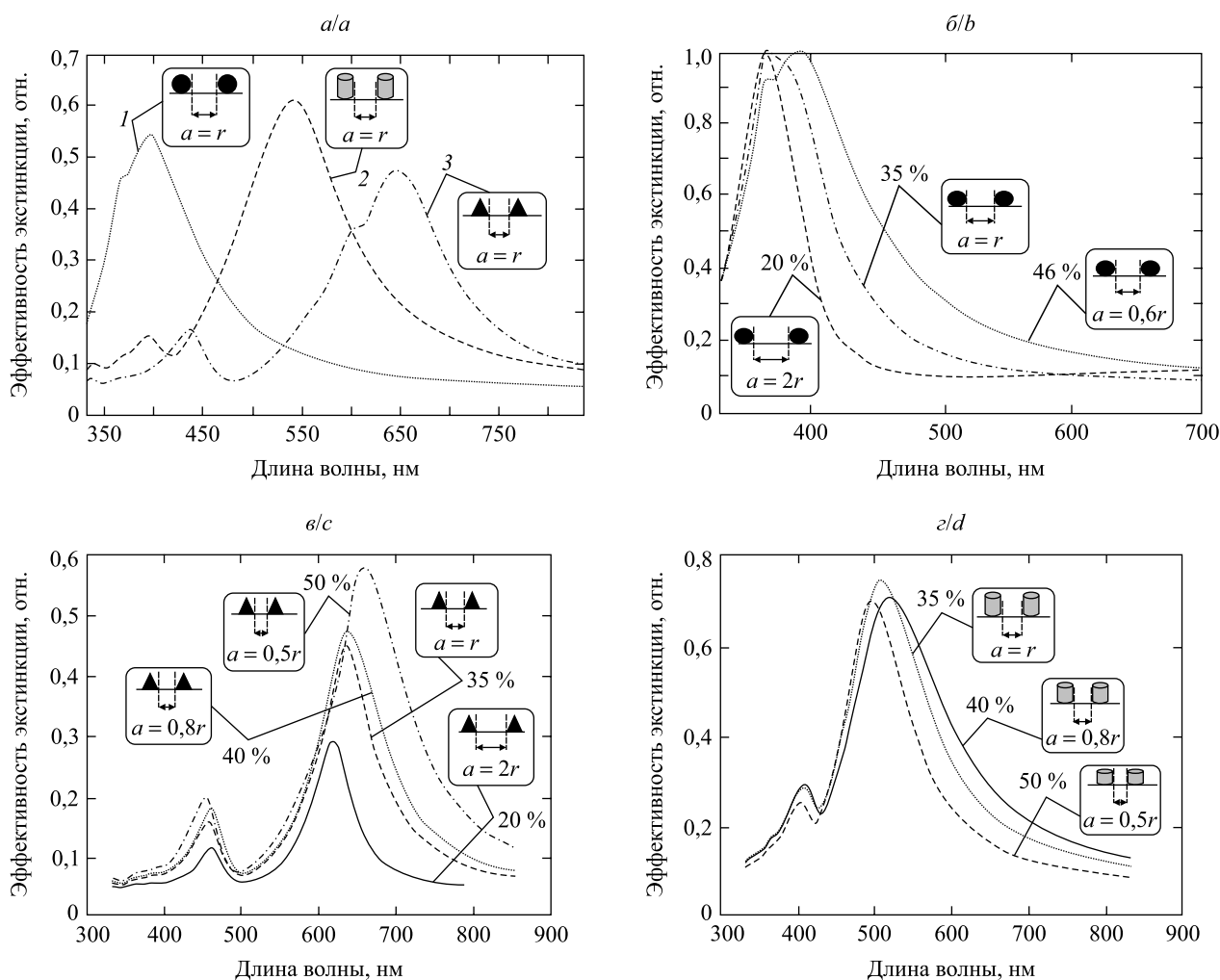


Рис. 2. Спектры экстинкции наноструктур с НЧ Ag различной формы на стеклянной подложке в атмосфере воздуха: а – спектры экстинкции для сфер (1), цилиндров (2), конусов (3) для $\rho = 35\%$; б – сравнение спектров экстинкции для сфер с различной плотностью заполнения поверхности; в – сравнение спектров экстинкции для конусов с различной плотностью заполнения поверхности; г – сравнение спектров экстинкции для цилиндров с различной плотностью заполнения поверхности.

Для рис. б – г: радиус проекции НЧ на основании 25 нм, для конусов и цилиндров высота $h = r$

Fig. 2. Extinction spectra for the nanostructures based on nanoparticles of different shapes on the glass substrate in air: а – presents comparison of extinction spectra for spheres (1), cylinders (2), cones (3) at the surface occupation density 35%; б – comparison of extinction spectra for the spheres with different surface occupation densities; в – comparison of extinction spectra for the cones with different surface occupation densities; г – comparison of extinction spectra for the cylinders with different surface occupation densities. The nanoparticle normal projection radius is 25 nm for figures б – г, and $h = r$ for cones or cylinders

различных степеней заполнения поверхности приведены на рис. 2, *в* и *г*. Из рисунка видно, что при увеличении степени заполнения поверхности полоса ППР в спектре экстинкции сдвигается в длинноволновую область спектра как для конических, так и для цилиндрических НЧ, при этом ширина полосы ППР на полувысоте увеличивается в большей мере для конических. Изменение степени заполнения поверхности коническими НЧ позволяет перестраивать спектральное положение полосы ППР более чем на 50 нм, а цилиндрическими – более чем на 30 нм.

Таким образом, установлено, что грубое управление спектральным положением полосы ППР в широком диапазоне длин волн от 350 до 750 нм возможно на этапе синтеза наноструктуры путем вариации формы наночастиц, а более тонкое управление спектральной формой полосы ППР и положением полосы в пределах 30–50 нм достигается путем изменения линейных размеров и плотности заполнения поверхности наночастицами.

Распределение напряженности электрического поля и параметры спектров экстинкции

Пространственное распределение напряженности электрического поля E при взаимодействии оптического излучения в одинаковой фазе с двумерными слоями сферических НЧ Ag на поверхности стеклянной подложки представлено на рис. 3, *а* – *г*.

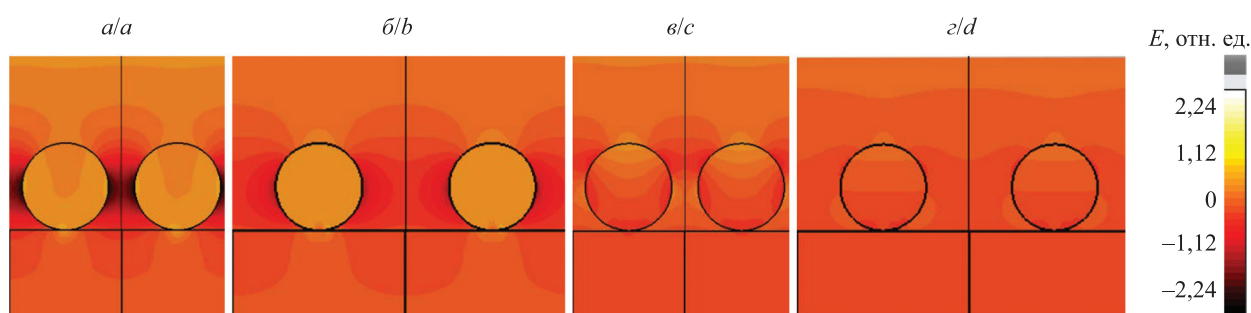


Рис. 3. Пространственное распределение напряженности электрического поля в одинаковой фазе при взаимодействии оптического излучения с двумерными слоями НЧ Ag на поверхности стеклянной подложки (сагиттальное сечение):

а – близко расположенные НЧ, длина волны 393 нм; *б* – разнесенные НЧ, длина волны 393 нм; *в* – близко расположенные НЧ, длина волны 456 нм; *г* – разнесенные НЧ, длина волны 456 нм

Fig. 3. Spatial distribution of the electric field with a constant phase during the interaction of optical radiation with a 2D-array of nanoparticles on the glass substrate in the air (sagittal cut):
a – high-density nanostructure, wavelength is 393 nm; *b* – low-density nanostructure, wavelength is 393 nm;
c – high-density nanostructure, wavelength is 456 nm; *d* – low-density nanostructure, wavelength is 456 nm

Случай близко расположенных НЧ Ag, взаимодействующих с электромагнитным излучением на длине волны пика ППР, составляющей 393 нм, приведен на рис. 3, *а*. Здесь между НЧ в слое хорошо видны перекрывающиеся области аномально высоких значений напряженности (значения напряженностей, многократно превышающие напряженность изначально падающей волны [12]) электрического поля, свидетельствующие об интенсивном межчастичном взаимодействии. При изменении длины волны падающего излучения (например, как показано на рис. 3, *в*, на длине волны 341 нм) этого эффекта не наблюдается (в случае 456 нм он также проявляется слабее), что говорит о резонансном характере коллективного взаимодействия между НЧ в слое.

На рис. 4 приведена зависимость длины волны пика ППР в спектре экстинкции от аспектного отношения НЧ Ag для различных величин плотности заполнения поверхности НЧ для частиц конической (см. рис. 4, *а*) и цилиндрической (см. рис. 4, *б*) форм. Видно, что для конических НЧ при увеличении аспектного отношения НЧ происходит уменьшение длины волны максимума пика ППР в спектре экстинкции. Большей степени заполнения поверхности соответствует менее резкое уменьшение длины волны максимума пика ППР, что, вероятно, связано с коллективными взаимодействиями плазмонов в составе наноструктуры. При этом, однако, для аспектных отношений менее 1,4 максимумы пиков ППР (в случае наноконусов) оказываются очень близкими для степеней заполнения поверхности до 40 %. Это, в свою очередь, связано с тем, что НЧ слабо взаимодействуют друг с другом. По этой причине конические наноструктуры с длиной волны пика ППР в спектре экстинкции от 620 до 840 нм могут быть синтезированы путем подбора аспектного отношения конических НЧ, образующих данную структуру, в пределах 0,6–1,4, при этом степень заполнения поверхности должна составлять менее 40 %. Важно

также, что в резонансном случае (см. рис. 4, а, вставку 1) напряженность электрического поля достигает максимального значения вблизи основания конуса. Для цилиндрических наночастиц, напротив, при увеличении аспектного отношения НЧ происходит снижение длины волны максимума пика ППР в спектре экстинкции. Это, вероятно, связано с постоянным аксиальным сечением НЧ, что вызывает более однородное распределение поля внутри НЧ, а это, в свою очередь, обуславливает пропорциональность энергии, накопленной в объеме НЧ, с ее аспектным отношением. Анализ напряженности электрического поля свидетельствует, что в резонансном случае (см. рис. 4, б, вставку 1) напряженность электрического поля оказывается практически однородной во всем объеме НЧ.

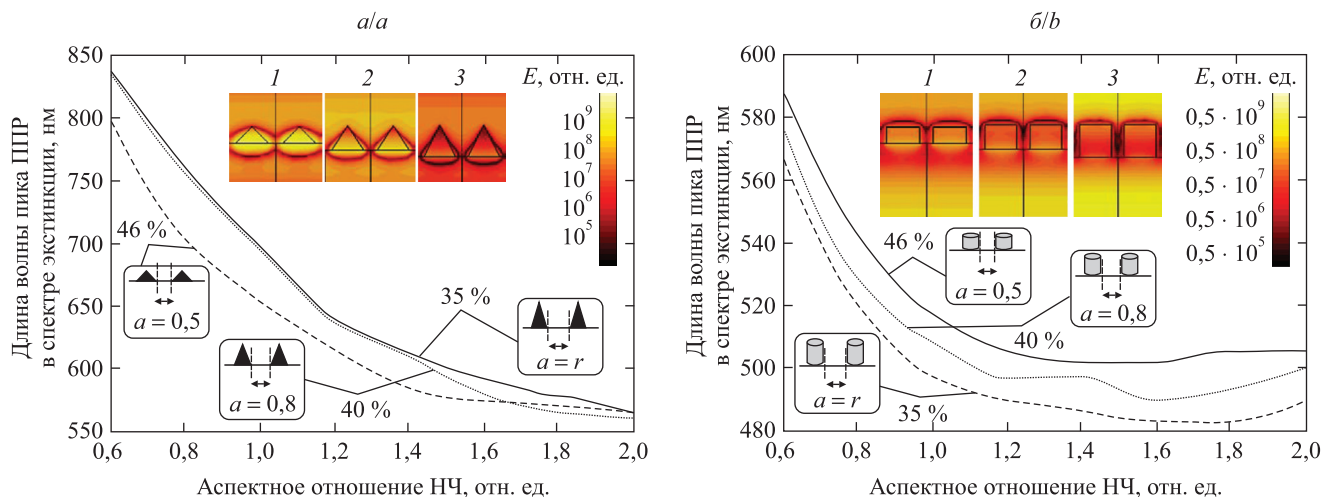


Рис. 4. Зависимость длины волны пика ППР в спектре экстинкции от аспектного отношения наноконусов (а) и наноцилиндров (б) НЧ Ag для различных величин плотности заполнения поверхности.

На вставках приведено распределение напряженности электрического поля с одинаковой фазой в сагитальном сечении наноструктур со следующими параметрами для наноконусов: длина волны 693 нм, аспектное отношение 1, плотность заполнения поверхности 40 % (1), 35 % (2), 46 % (3), а также следующими параметрами для наноцилиндров: длина волны 509 нм, аспектное отношение 1, плотность заполнения поверхности 40 % (1), 46 % (2), 35 % (3)

Fig. 4. Wavelength of the surface plasmon resonance peak in the extinction spectrum versus aspect ratio of Ag nanocones (a) and nanocylinders (b) for different surface occupation densities. The spatial electric-field distributions with a constant phase in a sagittal cut of the nanostructures are shown in the insertions. Parameters for nanocones: wavelength 693 nm, aspect ratio 1, surface occupation density 40 % (1), 35 % (2), 46 % (3). Parameters for nanocylinders: wavelength 509 nm, aspect ratio 1, surface occupation density 40 % (1), 46 % (2), 35 % (3)

Заключение

В настоящей работе описана возможность управления характеристиками оптических спектров двумерных массивов НЧ Ag на стеклянной подложке, основанная на подборе формы, плотности заполнения поверхности и аспектного отношения НЧ. Установлены особенности распределения напряженности электрического поля в наноструктуре в пике, а также на границах полосы поверхностного плазмонного резонанса. Исследованы параметры наноструктур, при которых обеспечивается отсутствие межчастичного взаимодействия. Полученные результаты могут быть полезны для развития технологий формирования устройств, содержащих в качестве активных поверхностей двумерные массивы НЧ Ag.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

1. Оптические сенсоры на основе поверхностного плазмонного резонанса для высокочувствительного биохимического анализа / Д. А. Мамичев [и др.] // Молекулярная медицина. 2012. № 6. С. 19–27.
2. Zhu S. L., Zhou W. Numerical Design Methods of Nanostructure Array for Nanobiosensing // Plasmonics. 2010. Vol. 5, № 3. P. 267–271.
3. Conical nanoparticles for blood disease detection / L. L. Spada [et al.] // Adv. nanoparticles. 2013. Vol. 2, № 3. P. 259–265.
4. Yugang Sun, Changhua An. Shaped gold and silver nanoparticles // Front. mater. sci. 2011. Vol. 5, issue 1. P. 1–24.
5. Liquid-phase formation of silver nanoparticles on a glass substrate regulated by gold nanoparticles / K. Hanada [et al.] // Sens. Mater. 2011. Vol. 23, № 5. P. 251–261.
6. Goncharov V. K., Kozadaev K. V., Mikitchuk A. P. Diagnostics of the monolayer silver nanostructures on a solid substrate using the bifactorial analysis of the SPR-band // High temp. mater. process. 2014. Vol. 18, issue 3. P. 217–229.
7. Хлебцов Н. Г. Оптика и биофотоника наночастиц с плазмонным резонансом // Квантовая электроника. 2008. Т. 38, № 6. С. 504–529.

8. Дынич Р. А., Ковтун-Кузель В. А., Понявина А. Н. Моделирование характеристик рассеяния электромагнитного излучения упорядоченным ансамблем диэлектрических цилиндров // Журн. прикл. спектроскопии. 2011. Т. 78, № 6. С. 874–879.
9. Fritzen F., Bohlke T. Influence of the type of boundary conditions on the numerical properties of unit cell problems // Technische mech. 2010. Vol. 30, № 4. P. 354–363.
10. Голованов О. А. Автономные блоки с виртуальными каналами Флоке и их применение для решения прикладных задач электродинамики // Радиотехника и электроника. 2006. Т. 51, № 12. С. 1423–1430.
11. Курюшин А. А., Пластиков А. Н. Численные методы расчета // Проектирование СВЧ-устройств в среде CST Microwave Studio. М., 2010. С. 47–73.
12. Микитчук Е. П., Козадаев К. В. Моделирование взаимодействия между серебряными наночастицами в двумерном массиве на стеклянной подложке // Журн. прикл. спектроскопии. 2016. Т. 83, № 6. С. 947–953.

REFERENCES

1. Mamichev D. A., Kuznetsov I. A., Maslova N. E., et al. Optical sensors based on surface plasmon resonance for high-sensitive biochemical analysis. *Molekulyarnaya meditsina*. 2012. No. 6. P. 19–27 (in Russ.).
2. Zhu S. L., Zhou W. Numerical Design Methods of Nanostructure Array for Nanobiosensing. *Plasmonics*. 2010. Vol. 5, No. 3. P. 267–271. DOI: 10.1007/s11468-010-9137-8.
3. Spada L. L., Lovine R., Tarparelli R., et al. Conical nanoparticles for blood disease detection. *Adv. nanoparticles*. 2013. Vol. 2, No. 3. P. 259–265. DOI: 10.4236/anp.2013.23036.
4. Yugang Sun, Changhua An. Shaped gold and silver nanoparticles. *Front. mater. sci*. 2011. Vol. 5, issue 1. P. 1–24. DOI: 10.1007/s11706-011-0100-1.
5. Hanada K., Uchida K., Citterlo D., et al. Liquid-phase formation of silver nanoparticles on a glass substrate regulated by gold nanoparticles. *Sens. Mater*. 2011. Vol. 23, No. 5. P. 251–261.
6. Goncharov V. K., Kozadaev K. V., Mikitchuk A. P. Diagnostics of the monolayer silver nanostructures on a solid substrate using the bifactorial analysis of the SPR-band. *High temp. mater. process*. 2014. Vol. 18, issue 3. P. 217–229. DOI: 10.1615/HighTempMatProc.2015015636.
7. Khlebtsov N. G. Optics and biophotonics of nanoparticles with a plasmon resonance. *Kvant. electron*. 2008. Vol. 38, No. 6. P. 504–529 (in Russ.).
8. Dynich R. A., Kovtun-Kuzhel V. A., Ponyavina A. N. Modelirovanie kharakteristik rasseyaniya elektromagnitnogo izlucheniya uporyadochennym ansamblem dielektricheskikh tsilindrov [Modeling the characteristics of electromagnetic radiation scattering by an ordered assembly of dielectric cylinders]. *Zhurnal prikl. spektrosk.* 2011. Vol. 78, No. 6. P. 874–879 (in Russ.).
9. Fritzen F., Bohlke T. Influence of the type of boundary conditions on the numerical properties of unit cell problems. *Technische mech*. 2010. Vol. 30, No. 4. P. 354–363.
10. Golovanov O. A. Avtonomnye bloki s virtual'nymi kanalami Floke i ikh primenenie dlya resheniya prikladnykh zadach elektrodinamiki [Solution of Applied Problems of Electromagnetics Based on the Use of Autonomous Blocks with Virtual Floquet Channels]. *Radiotekh. elektron*. 2006. Vol. 51, No. 12. P. 1423–1430 (in Russ.).
11. Kurushin A. A., Plastikov A. N. Chislennyye metody rascheta. *Proektirovanie SVCh ustroystv v srede CST Microwave Studio*. Mosc., 2010. S. 47–73 (in Russ.).
12. Mikitchuk E. P., Kozadaev K. V. Modelirovanie vzaimodeistviya mezhdu serebryanymi nanochastitsami v dvumernom massive na steklyannoi podlozhke [Modeling the Interaction between Silver Nanoparticles in a 2D-Array on a Glass Substrate]. *Zhurnal prikl. spektrosk.* 2016. Vol. 83, No. 6. P. 947–953 (in Russ.).

Статья поступила в редколлегию 02.09.2016.
Received by editorial board 02.09.2016.

ПРИБОРЫ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЙ

RESEARCH INSTRUMENTS AND METHODS

УДК 303.732.4

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОВ НОРМИРОВКИ ДАННЫХ В ЭКСПЕРИМЕНТАХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ФОТООБЕСЦВЕЧИВАНИЯ

М. В. АНТОНЕНКО¹⁾, А. А. ГОЛОВАТЫЙ²⁾, Н. Н. ЯЦКОВ¹⁾, В. В. СКАКУН¹⁾

¹⁾Белорусский государственный университет,
пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Республика Беларусь
²⁾Европейская молекулярно-биологическая лаборатория,
Мейерхофштрассе, 1, 69117, г. Гейдельберг, Германия

Исследованы алгоритмы нормировки данных эксперимента по восстановлению флуоресценции после фотообесцвечивания на примерах моделей диффузии и молекулярных взаимодействий белка актина, отражающих особенности проведения эксперимента. Представлен сравнительный анализ методов нормировки данных

Образец цитирования:

Антоненко М. В., Головатый А. А., Яцков Н. Н., Скакун В. В. Исследование методов нормировки данных в экспериментах с использованием фотообесцвечивания // Журн. Белорус. гос. ун-та. Физика. 2017. № 1. С. 108–117.

For citation:

Antonenka M. V., Halavatyi A. A., Yatskou M. M., Skakun V. V. Analysis of data normalization methods for photo-bleaching experiments. *J. Belarus. State Univ. Phys.* 2017. No. 1. P. 108–117 (in Russ.).

Авторы:

Михаил Владимирович Антоненко – аспирант кафедры системного анализа и компьютерного моделирования факультета радиоп физики и компьютерных технологий. Научный руководитель – В. В. Скакун.

Александр Александрович Головатый – кандидат физико-математических наук; научный сотрудник.

Николай Николаевич Яцков – кандидат физико-математических наук; доцент кафедры системного анализа и компьютерного моделирования факультета радиоп физики и компьютерных технологий.

Виктор Васильевич Скакун – кандидат физико-математических наук; заведующий кафедрой системного анализа и компьютерного моделирования факультета радиоп физики и компьютерных технологий.

Authors:

Mikhail Antonenka, postgraduate student at the department of systems analysis and computer simulation, faculty of radiophysics and computer technologies.

misha.antonenko.minsk@gmail.com

Aliaksandr Halavatyi, PhD (physics and mathematics); researcher. *aliaksandr.halavatyi@embl.de*

Mikalai Yatskou, PhD (physics and mathematics); associate professor at the department of systems analysis and computer simulation, faculty of radiophysics and computer technologies.

yatskou@bsu.by

Victor Skakun, PhD (physics and mathematics); head of the department of systems analysis and computer simulation, faculty of radiophysics and computer technologies.

skakun@bsu.by

и впервые предложена их классификация по признакам, характеризующим биологическую систему. Проведено сравнение подходов к усреднению экспериментальных данных и оценок параметров. Показано, что усреднение оценок параметров, а не самих экспериментальных данных позволяет получить менее смещенные оценки параметров биологической системы.

Ключевые слова: фотообесцвечивание; анализ данных; имитационная модель; кривая восстановления флуоресценции; методы нормировки; диффузия.

ANALYSIS OF DATA NORMALIZATION METHODS FOR PHOTOBLEACHING EXPERIMENTS

M. V. ANTONENKA^a, A. A. HALAVATYI^b, M. M. YATSKOU^a, V. V. SKAKUN^a

^aBelarusian State University, Nezavisimosti avenue, 4, 220030, Minsk, Republic of Belarus

^bEuropean Molecular Biology Laboratory, Meierkhofshtrasse, 1, 69117, Heidelberg, Germany

Corresponding author: misha.antonenko.minsk@gmail.com

The research of normalization methods of fluorescence recovery after photobleaching experimental data for diffusion and chemical interactions models taking into account experimental features is performed. The comparison of data normalization methods is performed, and the classification of normalization methods based on biological system's features is first proposed. The comparison of averaging experimental data method and averaging parameter estimation method is performed. It is shown that parameter estimation values averaging rather than experimental data values averaging leads to less biased estimates of biological system's parameters.

Key words: photobleaching; data analysis; simulation model; fluorescence recovery curve; normalization methods; diffusion.

Введение

Одним из методов, позволяющих выполнять анализ внутриклеточных процессов, является восстановление флуоресценции после фотообесцвечивания (ВФФ; в литературе на английском языке – Fluorescence Recovery After Photobleaching, FRAP) [1]. Метод широко используется ввиду относительно невысокой стоимости проведения экспериментов, позволяет получить качественное и количественное описание белков, выполняющих регуляторную функцию в клетках, и их взаимодействий. Среди проводимых исследований особый интерес вызывает изучение полимеризации белка актина в живых клетках, так как нарушение актиновых клеточных структур связано с различного рода заболеваниями [2].

Существующие модели анализа кинетических процессов полимеризации белка актина, такие как диффузии Элленберга и Соумпэсиса, модель химических взаимодействий [3; 4], не учитывают экспериментальных особенностей, связанных с частичным обесцвечиванием исследуемого биологического образца, конечным временем засветки, переходом части флуорофоров в триплетное состояние при изменении режима работы лазера. В свою очередь, разработка моделей кинетических процессов белка актина для анализа данных без учета экспериментальных искажений приводит к смещению оценок параметров [5]. Методы анализа результатов FRAP-экспериментов используют различные способы преобразования и нормировки данных [6; 7]. Исследование влияния алгоритмов нормировки на точность оценок параметров моделей диффузии и взаимодействия белка актина с нелюминесцирующими молекулами, сайтами связывания, или ловушками, является одной из важнейших задач. В настоящее время в литературе не представлены научные работы по единой классификации и исследованию методов нормировки данных FRAP-экспериментов, дающие рекомендации к практическому использованию алгоритмов нормировки данных.

Цель настоящей работы – исследование алгоритмов нормировки данных FRAP-экспериментов на примерах моделей диффузии и молекулярных взаимодействий белка актина. Представлен алгоритм моделирования кривых восстановления флуоресценции в различных областях клеток для моделей диффузии и молекулярных взаимодействий белка G-актина. Разработана методика исследования влияния различных способов преобразования (нормировок) экспериментальных данных на качество получаемых оценок параметров. Представлена классификация применимости различных методов нормировок в зависимости от признаков биологической системы, проведено сравнение подходов к усреднению экспериментальных данных и оценок параметров.

Восстановление флуоресценции после фотообесцвечивания

Во FRAP-методе в результате применения лазера высокой интенсивности в течение относительно короткого промежутка времени происходит необратимое фотообесцвечивание небольшой области, так называемой области интереса, в клетке ROI (от англ. *region of interest*). Затем вследствие различных транспортных и миграционных процессов с участием белков в клетке флуоресцирующие молекулы из необесцвеченной области проникают в область интереса. Таким образом, происходит восстановление флуоресценции молекул до некоторого постоянного значения – области плато. При этом скорость достижения плато, а также форма кривой восстановления зависят от диффузии и взаимодействия белков и их комплексов в клетке.

Полный набор данных FRAP-эксперимента включает следующие кривые флуоресценции: $I_{\text{frap}}(t)$ – средняя интенсивность флуоресценции в области фотообесцвечивания; $I_{\text{base}}(t)$ – средняя интенсивность флуоресценции вне клетки («фон»); $I_{\text{whole}}(t)$ – средняя интенсивность всей исследуемой клетки; $I_{\text{ref}}(t)$ – средняя интенсивность в области клетки вне фотообесцвечивания. Минимальным объемом данных, пригодных для анализа, является набор из двух кривых флуоресценции – $I_{\text{frap}}(t)$ и $I_{\text{whole}}(t)$.

Алгоритмы нормировок кривых восстановления флуоресценции

Рассмотрим нормировки, не учитывающие приобретенное обесцвечивание образца вследствие работы лазера в режиме измерения интенсивности флуоресценции после фотообесцвечивания. В нормировках Рэйнера и обратного умножения [8] кривая FRAP нормируется ($I_{\text{frap-norm}}$) в соответствии с выражением

$$I_{\text{frap-norm}} = \frac{I_{\text{frap}}(t) - I_{\text{frap-bleach}}}{I_{\text{frap-pre}} - I_{\text{frap-bleach}}},$$

где $I_{\text{frap-bleach}}$ – значение интенсивности флуоресценции сразу после обесцвечивания; $I_{\text{frap-pre}}$ – средняя интенсивность флуоресценции в исследуемой области клетки до фотообесцвечивания.

Затем процессу нормировки подлежит одна из доступных кривых эксперимента – $I_{\text{whole}}(t)$ или $I_{\text{ref}}(t)$. Для определенности запишем нормировку Рэйнера для кривой $I_{\text{whole}}(t)$

$$I_{\text{whole-norm}} = \frac{I_{\text{whole}}(t) - I_{\text{frap-bleach}}}{I_{\text{frap-pre}} - I_{\text{frap-bleach}}}.$$

Нормировка обратного умножения над кривой $I_{\text{whole}}(t)$ выполняется в два этапа:

$$I_{\text{whole-norm}_1}(t) = (I_{\text{whole}}(t) - I_{\text{base}}(t)) \frac{I_{\text{frap-pre}}}{I_{\text{whole-pre}}};$$

$$I_{\text{whole-norm}_2}(t) = \frac{I_{\text{whole-norm}_1}(t)}{I_{\text{frap-pre}} - I_{\text{frap-bleach}}}.$$

Приобретенное обесцвечивание в нормировках учитывается в процессе регрессионного анализа. Рассмотрим параметр уменьшения флуоресценции (τ_{decay}):

$$I_{\text{frap-norm}}(t) = \frac{I_{\text{frap-norm}}(t)}{e^{-\tau_{\text{decay}} t}}.$$

В двойной (Double) нормировке [8] учитывается эффект приобретенного обесцвечивания путем введения в нормировку данных из кривой $I_{\text{whole}}(t)$:

$$I_{\text{frap-norm}} = \frac{I_{\text{whole-pre}}}{I_{\text{whole}}(t) - I_{\text{base}}(t)} \frac{I_{\text{frap}}(t) - I_{\text{base}}(t)}{I_{\text{frap-pre}}}.$$

Для одинарной (Single) нормировки [8] необходимы только кривые I_{frap} и $I_{\text{base}}(t)$:

$$I_{\text{frap-norm}} = \frac{I_{\text{frap}}(t) - I_{\text{base}}(t)}{I_{\text{frap-pre}}}.$$

В методах двойной и одинарной шкалированных нормировок [8] дополнительно проводят нормировку к полной шкале (Full scale):

$$I_{\text{frap-norm}}(t) = \frac{I_{\text{frap-norm}}(t) - I_{\text{frap-norm}}(t_{\text{bleach}})}{I_{\text{frap-norm-pre}} - I_{\text{frap-norm}}(t_{\text{bleach}})}.$$

Модели G-актина для кривой восстановления флуоресценции

Для глобулярных молекул G-актина существуют два основных фактора, влияющих на их подвижность: диффузия, зависящая от условий биологической среды (вязкость цитоплазмы, температура и др.) [4], взаимодействие с нелюминесцирующими молекулами, сайтами связывания, или ловушками. В общем случае изменения концентраций сайтов связывания, свободных и связанных белков во времени описываются системой

$$\begin{cases} \frac{\partial f}{\partial t} = D_f \nabla^2 f - k_{\text{on}} f s + k_{\text{off}} c, \\ \frac{\partial s}{\partial t} = D_s \nabla^2 s - k_{\text{on}} f s + k_{\text{off}} c, \\ \frac{\partial c}{\partial t} = D_c \nabla^2 c + k_{\text{on}} f s - k_{\text{off}} c, \end{cases} \quad (1)$$

где f – концентрация свободных белков; s – концентрация ловушек (сайтов связывания); c – концентрация связанных комплексов; D_f , D_s , D_c – коэффициенты диффузии для свободных белков, ловушек и комплексов соответственно; k_{on} , k_{off} – скорости ассоциации и диссоциации соответственно.

В случае влияния процессов диффузии и взаимодействия с ловушками на восстановление флуоресценции решение данной системы представляет собой преобразование Лапласа от функции восстановления флуоресценции. Для получения зависимости интенсивности флуоресценции от времени необходимо провести обратное преобразование Лапласа: $\text{frap}(t) = L^{-1}[\text{frap}(p)]$, где L^{-1} – оператор обратного преобразования Лапласа.

$$\begin{cases} \text{frap}(p) = \frac{1}{p} - \frac{F_{\text{eq}}}{p} (1 - 2K_1(qw)I_1(qw)) \left(1 + \frac{k_{\text{on}}}{p + k_{\text{off}}} \right) - \frac{C_{\text{eq}}}{p + k_{\text{off}}}, \\ F_{\text{eq}} = \frac{k_{\text{off}}}{k_{\text{on}} + k_{\text{off}}}; C_{\text{eq}} = \frac{k_{\text{on}}}{k_{\text{on}} + k_{\text{off}}}; q = \sqrt{\left(\frac{p}{D_f} \right) \left(1 + \frac{k_{\text{on}}}{p + k_{\text{off}}} \right)}, \end{cases} \quad (2)$$

где F_{eq} , C_{eq} – концентрации в состоянии равновесия свободных протеинов и неподвижных ловушек соответственно, причем $F_{\text{eq}} + C_{\text{eq}} = 1$; I_1 , K_1 – модифицированные функции Бесселя первого и второго рода соответственно; w – радиус пятна засветки.

В частном случае, при $\frac{k_{\text{on}}}{k_{\text{off}}} \ll 1$, система описывается моделью диффузии:

$$\left\{ \text{frap}(t) = e^{-\frac{\tau_D}{t}} \left[I_0\left(2\frac{\tau_D}{t} \right) + I_1\left(2\frac{\tau_D}{t} \right) \right]; \tau_D = \frac{w^2}{4D_f}, \right. \quad (3)$$

где I_0 , I_1 – модифицированные функции Бесселя первого рода нулевого и первого порядков соответственно. Ограничения применимости – двумерная диффузия и круглая засветка [9].

В случае большой концентрации ловушек и малой скорости ассоциации $\left(\frac{k_{\text{on}} w^2}{D_f} \ll 1 \text{ и } \frac{k_{\text{off}}}{k_{\text{on}}} \ll 1 \right)$ целесообразно использовать модель ловушек G-актина

$$\text{frap}(t) = 1 - C_{\text{eq}} e^{-k_{\text{off}} t}. \quad (4)$$

В этой модели процесс диффузии происходит быстро относительно процессов химического взаимодействия и шкалы времени проведения эксперимента [4].

Моделирование G-актина для кривой восстановления флуоресценции

Моделирование экспериментальных данных осуществляется для трех кривых – $I_{\text{frap}}(t)$, $I_{\text{whole}}(t)$, $I_{\text{base}}(t)$. Первоначально выбираются интервал и шаг по времени, в течение которого происходит моделирование. Затем в сформированных отсчетах времени рассчитываются теоретические значения $I_{\text{theory}}(t)$ для выбранной модели согласно математическому описанию соответствующей модели (формулы (1)–(4)).

При моделировании кривой восстановления в области интереса после расчета теоретических значений I_{theory} к полученной кривой добавляется шум:

$$I_{\text{frap}} = \begin{cases} I_{\text{theory}} + C_{\text{disp}} P_{\lambda}, & I_{\text{theory}} \ll I_{\text{max}}, \\ I_{\text{theory}} + C_{\text{disp}} \xi \sigma, & I_{\text{theory}} \sim I_{\text{max}}, \end{cases} \quad (5)$$

где C_{disp} – коэффициент разброса, регулирующий высоту шума в интервале $[0,01; 0,12]$; ξ – реализация нормальной случайной величины с математическим ожиданием 0 и дисперсией 1; $\sigma = \sqrt{I_{\text{theory}}}$ – коэффициент, учитывающий неравномерную величину шума в зависимости от значения интенсивности; P_{λ} – реализация пуассоновской случайной величины, в качестве параметра пуассоновского распределения при относительно малых значениях интенсивности (до 20 единиц при максимальном значении 255) выступает теоретическая интенсивность $\lambda = I_{\text{theory}}$. Фаза до обесцвечивания

$$I_{\text{frap-pre}} = C_{\text{frap-pre}} + C_{\text{disp}_2} \xi \sqrt{C_{\text{frap-pre}}}, \quad (6)$$

где коэффициент $C_{\text{frap-pre}}$ соответствует максимальному значению теоретической интенсивности $C_{\text{frap-pre}} = I_{\text{theory}}^{\text{max}} = I_{\text{theory}}(t \rightarrow \infty)$; C_{disp_2} – коэффициент разброса в интервале $[0,01; 0,12]$, характеризующий флуктуации системы до обесцвечивания.

Кривая восстановления в области вне клетки вычислялась по формуле

$$I_{\text{base}} = C_{\text{base}} + C_{\text{disp}} \xi \sqrt{C_{\text{base}}}, \quad (7)$$

где коэффициент C_{base} может варьироваться в интервале $[0,01; 0,5]$ (в настоящей работе принималось $C_{\text{base}} = 0,1$). В предположении, что фоновая интенсивность вне клетки не меняется при проведении эксперимента, отдельного моделирования кривой восстановления флуоресценции до обесцвечивания не требуется.

Кривая восстановления в области всей клетки в случае обретенного обесцвечивания

$$I_{\text{whole}} = A_{\text{decay}} e^{-\tau_{\text{decay}} t} + y_0, \quad (8)$$

где τ_{decay} – параметр, учитывающий уменьшение флуоресценции; y_0 – значение, к которому стремится интенсивность при $t \rightarrow \infty$. В смоделированной кривой значение y_0 выбиралось как $y_0 = \max(I_{\text{base}})$ на том основании, что средняя интенсивность флуоресценции во всей клетке не может стать ниже уровня «фоновой» интенсивности вне клетки; A_{decay} – коэффициент, определяющий максимальный уровень интенсивности. Далее, на всю кривую $I_{\text{whole}}(t)$ накладывался шум в соответствии с выражением (5).

При переключении лазера в режим снятия изображения часть флуорофоров переходит в триплетное состояние [10], уменьшая число флуорофоров, участвующих в процессе флуоресценции, что оказывает непосредственное влияние на кривую восстановления. Для учета эффекта изменения концентрации

флуоресцирующих частиц необходимо исключить из анализа первые экспериментальные точки. В алгоритм анализа данных добавлена возможность задавать время изменения частоты снятия изображения, чтобы исключить из последующего анализа увеличение средней интенсивности, которое не связано с процессами, проходящими в клетке, а представляет собой особенность проведения эксперимента.

В большинстве FRAP-экспериментов не производят полного выжигания флуорофоров в интересующей области образца [11]. Это связано с тем, что воздействие лазера высокой интенсивности может привести к выжиганию не только флуоресцирующего красителя, но и частиц самого образца. Существенным фактором неполной засветки может быть конечное время засветки. В результате влияния данных факторов кривая восстановления изначально имеет ненулевой уровень интенсивности. Для учета подобных эффектов в имитационной модели введен параметр φ , характеризующий обесцвеченную часть:

$$\varphi = \frac{I_{\text{frap-bleach}}}{I_{\text{frap-pre}}}. \quad (9)$$

Для общей модели диффузии и неподвижных ловушек G-актина справедливо выражение

$$\text{frap}(t) = 1 - \varphi + \varphi \left[L^{-1}(\text{frap}(p)) \right], \quad (10)$$

где L^{-1} – оператор обратного преобразования Лапласа.

Алгоритм анализа кривых восстановления флуоресценции

Для исследования влияния методов нормировки на качество анализа данных предложена методика изучения и моделирования последних, основные этапы которой представлены на рис. 1, а. На рис. 1, б, приведены методы усреднения для работы с набором клеток.

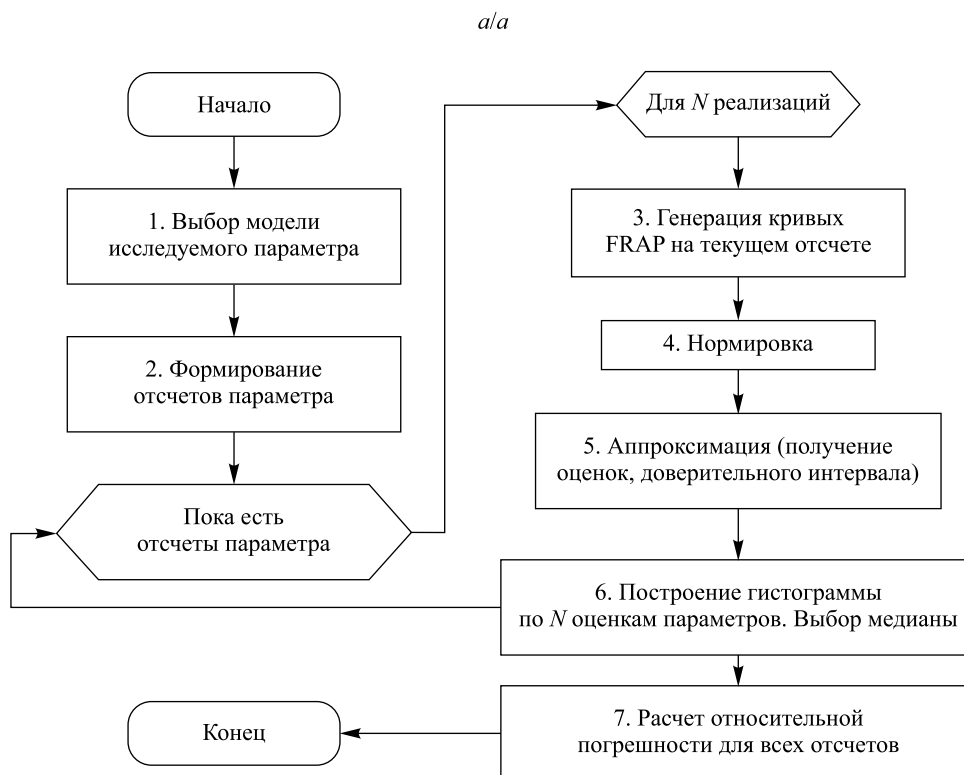


Рис. 1. Методики исследования влияния различных способов нормировок (а) на качество анализа данных (начало)

Fig. 1. Methods of investigation normalization (a) impact on the data analysis quality (beginning)

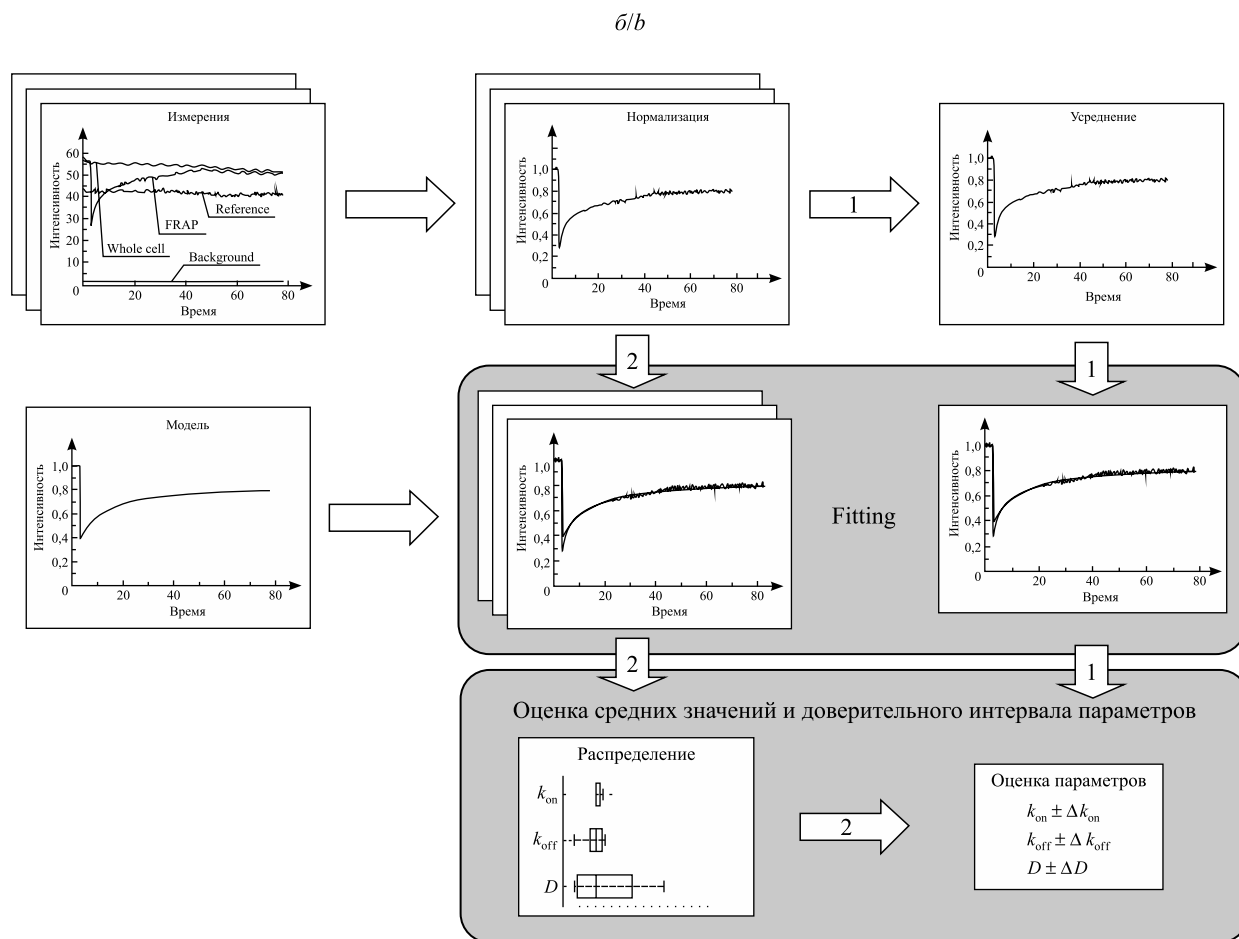


Рис. 1. Методики исследования усредняющих подходов (б) на качество анализа данных (окончание)

Fig. 1. Methods of investigation averaging techniques (b) impact on the data analysis quality (ending)

Прежде всего необходимо выбрать модель G-актина для кривой восстановления, для которой будет проводиться сравнительный анализ, и исследуемый параметр (блок 1) (см. рис. 1), например уровень шума, коэффициент диффузии и др. Затем устанавливается интересующий интервал для выбранного параметра (блок 2). В цикле по всем отсчетам анализируется набор N реализаций, а именно производится моделирование набора кривых флуоресценции (блок 3) в соответствии с выражениями (5)–(10), затем применяются методы нормировок (блок 4) – одиночная, двойная, одиночная шкалированная, двойная шкалированная, нормировка Рэйнера и нормировка обратного умножения. Последние две нормировки идентичны в случае отсутствия эффекта уменьшения флуоресценции после фотообесцвечивания. В блоке 5 выполняется процедура аппроксимации нормированных кривых (блок 6), в качестве целевой функции используется евклидово расстояние, применяется алгоритм минимизации Левенберга – Марквардта. В результате выполнения анализа предоставляется набор оценок параметров моделей – медианное значение и их 95 % доверительные интервалы (блок 6). По медианному значению для

текущего отсчета вычислялась относительная ошибка (RE – relative error) $RE = \frac{\Delta x}{x_{\text{true}}}$. На последнем

шаге строились графики относительной ошибки для всего диапазона исследуемого параметра (блок 7).

В целях определения метода усреднения, с помощью которого можно получить более состоятельные оценки параметров, по идентичной схеме проводилось исследование двух подходов к анализу набора клеток, имеющих определенный биологический шум. Различие в подходах заключается в том, что в первом случае усреднение происходит до процесса аппроксимации параметров и анализируется усредненная кривая, во втором – после процесса аппроксимации параметров, т. е. усредняются оценки параметров.

Результаты эксперимента и их обсуждение

Исследование влияния методов нормировки на качество анализа данных проводилось для следующих параметров и моделей G-актина: уровня шума (C_{disp}) и коэффициента диссоциации (k_{off}) для модели ловушек G-актина, коэффициента диффузии (D_f) для модели диффузии. Результаты сравнительного анализа алгоритмов нормировки данных представлены на рис. 2.

Проведенные исследования позволили сделать следующие выводы.

- Единичная нормировка является наиболее универсальной. Устойчива к шуму ($\text{RE} < 15\%$), для всех моделей показывает приемлемый результат ($\text{RE} < 13\%$), а для модели диффузии – наилучший результат ($\text{RE} < 10\%$).

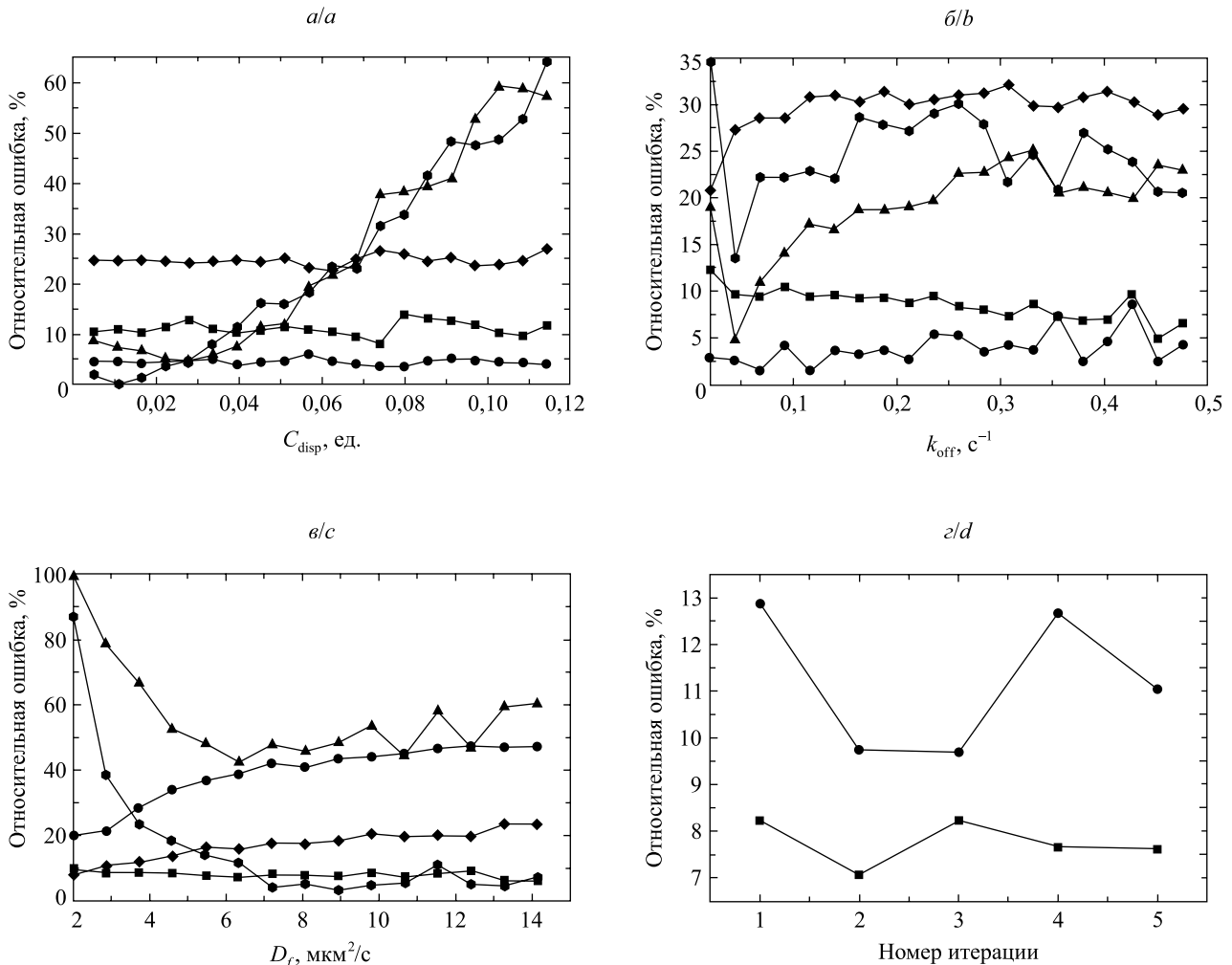


Рис. 2. Относительная ошибка для различных алгоритмов нормировки данных в зависимости:

от уровня шума C_{disp} для модели ловушек G-актина (а), параметры системы $k_{\text{on}} = 5 \text{ с}^{-1}$, $k_{\text{off}} = 0,05 \text{ с}^{-1}$; коэффициента диссоциации k_{off} для модели ловушек G-актина (б), параметры системы $C_{\text{disp}} = 0,03$, $k_{\text{on}} = 5 \text{ с}^{-1}$; коэффициента диффузии D_f для модели диффузии G-актина (в), параметры системы $C_{\text{disp}} = 0,04$, $w = 12 \text{ мкм}$; метода усреднения кривых восстановления флуоресценции (г), параметры системы $D = 4 \text{ мкм}^2/\text{с}$, $w = 5 \text{ мкм}$;

—■— единичная, —●— единичная шкалированная, —▲— двойная, —●— двойная шкалированная, —◆— Рэйнера (а, б, в); —■— после аппроксимации, —●— до аппроксимации (г)

Fig. 2. Relative error for different normalization algorithms: dependent on the noise level C_{disp} for the G-actin binding sites model (a), parameters of the system $k_{\text{on}} = 5 \text{ s}^{-1}$, $k_{\text{off}} = 0.05 \text{ s}^{-1}$; dependent on the diffusion coefficient k_{off} for the G-actin binding sites model (b), parameters of the system $C_{\text{disp}} = 0.03$, $k_{\text{on}} = 5 \text{ s}^{-1}$; dependent on the diffusion coefficient D_f for the G-actin diffusion model (c), parameters of the system $C_{\text{disp}} = 0.04$, $w = 12 \text{ }\mu\text{m}$; dependent on the averaging fluorescence recovery curves methods (d), parameters of the system $D = 4 \text{ }\mu\text{m}^2/\text{s}$, $w = 5 \text{ }\mu\text{m}$;

—■— single, —●— full scale, —▲— double, —●— double full scale, —◆— Rainer (a, b, c); —■— after approximation, —●— before approximation (d)

- Единичная шкалированная нормировка наиболее применима для модели ловушек G-актина ($RE \approx 5\%$). Однако данная нормировка не учитывает эффект приобретенного фотообесцвечивания.
- Нормировки Рэйнера (и обратного умножения) наиболее эффективны для использования в случае значительного эффекта приобретенного фотообесцвечивания, однако уступают в точности оценки параметров моделям при отсутствии этого эффекта (RE составляет 25–30 %).
- Двойная и двойная шкалированная нормировки демонстрируют неустойчивость к шуму (так как при увеличении коэффициента разброса возрастает относительная ошибка, достигая 60 %), и в то же время последняя показывает приемлемый результат в системах со значительным преобладанием процесса диффузии ($RE < 10\%$ при $D > 7 \text{ мкм}^2/\text{с}$).

Изучение методов анализа набора данных с флуктуирующими значениями биологических параметров показало (см. рис. 2, z), что усреднение оценок параметров, а не самих экспериментальных данных позволяет получить менее смещенные оценки (до 7 %).

Заключение

В работе проведено исследование алгоритмов нормировки данных FRAP-экспериментов на примерах моделей диффузии и молекулярных взаимодействий белка актина, представлен сравнительный анализ методов нормировок данных и впервые предложена классификация методов нормировок по признакам, характеризующим биологическую систему: единичная нормировка является наиболее универсальной и устойчивой к шуму; двойная и двойная шкалированная нормировки максимально эффективны в системах с преобладанием процесса диффузии; единичная шкалированная нормировка наиболее действенна при преобладании химических взаимодействий G-актина; в случае значительного эффекта приобретенного фотообесцвечивания наилучшую точность показала нормировка Рэйнера. Исследовано влияние подходов с усреднением до и после процесса аппроксимации параметров при биологическом шуме параметров, характеризующих процесс в клетке. При использовании подхода с усреднением параметров после аппроксимации оценка среднего значения для параметра получается ближе к истинному (теоретическому) среднему для биологических шумов.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

1. Carnell M., Macmillan A., Whan R. FRAP: Acquisition, Analysis, and Applications // *Methods Mol. Biol.* 2015. Vol. 1232. P. 255–271.
2. A mathematical model of actin filament turnover for fitting FRAP data / A. Halavatyi [et al.] // *Eur. Biophys. J.* 2010. Vol. 39, № 4. P. 669–677.
3. Sustr D., Duschl C., Volodkin D. FRAP-based evaluation of protein diffusion in polyelectrolyte multilayers // *Eur. Polym. J.* 2015. Vol. 68. P. 665–670.
4. Sprague B. L. FRAP analysis of binding: proper and fitting // *Trends Cell Biol.* 2005. Vol. 15, № 2. P. 84–91.
5. Антоненко М. В., Головатый А. А., Яцков Н. Н. Анализ кривых восстановления флуоресценции после фотообесцвечивания // ИТС-2012 : материалы XI Междунар. науч. конф. (Минск, 24 окт. 2012 г.). Минск, 2012. С. 295–297.
6. Kang M., Andreani M., Kenworthy A. K. Validation of Normalizations, Scaling, and Photofading Corrections for FRAP Data Analysis // *PLoS One*. 2015. Vol. 10 (5). P. 1–28.
7. Yuste S. B., Abad E., Baumgaertner A. Anomalous diffusion and FRAP dynamics in the random comb model // *Phys. Rev.* 2016. Vol. 94. P. 1–35. Article ID 012118.
8. Miura K. Analysis of FRAP Curves. 2005 [Electronic resource]. URL: www.embl.de/eamnet/frap/FRAP.html (date of access: 03.05.2016).
9. Soumpasis D. Theoretical analysis of fluorescence photobleaching recovery experiments // *Biophys. J.* 1983. Vol. 41, issue 1. P. 95–97.
10. Donnert G. Major signal increase in fluorescence microscopy through dark-state relaxation // *Nat. Methods*. 2007. Vol. 4. P. 81–86.
11. Habuchi S. Reversible single-molecule photo switching in the GFP-like fluorescent protein Dronpa // *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* 2005. Vol. 102, № 27. P. 9511–9516.

REFERENCES

1. Carnell M., Macmillan A., Whan R. FRAP: Acquisition, Analysis, and Applications. *Methods Mol. Biol.* 2015. Vol. 1232. P. 255–271. DOI: 10.1007/978-1-4939-1752-5_18.
2. Halavatyi A., Nazarov P., Tanoury Z., et al. A mathematical model of actin filament turnover for fitting FRAP data. *Eur. Biophys. J.* 2010. Vol. 39, No. 4. P. 669–677. DOI: 10.1007/s00249-009-0558-2.
3. Sustr D., Duschl C., Volodkin D. FRAP-based evaluation of protein diffusion in polyelectrolyte multilayers. *Eur. Polym. J.* 2015. Vol. 68. P. 665–670. DOI: 10.1016/j.eurpolymj.2015.03.063.
4. Sprague B. L. FRAP analysis of binding: proper and fitting. *Trends Cell Biol.* 2005. Vol. 15, No. 2. P. 84–91. DOI: 10.1016/j.tcb.2004.12.001.
5. Antonenko M. V., Golovatyi A. A., Yatskov N. N. Analiz krivyykh vosstanovleniya fluorestsentsii posle fotoobestsvechivaniya. *ITS-2012 : materialy XI Mezhdunar. nauchn. konf. (Minsk, 24 Oct. 2012).* Minsk, 2012. P. 295–297 (in Russ.).

6. Kang M., Andreani M., Kenworthy A. K. Validation of Normalizations, Scaling, and Photofading Corrections for FRAP Data Analysis. *PLoS One*. 2015. Vol. 10 (5). P. 1–28. DOI: 10.1371/journal.pone.0127966.
7. Yuste S. B., Abad E., Baumgaertner A. Anomalous diffusion and FRAP dynamics in the random comb model. *Phys. Rev.* 2016. Vol. 94. P. 1–35. Article ID 012118. DOI: 10.1103/PhysRevE.94.012118.
8. Miura K. Analysis of FRAP Curves. 2005 [Electronic resource]. URL: www.embl.de/eamnet/frap/FRAP.html (date of access: 03.05.2016).
9. Soumpasis D. Theoretical analysis of fluorescence photobleaching recovery experiments. *Biophys. J.* 1983. Vol. 41, issue 1. P. 95–97. DOI: 10.1016/S0006-3495(83)84410-5.
10. Donnert G. Major signal increase in fluorescence microscopy through dark-state relaxation. *Nat. Methods*. 2007. Vol. 4. P. 81–86. DOI: 10.1038/nmeth986.
11. Habuchi S. Reversible single-molecule photo switching in the GFP-like fluorescent protein Dronpa. *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* 2005. Vol. 102, No. 27. P. 9511–9516. DOI: 10.1073/pnas.0500489102.

Статья поступила в редколлегию 22.06.2016.
Received by editorial board 22.06.2016.

СОДЕРЖАНИЕ

ИСТОРИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ

<i>Барышевский В. Г., Максименко С. А.</i> Институт ядерных проблем БГУ: 30 лет научных исследований.....	4
<i>Русак В. Н., Абрашина-Жадаева Н. Г.</i> К 55-летию кафедры высшей математики и математической физики физического факультета БГУ	14

ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ

<i>Комяк А. И., Вилейшикова Н. П., Комяк Е. Н., Зажогин А. П.</i> Фотохимические процессы в растворах перхлората уранила в ацетоне с участием атмосферного кислорода.....	21
<i>Воропай Е. С., Самцов М. П., Ляшенко Л. С.</i> Регистрация флуоресценции зондов на основе полиметиновых красителей в тканях <i>in vivo</i>	28
<i>Баззал Х., Фадаиян А. Р., Зажогин А. П.</i> Исследования процессов образования нитрида алюминия в плазме в зависимости от угла падения сдвоенных лазерных импульсов на мишень из алюминиевого сплава Д16Т в атмосфере воздуха	34

ФИЗИКА ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ЯВЛЕНИЙ

<i>Фурс А. Н.</i> Потенциалы электромагнитного поля произвольного распределения зарядов и токов в калибровке Кулона	43
<i>Новицкий А. В., Альварес Родригес Р. Х., Галынский В. М.</i> Сферические бесселевы решения уравнений Максвелла в неоднородных вращательно-симметричных средах.....	52
<i>Чудовская Е. А.</i> Формализованное описание лавины электронов в канале микроканальной пластины	61

ФИЗИКА ЯДРА И ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ

<i>Шершень И. А., Шишкина Т. В.</i> Исследование фермионов различных поколений в процессах столкновения с фотонами высокой энергии	67
--	----

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

<i>Shaposhnikov V. L., Krivosheeva A. V., Borisenko V. E.</i> Effect of pressure on electronic and optical properties of magnesium silicide and germanide [<i>Шапошников В. Л., Кривошеева А. В., Борисенко В. Е.</i> Влияние давления на электронные и оптические свойства силицида и германида магния].....	73
<i>Власенко С. В., Бенедиктович А. И.</i> Поглощение рентгеновского излучения при анализе остаточных напряжений в образцах с цилиндрической геометрией.....	82

ФИЗИКА ЛАЗЕРОВ

<i>Сташкевич И. В., Герасименко В. И.</i> Влияние матрицы на характеристики квазитрехуровневого неодимового лазера при стационарной генерации.....	88
--	----

ФИЗИКА И ТЕХНИКА ПОЛУПРОВОДНИКОВ

<i>Буслюк В. В., Нерода И. Ю., Петлицкий А. Н., Просолович В. С., Янковский Ю. Н., Лановский Р. А.</i> Электрофизические параметры генераторных диодов для создания широкополосного шума	95
--	----

НАНОМАТЕРИАЛЫ И НАНОТЕХНОЛОГИИ

<i>Микитчук Е. П., Козадаев К. В.</i> Моделирование электромагнитных свойств серебряных наноструктур на подложке в атмосфере воздуха.....	100
---	-----

ПРИБОРЫ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЙ

<i>Антоненко М. В., Головатый А. А., Яцков Н. Н., Скакун В. В.</i> Исследование методов нормировки данных в экспериментах с использованием фотообесцвечивания.....	108
--	-----

CONTENTS

HISTORICAL MATERIALS

<i>Baryshevsky V. G., Maksimenko S. G.</i> Institute for Nuclear Problems: 30 years of research activity.....	4
<i>Rusak V. N., Abrashina-Zhadaeva N. G.</i> 55 th anniversary of the department of higher mathematics and mathematical physics of the physics faculty of BSU.....	14

OPTICS AND SPECTROSCOPY

<i>Komyak A. I., Vilejshikova N. P., Komyak E. N., Zajogin A. P.</i> Photochemical processes in solutions of uranyl perchlorate in acetone with participation of atmospheric oxygen	21
<i>Voropay E. S., Samtsov M. P., Lyashenko L. S.</i> Recording of fluorescence from the probes based on polymethine dyes in the tissues <i>in vivo</i>	28
<i>Bazzal Kh., Fadaeian A. R., Zajogin A. P.</i> Investigation into the formation processes of aluminium nitride in the plasma depending on the incidence angle of double laser pulses onto the target of D16T aluminium alloy in the air	34

PHYSICS OF ELECTROMAGNETIC PHENOMENA

<i>Furs A. N.</i> The electromagnetic field potentials of an arbitrary charge and current distribution in Coulomb gauge.....	43
<i>Novitsky A. V., Alvarez Rodriguez R. J., Galynsky V. M.</i> Spherical Bessel solutions of Maxwell's equations in inhomogeneous rotationally symmetric media	52
<i>Tchoudovskaja E. A.</i> Formal description of electron avalanche in the channel of microchannel plate.....	61

ATOMIC NUCLEUS AND ELEMENTARY PARTICLE PHYSICS

<i>Shershan I. A., Shishkina T. V.</i> The different generations fermions investigation in it scattering by high energy photon beams	67
--	----

CONDENSED STATE PHYSICS

<i>Shaposhnikov V. L., Krivosheeva A. V., Borisenko V. E.</i> Effect of pressure on electronic and optical properties of magnesium silicide and germanide.....	73
<i>Vlasenko S. V., Benediktovitch A. I.</i> X-ray absorption in the analysis of residual stresses in samples with cylindrical geometry	82

LASER PHYSICS

<i>Stashkevich I. V., Herasimenka V. I.</i> The matrix effect on the quasi-three-level neodymium laser parameters in the stationary regime	88
--	----

SEMICONDUCTOR PHYSICS AND ENGINEERING

<i>Busliuk V. V., Neroda I. Y., Pyatlitski A. N., Prasalovich U. S., Yankouski Y. N., Lanouski R. A.</i> Electrophysical parameters of the diodes for broadband noise generation	95
--	----

NANOMATERIALS AND NANOTECHNOLOGIES

<i>Mikitchuk A. P., Kozadaev K. V.</i> Simulation of the electromagnetic properties of silver nanostructures on the solid substrate in the air atmosphere.....	100
--	-----

RESEARCH INSTRUMENTS AND METHODS

<i>Antonienka M. V., Halavatyi A. A., Yatskou M. M., Skakun V. V.</i> Analysis of data normalization methods for photobleaching experiments	108
---	-----

Журнал включен Высшей аттестационной комиссией Республики Беларусь в Перечень научных изданий для опубликования результатов диссертационных исследований по физико-математическим наукам (в области теоретической, экспериментальной и прикладной физики).

Журнал включен в библиографическую базу данных научных публикаций «Российский индекс научного цитирования» (РИНЦ).

**Журнал Белорусского
государственного университета. Физика.
№ 1. 2017**

Учредитель:
Белорусский государственный университет

Юридический адрес: пр. Независимости, 4,
220030, Минск.

Почтовый адрес: ул. Кальварийская, 9, каб. 636, 637,
220004, Минск.

Тел. 259-70-74, 259-70-75.

E-mail: vestnikbsu@mail.ru
vestnikbsu@bsu.by

«Журнал Белорусского государственного
университета. Физика» издается с января 1969 г.
До 2017 г. выходил под названием «Вестник БГУ.
Серия 1. Физика. Математика. Информатика»
(ISSN 1561-834X).

Редактор *Е. В. Павлова*
Технический редактор *В. В. Кильдишева*
Корректор *Л. А. Меркуль*

Подписано в печать 23.01.2017.

Тираж 150 экз. Заказ 10.

Республиканское унитарное предприятие
«Издательский центр Белорусского
государственного университета».
ЛП № 02330/117 от 14.04.2014.
Ул. Красноармейская, 6, 220030, Минск.

© БГУ, 2017

**Journal
of the Belarusian State University. Physics.
№ 1. 2017**

Founder:
Belarusian State University

Registered address: Nezavisimosti ave., 4, 220030, Minsk.

Correspondence address: Kal'variiskaya str., 9, office 636, 637,
220004, Minsk.

Tel. 259-70-74, 259-70-75.

E-mail: vestnikbsu@mail.ru
vestnikbsu@bsu.by

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

Editor *E. V. Pavlova*
Technical editor *V. V. Kil'disheva*
Proofreader *L. A. Merkul'*

Signed print 23.01.2017.

Edition 150 copies. Order number 10.

Publishing Center of BSU.
License for publishing No. 02330/117, 14 April, 2014.
Krasnoarmeiskaya str., 6, 220030, Minsk.

© BSU, 2017