



ЖУРНАЛ
БЕЛОРУССКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА

ФИЗИКА

JOURNAL
OF THE BELARUSIAN STATE UNIVERSITY

PHYSICS

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

Выходит три раза в год

3

2019

МИНСК
БГУ

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

- Главный редактор** АНИШИЧ В. М. – доктор физико-математических наук, профессор; профессор кафедры физики твердого тела физического факультета Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь.
E-mail: anishchik@bsu.by
- Заместитель главного редактора** ВОРОПАЙ Е. С. – доктор физико-математических наук, профессор; профессор кафедры лазерной физики и спектроскопии физического факультета Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь.
E-mail: voropay@bsu.by
- Ответственный секретарь** КАБАНОВА О. С. – кандидат физико-математических наук; научный сотрудник лаборатории нелинейной оптики и спектроскопии кафедры лазерной физики и спектроскопии физического факультета Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь.
E-mail: kabanovaos@bsu.by
- Бондаренко Г. Г.** Московский институт электроники и математики Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики», Москва, Россия.
- Воеводин В. Н.** Институт физики твердого тела, материаловедения и технологий Национальной академии наук Украины, Харьков, Украина.
- Жуковский П. В.** Люблинский технический университет, Люблин, Польша.
- Кислицын С. Б.** Институт ядерной физики Министерства энергетики Республики Казахстан, Алма-Ата, Казахстан.
- Козлов С. А.** Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики, Санкт-Петербург, Россия.
- Кучинский П. В.** НИУ «Институт прикладных физических проблем им. А. Н. Севченко» Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь.
- Максименко С. А.** НИУ «Институт ядерных проблем» Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь.
- Малый С. В.** Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь.
- Маскевич С. А.** Международный государственный экологический институт им. А. Д. Сахарова Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь.
- Машлан М.** Оломоуцкий университет им. Палацкого, Оломоуц, Чехия.
- Патрин А. А.** Кошалинский технический университет, Кошалин, Польша.
- Погребняк А. Д.** Сумский государственный университет, Сумы, Украина.
- Ремнев Г. Е.** Томский политехнический университет, Томск, Россия.
- Толстик А. Л.** Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь.
- Туроверов К. К.** Институт цитологии Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия.
- Чалов В. Н.** Имперский колледж Лондона, Лондон, Великобритания.
- Шандаров С. М.** Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, Томск, Россия.
- Хайнцманн Р.** Институт физической химии Йенского университета, Йена, Германия.

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ

- Ануфрик С. С.** Гродненский государственный университет им. Янки Купалы, Гродно, Беларусь.
- Гусев О. К.** Белорусский национальный технический университет, Минск, Беларусь.
- Казак Н. С.** Институт физики им. Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь.
- Килин С. Я.** Национальная академия наук Беларуси, Минск, Беларусь.
- Кононов В. А.** СП «ЛОТИС ТИИ», Минск, Беларусь.
- Маляревич А. М.** Белорусский национальный технический университет, Минск, Беларусь.
- Пенязьков О. Г.** Институт тепло- и массообмена им. А. В. Лыкова Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь.
- Пилипенко В. А.** Государственный центр «Белмикросистемы» филиала НТЦ «Белмикросистемы» ОАО «Интеграл» – управляющей компании холдинга «Интеграл», Минск, Беларусь.
- Плетюхов В. А.** Брестский государственный университет им. А. С. Пушкина, Брест, Беларусь.
- Семченко И. В.** Гомельский государственный университет им. Франциска Скорины, Гомель, Беларусь.
- Федосюк В. М.** ГНПО «Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению», Минск, Беларусь.
- Шкадаревич А. П.** Научно-производственное унитарное предприятие «Научно-технический центр “ЛЭМТ” БелОМО», Минск, Беларусь.

EDITORIAL BOARD

- | | |
|-------------------------------|---|
| Editor-in-chief | ANISHCHIK V. M. , doctor of science (physics and mathematics), full professor; professor at the department of solid-state physics, faculty of physics, 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; professor at the department of laser physics and spectroscopy, faculty of physics, Belarusian State University, Minsk, Belarus.
E-mail: voropay@bsu.by |
| Executive Secretary | KABANOVA O. S. , PhD (physics and mathematics); researcher at the laboratory of nonlinear optics and spectroscopy, department of laser physics and spectroscopy, faculty of physics, Belarusian State University, Minsk, Belarus.
E-mail: kabanovaos@bsu.by |
-
- | | |
|-------------------------|---|
| Bondarenko G. G. | Moscow Institute of Electronics and Mathematics of the National Research University «Higher School of Economics», Moscow, Russia. |
| Voevodin V. N. | Institute of Solid State Physics, Materials Science and Technologies, National Academy of Sciences of Ukraine, Kharkiv, Ukraine. |
| Zhukowski P. V. | Lublin University of Technology, Lublin, Poland. |
| Kislitsin S. B. | Institute of Nuclear Physics of the Ministry of Energy of the Republic of Kazakhstan, Almaty, Kazakhstan. |
| Kozlov S. A. | Saint Petersburg National Research University of Information Technologies, Mechanics and Optics, Saint Petersburg, Russia. |
| Kuchinski P. V. | A. N. Sevchenko Institute of Applied Physical Problems of the Belarusian State University, Minsk, Belarus. |
| Maksimenko S. A. | Institute for Nuclear Problems of the Belarusian State University, Minsk, Belarus. |
| Maly S. V. | Belarusian State University, Minsk, Belarus. |
| Maskevich S. A. | International Sakharov Environmental Institute of the Belarusian State University, Minsk, Belarus. |
| Maslan M. | Palacký University, Olomouc, Czech Republic. |
| Patryn A. A. | Politechnika Koszalińska, Koszalin, Poland. |
| Pogrebnjak A. D. | Sumy State University, Sumy, Ukraine. |
| Remnev G. E. | Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russia. |
| Tolstik A. L. | Belarusian State University, Minsk, Belarus. |
| Turoverov K. K. | Institute of Cytology, Russian Academy of Sciences, Saint Petersburg, Russia. |
| Chalov V. N. | Imperial College London, London, United Kingdom. |
| Shandarov S. M. | Tomsk State University of Control Systems and Radioelectronics, Tomsk, Russia. |
| Heintzmann R. | Institute of Physical Chemistry of the Jena University, Jena, Germany. |

EDITORIAL COUNCIL

- | | |
|---------------------------|---|
| Anufrik S. S. | Yanka Kupala State University of Grodno, Grodno, Belarus. |
| Gusev O. K. | Belarusian National Technical University, Minsk, Belarus. |
| 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. |
| Kononov V. A. | «LOTIS TII», Minsk, Belarus. |
| Malyarevich A. M. | Belarusian National Technical University, Minsk, Belarus. |
| Penyazkov O. G. | A. V. Luikov Heat and Mass Transfer Institute of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus. |
| Pilipenko V. A. | JSC «Integral», Minsk, Belarus. |
| Pletyukhov V. A. | Brest State University named after A. S. Pushkin, Brest, Belarus. |
| Semchenko I. V. | Francisk Skorina Gomel State University, Gomel, Belarus. |
| Fedosyuk V. M. | SSPA «Scientific and Practical Materials Research Centre of NAS of Belarus», Minsk, Belarus. |
| Shkadarevich A. P. | Unitary Enterprise «STC «LEMT» of the BelOMO», Minsk, Belarus. |

УДК 532.783;535.42

ДВУМЕРНАЯ ДИФРАКЦИОННАЯ ОПТИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА НА ОСНОВЕ ТЕКСТУРИРОВАННОЙ ФОТООРИЕНТАЦИИ ПОЛИМЕРИЗУЕМОГО ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА

О. С. КАБАНОВА¹⁾, И. И. РУШНОВА¹⁾, Е. А. МЕЛЬНИКОВА¹⁾,
А. Л. ТОЛСТИК¹⁾, Ал. А. МУРАВСКИЙ²⁾, Ан. А. МУРАВСКИЙ²⁾, Р. ХАЙНЦМАНН³⁾

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

²⁾Институт химии новых материалов Национальной академии наук Беларуси,

ул. Ф. Скорины, 36, 220141, г. Минск, Беларусь

³⁾Институт фотонных технологий им. Лейбница,

ул. Альберта Эйнштейна, 9, 07745, г. Йена, Германия

Исследованы дифракционные характеристики многослойной оптической структуры, представляющей собой двумерную фазовую решетку, сформированную в тонкопленочных слоях нематического полимеризуемого жидкого кристалла (ПЖК). Для создания периодически упорядоченных жидкокристаллических (ЖК) доменов с размерами 5–10 мкм, формирующих пропускающую анизотропную ЖК-решетку, использовалась технология послойной текстурированной фотоориентации водорастворимого азокрасителя AbA-2522. Жидкостное нанесение пленок фотоориентируемого азокрасителя AbA-2522 из водного раствора на поверхность фотоотвержденного ПЖК-слоя реализовано без использования буферного слоя, что является важным технологическим преимуществом. Экспериментально изучены возможности пространственно-поляризационного управления световыми пучками с помощью разработанных одно- и двумерных пропускающих дифракционных ЖК-структур. Результаты исследования перспективны с точки зрения создания ЖК-устройств для решения актуальных задач поляризационной фотоники.

Ключевые слова: дифракционная структура; текстурированная фотоориентация; полимеризуемый жидкий кристалл; оптическая анизотропия; ориентирующие пленки.

Благодарность. Работа выполнена при финансовой поддержке государственной программы научных исследований Республики Беларусь «Конвергенция-2020» (задание 3.03.5 «Разработка материалов и технологий создания микроструктурированных жидкокристаллических элементов для фотонных приложений»), а также Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (договор № Ф18КИ-025 «Новые высокочувствительные фотоориентирующие материалы и жидкокристаллические пространственные фазовые модуляторы на их основе, формируемые методом оптической адресации»).

Образец цитирования:

Кабанова ОС, Рушнова ИИ, Мельникова ЕА, Толстик АЛ, Муравский АлА, Муравский АнА, Хайнцманн Р. Двумерная дифракционная оптическая структура на основе текстурированной фотоориентации полимеризуемого жидкого кристалла. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика*. 2019;3:4–11.
<https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-3-4-11>

For citation:

Kabanova OS, Rushnova II, Melnikova EA, Tolstik AL, Muravsky AlA, Murauski AnA, Heintzmann R. Two-dimensional diffractive optical structure based on patterned photoalignment of polymerizable liquid crystal. *Journal of the Belarusian State University. Physics*. 2019;3:4–11. Russian.
<https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-3-4-11>

TWO-DIMENTIONAL DIFFRACTIVE OPTICAL STRUCTURE BASED ON PATTERNED PHOTOALIGNMENT OF POLYMERIZABLE LIQUID CRYSTAL

O. S. KABANOVA^a, I. I. RUSHNOVA^a, E. A. MELNIKOVA^a,
A. L. TOLSTIK^a, Al. A. MURAVSKY^b, An. A. MURAUSKI^b, R. HEINTZMANN^c

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

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

^cLeibniz Institute of Photonic Technology,
9 Albert-Einstein-Straße, Jena 07745, Germany

Corresponding author: O. S. Kabanova (kabanovaos@bsu.by)

This paper is devoted to the investigation of the diffraction characteristics of a multilayer optical structure, represented by a two-dimensional phase lattice formed in thin-film layers of nematic polymerizable liquid crystal (PLC). In order to generate periodically ordered liquid-crystal (LC) domains with dimensions of 5–10 μm , which form an anisotropic LC grating, the layer-by-layer patterned photoalignment technology of the water-soluble azo dye AbA-2522 was used. The possibilities of spatial-polarization control of light beams by means of developed one- and two-dimensional diffractive LC structures have been studied experimentally. Our results are promising from the point of view of development and creation of LC-devices for solving current problems of polarization photonics.

Keywords: diffractive structure; patterned photoalignment; polymerizable liquid crystal; optical anisotropy; alignment films.

Acknowledgements. This research has been financially supported by the State Program of Scientific Research of the Republic of Belarus «Convergence 2020» (assignment 3.03.5 «Development of materials and technologies for the creation of microstructured liquid crystal elements for photonic applications») and also by the Belarusian Republican Foundation for Fundamental Research (contract No. F18KI-025 «New highly sensitive photoalignment materials and liquid crystal spatial phase modulators based on them, formed by the optical addressing method»).

Введение

Успешное применение активно развивающихся технологий фотоориентации жидкокристаллических (ЖК) материалов на протяжении последнего десятилетия отмечено рядом выдающихся инновационных и научных достижений в различных областях фотоники [1]. В частности, микро- и нанотехнологии фотоориентации стимулируют колоссальный прогресс в сфере производства перестраиваемых фотонных ЖК-устройств [2–6], таких как оптические переключатели, текстурированные ретардеры, перестраиваемые аттенюаторы, фотонно-кристаллические волокна, фильтры, дифракционные решетки, вихревые фазовые пластинки, лазеры и др. В этой связи большой интерес исследовательских групп во всем мире привлекают технологии текстурированной фотоориентации в целях разработки многодоменных (локально-неоднородных) ЖК-структур, выполняющих различные оптические функции [7–12].

Фотоориентируемые материалы (фотоориентанты), используемые для задания граничных условий ориентации директора жидкого кристалла на поверхности, служат ключевым компонентом для реализации технологии текстурированной фотоориентации. Современные технологические разработки в данной области сосредоточены на синтезировании новых фотоориентантов (фотополимеров, азокрасителей и др.), позволяющих реализовать локальное управление ориентацией директора жидкого кристалла с высоким пространственным разрешением (порядка единиц микрон). На сегодняшний день перспективными оптическими материалами являются фотоориентируемые азокрасители, наносимые из водных растворов. Формирование многодоменной ориентации директора жидкого кристалла в данном случае реализуется посредством последовательных операций облучения тонкой пленки азокрасителя линейно-поляризованным излучением видимой области. Фотоориентируемые азокрасители обеспечивают высокую азимутальную энергию сцепления с ЖК-материалами (порядка 10^{-4} Дж/м²) при относительно малых значениях экспозиционной дозы (порядка 2,0 Дж/см²), что делает их привлекательными материалами для создания многослойных ЖК-структур с расширенными функциональными характеристиками.

Цель работы – экспериментальное исследование оптических свойств двумерной дифракционной ЖК-структуры, созданной на основе технологии послойной текстурированной фотоориентации водорастворимого азокрасителя.

Материалы и методы

Предлагаемая двумерная дифракционная оптическая структура представляет собой многослойную композицию, функциональную основу которой составляют два тонкопленочных слоя нематического полимеризуемого жидкого кристалла (ПЖК) с многодоменным распределением директора (рис. 1). Формирование дифракционных оптических структур, представляющих собой анизотропные фазовые ЖК-решетки, осуществлялось с помощью технологии текстурированной фотоориентации ПЖК. В качестве фотоориентируемого материала использовался водорастворимый азокраситель AbA-2522 [13; 14], разработанный и синтезированный в лаборатории «Материалы и технологии ЖК-устройств» Института химии новых материалов НАН Беларуси.

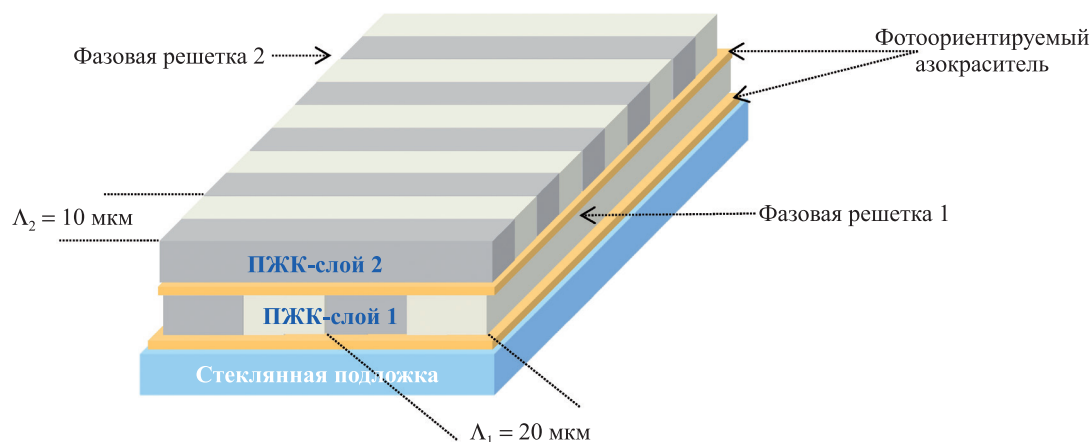


Рис. 1. Схема многослойной дифракционной оптической структуры на основе фазовых решеток в тонкопленочных слоях полимеризуемого жидкого кристалла

Fig. 1. Scheme of multilayer diffractive optical structure based on phase gratings formed within thin-film polymerizable liquid crystal layers

Ориентирующие свойства азокрасителя AbA-2522 формируются под действием облучения линейно-поляризованным светом с длиной волны 450 нм, причем направление наведенной ориентации перпендикулярно направлению поляризации активирующего излучения. Важно заметить, что наведенное направление ориентации в пленке азокрасителя может быть легко изменено впоследствии путем дополнительного облучения фотоориентанта активирующим излучением с отличным направлением поляризации. Данное обстоятельство позволяет реализовать на практике высокофункциональные ЖК-структуры с локально-неоднородным распределением директора. Другими важными преимуществами фотоориентируемого азокрасителя AbA-2522 являются высокая фоточувствительность (экспозиционная доза менее 2,0 Дж/см²), большая азимутальная энергия сцепления W_A (порядка 10⁻⁴ Дж/м²), фото- и термостабильность ориентирующих свойств. Кроме того, водорастворимые азокрасители – экологически чистые и безопасные материалы.

На рис. 2 приведены основные этапы процесса изготовления многослойной дифракционной ЖК-структуры с помощью технологии текстурированной фотоориентации азокрасителя. Жидкостное нанесение функциональной тонкой пленки (толщиной 20–50 нм) водорастворимого азокрасителя AbA-2522 на поверхность тщательно очищенной стеклянной подложки осуществлялось методом род-коутинга (Mayer-Rod coating). В целях формирования однородной планарной ориентации пленка азокрасителя облучалась линейно-поляризованным излучением светодиодной матрицы ($\lambda = 450$ нм, доза облучения $D_1 = 1,8$ Дж/см²). Далее производилось повторное облучение пленки азокрасителя активирующим излучением ($\lambda = 450$ нм, $D_2 = 9,0$ Дж/см²), характеризующимся перпендикулярным первоначальному направлению линейной поляризации, с использованием металлизированной амплитудной фотомаски (период структуры $\Lambda_1 = 20$ мкм), что позволило изменить направление ориентации молекул азокрасителя в немаскированных областях пленки на угол 90°. Двухстадийный процесс облучения с применением амплитудной фотомаски обеспечил формирование периодических ориентирующих структур на поверхности пленки азокрасителя.

Следующим этапом являлось нанесение на анизотропную пленку азокрасителя тонкого слоя ПЖК-материала RM257 (Merck, США). Фиксация полученной многодоменной ориентации в ПЖК-слое реализовывалась путем экспонирования последнего излучением ультрафиолетового (УФ) светодиода с длиной волны 365 нм.

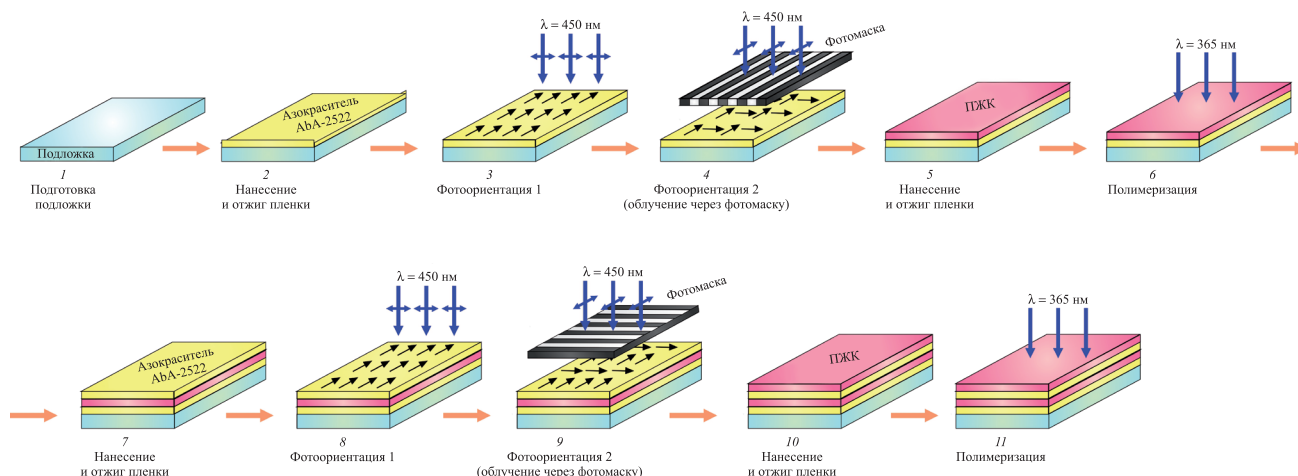


Рис. 2. Основные этапы (1–11) процесса изготовления многослойной дифракционной ЖК-структуры

Fig. 2. Key steps (1–11) of the manufacturing process of multilayered diffractive liquid crystal structure

Для используемого в работе ПЖК величина Δnd (Δn – оптическая анизотропия, d – толщина слоя) составляла 0,14 мкм. Таким образом, последовательное выполнение этапов 1–6 (см. рис. 2) позволило изготовить одномерную фазовую ЖК-решетку с периодом 20 мкм. Повторное выполнение этапов 2–6 обеспечило изготовление многослойной двумерной дифракционной ЖК-структуры с взаимно ортогональными направлениями штрихов. Следует отметить, что вторая пленка водорастворимого азокрасителя AbA-2522 наносилась на поверхность УФ-отвержденного ПЖК без буферного слоя (этап 7), поскольку выбранный материал характеризуется отсутствием необходимости использования агрессивных растворителей, что является важным технологическим преимуществом. Двухстадийное облучение второй пленки азокрасителя (этап 9) также реализовывалось с помощью амплитудной фотомаски ($\Lambda_2 = 10$ мкм), повернутой на угол 90° относительно ее положения на этапе 4.

Представленная технология позволяет в общем случае изготавливать многослойные дифракционные оптические структуры с различными профилями и (или) периодами фазовых решеток. На рис. 3 приведены микрофотографии пропускающей двумерной фазовой ЖК-решетки ($\Lambda_1 = 20$ мкм, $\Lambda_2 = 10$ мкм) в поляризованном свете, полученные с помощью поляризационного микроскопа. Изготовленный образец характеризуется бездефектной многодоменной ориентацией ПЖК, формирующей анизотропную фазовую решетку с прямоугольным профилем штриха.

Экспериментальное исследование дифракционных свойств разработанных фазовых ЖК-решеток осуществлялось с помощью установки, схема которой представлена на рис. 4. Линейно-поляризованное излучение гелий-неонового лазера с длиной волны 633 нм направлялось перпендикулярно плоскости ЖК-решетки. Для поворота плоскости поляризации входного излучения применялась полуволновая пластинка. Интенсивность дифрагированного излучения регистрировалась в xu -плоскости с помощью высокочувствительного фотодетектора, перемещаемого при помощи микроподвижек вдоль направления пространственных осей x и y . Для исследования состояния поляризации дифрагированных световых пучков использовался анализатор.

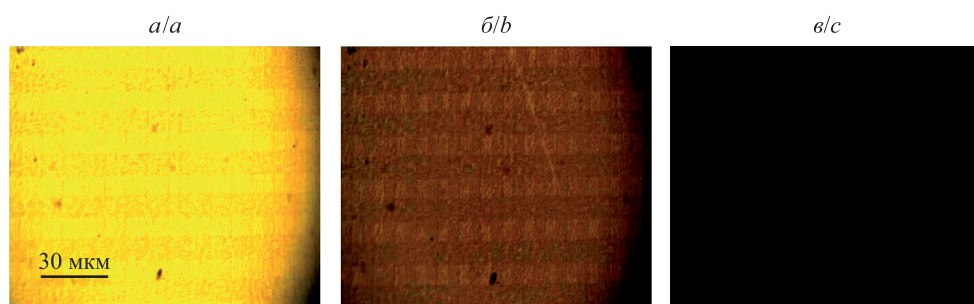


Рис. 3. Поляризационные микрофотографии двумерной дифракционной ЖК-решетки при различных углах между плоскостями пропускания поляризатора и анализатора:

$a - 0^\circ$; $b - 45^\circ$; $в - 90^\circ$

Fig. 3. Polarization microphotographs of a two-dimensional diffractive LC grating at different angles between the transmission planes of the polarizer and the analyzer:

$a - 0^\circ$; $b - 45^\circ$; $c - 90^\circ$

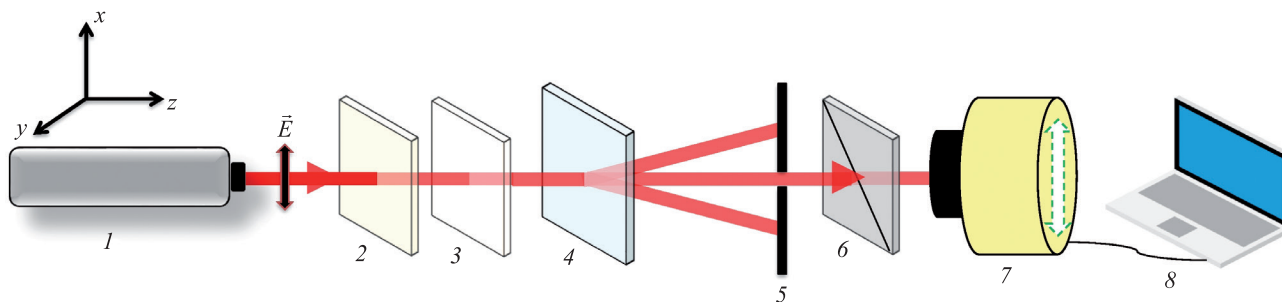


Рис. 4. Схема экспериментальной установки для исследования дифракционных свойств анизотропных пропускающих ЖК-решеток: 1 – гелий-неоновый лазер; 2 – светофильтр; 3 – полуволновая пластинка; 4 – фазовая ЖК-решетка; 5 – ирисовая диафрагма; 6 – анализатор; 7 – фотодетектор; 8 – персональный компьютер

Fig. 4. Scheme of experimental setup for investigation of diffraction properties of anisotropic LC gratings: 1 – He-Ne laser; 2 – filter; 3 – half-wave plate; 4 – LC phase grating; 5 – iris diaphragm; 6 – analyzer; 7 – photodetector; 8 – computer

Результаты и их обсуждение

На основе технологии текстурированной фотоориентации водорастворимого азокрасителя изготовлены одномерная (последовательное выполнение этапов 1–6 (см. рис. 2)) и двумерная (последовательное выполнение этапов 1–11 (см. рис. 2)) ЖК-решетки. На дифракционных картинах данных решеток (рис. 5) наблюдаются максимумы нулевого, 1-го порядка дифракции высокой интенсивности, максимумы 3-го и 5-го порядков дифракции относительно меньшей интенсивности, тогда как максимумы 2-го и 4-го порядков практически не визуализируются.



Рис. 5. Дифракционная картина одномерной (а) и двумерной (б) анизотропных фазовых ЖК-решеток

Fig. 5. Diffraction pattern of a one-dimensional (а) and two-dimensional (б) anisotropic LC phase gratings

Отсутствие дифракционных максимумов четного порядка является особенностью решеток прямоугольного профиля. Полученные экспериментальные значения дифракционной эффективности η исследуемых решеток характеризуют распределение энергии прошедшего света по порядкам дифракции:

$$\eta = \frac{I_m}{I_0} \cdot 100 \%,$$

где I_m – интенсивность света в m -м порядке дифракции; I_0 – интенсивность светового пучка, падающего на решетку.

Периодическая ЖК-структура (см. рис. 5, а) функционирует как одномерная фазовая дифракционная решетка с прямоугольным профилем штриха и эффективностью дифракции в 1-й порядок $\eta_1 \sim 3\text{--}7\%$. Характерной особенностью дифракционной картины двумерной ЖК-решетки (см. рис. 5, б) является наличие дифракционных максимумов нечетных порядков по двум координатам x, y в плоскости наблюдения (значение дифракционной эффективности в 1-м порядке: $\eta_1 \sim 3\text{--}7\%$).

Результаты экспериментального исследования состояния поляризации дифрагированных световых пучков приведены на рис. 6. Линейно-поляризованное излучение гелий-неонового лазера направлялось перпендикулярно плоскости ЖК-решетки. Рассмотрены три варианта состояния поляризации падающего

светового пучка: $\vec{E} \parallel O_x$, $\vec{E} \parallel O_y$, угол между $\vec{E}$ и O_y составляет 45° . Как и ожидалось, прошедший световой пучок (нулевой порядок дифракции) для всех рассмотренных случаев был поляризован в том же направлении, что и падающий пучок гелий-неонового лазера. Сохранялась поляризация и для дифрагированных пучков в случаях, когда падающий пучок был поляризован вдоль осей x и y . Ситуация менялась, когда вектор $\vec{E}$ составлял угол 45° с осью O_y . В этом случае поляризация дифрагированного пучка поворачивалась на 90° как для 1-го, так и 3-го порядка дифракции. Такое поведение состояния поляризации объясняется особенностью дифракции на поляризационных решетках, для которых дифракция в четные и нечетные порядки характеризуется ортогональными состояниями поляризации [15; 16].

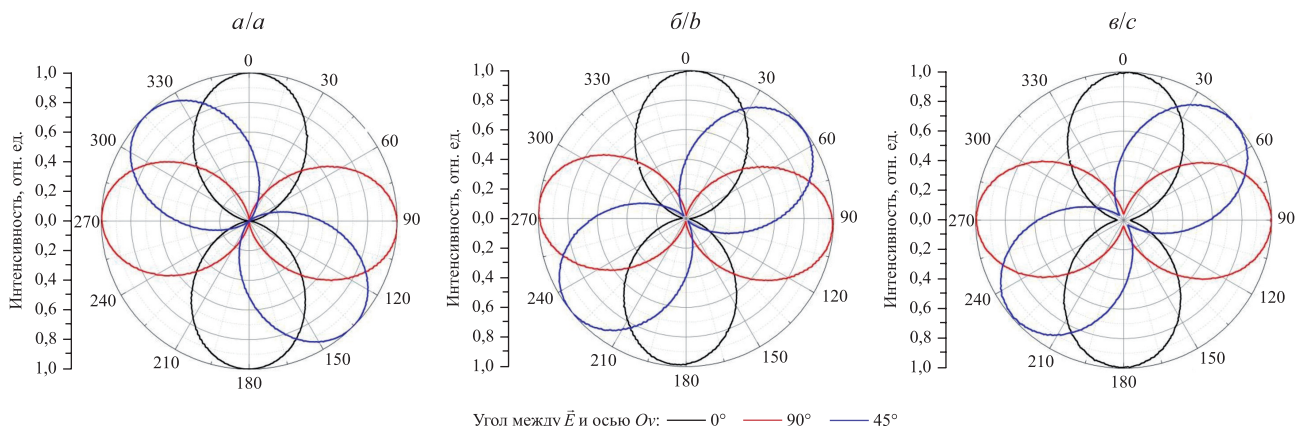


Рис. 6. Состояние поляризации дифрагированного света для фазовой ЖК-решетки.

Порядок дифракции: а – нулевой; б – 1-й; в – 3-й

Fig. 6. Polarization state of diffracted light for a LC phase grating.

Diffraction order: а – zero; б – 1st; в – 3rd

Заключение

Рассмотрена эффективная методика создания двумерных дифракционных ЖК-структур, основанная на технологии послойной текстурированной фотоориентации водорастворимого азокрасителя AbA-2522, характеризующегося обратимостью межмолекулярных связей в процессе фотоориентации. Изготовлены одно- и двумерные анизотропные фазовые ЖК-решетки для пространственно-поляризационного управления лазерным излучением. Результаты исследования дифракционных картин изготовленных анизотропных ЖК-решеток указывают на их соответствие решеткам с прямоугольным профилем штриха. Экспериментально измерены поляризационные диаграммы дифрагированного света для исследуемых ЖК-решеток. Областью практического применения полученных результатов является разработка и создание оптических устройств и систем для пространственно-поляризационного управления оптическим излучением.

Библиографические ссылки

1. Chigrinov VG, Kozenkov VM, Kwok H-S. *Photoalignment of Liquid Crystalline Materials: Physics and Applications*. Chichester: John Wiley & Sons; 2008. 248 p. DOI: 10.1002/9780470751800.
2. Chigrinov VG. Photoaligning and photopatterning – a new challenge in liquid crystal photonics. *Crystals*. 2013;3(4):149–162. DOI: 10.3390/cryst3010149.
3. Komar A, Tolstik A, Melnikova E, Muravsky A. Optical switch based on the electrically controlled liquid crystal interface. *Applied Optics*. 2015;54(16):5130–5135. DOI: 10.1364/AO.54.005130.
4. Melnikova E, Tolstik A, Rushnova I, Kabanova O, Muravsky A. Electrically controlled spatial-polarization switch based on patterned photoalignment of nematic liquid crystals. *Applied Optics*. 2016;55(23):6491–6495. DOI: 10.1364/AO.55.006491.
5. Rushnova I, Melnikova E, Tolstik A, Muravsky A. Electrically switchable photonic liquid crystal devices for routing of a polarized light wave. *Optics Communications*. 2018;413:179–183. DOI: 10.1016/J.OPTCOM.2017.12.029.
6. Rushnova II, Kabanova OS, Melnikova EA, Tolstik AL. Integrated-optical nematic liquid crystal switches: designing and operation features. *Nonlinear Phenomena in Complex Systems*. 2018;21(3):206–219.
7. Rutkowska KA, Chychłowski M, Kwaśny M, Ostromecka I, Piłka J, Laudyn UA. Light propagation in periodic photonic structures formed by photo-orientation and photo-polymerization of nematic liquid crystals. *Opto-Electronics Review*. 2017;25(2):118–126. DOI: 10.1016/J.OPELRE.2017.05.004.
8. Chigrinov VG, Kwok H-S, Hasebe H, Takatsu H, Takada H. Liquid-crystal photoaligning by azo dyes. *Journal of the Society for Information Display*. 2008;16(9):897–904. DOI: 10.1889/1.2976648.

9. Trofimova A, Mahilny U. Anisotropic gratings based on patterned photoalignment of reactive mesogen. *Journal of the Optical Society of America B*. 2014;31(5):948–952. DOI: 10.1364/JOSAB.31.000948.
10. Hu W, Srivastava A, Xu F, Sun J-T, Lin X-W, Cui H-Q, et al. Liquid crystal gratings based on alternate TN and PA photoalignment. *Optics Express*. 2012;20(5):5384–5391. DOI: 10.1364/OE.20.005384.
11. Оленская ИИ, Кабанова ОС, Мельникова ЕА. Жидкокристаллические волноводные элементы с различной топологией модуляции границы раздела рефрактивных областей. *Известия Самарского научного центра Российской академии наук*. 2015;17(2):87–91.
12. Zhao CX, Fan F, Du T, Chigrinov VG, Kwok HS. Multilayer photo-aligned thin-film structure for polarizing photonics. *Optics Letters*. 2015;40(13):2993–2996. DOI: 10.1364/OL.40.002993.
13. Mikulich V, Murawski A, Muravsky A, Agabekov V. Influence of methyl substituents on azo-dye photoalignment in thin films. *Journal of Applied Spectroscopy*. 2016;83(1):115–120. DOI: 10.1007/s10812-016-0252-y.
14. Mikulich V, Murauski A, Muravsky A, Agabekov V, Bezruchenko V. Waterproof material for liquid crystals photoalignment based on azo dyes. *Journal of the Society for Information Display*. 2014;22(1):199–203. DOI: 10.1002/jsid.238.
15. Ормачева О, Толстик АЛ. Поляризационное многоволновое взаимодействие в растворах лазерных красителей. *Известия Российской академии наук. Серия физическая*. 2005;69(8):1144–1146.
16. Gorbach DV, Nazarov SA, Romanov OG, Tolstik AL. Polarization transformation of singular light beams upon four- and six-wave mixing. *Nonlinear Phenomena in Complex Systems*. 2015;18(2):149–156.

References

1. Chigrinov VG, Kozenkov VM, Kwok H-S. *Photoalignment of Liquid Crystalline Materials: Physics and Applications*. Chichester: John Wiley & Sons; 2008. 248 p. DOI: 10.1002/9780470751800.
2. Chigrinov VG. Photoaligning and photopatterning – a new challenge in liquid crystal photonics. *Crystals*. 2013;3(4):149–162. DOI: 10.3390/cryst3010149.
3. Komar A, Tolstik A, Melnikova E, Muravsky A. Optical switch based on the electrically controlled liquid crystal interface. *Applied Optics*. 2015;54(16):5130–5135. DOI: 10.1364/AO.54.005130.
4. Melnikova E, Tolstik A, Rushnova I, Kabanova O, Muravsky A. Electrically controlled spatial-polarization switch based on patterned photoalignment of nematic liquid crystals. *Applied Optics*. 2016;55(23):6491–6495. DOI: 10.1364/AO.55.006491.
5. Rushnova I, Melnikova E, Tolstik A, Muravsky A. Electrically switchable photonic liquid crystal devices for routing of a polarized light wave. *Optics Communications*. 2018;413:179–183. DOI: 10.1016/J.OPTCOM.2017.12.029.
6. Rushnova II, Kabanova OS, Melnikova EA, Tolstik AL. Integrated-optical nematic liquid crystal switches: designing and operation features. *Nonlinear Phenomena in Complex Systems*. 2018;21(3):206–219.
7. Rutkowska KA, Chychłowski M, Kwaśny M, Ostromecka I, Piłka J, Laudyn UA. Light propagation in periodic photonic structures formed by photo-orientation and photo-polymerization of nematic liquid crystals. *Opto-Electronics Review*. 2017;25(2):118–126. DOI: 10.1016/J.OPELRE.2017.05.004.
8. Chigrinov VG, Kwok H-S, Hasebe H, Takatsu H, Takada H. Liquid-crystal photoaligning by azo dyes. *Journal of the Society for Information Display*. 2008;16(9):897–904. DOI: 10.1889/1.2976648.
9. Trofimova A, Mahilny U. Anisotropic gratings based on patterned photoalignment of reactive mesogen. *Journal of the Optical Society of America B*. 2014;31(5):948–952. DOI: 10.1364/JOSAB.31.000948.
10. Hu W, Srivastava A, Xu F, Sun J-T, Lin X-W, Cui H-Q, et al. Liquid crystal gratings based on alternate TN and PA photoalignment. *Optics Express*. 2012;20(5):5384–5391. DOI: 10.1364/OE.20.005384.
11. Olenskaya II, Kabanova OS, Melnikova EA. [Liquid crystal waveguide elements with different topology of modulation of interface refractive areas]. *Izvestiya Samarskogo nauchnogo tsentra Rossiiskoi akademii nauk*. 2015;17(2):87–91. Russian.
12. Zhao CX, Fan F, Du T, Chigrinov VG, Kwok HS. Multilayer photo-aligned thin-film structure for polarizing photonics. *Optics Letters*. 2015;40(13):2993–2996. DOI: 10.1364/OL.40.002993.
13. Mikulich V, Murawski A, Muravsky A, Agabekov V. Influence of methyl substituents on azo-dye photoalignment in thin films. *Journal of Applied Spectroscopy*. 2016;83(1):115–120. DOI: 10.1007/s10812-016-0252-y.
14. Mikulich V, Murauski A, Muravsky A, Agabekov V, Bezruchenko V. Waterproof material for liquid crystals photoalignment based on azo dyes. *Journal of the Society for Information Display*. 2014;22(1):199–203. DOI: 10.1002/jsid.238.
15. Ormachea O, Tolstik AL. [Polarization multiwave mixing in solutions of laser dyes]. *Izvestiya Rossiiskoi akademii nauk. Seriya fizicheskaya*. 2005;69(8):1144–1146. Russian.
16. Gorbach DV, Nazarov SA, Romanov OG, Tolstik AL. Polarization transformation of singular light beams upon four- and six-wave mixing. *Nonlinear Phenomena in Complex Systems*. 2015;18(2):149–156.

Статья поступила в редколлегию 28.08.2019.
Received by editorial board 28.08.2019.

Авторы:

Ольга Сергеевна Кабанова — кандидат физико-математических наук; научный сотрудник лаборатории нелинейной оптики и спектроскопии кафедры лазерной физики и спектроскопии физического факультета.

Authors:

Olga S. Kabanova, PhD (physics and mathematics); researcher at the laboratory of nonlinear optics and spectroscopy, department of laser physics and spectroscopy, faculty of physics.
kabanovaos@bsu.by
<http://orcid.org/0000-0001-5100-9708>

Ирина Ивановна Рушнова – кандидат физико-математических наук; научный сотрудник лаборатории нелинейной оптики и спектроскопии кафедры лазерной физики и спектроскопии физического факультета.

Елена Александровна Мельникова – кандидат физико-математических наук, доцент; доцент кафедры лазерной физики и спектроскопии физического факультета.

Алексей Леонидович Толстик – доктор физико-математических наук, профессор; заведующий кафедрой лазерной физики и спектроскопии физического факультета.

Александр Анатольевич Муравский – кандидат физико-математических наук, доцент; заведующий лабораторией «Материалы и технологии ЖК-устройств».

Анатолий Александрович Муравский – кандидат физико-математических наук; ведущий научный сотрудник лаборатории «Материалы и технологии ЖК-устройств».

Райнер Хайнцманн – доктор физических наук, профессор; руководитель отдела микроскопии.

Iryna I. Rushnova, PhD (physics and mathematics); researcher at the laboratory of nonlinear optics and spectroscopy, department of laser physics and spectroscopy, faculty of physics.
rushnova@bsu.by

<http://orcid.org/0000-0002-1049-1953>

Elena A. Melnikova, PhD (physics and mathematics), docent; associate professor at the department of laser physics and spectroscopy, faculty of physics.

melnikova@bsu.by

<http://orcid.org/0000-0001-5097-5832>

Alexei L. Tolstik, doctor of science (physics and mathematics), full professor; head of the department of laser physics and spectroscopy, faculty of physics.

tolstik@bsu.by

<http://orcid.org/0000-0003-4953-4890>

Alexander A. Muravsky, PhD (physics and mathematics), docent; head of the laboratory «Materials and technologies of LC devices».

alexander.muravsky@ichnm.basnet.by

<http://orcid.org/0000-0003-0652-7391>

Anatoli A. Murauski, PhD (physics and mathematics); leading researcher at the laboratory «Materials and technologies of LC devices».

anatoli_murauski@ichnm.basnet.by

<http://orcid.org/0000-0002-9755-7790>

Rainer Heintzmann, doctor of science (physics), full professor; head of the microscopy research unit.

rainer.heintzmann@leibniz-ipht.de

<http://orcid.org/0000-0002-4950-1936>

УДК 621.373.8

ВЛИЯНИЕ РАЗЛИЧНЫХ ИСТОЧНИКОВ ФЛУКТУАЦИЙ НА СТАТИСТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ВЫХОДНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ПОВЕРХНОСТНО ИЗЛУЧАЮЩИХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ЛАЗЕРОВ

Л. И. БУРОВ¹⁾, А. С. ГОРБАЦЕВИЧ¹⁾, П. М. ЛОБАЦЕВИЧ¹⁾

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

На основе статистического моделирования проведен численный анализ влияния различных факторов (флуктуации интенсивности спонтанного испускания, концентрации неравновесных носителей, плотности инжекционного тока) на статистические характеристики выходного излучения поверхностно излучающих полупроводниковых лазеров в области поляризационной неустойчивости. В этой области эффект флуктуаций проявляется максимальным образом, что позволяет сделать обоснованные выводы об относительном влиянии различных параметров. В теории полупроводниковых лазеров принято считать, что доминирующим источником флуктуаций служат флуктуации интенсивности спонтанного испускания, а всеми остальными источниками можно пренебречь. Анализ данных результатов статистического моделирования показывает, что такое утверждение излишне жесткое и данный источник не является доминирующим. Более того, как показали результаты моделирования, основной вклад определяется флуктуациями концентрации неравновесных носителей, которые могут быть связаны не только с флуктуациями спонтанного испускания. Именно учет флуктуаций концентрации носителей, которые приводят к флуктуациям коэффициента усиления, позволяет получить весь набор зависимостей, которые наблюдаются

Образец цитирования:

Буров ЛИ, Горбачевич АС, Лобацевич ПМ. Влияние различных источников флуктуаций на статистические характеристики выходного излучения поверхностно излучающих полупроводниковых лазеров. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика*. 2019;3:12–21. <https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-3-12-21>

For citation:

Burov LI, Gorbachevich AS, Labatsevich PM. The influence various sources of fluctuation on the statistical parameters of the vertical cavity surface emitting lasers output radiation. *Journal of the Belarusian State University. Physics*. 2019;3:12–21. Russian. <https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-3-12-21>

Авторы:

Леонид Иванович Буров – кандидат физико-математических наук, доцент; доцент кафедры общей физики физического факультета.

Александр Сергеевич Горбачевич – кандидат физико-математических наук; доцент кафедры общей физики физического факультета.

Павел Михайлович Лобацевич – магистрант кафедры общей физики физического факультета. Научный руководитель – Л. И. Буров.

Authors:

Leonid I. Burov, PhD (physics and mathematics), docent; associate professor at the department of general physics, faculty of physics.

burov@bsu.by

Alexander S. Gorbachevich, PhD (physics and mathematics); associate professor at the department of general physics, faculty of physics.

alex.gorbachevich@gmail.com

Pavel M. Labatsevich, master's degree student at the department of general physics, faculty of physics.

pavel.labatsevich@mail.ru

экспериментально. Такой результат нельзя непосредственно связать с особенностями принятой модели, тем более что в ней спонтанное излучение рассматривается как существенный фактор и, если бы его влияние было действительно доминирующим, это обязательно сказалось бы на результатах статистического моделирования. Поэтому полученные данные позволяют усомниться в главенствующей роли флуктуаций интенсивности спонтанного излучения в процессе формирования статистических характеристик выходного излучения и принять во внимание флуктуации концентрации неравновесных носителей.

Ключевые слова: полупроводниковый лазер; поляризация; флуктуации.

THE INFLUENCE VARIOUS SOURCES OF FLUCTUATION ON THE STATISTICAL PARAMETERS OF THE VERTICAL CAVITY SURFACE EMITTING LASERS OUTPUT RADIATION

L. I. BUROV^a, A. S. GORBATSEVICH^a, P. M. LABATSEVICH^a

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

Corresponding author: P. M. Labatsevich (pavel.lobatsevich@mail.ru)

Based on statistical modeling, a numerical analysis of the effects exerted by different factors (fluctuations of the spontaneous emission intensity, nonequilibrium carrier concentration, injection current density) on the statistical characteristics of radiation at the output of surface emitting semiconductor lasers in the region of polarization instability has been performed. In this region the effect of fluctuations is maximal, offering the possibility for substantiated conclusions about relative effects of the parameters. In a theory of semiconductor lasers it is thought that the intensity fluctuations of spontaneous emission represent the dominant source of fluctuations, whereas all other sources may be neglected. As demonstrated by the results of conducted statistical modeling, this statement is too rigorous; moreover, such a source is not dominant. Taking into consideration fluctuations of the carrier concentration, which result in fluctuations of the amplification factor, we can derive a complete set of the relationships observed experimentally. This result cannot be associated with features our model because in our theory spontaneous emission is a significant factor. If the influence of spontaneous emission would be the dominant factor, it would affect the simulation results. The obtained data make it possible to doubt the key role of the spontaneous emission intensity fluctuations in the process of statistical characteristics formation for the output radiation and to take into account fluctuations of the nonequilibrium carrier concentration.

Keywords: semiconductor laser; polarization; fluctuations.

Введение

Эффект переключения поляризации (ПП) в поверхностно излучающих полупроводниковых лазерах (VCSEL), связанный с резким переключением выходного излучения с одной линейной поляризации на ортогональную при плавном изменении инжекционного тока, хорошо известен [1] и широко используется как для исследования внутренней динамики полупроводниковых лазеров, так и в разнообразных прикладных сферах. Более того, область ПП является областью сильной неустойчивости, в которой флуктуации играют существенную роль в определении режимов работы лазера и характеристик его выходного излучения [2]. Поэтому важным представляется вопрос об источниках флуктуаций и их относительном вкладе в окончательные эффекты. Для полупроводниковых лазеров выделяют три основных источника: флуктуации спонтанного излучения, концентрации плотности неравновесных носителей и плотности инжекционного тока. Однако начиная с классических работ Ч. Генри [3] общепринятым считается, что вся статистика в полупроводниковых лазерах определяется флуктуациями спонтанного излучения. В то же время именно для VCSEL в области ПП обнаружено, что подобная доминанта не позволяет объяснить получающиеся зависимости [4].

Если более детально рассмотреть статистическую природу спонтанного излучения, то она проявляется в двух аспектах. Во-первых, сам процесс спонтанного излучения носит случайный характер, что в первую очередь отражается на ориентации поляризации испускаемого кванта. Однако доминирующий подход к описанию основан на методе поляризационных мод (МПМ), в котором используются только две ортогональные базовые поляризации с разложением любой иной поляризации по базовым. С точки зрения статистики это означает определенное усреднение и, следовательно, снижение эффективности воздействия данного механизма. Во-вторых, имеет место случайное распределение актов

испускания по объему активной среды. Однако в рамках точечных моделей, которые используются в подавляющем большинстве случаев, происходит усреднение по объему резонатора, что нивелирует данный эффект, если только нет иных механизмов флуктуации плотности неравновесных носителей. Интересным является и тот факт, что в наиболее популярном варианте МПМ (model SFM) в его исходной формулировке [5] спонтанное излучение вообще отсутствует и лишь позднее появляется в качестве чисто ленжевенских членов в соответствующих уравнениях, которые по своей сути есть подгоночные параметры.

Таким образом, вышесказанное указывает на то, что нет достаточных физических оснований считать спонтанное излучение доминирующим фактором, определяющим статистические характеристики полупроводниковых лазеров вообще и VCSEL в частности. Необходимо исследовать весь набор источников и определить роль каждого из факторов в формировании окончательного результата, что и является основной целью данной работы. Область ПП выбрана именно для получения наиболее существенных эффектов.

Теоретическая модель

В качестве базовой служит модель, которая последовательно развивалась авторами и показала прекрасную работоспособность применительно к описанию поляризационных эффектов в VCSEL [6; 7]. Более того, эта модель использует представление поляризованного излучения в виде некогерентного набора большого числа линейно-поляризованных компонент с разной ориентацией вектора поляризации (метод поляризационных компонент, МПК), что позволяет детально учесть статистический характер спонтанного испускания. Что касается двух оставшихся источников флуктуаций, то собственные флуктуации инжекционного тока обычно малы и для выяснения влияния такого фактора применяют внешний источник флуктуаций, а в случае флуктуаций концентрации неравновесных носителей заряда N их можно моделировать за счет флуктуаций плотности инжекционного тока [8; 9]. Это связано с тем, что изменения N порождают соответствующие изменения коэффициента усиления, которые можно моделировать путем вариации плотности инжекционного тока. Подобное допущение позволяет использовать простую точечную модель лазера.

Итак, применим модель, детально описанную в работе [7], с параметрами, представленными в общем виде. Тогда систему уравнений для ориентационной компоненты плотности фотонов $S(\psi)$ в резонаторе и концентрации неравновесных носителей заряда N можно записать как

$$\begin{aligned} \frac{dS(\psi)}{dt} &= \Gamma\beta \frac{N}{\pi\tau_N} - v(\Gamma G(\psi) - \rho(\psi) - k_r(\psi))S(\psi), \\ \frac{dN}{dt} &= \frac{j}{ed} - v \int G(\psi)S(\psi)d\psi - \frac{N}{\tau_N}, \end{aligned} \quad (1)$$

где ψ – угол, определяющий ориентацию вектора поляризации компоненты плотности фотонов $S(\psi)$ относительно выделенной оси; Γ – фактор оптического ограничения; β – доля фотонов спонтанного излучения, попадающая в моду генерации; τ_N – время жизни неравновесных носителей заряда; v – скорость света в активном слое; j – плотность инжекционного тока; e – заряд электрона; d – толщина активного слоя; $G(\psi)$, $\rho(\psi)$, $k_r(\psi)$ – ориентационные компоненты коэффициентов усиления, внутренних потерь и потерь на зеркалах резонатора соответственно, которые имеют вид [7]

$$\begin{aligned} G(\psi) &= g_0(N - N_{tr}) \left(1 + k_0 \left(1 - \frac{j}{j_{ps}} \right) \cos 2\psi \right), \\ \rho(\psi) &= \rho_0 \left(1 + k_1 \left(1 - \frac{j}{j_{ps1}} \right) \cos 2(\psi - \psi_0) \right), \\ k_r(\psi) &= \ln \frac{1}{R_{10}R_{20}} - k_2 \cos 2\psi, \end{aligned}$$

здесь N_{tr} – концентрация прозрачности; j_{ps} – значение плотности инжекционного тока, соответствующее точке поляризационного переключения; j_{ps1} – плотность тока инжекции, соответствующая нулевой анизотропии коэффициента потерь; ψ_0 – разность фаз между направлением максимальной анизотропии коэффициента потерь и коэффициента усиления; R_{10} , R_{20} – средние по ориентации значения коэффициентов отражения зеркал.

Детальное определение всех функций и параметров приведено в работе [7], мы же остановимся на дополнениях к сформулированной системе уравнений, связанных с введением в рассмотрение флуктуаций.

Статистичность спонтанного испускания заключается в том, что фотон может попадать в компоненту произвольной поляризации. Вторым фактором влияния спонтанного испускания является то, что суммарное количество фотонов в каждый момент времени может быть различным. Но второй фактор оказывает существенно меньшее влияние, так как количество испущенных фотонов (выше порога) является значительной величиной, на которой такие флуктуации практически незаметны. Поэтому в уравнениях (1) мы заменим члены, определяющие вклад спонтанного излучения, следующим образом:

$$L(\psi) = L_{S(N)}(1 + f_\psi(\epsilon)),$$

где $L_S = \Gamma\beta \frac{N}{\pi\tau_N}$, $L_N = \frac{N}{\tau_N}$; $f_\psi(\epsilon)$ – функция нормального распределения случайной величины с заданными средним значением и дисперсией. При сохранении полного числа фотонов среднее значение должно быть нулевым, однако и для него можно выбрать нормальное распределение, так что полное число фотонов будет меняться для разных реализаций.

Поскольку вторым фактором является статистичность распределения плотности инжекционного тока, то выбор функции становится тривиальным:

$$J(\psi) = J_0(1 + \epsilon(\psi)),$$

где $\epsilon(\psi)$ – случайная функция, конкретный вид которой будет описан ниже.

Численные решения строились с использованием значений величин, характерных для полупроводниковых структур типа GaAs, которые обычно обеспечивают генерацию в области 850–950 нм. Сама процедура численного расчета проводилась следующим образом. Для выбранного набора параметров рассчитывалась ватт-амперная характеристика (ВАХ) лазера без учета флуктуаций параметра $L(\psi)$. По данным ВАХ находилась примерная величина порогового тока – значение, с которого начинается резкий рост выходной интенсивности. Затем рассчитывалась зависимость степени поляризации выходного излучения от тока инжекции, причем параметры анизотропии компонент коэффициента усиления подбирались таким образом, чтобы точка ПП (значение инжекционного тока, при котором степень поляризации выходного излучения равна нулю) составляла примерно 150 % от порогового тока. На практике, как правило, это обеспечивает одномодовый режим VCSEL.

Режим работы был выбран квазистационарным, т. е. сначала ток достигал рабочего значения, а потом «включались» флуктуации интенсивности спонтанного испускания. Флуктуационное ориентационное распределение интенсивности спонтанного испускания изменялось через 10 нс. Для каждого распределения снимались основные характеристики лазерного излучения. Таким образом для каждого численного эксперимента получали данные, состоящие из 10^5 точек. На основе этих данных строились гистограммы, по набору которых выявлялись основные закономерности. При численном моделировании основными параметрами выступали величины рабочего тока j , анизотропии коэффициента усиления K_0 , вклада спонтанного испускания в моду генерации β и дисперсия случайной величины σ .

Результаты численного моделирования

Первоначально моделировалась ситуация с доминантой одного из источников флуктуаций, поскольку это позволяет проверить корректность исходной модели на основе заложенных физических явлений, результат которых можно качественно предсказать. С другой стороны, необходимо определить области параметров системы, в которых влияние данного источника флуктуаций является наиболее существенным, что важно при анализе поведения системы с участием обоих источников флуктуаций.

Естественным представляется первоначальный выбор спонтанного испускания как основного источника флуктуаций, поскольку это одна из основных гипотез, подлежащих проверке. Логичным является и выбор значения инжекционного тока вблизи точки ПП (значение тока, при котором степень поляризации выходного излучения равна нулю), поскольку именно в этой области флуктуации спонтанного излучения как процесса, запускающего процесс генерации, должны оказывать наибольшее влияние. Следует отметить, что положение точки ПП зависит от динамики процесса включения тока инжекции [10] и, хотя эта зависимость весьма слабая для квазистационарных режимов, говорить о точном определении точки ПП не совсем корректно. Для нашей серии модельных расчетов исходя из параметров режимов работы системы значение точки ПП принято равным 2,1 мА.

Отметим, что функции распределения выходной интенсивности близки к нормальным, но обладают аномально низкой (по сравнению с наблюдаемыми экспериментально) величиной дисперсии, в то время как для степени поляризации имеет место вполне приемлемая картина (рис. 1), вертикальные оси

представляют количество N реализаций данного значения интенсивности или степени поляризации, нормированное на максимальное число реализаций $N_{\max}$. Этот результат не является неожиданным, поскольку еще в [11] было показано, что малая дисперсия распределений связана с достаточно большим числом поляризационных компонент. В этом случае даже высокая величина дисперсии распределения в отдельной компоненте нивелируется вследствие большого числа статистически независимых компонент. Более того, проведенные расчеты подтвердили вывод [11] о том, что дисперсия распределений резко возрастает при уменьшении числа компонент (ниже 10) и достигает максимума для двух компонент, что отвечает случаю МПМ, причем ее значения примерно соответствуют тому диапазону, который получается при прямом использовании МПМ. На основе полученных результатов было выбрано число компонент, равное 70. Оно достаточно велико, чтобы выявить тонкие эффекты, если таковые будут наблюдаться, и в то же время не создает существенных проблем в численных расчетах.

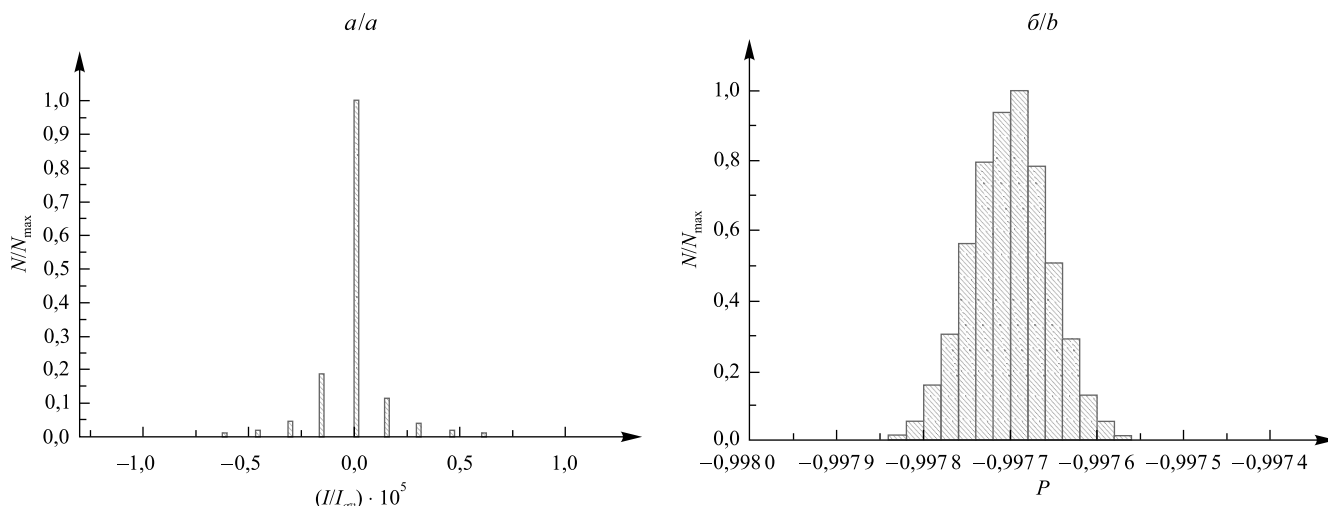


Рис. 1. Гистограммы распределения относительной интенсивности (а) и степени поляризации (б) при $K_0 = -0.01$, $\beta = 10^{-4}$, $j = 1.90$ мА, $\sigma = 0.2$

Fig. 1. The relative intensity (a) and polarization degree (b) distribution histograms with the value of parameters $K_0 = -0.01$, $\beta = 10^{-4}$, $j = 1.90$ mA, $\sigma = 0.2$

Полученные anomalно низкие значения дисперсий для распределений интенсивности выходного излучения могут поставить вопрос о корректности используемой модели. Однако гистограммы распределения степени поляризации не только дают значения дисперсии, близкие к наблюдаемым, но и демонстрируют зависимости, легко укладывающиеся в механизмы формирования поляризованного излучения. Например, на рис. 2 для сравнения приведены гистограммы величин тока вблизи точки ПП (см. рис. 2, а) и на краю области ПП (см. рис. 2, б). Во втором случае дисперсия более чем на порядок ниже, что и должно наблюдаться не только из-за механизма формирования, но и по простой логике процесса (точка ПП – точка максимальной неустойчивости).

Влияние спонтанного излучения на функции распределения степени поляризации легко проследить по величине вклада этого процесса β в моду генерации (рис. 3). При увеличении β распределение сдвигается в область меньших значений и сопровождается ростом дисперсии. Такое поведение вполне понятно: поскольку спонтанное излучение в полупроводниковых лазерах слабо поляризовано, то увеличение его вклада ведет к деполяризации лазерного излучения.

Совершенно обратный эффект, как и следовало ожидать, несет рост анизотропии коэффициента усиления – сужение распределения и сдвиг среднего значения в сторону максимальных значений (рис. 4).

Флуктуации спонтанного излучения, казалось бы, вполне закономерным образом проявляются в функциях распределения поляризации, однако это не совсем так. Действительно, даже при наличии 100 % флуктуаций гистограммы степени поляризации имеют вид нормального распределения с повышенной дисперсией при моделировании вблизи точки ПП (рис. 5). Увеличение дисперсии флуктуаций спонтанного испускания приводит к росту дисперсии гистограммы степени поляризации и смещению среднего значения степени поляризации (это вполне согласуется с идеологией, описанной выше), но такое уширение гистограмм для степени поляризации не согласуется с тем, что обычно наблюдается экспериментально. При больших флуктуациях система статистически изменяется (перескакивает) между состояниями с предельными значениями степени поляризации (polarization hopping [8]). С точки зрения функции распределения это переход от нормального распределения к функции с двумя максимумами в области предельных величин, причем при значениях значительно меньших, чем для зависимостей, приведенных на рис. 5.

Таким образом, можно окончательно утверждать, что флуктуации спонтанного излучения влияют на параметры лазерной системы, но не могут рассматриваться как определяющий фактор [12]. Поэтому перейдем ко второму источнику флуктуаций, связанному с поведением плотности неравновесных носителей, которое будем моделировать через флуктуации инжекционного тока.

Вернемся к выбору случайной функции $\varepsilon(\psi)$, поскольку существенным вопросом остается зависимость этой функции от угла ψ . Действительно, нужна физическая причина, которая позволила бы считать распределение плотности тока отличающимся от аксиально-симметричного относительно оси резонатора VCSEL. Фактически эта проблема прямо связана с ориентационной анизотропией коэффициента усиления VCSEL, которая непосредственно (феноменологически) заложена в МПК. Анализ указанной проблемы детально проведен в [6], а здесь лишь отметим, что эта анизотропия может меняться за счет нагрева при протекании тока. Поэтому нарушение аксиальной симметрии в распределении тока может сопровождаться изменением анизотропии коэффициента усиления. Кроме того, для

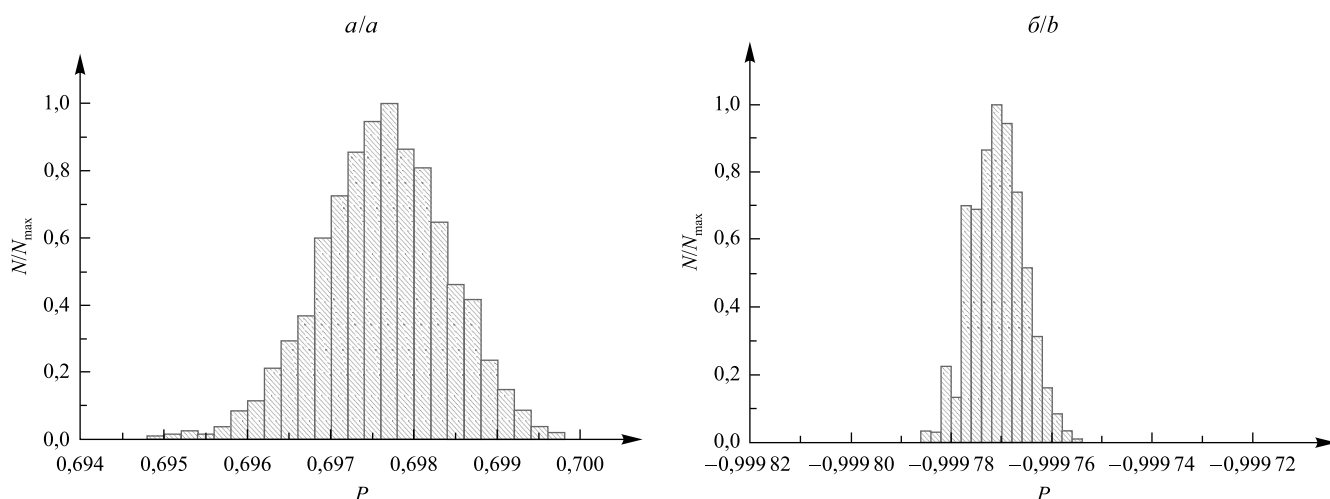


Рис. 2. Гистограммы распределения степени поляризации при $\beta = 10^{-4}$, $K_0 = -0.1$, $\sigma = 0.2$ для различных значений рабочего тока j : а – 2,1001 мА; б – 1,90 мА

Fig. 2. The polarization degree distribution histograms with other parameters equal $\beta = 10^{-4}$, $K_0 = -0.1$, $\sigma = 0.2$ for different value of injection current j : а – 2.1001 mA; б – 1.90 mA

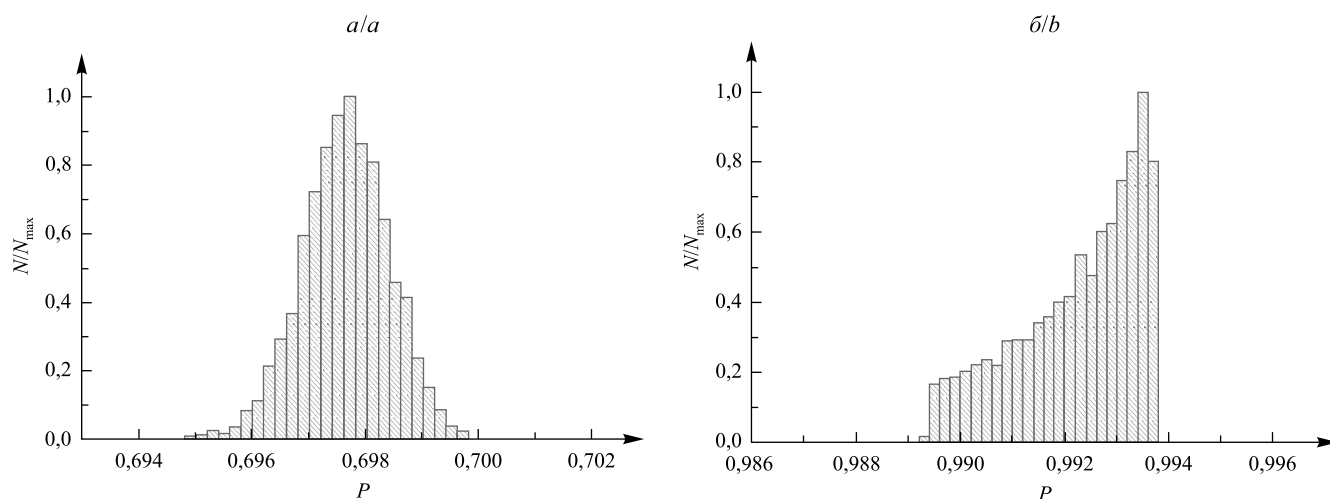


Рис. 3. Гистограммы распределения степени поляризации при $K_0 = -0.1$, $j = 2.1001$ мА, $\sigma = 0.2$ для различных значений спонтанного испускания β : а – 10^{-4} ; б – 10^{-6}

Fig. 3. The polarization degree distribution histograms with other parameters equal $K_0 = -0.1$, $j = 2.1001$ mA, $\sigma = 0.2$ for different value of spontaneous emission β : а – 10^{-4} ; б – 10^{-6}

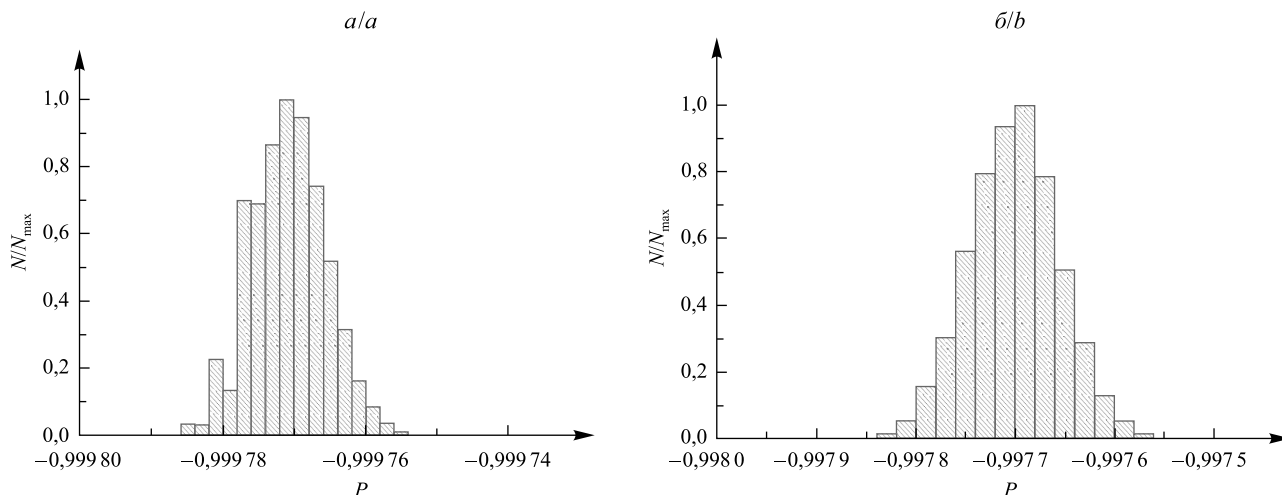


Рис. 4. Гистограммы распределения степени поляризации при $\beta = 10^{-4}$, $j = 1,90$ мА, $\sigma = 0,2$ для различных значений анизотропии коэффициента усиления: $K_0 = -0,1$ (а) и $K_0 = -0,01$ (б)
Fig. 4. The polarization degree distribution histograms with other parameters equal $\beta = 10^{-4}$, $j = 1,90$ mA, $\sigma = 0,2$ for different value of gain anisotropy: $K_0 = -0,1$ (a) and $K_0 = -0,01$ (b)

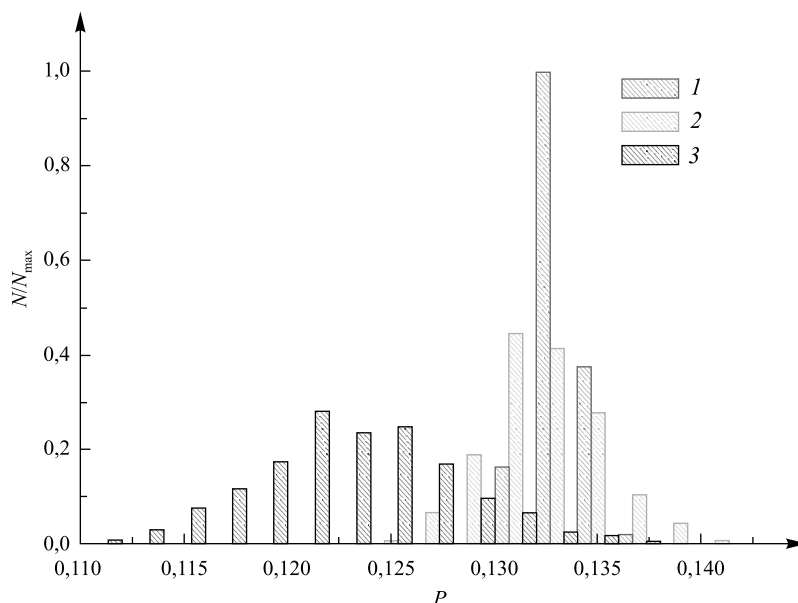


Рис. 5. Гистограммы распределения степени поляризации при $\beta = 10^{-4}$, $j = 2,1001$ мА, $K_0 = -0,01$ для различных величин дисперсии флуктуаций спонтанного испускания: $\sigma = 0,2$ (1); $\sigma = 0,5$ (2); $\sigma = 1$ (3)
Fig. 5. The polarization degree distribution histograms with other parameters equal $\beta = 10^{-4}$, $j = 2,1001$ mA, $K_0 = -0,01$ for different value of spontaneous emission dispersion: $\sigma = 0,2$ (1); $\sigma = 0,5$ (2); $\sigma = 1$ (3)

улучшения проводимости структур VCSEL области брэгговских отражателей обычно допируют дополнительными примесями, увеличивая электронную или дырочную проводимость этих областей [13]. Другими словами, распределение плотности инжекционного тока вполне может терять аксиальную симметрию вследствие целого ряда причин. Однако необходимо подчеркнуть, что флуктуации плотности тока несут нагрузку в большей степени как модельный фактор. Поэтому и его флуктуации мы можем рассматривать гораздо большими, чем это определяется чисто физическими факторами. Более того, численные оценки показывают, что изменению инжекционного тока на 20 % соответствуют изменения плотности неравновесных носителей, не превышающие 2 %. Это принципиально соответствует

общей теории полупроводниковых лазеров, в которой в области выше порога концентрация неравновесных носителей остается практически постоянной. Поэтому будем определять случайную функцию $\varepsilon(\psi)$ с помощью оператора

$$\varepsilon(\psi) = \text{rnd_gauss}(\psi, 0, \sigma),$$

задающего распределение Гаусса с нулевым математическим ожиданием и дисперсией σ .

Отметим еще раз тот факт (а он чрезвычайно важен при дальнейшем анализе), что при численном решении точные значения инжекционного тока, соответствующего точке ПП, получить сложно, поэтому запись в тексте «в точке ПП» нужно понимать как «вблизи точки ПП», что может явно проявляться в расчете поляризационных характеристик.

Среди полученных результатов сразу же отметим следующий: функции распределения интенсивности имеют существенно большие значения дисперсии, сопоставимые с наблюдаемыми экспериментально, а функции распределения степени поляризации для точек, смещенных относительно точки ПП, имеют характерную асимметрию (рис. 6).

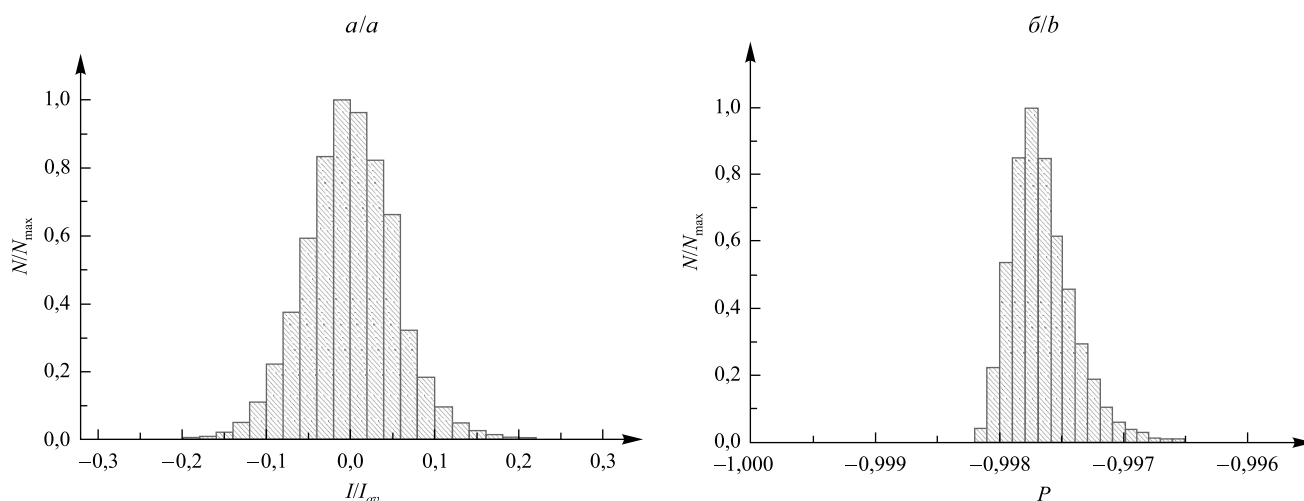


Рис. 6. Гистограммы распределения относительной интенсивности (а) и степени поляризации (б) при $K_0 = -0.01$, $\beta = 10^{-4}$, $j = 1.9$ мА, $\sigma = 0.2$

Fig. 6. The relative intensity (a) and polarization degree (b) distribution histograms with the value of parameters $K_0 = -0.01$, $\beta = 10^{-4}$, $j = 1.9$ mA, $\sigma = 0.2$

Влияние вклада спонтанного излучения в моду генерации и степени анизотропии коэффициента усиления аналогично предыдущему случаю, но эффект выражен гораздо сильнее. А вот сдвиг значений инжекционного тока дает весьма характерные результаты (рис. 7). Функции распределения интенсивности остаются симметричными с почти неизменной дисперсией. Однако гистограмма степени поляризации при смещении тока в точку ПП меняет характер распределения. При значении тока на краю области ПП гистограмма сохраняет вид нормального распределения. Если рабочий ток находится вблизи точки ПП, то гистограмма расплывается и образует два максимума, которые соответствуют предельным значениям степени поляризации -1 и $+1$. Данный факт наблюдается в экспериментальных работах, что является весомым аргументом в пользу теории, согласно которой основным источником флуктуаций служат флуктуации спонтанного испускания и плотности инжекционного тока. Это говорит о том, что флуктуаций тока на уровне 20 % достаточно для того, чтобы перевести систему в одно из предельных состояний.

Отметим, что закономерности, установленные при флуктуациях спонтанного испускания, полностью проявляются и при наличии флуктуаций плотности инжекционного тока и концентрации неравновесных носителей. Следовательно, данные закономерности служат фундаментальными для нашей феноменологической модели.

Ранее было продемонстрировано, что при 100 % флуктуациях спонтанного испускания функция распределения в точке ПП имеет вид нормального распределения (см. рис. 5), в то время как при наличии 20 % флуктуаций плотности инжекционного тока для степени поляризации наблюдается формирование двух максимумов. Необходимо уточнить, при какой величине флуктуаций плотности инжекционного тока начинается изменение формы функции распределения.

Гистограммы распределения степени поляризации показывают, что вблизи точки ПП (см. рис. 7, а) при наличии флуктуаций плотности инжекционного тока около 8 % начинают формироваться два максимума.

Это свидетельствует о том, что флуктуации плотности инжекционного тока являются очень существенным источником флуктуаций. Одновременно стоит отметить, что на краю области переключения поляризации при наличии шумов на уровне 20 % нормальное распределение степени поляризации переходит в функцию с двумя максимумами (см. рис. 7, б). На основе полученных данных приходим к выводу, что флуктуации плотности инжекционного тока лежат в пределах от 8 до 20 %. Экспериментальные оценки реальных шумов плотности инжекционного тока с учетом шумов концентрации неравновесных носителей тока попадают в указанный диапазон, что говорит о согласованности опытных данных и результатов моделирования.

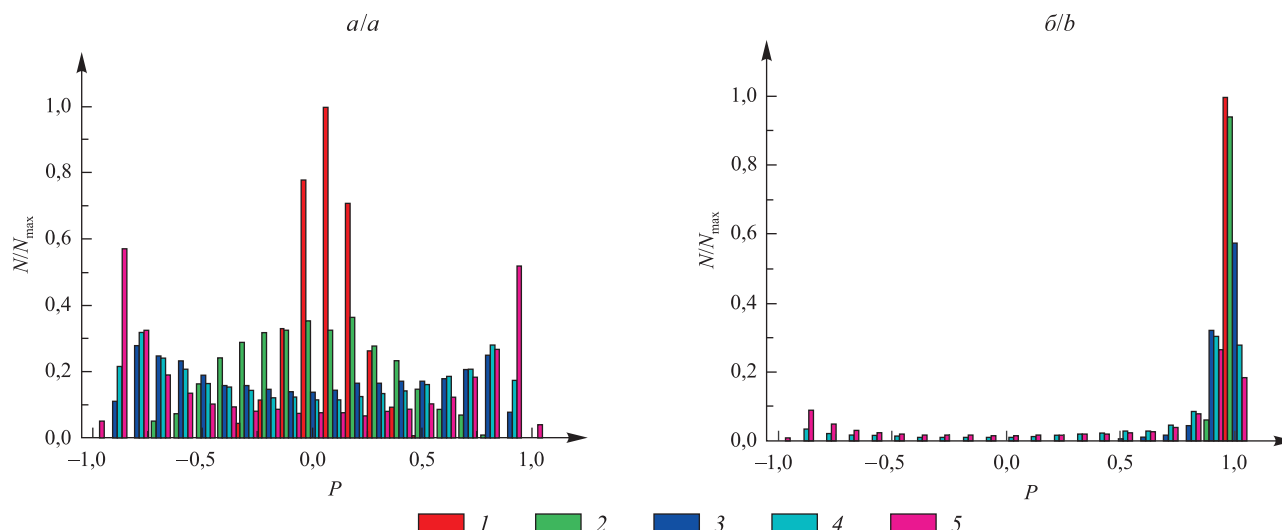


Рис. 7. Гистограммы степени поляризации вблизи точки ПП (а) и на краю области ПП (б) при различной величине дисперсии флуктуаций плотности инжекционного тока:
1 – 0,001; 2 – 0,003; 3 – 0,008; 4 – 0,01; 5 – 0,02

Fig. 7. The polarization degree histograms at the PS point (a) and at the point shifted relative to the current PS point (b) for different value of injection current dispersion:
1 – 0.001; 2 – 0.003; 3 – 0.008; 4 – 0.01; 5 – 0.02

Моделирование с учетом обоих источников флуктуаций показывает, что зависимости очень близки к тем, которые получены при наличии только флуктуаций инжекционного тока. Поэтому результаты этих расчетов в статье не приводятся.

Заключение

Аномально малая величина дисперсии гистограммы распределения интенсивности и форма функции распределения степени поляризации при наличии флуктуаций спонтанного испускания указывают на тот факт, что данный источник шумов, как основной источник статистичности, является некорректным. В то же время дисперсия гистограммы распределения интенсивности, формирование двух максимумов в области поляризационной неустойчивости для гистограммы степени поляризации даже при малых флуктуациях плотности тока приводят к выводу, что именно плотность инжекционного тока и концентрации неравновесных носителей являются основными источниками шумов в VCSEL-лазерах.

Нельзя исключать, что при определенных условиях вклад спонтанного излучения в формирование статистических характеристик окажется более существенным, особенно при нестационарных процессах. Это может быть целью дальнейших исследований.

Библиографические ссылки

1. Panajotov K, Prati F. Polarization Dynamics of VCSELs. *VCSELs*. 2013;166:181–231. DOI: 10.1007/978-3-642-24986-0_6.
2. Zamorra-Munt J, Masoller C. Exploiting noise and polarization bistability in vertical-cavity surface-emitting lasers for fast pulse generation and logic operations. In: Ludge K, editor. *Nonlinear laser dynamics: from quantum dots to cryptography*. Berlin: Wiley-VCH; 2012. p. 35–56. DOI: 10.1002/9783527639823.ch2.
3. Henry CH. Theory of the linewidth of semiconductor lasers. *IEEE Journal of Quantum Electronics*. 1982;18(2):259–264. DOI: 10.1109/JQE.1982.1071522.
4. Valle A, Sciamanna M, Panajotov K. Irregular pulsating polarization dynamics in gain-switched vertical-cavity surface-emitting lasers. *IEEE Journal of Quantum Electronics*. 2008;44(2):136–143. DOI: 10.1109/JQE.2007.910707.

5. San Miguel M, Feng Q, Moloney JV. Light-polarization dynamics in surface-emitting semiconductor lasers. *Physical Review A*. 1995;52(2):1728–1739. DOI: 10.1103/physreva.52.1728.
6. Буров ЛИ, Горбачевич АС, Лобаевич ПМ. Наведенный дихроизм усиления в поверхностно излучающих полупроводниковых лазерах. *Вестник БГУ. Серия 1. Физика. Математика. Информатика*. 2016;3:63–70.
7. Буров ЛИ, Горбачевич АС, Лобаевич ПМ. Влияние ориентационной анизотропии параметров поверхностно излучающих полупроводниковых лазеров на возможность получения поляризационных переключений. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика*. 2018;1:51–57.
8. Willemsen MB, Khalid MUF, van Exter MP, Woerdman JP. Polarization switching of a vertical-cavity semiconductor laser as a Kramers hopping problem. *Physical Review Letters*. 1999;82(24):4815–4818. DOI: 10.1103/PhysRevLett.82.4815.
9. Willemsen MB, van Exter MP, Woerdman JP. Anatomy of a polarization switch of a vertical-cavity semiconductor laser. *Physical Review Letters*. 2000;84(19):4337–4340. DOI: 10.1103/PhysRevLett.84.4337.
10. Буров ЛИ, Горбачевич АС, Лобаевич ПМ. Переходные процессы при поляризационных переключениях в поверхностно излучающих полупроводниковых лазерах. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика*. 2018;2:17–24.
11. Буров ЛИ, Горбачевич АС, Лобаевич ПМ. Роль флуктуаций плотности неравновесных носителей и инжекционного тока в формировании статистических характеристик поверхностно излучающих полупроводниковых лазеров. В: *Полупроводниковые лазеры и системы на их основе. 10-й Белорусско-Российский семинар; 26–29 мая 2015 г.; Минск, Беларусь*. Минск: Ковчег; 2015. с. 88–90.
12. Буров ЛИ, Горбачевич АС, Лобаевич ПМ. Роль спонтанного испускания в формировании поляризованного излучения VCSEL. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика*. 2017;2:50–56.
13. Goeman S, Boons S, Dhoedt B, Vandeputte K, Caekebeke K, Van Daele P, et al. First demonstration of highly reflective and highly polarization selective diffraction gratings (GIRO-Gratings) for long-wavelength VCSEL's. *IEEE Photonics Technology Letters*. 1998;10(9):1205–1207. DOI: 10.1109/68.705591.

References

1. Panajotov K, Prati F. Polarization Dynamics of VCSELs. *VCSELs*. 2013;166:181–231. DOI: 10.1007/978-3-642-24986-0_6.
2. Zamorra-Munt J, Masoller C. Exploiting noise and polarization bistability in vertical-cavity surface-emitting lasers for fast pulse generation and logic operations. In: Ludge K, editor. *Nonlinear laser dynamics: from quantum dots to cryptography*. Berlin: Wiley-VCH; 2012. p. 35–56. DOI: 10.1002/9783527639823.ch2.
3. Henry CH. Theory of the linewidth of semiconductor lasers. *IEEE Journal of Quantum Electronics*. 1982;18(2):259–264. DOI: 10.1109/JQE.1982.1071522.
4. Valle A, Sciamanna M, Panajotov K. Irregular pulsating polarization dynamics in gain-switched vertical-cavity surface-emitting lasers. *IEEE Journal of Quantum Electronics*. 2008;44(2):136–143. DOI: 10.1109/JQE.2007.910707.
5. San Miguel M, Feng Q, Moloney JV. Light-polarization dynamics in surface-emitting semiconductor lasers. *Physical Review A*. 1995;52(2):1728–1739. DOI: 10.1103/physreva.52.1728.
6. Буров ЛИ, Горбачевич АС, Лобаевич ПМ. The induced amplification dichroism in surface-emitting semiconductor lasers. *Vestnik BGU. Seriya 1. Fizika. Matematika. Informatika*. 2016;3:63–70. Russian.
7. Буров ЛИ, Горбачевич АС, Лобаевич ПМ. The effect of the orientational anisotropy of VCSEL parameters on the possibility to implement polarization switching. *Journal of the Belarusian State University. Physics*. 2018;1:51–57. Russian.
8. Willemsen MB, Khalid MUF, van Exter MP, Woerdman JP. Polarization switching of a vertical-cavity semiconductor laser as a Kramers hopping problem. *Physical Review Letters*. 1999;82(24):4815–4818. DOI: 10.1103/PhysRevLett.82.4815.
9. Willemsen MB, van Exter MP, Woerdman JP. Anatomy of a polarization switch of a vertical-cavity semiconductor laser. *Physical Review Letters*. 2000;84(19):4337–4340. DOI: 10.1103/PhysRevLett.84.4337.
10. Буров ЛИ, Горбачевич АС, Лобаевич ПМ. Polarization switching transients in surface-emitting semiconductor lasers. *Journal of the Belarusian State University. Physics*. 2018;2:17–24. Russian.
11. Буров ЛИ, Горбачевич АС, Лобаевич ПМ. [Affect of carrier and injection current noise on statistical parameters of surface-emitting semiconductor lasers]. In: *Poluprovodnikovye lazery i sistemy na ikh osnove. 10-i Belorussko-Rossiiskii seminar; 26–29 maya 2015 g.; Minsk, Belarus* [Semiconductor lasers and systems. 10th Belarusian-Russian workshop; 2015 May 26–29; Minsk, Belarus]. Minsk: Kovcheg; 2015. p. 88–90. Russian.
12. Буров ЛИ, Горбачевич АС, Лобаевич ПМ. The effect of spontaneous emission on the VCSEL laser output polarization. *Journal of the Belarusian State University. Physics*. 2017;2:50–56. Russian.
13. Goeman S, Boons S, Dhoedt B, Vandeputte K, Caekebeke K, Van Daele P, et al. First demonstration of highly reflective and highly polarization selective diffraction gratings (GIRO-Gratings) for long-wavelength VCSEL's. *IEEE Photonics Technology Letters*. 1998;10(9):1205–1207. DOI: 10.1109/68.705591.

Статья поступила в редколлегию 25.07.2019.
Received by editorial board 25.07.2019.

PHYSICS OF ELECTROMAGNETIC PHENOMENA

УДК 537.533.79,621.385.69

РАДИАЦИОННАЯ НЕУСТОЙЧИВОСТЬ В РАСЩЕПЛЕННОМ РЕЗОНАТОРЕ

И. В. МОРОЗ¹⁾, А. А. РОУБА¹⁾

¹⁾Институт ядерных проблем Белорусского государственного университета,
ул. Бобруйская, 11, 220030, г. Минск, Беларусь

Рассмотрено взаимодействие электронного пучка с электромагнитным полем расщепленного резонатора, который состоит из полого цилиндрического резонатора и проводящей сетки, разделяющей его на связанные секции. В приближении малого сигнала с учетом объемного заряда пучка для несимметричного резонатора получено выражение удельных потерь энергии электрона, проходящего через систему. В рамках выбранного приближения показано, что резонатор с равными по длине секциями обеспечивает большую эффективность передачи энергии от пучка заряженных частиц к электромагнитному полю по сравнению с несимметричной конфигурацией системы. Установлено, что взаимодействие электрона с объемным зарядом в расщепленном резонаторе приводит к росту радиационной неустойчивости пучка при увеличении его плотности. Изучен эффект модуляции тока электронного пучка, проходящего через систему. Показано, что увеличение размера резонатора вызывает возрастание амплитуды переменной составляющей тока пучка на выходе из системы. Увеличение плотности тока пучка, входящего в область взаимодействия, также приводит к росту эффективности модуляции. Рассмотрена возможность повышения амплитуды модулированного тока в системе с неравными секциями.

Ключевые слова: модуляция электронного пучка; радиационная неустойчивость пучка; объемный заряд; сверхвысокочастотное излучение; расщепленный резонатор.

Благодарность. Авторы выражают благодарность доктору физико-математических наук, профессору Владимиру Григорьевичу Барышевскому за постановку задачи, многочисленные обсуждения и ценные замечания.

Образец цитирования:

Мороз ИВ, Ровба АА. Радиационная неустойчивость в расщепленном резонаторе. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2019;3:22–30.
<https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-3-22-30>

For citation:

Maroz IV, Rouba AA. Radiation instability in a split-cavity resonator. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2019;3:22–30. Russian.
<https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-3-22-30>

Авторы:

Илья Викторович Мороз – младший научный сотрудник лаборатории сильноточной электроники.

Анатолий Анатольевич Ровба – кандидат физико-математических наук; старший научный сотрудник лаборатории сильноточной электроники.

Authors:

Illia V. Maroz, junior researcher at the laboratory of high-current electronics.

miwa-holod@yandex.ru

Anatoly A. Rouba, PhD (physics and mathematics); senior researcher at the laboratory of high-current electronics.

rouba@inp.bsu.by

RADIATION INSTABILITY IN A SPLIT-CAVITY RESONATOR

I. V. MAROZ^a, A. A. ROUBA^a

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

Corresponding author: I. V. Maroz (miwa-holod@yandex.ru)

The interaction of an electron beam with the electromagnetic field of a split resonator that consists of a hollow cylindrical resonator and a conducting grid dividing it into coupled sections was considered. In the small-signal approximation, taking into account the space charge of the beam for an asymmetric resonator, the expression for the energy loss by the electron passing through the system was obtained. Within the chosen approximation, it was shown that a resonator with equal length sections provides greater efficiency in the transfer of energy from a charged particles beam to an electromagnetic field in comparison with an asymmetric system configuration. It was found that the interaction of an electron with a space charge in a split resonator leads to the increase of the radiation beam instability with the increase of its density. The effect of current modulation of the electron beam passing through the system was studied. It was shown that the resonator size increase leads to the increase of the amplitude of the beam current variable component at the system output. The increase of the current density of the beam entering the interaction region also leads to the increase of the modulation efficiency. The possibility of increasing the modulated current amplitude in a system with unequal sections was considered.

Keywords: electron beam modulation; radiation instability of the beam; space charge; microwave radiation; split-cavity resonator.

Acknowledgements. The authors would like to express their gratitude to doctor of science (physics and mathematics), full professor V. G. Baryshevsky for problem statement, numerous discussions and valuable comments that greatly improved the paper.

Введение

Мощные источники микроволнового излучения имеют широкую область применения в науке и технике. Их используют для ускорения заряженных частиц, нагрева плазмы, радиолокации и т. д.

В [1] впервые была рассмотрена генерация электромагнитного излучения цилиндрическим резонатором, содержащим внутри металлический экран, который делит резонатор на две связанные между собой части (рис. 1). Согласно [1] взаимодействие заряженных частиц с модой такого резонатора приводит к развитию радиационной неустойчивости и модуляции электронного пучка на более короткой длине, чем в монотроне. Следует отметить, что структура электромагнитного поля этой моды позволяет эффективно взаимодействовать с пучком, поперечное сечение которого соизмеримо площади сетки. Теория генерации излучения релятивистскими пучками в указанном генераторе представлена в [2], а в [3–9] построены более полные теоретические модели, разработаны способы увеличения эффективности такого устройства, представлены экспериментальные исследования подобных систем.

В данной работе теоретически изучено развитие радиационной неустойчивости в генераторе Мардера [1] с неравными по длине секциями с учетом объемного заряда пучка. Исследовано влияние объемного заряда и неравенства в продольных размерах камер на модуляцию тока.

Взаимодействие заряженных частиц с электромагнитным полем в резонаторах

Рассмотрим цилиндрический резонатор, разделенный на две части прозрачной для частиц проводящей сеткой (см. рис. 1). Между его боковой стенкой и разделительной сеткой имеется зазор, обеспечивающий электродинамическую связь между двумя частями резонатора. Такой резонатор обладает дополнительным набором собственных мод по сравнению с полым резонатором.

У рассматриваемого резонатора рабочей является мода, для которой продольная компонента электрического поля в секциях направлена в противоположные стороны, как показано на рис. 2. Прохождение заряженных частиц вдоль оси симметрии описанной структуры сопровождается развитием радиационной неустойчивости, что обусловлено взаимодействием заряженных

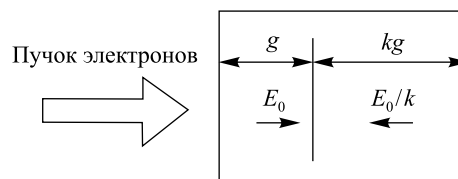


Рис. 1. Схематичное изображение резонатора
Fig. 1. Schematic representation of the resonator

частиц с рабочей модой резонатора, а именно: модуляция электронного пучка по скоростям происходит под действием продольной компоненты электрического поля. Следствием модуляции является изменение кинетической энергии частиц. Благодаря переходному излучению, которое образуется электронами при попадании в резонатор, в нем возникает затравочное электромагнитное поле [2].

Возбуждение электронным пучком рабочей моды резонатора в приближении слабого сигнала подробно рассмотрено в [1]. Однако все выкладки были сделаны для резонатора с секциями одинаковой длины. Поэтому представляет интерес исследование радиационной неустойчивости в резонаторе с неравными по длине секциями. Как и в [1], ограничимся рассмотрением одномерного движения частиц под действием продольной компоненты электрического поля E .

Для резонатора с неравными секциями структура рабочей моды колебаний была установлена с помощью пакета программ *Superfish* [10]. Численные расчеты показали, что продольная компонента электрического поля E , действующая на отдельно взятый электрон, движущийся вблизи оси резонатора, с хорошей степенью точности описывается выражением

$$E = \begin{cases} E_0 \sin(\omega t + \theta), & 0 \leq z < g, \\ -\frac{E_0}{k} \sin(\omega t + \theta), & g \leq z \leq kg, \end{cases} \quad (1)$$

где E_0 – амплитуда поля излучения; ω – частота рабочей моды, которая задается геометрией резонатора; θ – фаза электромагнитного поля в момент влета частицы в область взаимодействия; z – координата частицы; g – длина первой секции; kg – длина второй секции. Время t отсчитывается от момента влета частицы в резонатор. Следует обратить внимание, что при пересечении частицей разделительной сетки электрическое поле, действующее на нее, меняется не только по знаку, но и по абсолютному значению в $\frac{1}{k}$ раз.

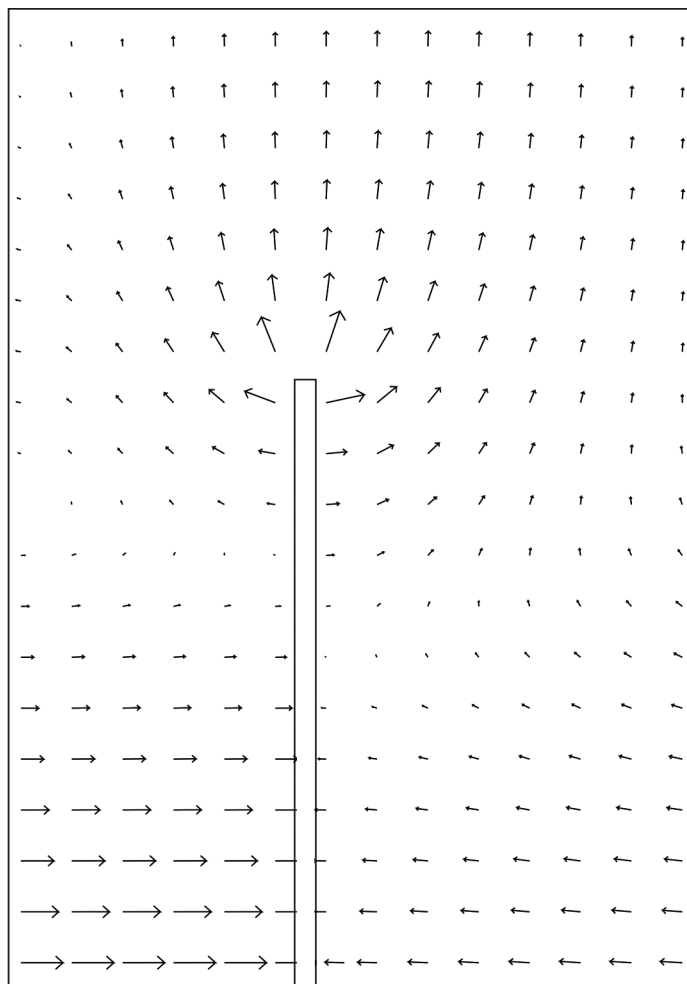


Рис. 2. Распределение электрического поля

Fig. 2. Electric field distribution

Изменение $\Delta\mathcal{K}$ средней кинетической энергии электронов, нормированное на начальную энергию частиц, задается выражением

$$\Delta\mathcal{K} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \left(\frac{v^2(\theta)}{v_0^2} - 1 \right) d\theta,$$

где v_0 – начальная скорость электрона; $v(\theta)$ – скорость электрона на выходе из резонатора (находится из решения уравнения движения).

По мере увеличения плотности тока пучка на движение электронов все большее влияние оказывает объемная плотность заряда. Для учета этого влияния рассмотрим одномерный случай движения невозмущенного однородного пучка. Для области пространства, ограниченной по оси z двумя проводящими плоскостями, пересекающими ось z в точках 0 и g , электрическое поле E_q объемного заряда пучка в точке z находится по формуле

$$E_q = \frac{n_e e}{\epsilon_0} \left(\frac{g}{2} - z \right),$$

где n_e – концентрация электронов; e – элементарный заряд; ϵ_0 – электрическая постоянная. При выводе выражения для E_q было использовано предположение о том, что характерные поперечные размеры системы намного больше g , и поэтому только продольная компонента электрического поля отлична от нуля.

Таким образом, в первой секции выражение для электрического поля, обусловленного полем излучения и объемным зарядом пучка, принимает вид

$$E = E_0 \sin(\omega t + \theta) + \frac{\omega_p^2 m_e}{e} \left(\frac{g}{2} - z \right),$$

где $\omega_p = \sqrt{\frac{n_e e^2}{m_e \epsilon_0}}$ – плазменная частота; m_e – масса электрона.

Уравнение движения с начальными условиями запишем следующим образом:

$$\begin{cases} \frac{d^2 z}{dt^2} = -\epsilon \omega v_0 \sin(\omega t + \theta) - \frac{\omega_p^2 g}{2} + \omega_p^2 z, \\ \left. z \right|_{t=0} = 0, \\ \left. \frac{dz}{dt} \right|_{t=0} = v_0, \end{cases} \quad (2)$$

где $\epsilon = \frac{e E_0}{m_e v_0 \omega}$ – безразмерная величина.

Для характеристики плотности тока в системе введем безразмерную величину $S = \frac{\omega_p}{\omega}$. В приближении малого сигнала ($\epsilon \ll 1$) и в предположении $S \ll 1$ закон движения частицы и ее скорость имеют вид соответственно

$$z \approx a + bt + a \frac{(\omega S t)^2}{2} + b \frac{(\omega S)^2 t^3}{6} + \frac{\epsilon v_0}{\omega(1+S^2)} \sin(\omega t + \theta) + \frac{g}{2} \quad (3)$$

и

$$v_1 \approx b + at(\omega S)^2 + b \frac{(\omega S)^2}{2} + \frac{\epsilon v_0}{(1+S^2)} \cos(\omega t + \theta), \quad (4)$$

где a и b – константы, определяемые соотношениями

$$a = -v_0 \left(\frac{T_0}{2} + \frac{\epsilon}{\omega(1+S^2)} \sin \theta \right),$$

$$b = v_0 \left(1 - \frac{\varepsilon}{1 + S^2} \cos \theta \right),$$

здесь $T_0 = \frac{g}{v_0}$ – время пролета электроном первой секции резонатора при отсутствии электрического поля.

Для того чтобы определить полное относительное изменение $\Delta \mathcal{K}$ энергии пучка электронов на выходе из резонатора, необходимо найти выражение для скорости электрона на выходе из резонатора.

Сначала из закона движения (3), решив уравнение $z(T_1) = g$, определим время T_1 пролета электроном первой секции резонатора при наличии электрического поля и с учетом объемного заряда. Подставив найденное выражение для T_1 в (4), получим выражение для скорости v_1 электрона на выходе из первой секции резонатора.

Для второй секции резонатора длиной kg уравнение движения и начальные условия аналогичны (2), где начальной скоростью электрона служит v_1 , а фаза в момент попадания во вторую секцию имеет вид $(\omega T_1 + \theta)$. С учетом выражения (1) для амплитуды электрического поля во второй секции уравнение движения электрона и начальные условия запишем как

$$\begin{cases} \frac{d^2 z}{dt^2} = \frac{\varepsilon}{k} \omega v_0 \sin(\omega t + \omega T_1 + \theta) - \frac{\omega_p^2 kg}{2} + \omega_p^2 z, \\ \left. z \right|_{t=0} = 0, \\ \left. \frac{dz}{dt} \right|_{t=0} = v_1. \end{cases} \quad (5)$$

Решив (5), можно определить относительное изменение энергии $\Delta \mathcal{K}$ пучка электронов на выходе из резонатора. Без учета объемного заряда ($S \rightarrow 0$) и при равных секциях резонатора ($k \rightarrow 1$) выражение для $\Delta \mathcal{K}$ принимает вид, приведенный в [1].

Если $\Delta \mathcal{K} < 0$, то электронный пучок теряет энергию и передает ее электромагнитному полю, тем самым усиливая поле рабочей моды. Таким образом, возникает генерация микроволнового излучения на частоте рабочей моды. Чтобы проанализировать влияние параметров системы на эффективность процесса передачи энергии от электронного пучка к электромагнитному полю, удобно найти отношение изменения энергии частиц к энергии модулирующего поля

$$\Delta K = \frac{\Delta \mathcal{K}}{\varepsilon^2 \left(\frac{\omega T_0}{2\pi} \right) \left(1 + \frac{1}{k} \right)},$$

знаменатель которого является безразмерной величиной, пропорциональной энергии модулирующего электромагнитного поля. Сгруппировав слагаемые по степеням S , выражение для ΔK можно представить в виде

$$\Delta K(L, k, S) = \Delta K^0(L, k) + S^2 \Delta K^1(L, k), \quad (6)$$

где $L = \frac{(1+k)\omega T_0}{2\pi}$ – безразмерная длина всей системы; $\Delta K^0(L, k)$ – нормированные потери энергии электроном в случае отсутствия объемного заряда; $\Delta K^1(L, k)$ – зависящая от S часть энергетических потерь.

Проанализировав зависимости, приведенные на рис. 3, можно заключить, что для любого k у функций $\Delta K^0(L, k)$ и $\Delta K^1(L, k)$ существует минимум при некотором значении $L = L_{\min}$, определяющем размер системы. Так, величина ΔK^0 достигает минимального значения при $L_{\min} = 0,53$, а ΔK^1 – при $L_{\min} = 0,45$. Из рис. 3 и выражения (6) следует, что изменение параметра S не будет приводить к существенным изменениям размеров системы, так как формы поверхностей $\Delta K^0(L, k)$ и $\Delta K^1(L, k)$ похожи, а зависящий от S член имеет малую амплитуду. При этом с ростом S будет наблюдаться увеличение энергетических потерь электрона. Так, если $S = 0,3$, то ΔK достигает минимума при $L_{\min} = 0,52$.

Из рис. 4 видно, что конфигурацией резонатора, для которой отмечается наиболее эффективная передача энергии от электронного пучка к электромагнитному полю, является конфигурация с равными секциями ($k = 1$).

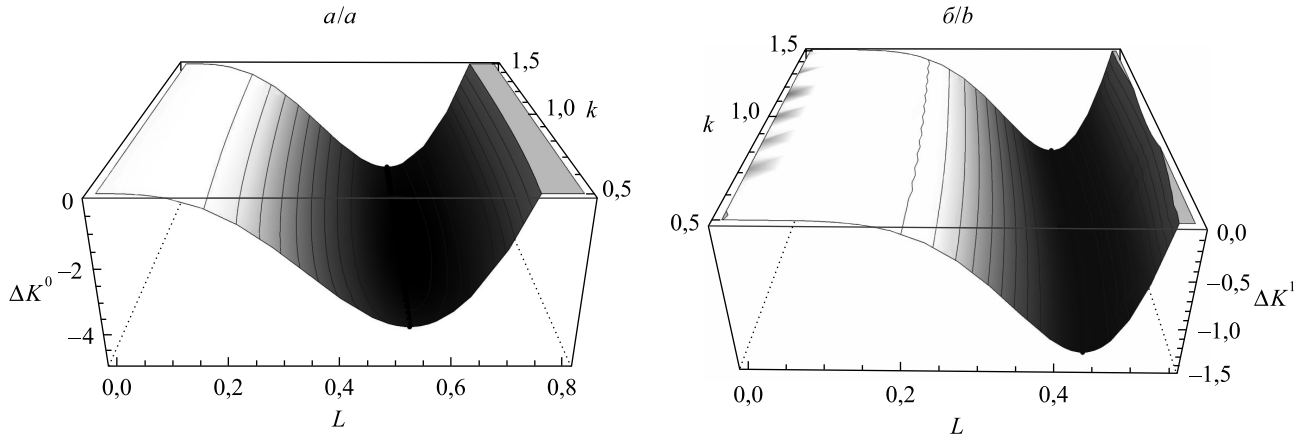


Рис. 3. Зависимость от параметров L и k величин $\Delta K^0(L, k)$ (а) и $\Delta K^1(L, k)$ (б)

Fig. 3. Dependence $\Delta K^0(L, k)$ (a) and $\Delta K^1(L, k)$ (b) on the parameters L and k

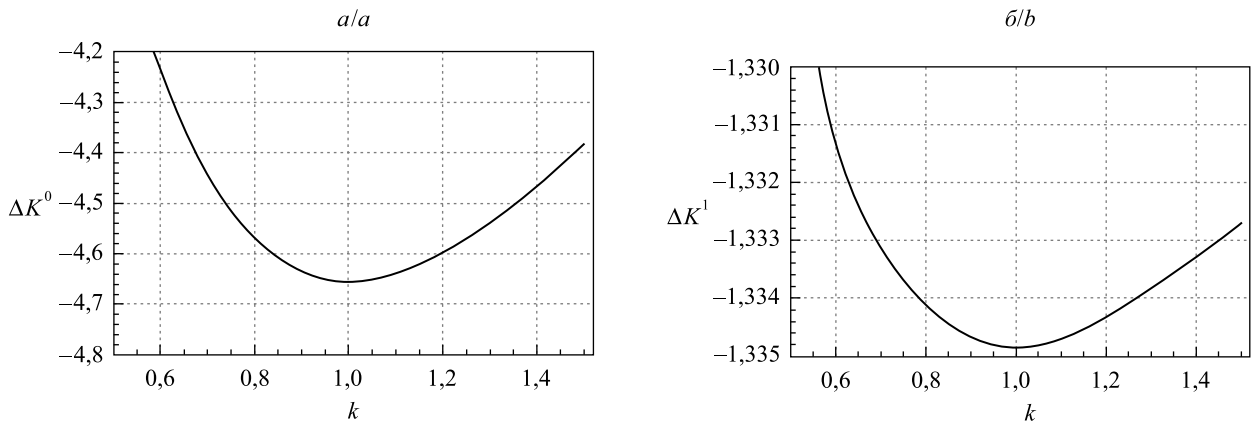


Рис. 4. Зависимость $\Delta K^0(L, k)$ (а) и $\Delta K^1(L, k)$ (б) от параметра k при $L = L_{\min}$

Fig. 4. Dependence $\Delta K^0(L, k)$ (a) and $\Delta K^1(L, k)$ (b) on the parameter k when $L = L_{\min}$

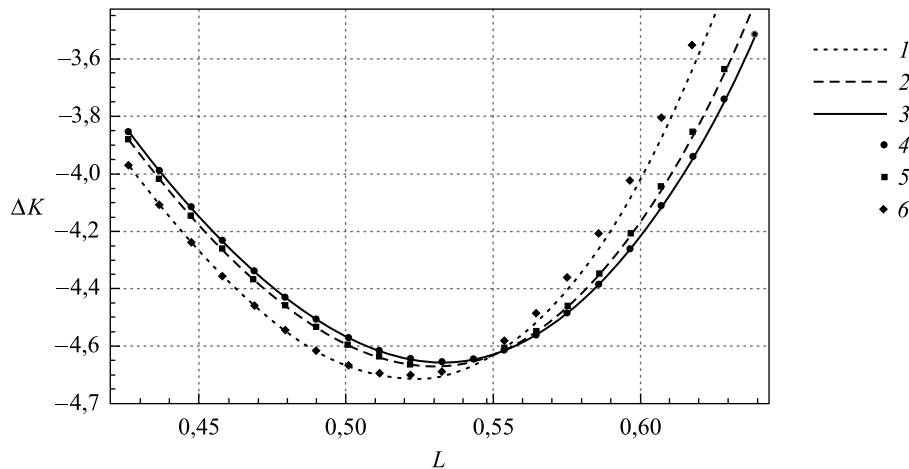


Рис. 5. Аналитическая зависимость ΔK от L (1–3) и численные решения (4–6) при $k = 1$ для разных значений S : 1, 4 – 0; 2, 5 – 0.15; 3, 5 – 0.3

Fig. 5. Analytical dependence of ΔK on L (1–3) and numerical calculation (4–6) when $k = 1$ for different values of S : 1, 4 – 0; 2, 5 – 0.15; 3, 5 – 0.3

В качестве примера рассмотрим пучок электронов с энергией 300 кэВ. Согласно полученным результатам, чтобы получить генерацию на частоте $\omega = 3$ ГГц, длина каждой секции резонатора должна составлять: $g = 20$ мм.

На рис. 5 показано сравнение аналитической зависимости (6) ΔK от L при различных величинах S и значения ΔK , найденного путем численного решения уравнений (2) и (5).

Различие между численным расчетом и аналитическим решением объясняется использованием разложения по параметру S до квадратичных членов включительно в соотношениях (3) и (4), необходимого при аналитическом выражении удельных потерь энергии электроном.

Зависимость ΔK от S представлена на рис. 6, при этом L и k выбираются таким образом, чтобы для заданного значения параметра S величина ΔK достигала минимума.

Из рис. 5 и 6 следует, что увеличение плотности пучка электронов приводит к росту потерь энергии и, следовательно, к росту радиационной неустойчивости пучка.

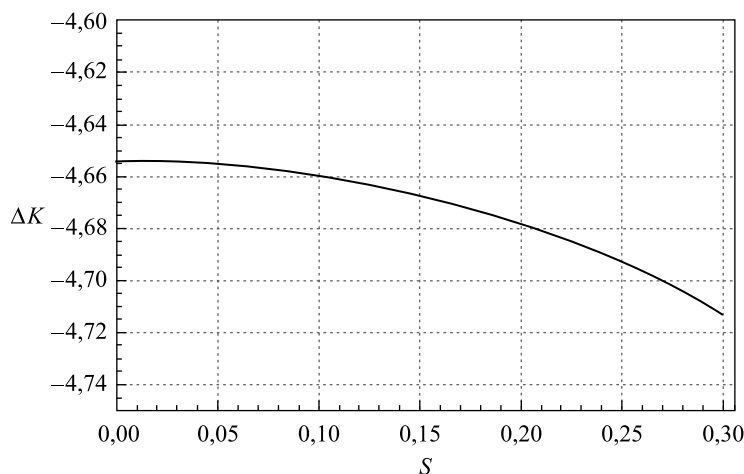


Рис. 6. Зависимость ΔK от параметра S

Fig. 6. Dependence of ΔK on the parameter S

Модулирование электронного пучка, проходящего через расщепленный резонатор

В рассмотренном выше расщепленном резонаторе возникает неравномерность в распределении по скоростям заряженных частиц и вследствие конечных размеров системы неоднородность плотности пучка. Следовательно, подобная система позволяет модулировать ток пучка [1].

Рассмотрим процесс группировки электронного пучка. Пусть с момента t_0 за время Δt_0 в область взаимодействия входит ΔN частиц. Таким образом, $\Delta N = J_0 \Delta t_0$, где J_0 – ток немодулированного пучка. Такое же количество частиц покидает область взаимодействия с момента t_f за время Δt_f : $\Delta N = J \Delta t_f$, где значение t_f находится из совместного решения уравнений (2) и (5). В результате перехода к бесконечно малым величинам получим выражение для тока J пучка на выходе из системы:

$$J = J_0 \left(\frac{dt_f}{dt_0} \right)^{-1}. \quad (7)$$

Решая задачу, аналогичную (2), но с начальными условиями, определенными в момент времени t_0 , и с начальной фазой поля $(\theta + \omega t_0)$, можно получить явное выражение для (7). Для удобства введем нормированную переменную составляющую тока пучка j :

$$j = \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{J}{J_0} - 1 \right). \quad (8)$$

Конечное выражение для j можно получить, если разложить (7) в ряд по ε и S^2 , а затем подставить полученный результат в (8).

Для достижения наибольшей эффективности преобразования энергии электронного пучка в энергию генерируемого СВЧ-излучения необходимо добиться максимально модулированного тока пучка.

С этой целью следует выявить влияние параметров системы на модуляцию. Указанные ранее ограничения модели и необходимость выполнения условия $\Delta K < 0$ определяют диапазон возможных значений параметров системы.

На рис. 7 приведена зависимость амплитуды переменной составляющей тока j от параметров k и L для двух значений S (0 и 0,3). Выделенная черным цветом линия соответствует наибольшей величине j в зависимости от k для каждого значения L .

Максимальная величина $j = 9,71$ достигается при $\{L; k; S\} = \{0,75; 0,48; 0,3\}$. Для резонатора с равными камерами (т. е. при $k = 1$) максимальное значение $j = 9,19$ наблюдается при $\{L; k; S\} = \{0,75; 1,0; 0,3\}$. Без учета объемного заряда максимальная величина $j = 8,46$ достигается при $\{L; k; S\} = \{0,75; 0,59; 0\}$. Уместно сравнить со значениями, соответствующими наибольшей передаче энергии от электронного пучка к электромагнитному полю: $j = 3,85$ при $\{L; k; S\} = \{0,52; 1,0; 0\}$ и $j = 4,15$ при $\{L; k; S\} = \{0,52; 1,0; 0,3\}$.

На рис. 8 показана зависимость амплитуды j от S при таких L и k , что для заданного параметра S достигается максимум амплитуды j .

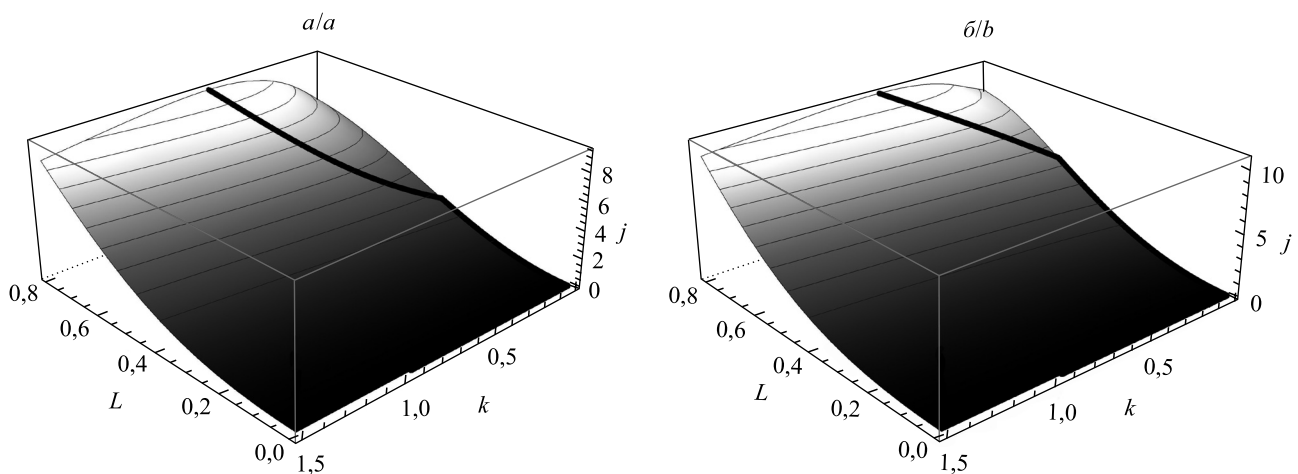


Рис. 7. Зависимость амплитуды переменной составляющей тока j от параметров k и L для $S = 0$ (а) и $S = 0,3$ (б)

Fig. 7. Dependence of the amplitude of the changing component j of the current on the parameters k and L for $S = 0$ (a) and $S = 0.3$ (b)

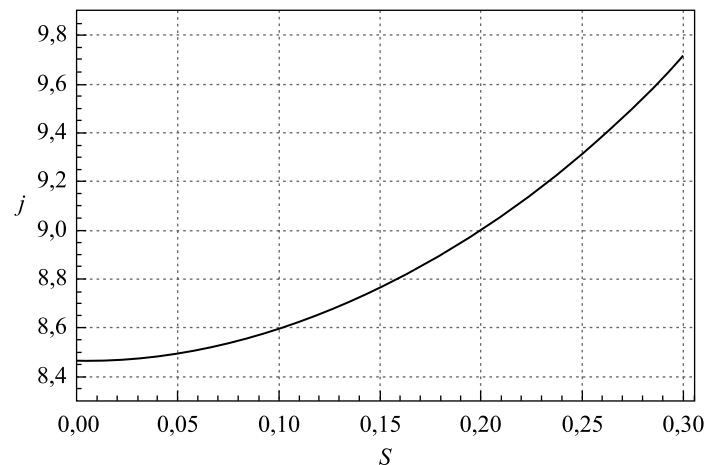


Рис. 8. Зависимость амплитуды переменной составляющей тока j от параметра S при фиксированных значениях k и L

Fig. 8. Dependence of the amplitude of the variable component j of the current on S for fixed k and L

Анализируя рис. 7 и 8, можно сделать вывод, что с увеличением размера системы и плотности тока эффективность модуляции возрастает. Если же зафиксировать размер системы, то конфигурация, для которой вторая камера меньше первой ($k < 1$), приводит к большей модуляции пучка.

Следует отметить, что при выборе параметров системы необходимо соблюдать баланс между передаваемой энергией от пучка к электромагнитному полю в резонаторе и эффективностью модуляции пучка. Первый фактор обеспечивает скорость нарастания поля в модулирующей системе и его максимальное значение, второй – максимальную эффективность модуляции пучка. В результате можно добиться наибольшей модуляции электронного пучка и, как следствие, максимальной конверсии энергии электронов в энергию излучения.

Заключение

В настоящей работе теоретически исследована радиационная неустойчивость пучка электронов в резонаторе, разделенном проводящей сеткой на две неравные по длине части. В приближении малого сигнала получены выражения для энергетических потерь электронов и модуляции тока пучка. Анализ этих выражений позволяет сделать следующие выводы:

- резонатор с равными по длине секциями обеспечивает наибольшую эффективность передачи энергии от пучка заряженных частиц электромагнитному полю;
- увеличение тока пучка приводит к росту энергетических потерь электронов;
- с увеличением размера системы и плотности тока эффективность модуляции возрастает.

Показана возможность повышения эффективности модуляции в системе с неравными секциями, указанная профессором В. Г. Барышевым.

Библиографические ссылки / References

1. Marder BM, Clark MC, Bacon LD, Hoffman JM, Lemke RW, Coleman PD. The split-cavity oscillator: a high-power E -beam modulator and microwave source. *IEEE Transactions on Plasma Science*. 1992;20(3):312–331. DOI: 10.1109/27.142833.
2. Baryshevsky VG. Relativistic split-cavity oscillator. arXiv:1402.3403 [Preprint]. 2014 [cited 2019 March 12]. Available from: <https://arxiv.org/abs/1402.3403>.
3. Lemke RW, Collins Clark M, Marder BM. Theoretical and experimental investigation of a method for increasing the output power of a microwave tube based on the split-cavity oscillator. *Journal of Applied Physics*. 1994;75(10):5423–5432. DOI: 10.1063/1.355698.
4. Jun-Tao H, Hui-Huang Z, Bao-Liang Q, Yong-Gui L. A new method for increasing output power of a three-cavity transit time oscillator. *Chinese Physics Letters*. 2004;21(7):1302–1305. DOI: 10.1088/0256-307X/21/7/033.
5. Joaquim J Barroso, Joaquim Paulino Leite Neto. Coupled circular cavities for transit-time microwave tubes. *IEEE Transactions on Plasma Science*. 2010;38(6):1385–1390. DOI: 10.1109/TPS.2009.2038384.
6. Joaquim J Barroso. Electron bunching in split-cavity monotrons. *IEEE Transactions on Plasma Science*. 2009;36(9):2150–2154. DOI: 10.1109/TPS.2009.2026323.
7. Sotnikov GV, Tkach YuV, Scherbina SL. Eigen frequencies and field structure of axially symmetric split-cavities. *Electromagnetic Phenomena*. 2008;8(1–19):46–61.
8. Yun-Jian Z, Qiao-Sheng MA, Xiong L. Study of a compact external magnetic field radial split-cavity oscillator. *Chinese Physics C*. 2011;35(4):381–386. DOI: 10.1088/1674-1137/35/4/011.
9. Zhikai F, Qingxiang L, Daibing C, Jie T, Haijing Z. Theoretical and experimental researches on C-band three-cavity transit-time effect oscillator. *Science in China. Series G. Physics Mechanics and Astronomy*. 2004;47(3):310–329. DOI: 10.1360/02yw0316.
10. Billen JH, Young LM. Poisson Superfish, LA-UR-96-1834.

Статья поступила в редколлегию 19.07.2019.
Received by editorial board 19.07.2019.

ФИЗИКА ЯДРА И ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ

ATOMIC NUCLEUS AND ELEMENTARY PARTICLE PHYSICS

УДК 539.1.01, 539.124

ЭЛЕКТРОСЛАБЫЕ ОДНОПЕТЛЕВЫЕ ПОПРАВКИ К ПРОЦЕССУ РОЖДЕНИЯ ПАРЫ ФЕРМИОНОВ В ЭЛЕКТРОН-ПОЗИТРОННОЙ АННИГИЛЯЦИИ

В. В. ХАСЕНЕВИЧ¹⁾, Т. В. ШИШКИНА¹⁾

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

Приведены численные результаты определения полного сечения, поляризационной асимметрии, а также асимметрии рассеяния вперед-назад. Расчеты осуществлены для продольной поляризации начальных электрон-позитронных пучков, а также для неполяризованного случая в однопетлевом приближении стандартной электро-слабой модели Глэшоу – Вайнберга – Салама без рассмотрения полей кварков. В качестве схемы перенормировок использована неминимальная схема на массовой поверхности при одновременной перенормировке полей. Помимо излучения мягких фотонов, произведен численный учет жесткого тормозного излучения и осуществлен анализ влияния параметров обрезания фазовой области трехчастичного конечного состояния, в качестве которых выступают угол аколлинеарности между конечными лептонами, пороговые энергии детектирования конечных частиц, а также энергия излучения мягких фотонов. Описан алгоритм получения ультрафиолетово сходящегося выражения. Расчеты проводились в формализме функций Пассарино – Вельмана в приближении легких лептонов.

Ключевые слова: электрослабое взаимодействие; электрон-позитронные пучки; продольная поляризация; однопетлевые поправки; тормозное излучение.

Образец цитирования:

Хасеневич ВВ, Шишкина ТВ. Электрослабые однопетлевые поправки к процессу рождения пары фермионов в электрон-позитронной аннигиляции. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика*. 2019;3:31–40. <https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-3-31-40>

For citation:

Khasianevich UU, Shishkina TV. Electroweak one-loop corrections to the process of fermion pair production in electron-positron annihilation. *Journal of the Belarusian State University. Physics*. 2019;3:31–40. Russian. <https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-3-31-40>

Авторы:

Владимир Владиславович Хасеневич – младший научный сотрудник научно-исследовательской лаборатории научного приборостроения физического факультета.

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

Authors:

Uladzimir U. Khasianevich, junior researcher at the research laboratory of scientific instrumentation, faculty of physics. khasianevich.u.u@gmail.com

Tatiana V. Shishkina, doctor of science (physics and mathematics), full professor; professor at the department of theoretical physics and astrophysics, faculty of physics. shishkina.tatiana.v@gmail.com

ELECTROWEAK ONE-LOOP CORRECTIONS TO THE PROCESS OF FERMION PAIR PRODUCTION IN ELECTRON-POSITRON ANNIHILATION

U. U. KHASIANEVICH^a, T. V. SHISHKINA^a

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

Corresponding author: U. U. Khasianevich (khasianevich.u.u@gmail.com)

Numerical results for the total cross section, polarization asymmetry, as well as forward-backward asymmetry are presented. Calculations were carried out for longitudinal polarization of the initial electron-positron beams, as well as for the unpolarized case in the one-loop approximation for the standard electroweak Glashow – Weinberg – Salam model without considering quark fields. As a renormalization scheme, we used a non-minimal on-shell scheme with simultaneous renormalization of the fields. In addition to considering the radiation of soft photons, numerical analysis of hard bremsstrahlung was performed. Analysis of the effect of the cut-off parameters of the phase region of the three-particle final state was made, which are the acollinearity angle between the final leptons, the detecting threshold energies of the final particles, and the radiation energy of the soft photons. An algorithm for obtaining ultraviolet convergent expressions is described. The calculations were carried out in the formalism of the Passarino – Veltman functions in the light-lepton approximation.

Keywords: electroweak interaction; electron-positron beams; longitudinal polarization; one-loop corrections; bremsstrahlung.

Введение

В настоящее время стандартная модель является наиболее достоверной и экспериментально проверенной калибровочной теорией. В то же время существует ряд фактов, которые не могут найти объяснения в ее рамках. Поэтому на современном этапе сформировалось отношение к стандартной модели как к эффективной теории на сравнительно малых энергиях. В связи с этим к ней добавляют различные составляющие наподобие массовых нейтринных слагаемых, расширяют хиггсовский и другие секторы и т. д. В силу высокой достоверности стандартной модели эффекты новой физики являются слабыми. Это приводит к тому, что для их фиксации необходимы точные эксперименты. Таковые осуществляются, в частности, на электрон-позитронных ускорителях. Поскольку существует большое число проектов последних (например, ILC, CLIC, CEPC), то проведение расчетов в области их рабочих энергий с учетом современных значений физических констант необходимо для последующего сравнения с величинами, полученными в рамках расширенных моделей.

В настоящей работе рассматривается процесс аннигиляции электронов и позитронов в пару лептонов другого поколения. Данный процесс изучается достаточно давно [1]. Однако в области энергии современных экспериментов значительную роль играют эффекты теории возмущений, возникающие в следующих за лидирующим порядках, так называемые радиационные поправки. Наиболее полное вычисление электромагнитных радиационных поправок к данному процессу было произведено в [2–4], однако электрослабые поправки были представлены только в работах [5; 6]. После этого многие авторы выполняли расчеты данного процесса, но практически все, за исключением [7; 8], проводили их в рамках лишь электромагнитных поправок. Очевидно, что при энергиях планируемых экспериментов учет и анализ электрослабых поправок является актуальной задачей как при калибровке ускорителей, так и при поиске явлений и эффектов новой физики.

Используемая модель и предписания

В работе рассматривается процесс

$$e^+(p_+, \lambda_+) + e^-(p_-, \lambda_-) \rightarrow l^+(q_+) + l^-(q_-) + \gamma(k).$$

В случае продольной поляризации начальных пучков частиц со спиральностями $\lambda_{\pm}$ учет тормозного излучения в конечном состоянии является неизбежной теоретической необходимостью ввиду инфракрасной расходимости виртуального вклада.

В расчетах использовался лагранжиан в физической параметризации масс частиц и заряда электрона. Также применялась калибровка 'т Хоофта – Фейнмана, которая наиболее удобна, поскольку позволяет упростить вычисление пропагаторов векторных бозонов в петлях за счет введения духов Фаддеева – Попова и дополнительных нефизических бозонов Хиггса.

При расчете собственных энергий от замкнутых фермионных петель возникают следы, содержащие нечетное число матриц γ_5 , однозначный расчет которых требует дополнительного правила, в качестве которого мы применяли предписание Ларина [9; 10].

В кинематике $2 \rightarrow 2$ использовались следующие стандартные инварианты:

$$\begin{aligned} W^2 &\equiv s = (p_+ + p_-)^2 = (q_+ + q_-)^2, \\ i_+ &\equiv u = (p_+ - q_-)^2 = (p_- - q_+)^2 = -\frac{s}{4}(1 + \cos\theta_-), \\ i_- &\equiv t = (p_+ - q_+)^2 = (p_- - q_-)^2 = -\frac{s}{4}(1 - \cos\theta_-), \end{aligned}$$

где θ_- – угол между лептоном и электроном в системе центра инерции (с. ц. и.) ($\vec{p}_- + \vec{p}_+ = 0$). Далее под рабочей системой отсчета будет подразумеваться с. ц. и.

Дифференциальное сечение в наших обозначениях представляется как

$$d\sigma = \frac{\tau}{2s} \frac{d\Gamma_n}{(2\pi)^{3n-4}}, \quad d\Gamma_n = \prod_j \frac{dq_j}{2q_j^0} \delta\left(\sum_j q_j - p_+ - p_-\right),$$

где τ – квадрат амплитуды, усредненный по начальным и просуммированный по конечным спиновым состояниям фермионов. Двухчастичный фазовый объем имеет следующий вид:

$$\Gamma_2 = \frac{\pi}{4} \int d\cos\theta_-.$$

В вычислениях используется ковариантная нормировка спиноров, поэтому для матрицы плотности в пределе безмассовых фермионов справедливы выражения

$$\rho(p_\pm) = \frac{1}{2}(1 \mp \lambda_\pm \gamma_5) \gamma_\alpha p_\pm^\alpha.$$

Борновское сечение и виртуальный вклад

Лидирующий порядок теории возмущений в используемой калибровке представляет собой четыре амплитуды: две из них – распространение нейтральных бозонов γ , Z (рис. 1, *a*), остальные – хиггсовского скаляра H , а также нефизического псевдоскаляра χ . Поскольку взаимодействие скаляров с лептонами определяется отношением масс, то амплитуды двух последних диаграмм значительно подавлены

фактором $\frac{m_e m_f}{m_W^2}$ по отношению к распространению векторных бозонов, что позволяет пренебречь ими.

Это замечание также справедливо для аналогичных диаграмм в вершинных поправках (отметим, что амплитуды с распространением W -бозона имеют вклад, сравнимый с электромагнитными радиационными поправками).

Сечение рассматриваемого процесса в лидирующем порядке можно записать в виде

$$\frac{d\sigma_B}{dz} = \frac{1}{8\pi s} (\tau_Q + \tau_I + \tau_W),$$

где $z = \cos\theta_-$; τ_Q , τ_I и τ_W – вклады квантовой электродинамики, интерференции и распространения Z -бозона соответственно, которые имеют очень простую форму в приближении нулевых масс фермионов и могут быть представлены так (в правых частях опущен множитель $16\pi^2\alpha^2$):

$$\begin{aligned} \tau_Q &= P(1 + z^2), \\ \tau_I (2w)^{-1} &= v^2 P(1 + z^2) + avP_-(1 + z)^2 + 2a^2 Pz, \\ \tau_W w^{-2} &= (a^2 + v^2)^2 P(1 + z^2) + 2av(a^2 + v^2)P_-(1 + z)^2 + 8a^2 v^2 Pz, \end{aligned}$$

здесь $P = 1 - \lambda_+ \lambda_-$; $P_- = \lambda_+ - \lambda_-$; $w = s(s - m_Z^2)^{-1}$; v и a – векторная и аксиальная константы взаимодействия лептонов с Z -бозоном:

$$v = \left(-\frac{1}{2} + 2s_W^2\right) \frac{1}{2s_W c_W}, \quad a = -\frac{1}{2} \frac{1}{2s_W c_W}.$$

В качестве схемы перенормировок применялась неминимальная схема на массовой поверхности [11]. Это обусловлено следующими причинами. Параметры лагранжиана электрослабой части стандартной модели содержат хорошо определенные физические величины, что позволяет использовать физические условия перенормировки и гарантирует, что перенормированные параметры будут эквивалентны физическим во всех порядках теории возмущений. Явная перенормировка полей дает возможность производить расчеты только с ампутированными диаграммами, что значительно уменьшает их полное число, однако в результате радиационных поправок появляются недиагональные элементы массовых матриц, и голые поля перестают быть собственными состояниями с определенными массами. Неминимальная схема подразумевает введение матриц полевых констант перенормировки, что позволяет определить перенормированные поля таким образом, чтобы они были корректными собственными векторами физических масс во всех порядках теории возмущений. Наконец, вычисление радиационных поправок осуществляется с учетом большого количества фейнмановских диаграмм, громоздких по структуре ввиду необходимости вычисления петлевых интегралов, которые в подавляющем большинстве содержат ультрафиолетовые и (или) инфракрасные расходимости. Для рассматриваемого процесса радиационные поправки совпадают с однопетлевыми, поэтому возможно применение существующих алгоритмов и соответствующего программного обеспечения, упрощающих расчеты. Мы пользовались программными пакетами *FeynArts* [12] для генерации диаграмм и *FeynCalc* [13] для расчета амплитуд, поскольку они поддерживают интересующую нас схему перенормировок.

Ультрафиолетовые расходимости выделялись размерной регуляризацией в интегралах Пассарино – Вельтмана вида [5; 9; 11]

$$T_{v_1, \dots, v_p}^N(p_1, \dots, p_{N-1}, m_0, \dots, m_{N-1}) = \frac{(2\pi\mu)^{4-d}}{i\pi^2} \int d^d q \frac{q_{v_1} \dots q_{v_p}}{D_0 \dots D_{N-1}},$$

$$D_0 = q^2 - m_0^2 + i\epsilon, D_i = (q + p_i)^2 - m_i^2 + i\epsilon, i = \overline{1, N-1},$$

численный расчет которых проводился посредством пакета *Loop Tools* [14].

В однопетлевом приближении появляются новые топологии диаграмм, которые схематически изображены на рис. 1, б – е [5; 7; 8].

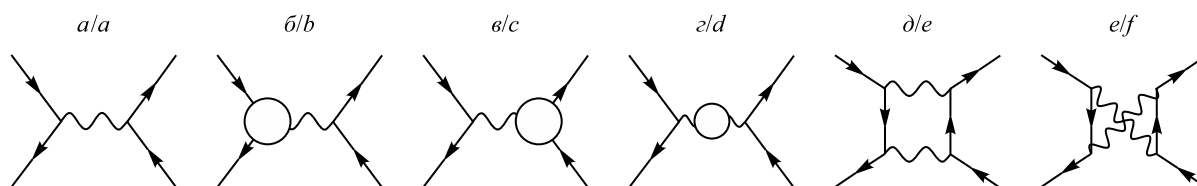


Рис. 1. Диаграммы Фейнмана для V -вклада в однопетлевом приближении:
а – борновские амплитуды; б, в – вершинные диаграммы;
г – собственно-энергетические диаграммы; д, е – диаграммы обмена двумя бозонами
Fig. 1. Feynman diagrams for V -contribution in one-loop approximation:
a – Born amplitudes; b, c – vertex diagrams; d – self-energy diagrams; e, f – box diagrams

Вершинные диаграммы содержат как непосредственно петлевые трехточечные интегралы, так и контрчленные диаграммы. Их сумма является ультрафиолетово сходящейся, однако имеет инфракрасную расходимость, содержащуюся в C_0 -функции, которая получается при интегрировании амплитуд с распространением фотона в петле, а также в B'_0 -функции в контрчленной вершине. На уровне сечений эта расходимость факторизуется и записывается в виде

$$\frac{d\sigma_{\text{vert}}^{IR}}{d\sigma_B} = \frac{\alpha}{\pi} \left[2m_e^2 B_0^{e'} - s_e C_0^e + \{e \rightarrow f\} \right],$$

где

$$B_0^{x'} = -\frac{1}{m_x^2} \left(1 + \ln \frac{\lambda}{m_x} \right), C_0^x = C_0(m_x^2, m_x^2, s, m_x^2, \lambda^2, m_x^2).$$

Явный вид C_0 -функции приведен в [9].

Выражения для констант контрчленных вершин получаются непосредственно из условий перенормировки, которые накладываются на собственно-энергетические диаграммы. Амплитуды на рис. 1, г, при учете соответствующих контрчленных диаграмм являются полностью сходящимися.

Обмен двумя калибровочными бозонами ультрафиолетово сходящийся, но содержит инфракрасно расходящийся вклад, который появляется из скалярных D_0 -функций. Эту расходимость удаётся свести к расходимости в C_0 -функции [9]:

$$\frac{d\sigma_{\text{box}}^{IR}}{d\sigma_B} = -\frac{\alpha_s}{\pi} [i_- C_0^- - \{- \rightarrow +\}], \quad C_0^\pm = C_0(m_e^2, m_f^2, i_\pm, m_e^2, \lambda^2, m_f^2).$$

Тормозное излучение

Поскольку виртуальный вклад не является инфракрасно сходящимся, то необходимо дополнительно учитывать сечение испускания реальных фотонов с энергией, не превосходящей порог экспериментальной установки. Соответствующие диаграммы изображены на рис. 2.

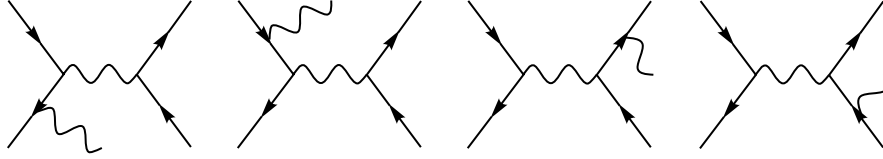


Рис. 2. Диаграммы Фейнмана для R -вклада
Fig. 2. Feynman diagrams for R -contribution

Сечение тормозного излучения можно схематически разбить следующим образом:

$$\frac{d\sigma_R}{dz} = \int_A d\sigma_H + \int_I (d\sigma_H - d\sigma_S) + \int_I d\sigma_S, \quad (1)$$

где A и I – анизотропная и изотропная области интегрирования фазового пространства (рис. 3); $d\sigma_H$ – сечение жесткого тормозного излучения; $d\sigma_S$ – сечение тормозного излучения в приближении мягких фотонов. Анизотропную область мы определяем ограничениями полного трехчастичного фазового пространства: экспериментальными параметрами обрезания и энергией фотона, при которой использовалось выражение для классического тока. Изотропная область соответствует излучению мягких фотонов с энергией, меньшей задаваемого искусственно порога ω .

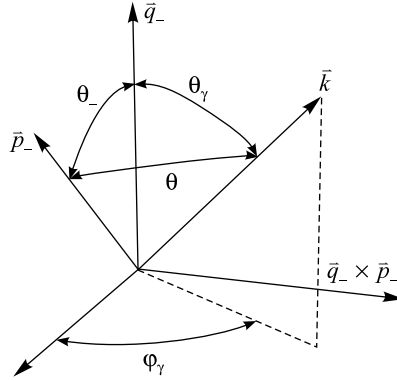


Рис. 3. Углы между векторами моментов импульса в с. ц. и.
Fig. 3. Angles between momentum vectors in c. m. s.

Путем выбора подходящего значения ω второй интеграл в (1) можно сделать сколь угодно малым. Однако, поскольку интегрирование жесткого тормозного излучения производилось численно и выражение для сечения не зависит от выбора максимальной энергии фотона приближения мягкого излучения, мы выбирали эту энергию такой, чтобы минимизировать вклад численного интегрирования.

Целью приведенного выше разбиения (1) является возможность получения аналитического выражения для сечения в области инфракрасной расходимости. Это позволяет комбинировать ее (при одинаковом способе регуляризации) с расходящейся частью виртуального вклада и получить физически осмысленный результат.

Дифференциальное сечение тормозного излучения в пределе излучения мягких фотонов может быть представлено в виде

$$d\sigma_S = -\frac{\alpha}{4\pi^2} d\sigma_B \int_{k_0 < \omega} \frac{d^3k}{k_0} \left(\sum_p \varepsilon(p) \frac{p^\nu}{pk} \right)^2, \quad (2)$$

где

$$\varepsilon(p_+) = -1, \quad \varepsilon(p_-) = +1, \quad \varepsilon(q_-) = -1, \quad \varepsilon(q_+) = +1.$$

Интегралы в правой части (2) являются инфракрасно расходящимися. При их вычислении осуществляется размерная регуляризация, соответствующая используемой при расчете функций Пассарино – Вельтмана в виртуальной части однопетлевых поправок.

В качестве линейно независимых инвариантов для определения амплитуд жесткого излучения были выбраны [15]

$$s = (p_+ + p_-)^2, \quad x_1 = \frac{1}{s}(s' + 2q_-k), \quad x_2 = \frac{s'}{s}, \quad -2p_-k, \quad i_-,$$

где $s' = (q_+ + q_-)^2$. Фазовый объем трехчастичного конечного состояния удобно представить набором параметров $\{x_1, x_2, \cos\theta_-, \varphi_\gamma\}$, где φ_γ – азимутальный угол фотона (см. рис. 3), поскольку справедливы следующие соотношения между энергиями конечного лептона E_- , антилептона E_+ , фотона E_γ и инвариантами $x_{1,2}$:

$$E_- = \frac{1}{2}\sqrt{s}x_1, \quad E_+ = \frac{1}{2}\sqrt{s}(1 + x_2 - x_1), \quad E_\gamma = \frac{1}{2}\sqrt{s}(1 - x_2).$$

Эти соотношения позволяют производить расчеты с реалистичными ограничениями на фермионы в конечном состоянии.

Из рис. 3 следует, что угол θ , входящий в инвариант p_-k , представляется соотношением

$$\cos\theta = \sin\theta_- \sin\theta_\gamma \cos\varphi_\gamma + \cos\theta_- \cos\theta_\gamma,$$

где θ_γ определяется из кинематических выражений следующим образом:

$$\cos\theta_\gamma = \frac{2x_2 - x_1x_2 - x_1}{(1 - x_2)}.$$

Интегрирование трехчастичного фазового объема проводится путем разбиения процесса $2 \rightarrow 3$ на два подпроцесса: $2 \rightarrow 2$ и $1 \rightarrow 2$. В результате имеем

$$\Gamma_3 = \frac{\pi s}{16} \int dx_1 dx_2 d\cos\theta_- d\varphi_\gamma.$$

В качестве экспериментальных параметров ограничения фазового объема выбираем

$$E_\pm \geq \frac{1}{2}e\sqrt{s} \equiv E_{th}, \quad \zeta \leq \zeta_{max},$$

где ζ – угол аколлинеарности.

Кривая постоянной аколлинеарности $\cos\zeta = \text{const}$ определяется уравнением

$$2x_2 = x_1(1 - x_1 + x_2)(1 + \cos\zeta).$$

Граница фазовой области схематично представлена на рис. 4. Регион, где инвариант x_2 близок к единице, соответствует изотропной области I и обозначен двойной штриховкой. Анизотропная область A ограничивается кривой постоянной аколлинеарности, разрешенными энергиями лептонов (показаны штриховыми линиями) и законом сохранения энергии-импульса.

Численные результаты

Анализ проводился для энергий 250–1000 ГэВ. Поскольку аннигиляция происходит в векторный бозон, то одинаковые конфигурации спинов оказываются сильно подавленными (нулевыми в пределе безмассовых фермионов), поэтому имеет смысл рассматривать только три конфигурации, которые определяются следующим образом:

$$\sigma_L : \lambda_- = -1, \quad \lambda_+ = +1,$$

$$\sigma_R : \lambda_- = +1, \quad \lambda_+ = -1,$$

$$\sigma_N : \lambda_- = 0, \quad \lambda_+ = 0.$$

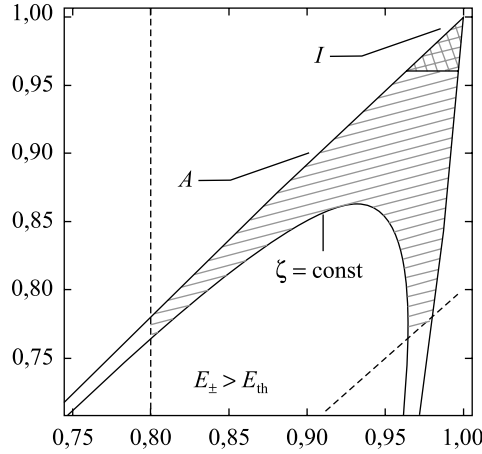


Рис. 4. Область интегрирования трехчастичного пространства
Fig. 4. Three-particle volume of integration

Чтобы получить как можно больше информации из экспериментальных данных, вводятся различные интегральные характеристики дифференциальных сечений, такие как полное сечение, асимметрия вперед-назад:

$$\sigma_T = \int_{-1}^1 \frac{d\sigma}{dz} dz, \quad A_{FB} = \frac{1}{\sigma_T} \left(\int_0^1 \frac{d\sigma}{dz} dz - \int_{-1}^0 \frac{d\sigma}{dz} dz \right).$$

У этих величин доступны для изучения три различные конфигурации спинов и поляризационная асимметрия

$$A_p = \frac{\sigma_L - \sigma_R}{\sigma_L + \sigma_R}.$$

Отметим, что рассматриваемые величины для тау-лептонов в конечном состоянии качественно не отличаются от таковых для пары мюонов, поэтому дальнейшие результаты будут приводиться только для последней. Очевидно, все исследуемые величины зависят от параметров обрезания: разрешенного угла аколлинеарности и регистрируемого порога энергии фермионов. Углы аколлинеарности изменялись от 5° до 50° , величина e – от 0,2 до 0,9. К этим параметрам мы добавили еще один: угол, фиксирующий конус вокруг направления начальных пучков, в котором измерения сечения не проводятся. В качестве оценки численных результатов его значение было установлено в 3° .

Зависимость полного сечения от энергии взаимодействия приведена на рис. 5 в двойном логарифмическом масштабе. Штриховой линией обозначены сечения для борновского приближения. Порядок сечений по величине при учете радиационных поправок не изменяется и является таким: наибольшее значение соответствует спиновой конфигурации σ_L , далее следует σ_R , наименьшее значение означает неполяризованное сечение σ_N (разные типы обозначены разными черными графическими значками на рис. 5).

Радиационные поправки для достаточно большой области разрешенного трехчастичного фазового пространства, ограниченного значениями $\zeta = 15^\circ$, $e = 0,5$, являются отрицательными и растут по модулю при увеличении энергии столкновения начальных пучков. Учет однопетлевых радиационных поправок для σ_L приводит к самым незначительным изменениям сечения. Далее по величине располагается неполяризованное сечение. Для σ_R наблюдается значительное уменьшение сечения, достигающее 10 %. Следует отметить, что для всех параметров обрезания будет иметь место сходная ситуация: радиационные поправки для σ_R приведут к его уменьшению более значительно, чем для остальных поляризаций начальных пучков. При сужении области интегрирования трехчастичного конечного состояния сечения будут уменьшаться, а процентные поправки соответственно расти. В рассматриваемой области параметров обрезания они могут достигать -30% при достаточно строгих критериях отбора событий.

На рис. 6 изображена процентная зависимость асимметрии рассеяния вперед-назад от суммарной энергии столкновения в с. ц. и. (обозначения соответствуют рис. 5, белые графические значки отражают борновские значения сечений). Следует обратить внимание, что порядок величин изменился: наибольшая – $A_{FB}(\sigma_L)$, наименьшая – $A_{FB}(\sigma_R)$. Можно наблюдать следующую картину: с ростом энергии взаимодействия асимметрии уменьшаются. В пределе $m_i \ll s$ в борновском приближении они вообще перестают зависеть от энергии столкновения и определяются лишь константами электрослабого взаимодействия и поляризациями начальных пучков. Видно, что учет радиационных поправок незначительно изменяет исследуемые величины, причем порядок асимметрий по величине опять сохраняется.

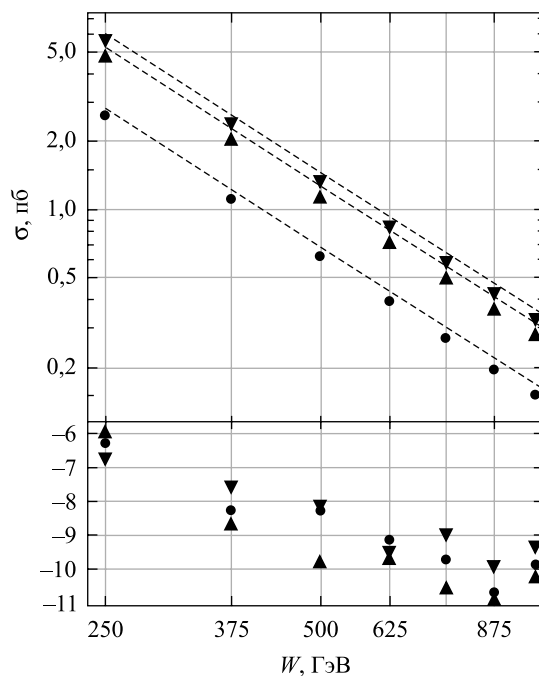


Рис. 5. Зависимость полного сечения от энергии столкновения в с. ц. и. при параметрах обрезания $\zeta = 15^\circ$, $e = 0,5$.
Снизу приведены процентные значения поправок (см. пояснения в тексте)
Fig. 5. Dependence of the total cross section on the collision energy in c. m. s. with cut-off parameters $\zeta = 15^\circ$, $e = 0.5$.
Percentage of corrections is shown below (see explanations in the text)

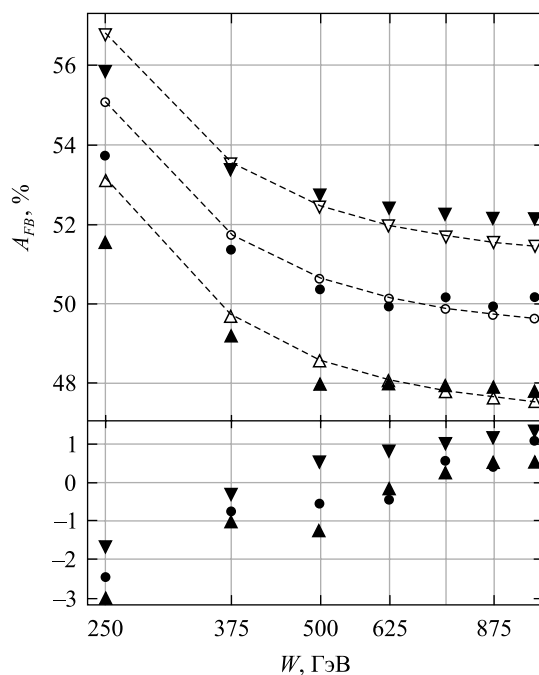


Рис. 6. Зависимость асимметрии рассеяния вперед-назад от энергии столкновения в с. ц. и. для $\zeta = 25^\circ$, $e = 0,6$.
Снизу приведены процентные значения поправок (пояснения в тексте)
Fig. 6. Dependence of the forward-backward asymmetry on the collision energy in c. m. s. with cut-off parameters $\zeta = 25^\circ$, $e = 0.6$.
Percentage of corrections is shown below (explanations in the text)

Также наблюдается такой достаточно интересный эффект: уменьшение рассматриваемой асимметрии за счет увеличения энергии в борновском приближении компенсируется ростом радиационных поправок, а это приводит к тому, что начиная с энергии около 500 ГэВ она практически перестает изменяться (в пределах точности численного интегрирования).

Из рис. 7 видно, что учет радиационных поправок приводит к росту поляризационной асимметрии для всех значений рассматриваемой энергии, причем с увеличением s величина этого изменения также растет. Такое поведение может быть количественно объяснено следующим образом. Разность в сечениях различных спиновых конфигураций остается примерно такой же, как и в случае вычислений для лидирующего порядка теории возмущений. Однако абсолютные значения сильно уменьшаются при более строгих критериях отбора событий. Это и приводит к росту асимметрии. Также мы наблюдаем схожую с рис. 6 картину: радиационные поправки к поляризационной асимметрии увеличиваются быстрее, чем уменьшается борновское сечение, и в результате A_p остается фактически постоянной для различных значений энергий.

На рис. 8 приведены зависимости асимметрий от параметров обрезания. Горизонтальные линии для асимметрий соответствуют борновским значениям. Параметр e принимает значения в диапазоне 0,2–0,9, как указывалось ранее. Следует обратить внимание, что при малых углах аколлинearности максимальные значения асимметрий наблюдаются при большей пороговой энергии фермионов (параметра e). При больших ζ поляризационная асимметрия перестает значительно зависеть от e (сужение закрашенной области).

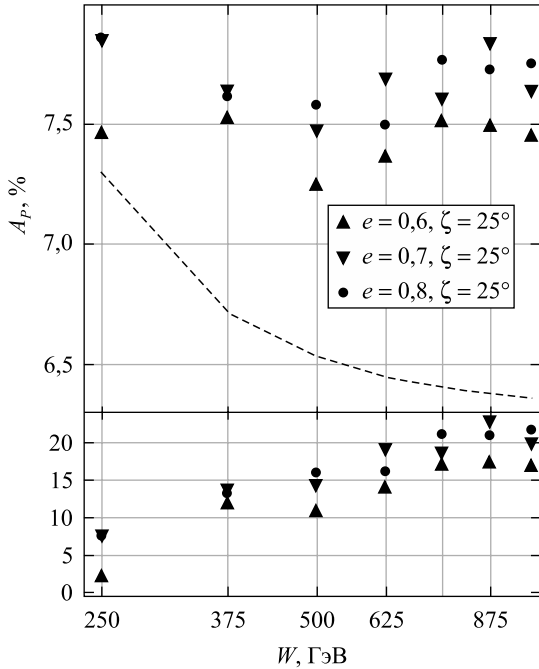


Рис. 7. Зависимость поляризационной асимметрии от энергии столкновения в с. ц. и.

Снизу приведены процентные значения поправок

Fig. 7. Dependence of the polarization asymmetry on the collision energy in c. m. s.

Percentage corrections are presented below

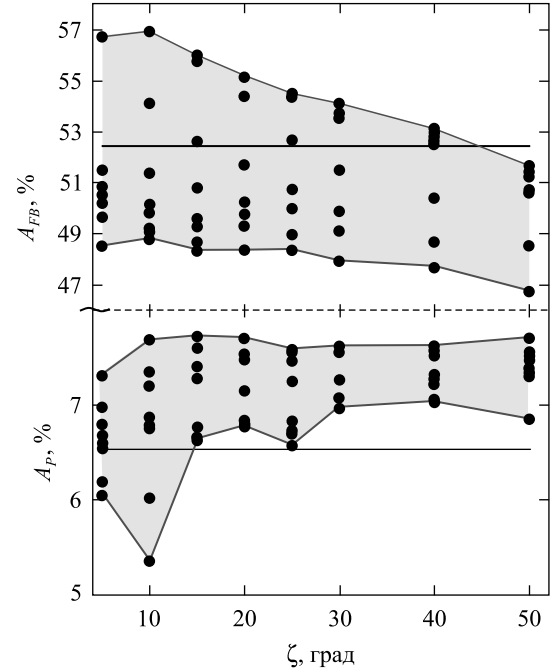


Рис. 8. Области значений асимметрий: вперед-назад (A_{FB}) и поляризационной (A_p) при энергии столкновения 250 ГэВ для различных пороговых энергий лептонов

Fig. 8. Magnitudes of forward-backward (A_{FB}) and polarization asymmetry (A_p) for the collision energy of 250 GeV for different threshold energies of leptons

Закключение

Малая величина отношения масс фермионов к вакуумному среднему поля Хиггса позволяет с достаточной степенью точности пренебречь вкладом хиггсовских полей и в силу этого значительно уменьшить число рассматриваемых диаграмм. Поскольку энергии в исследуемой области превышают вакуумное

среднее, то самосогласованность выкладок требует пренебрежения величинами порядка $\frac{m_f^2}{s}$, что и было сделано при расчетах. Это позволяет не рассматривать сечение вблизи малых углов рассеяния (при таких углах производить измерения затруднительно с экспериментальной точки зрения) и пренебрегать массами фермионов по сравнению с переменными t, u (за исключением случаев коллинеарных расходимостей).

С учетом указанных приближений в данной работе был произведен расчет интегральных характеристик изучаемого процесса: полного дифференциального сечения, поляризационной асимметрии и асимметрии вперед-назад.

Показано, что наибольшему влиянию подвержена поляризационная асимметрия, поскольку радиационные поправки увеличивают ее в два раза. Для A_{FB} эти поправки несколько скромнее и составляют около 5 %, в связи с чем наиболее важным инструментом в изучении рассматриваемого процесса является использование пучков поляризованных частиц в начальном состоянии.

Библиографические ссылки / References

1. Berestetskii VB, Pomeranchuk Ila. Formation of a μ -meson pair in positron annihilation. Letters to the editor. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. 1956;2(3):580.
2. Berends FA, Gaemers KJF, Gastmans R. Hard photon corrections to the process $e^+e^- \rightarrow \mu^+\mu^-$. *Nuclear Physics B*. 1973;57(2):381–400. DOI: 10.1016/0550-3213(73)90108-9.
3. Berends FA, Kleiss R. Distributions in the process $e^+e^- \rightarrow \mu^+\mu^-(\gamma)$. *Nuclear Physics B*. 1981;177(2):237–262. DOI: 10.1016/0550-3213(81)90390-4.
4. Berends FA, Kleiss R, Jadach S. Radiative corrections to muon pair and quark pair production in electron-positron collisions in the Z_0 region. *Nuclear Physics B*. 1982;202(1):63–88. DOI: 10.1016/0550-3213(82)90221-8.
5. Passarino G, Veltman M. One-loop corrections for e^+e^- annihilation into $\mu^+\mu^-$ in the Weinberg model. *Nuclear Physics B*. 1979;160(1):151–207. DOI: 10.1016/0550-3213(79)90234-7.
6. Passarino G. Hard bremsstrahlung corrections for the process $e^+e^- \rightarrow \mu^+\mu^-$. *Nuclear Physics B*. 1982;204(2):237–266. DOI: 10.1016/0550-3213(82)90147-X.
7. Igarashi M, Nakazawa N, Shimada T, Shimizu Y. Electroweak corrections to muon pair production in electron-positron annihilation at high energy. *Nuclear Physics B*. 1986;263(2):347–398. DOI: 10.1016/0550-3213(86)90122-7.
8. Fujimoto J, Igarashi M, Nakazawa N, Shimizu Y, Tobimatsu K. Radiative corrections to e^+e^- reactions in electroweak theory. *Progress of Theoretical Physics Supplement*. 1990;100:1–379. DOI: 10.1143/PTPS.100.1.
9. Hooft G't, Veltman MJG. Regularization and renormalization of gauge fields. *Nuclear Physics B*. 1972;44(1):189–213. DOI: 10.1016/0550-3213(72)90279-9.
10. Larin SA. The renormalization of the axial anomaly in dimensional regularization. *Physics Letters B*. 1993;303(1–2):113–118. DOI: 10.1016/0370-2693(93)90053-K.
11. Denner A. Techniques for the calculation of electroweak radiative corrections at the one-loop level and results for W-physics at LEP200. *Fortschritte Der Physik*. 1993;41(4):307–420. DOI: 10.1002/prop.2190410402.
12. Küblbeck J, Böhm M, Denner A. Feyn Arts – computer-algebraic generation of Feynman graphs and amplitudes. *Computer Physics Communications*. 1990;60(2):165–180. DOI: 10.1016/0010-4655(90)90001-H.
13. Mertig R, Böhm M, Denner A. Feyn Calc – computer-algebraic calculation of Feynman amplitudes. *Computer Physics Communications*. 1991;64(3):345–359. DOI: 10.1016/0010-4655(91)90130-D.
14. Hahn T, Pérez-Victoria M. Automated one-loop calculations in four and D dimensions. *Computer Physics Communications*. 1999;118(2–3):153–165. DOI: 10.1016/S0010-4655(98)00173-8.
15. Montagna G, Nicrosini O, Passarino G. Analytic final state corrections to $e^+e^- \rightarrow f\bar{f}$ with realistic cuts. *Physics Letters B*. 1993;309(3–4):436–442.

Статья поступила в редколлегию 19.07.2019.
Received by editorial board 19.07.2019.

УДК 539.12.01

ПРОЦЕСС РОЖДЕНИЯ W -БОЗОНА В ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЭЛЕКТРОН-ФОТОННЫХ СТОЛКНОВЕНИЯХ

И. А. ШЕРШЕНЬ¹⁾, Т. В. ШИШКИНА¹⁾

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

В работе исследуется процесс рождения W -бозона в высокоэнергетических электрон-фотонных столкновениях и использование прецизионных измерений его характеристик для поиска отклонений от Стандартной модели. В частности, обсуждается ряд расширенных калибровочных моделей, включающих аномальные мультибозонные взаимодействия как перспективное направление исследования «новой физики». Выполнен численный анализ полных сечений процессов с учетом радиационных поправок низшего порядка в мягкофотонном приближении в рамках Стандартной модели и за ее пределами, анализируются кинематические особенности сечений. Рассчитаны ограничения на аномальные трехбозонные константы связи и определены кинематические области поиска их проявлений в ходе экспериментов на Международном линейном коллайдере. Показано, что поиски «новой физики» на базе исследований электрон-фотонных столкновений лучше всего производить в окрестности пика рождения W -бозона. Также установлено, что будущие эксперименты на линейных ускорителях, обладающих высокой светимостью, позволят значительно уточнить ограничения на аномальные калибровочные константы связи.

Ключевые слова: сечение; «новая физика»; Стандартная модель; линейные коллайдеры.

W-BOSON PRODUCTION IN THE HIGH ENERGY ELECTRON-PHOTON COLLISIONS

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

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

Corresponding author: I. A. Shershan (ivan.shershan@gmail.com)

In this paper the analysis of W -boson production process in high-energy electron-photon collisions as a tool to search for deviations from the Standard Model is considered. In particular, a set of extended gauge models, including anomalous multi-boson interactions, are discussed as a promising way for «new physics» study. A numerical analysis of the total cross sections of the processes was carried out. The lowest order radiative corrections in the soft-photon approximation within the Standard Model are taken into account. Calculations beyond the Standard Model was performed, the kinematic features of the cross sections were identified. The restrictions on the anomalous triple gauge boson coupling constants were analyzed and the kinematic areas to the search for their manifestations were obtained during the experiments at the International Linear Collider. The paper shows that the search for «new physics» effects based on electron-photon collisions around the W -boson production peak is the maximal promising. It was also shown that future experiments at high luminosity linear colliders will significantly clarify the constraints on anomalous gauge coupling constants.

Keywords: cross section; «new physics»; Standard Model; International Linear Collider.

Образец цитирования:

Шершень ИА, Шишкина ТВ. Процесс рождения W -бозона в высокоэнергетических электрон-фотонных столкновениях. Журнал Белорусского государственного университета. Физика. 2019;3:41–50.
<https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-3-41-50>

For citation:

Shershan IA, Shishkina TV. W -boson production in the high energy electron-photon collisions. *Journal of the Belarusian State University. Physics*. 2019;3:41–50. Russian.
<https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-3-41-50>

Авторы:

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

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

Authors:

Ivan A. Shershan, postgraduate student at the department of theoretical physics and astrophysics, faculty of physics.
ivan.shershan@gmail.com

Tatiana V. Shishkina, doctor of science (physics and mathematics), full professor; professor at the department of theoretical physics and astrophysics, faculty of physics.
shishkina.tatiana.v@gmail.com

Введение

В настоящее время Стандартная модель (СМ) взаимодействия элементарных частиц наиболее разработана и удовлетворительно описывает большинство явлений, имеющих место в ускорительных экспериментах [1]. Однако очевидно, что СМ не является универсальной, а лишь низкоэнергетическим приближением некоторой более обширной модели. Несмотря на значительный прогресс в области коллайдерной техники и физики элементарных частиц в целом, в последние несколько десятилетий не было обнаружено эффектов, позволяющих говорить как о наличии эффектов «новой физики» (физики за рамками СМ), так и о действенных путях построения новых расширенных калибровочных моделей (РКМ) взаимодействия элементарных частиц.

Наблюдается разрыв между теорией и экспериментом. Связано это с тем фактом, что, исходя из общих принципов, возможно построение расширенных калибровочных моделей, частным пределом которых и является СМ. Неабелева структура СМ позволяет создать огромное количество таких моделей. Однако особую ценность из них имеют:

- обладающие максимальной простотой;
- предсказывающие наличие эффектов, которые можно обнаружить в ходе текущих или уже запланированных экспериментов на ускорителях.

Наиболее простыми являются модели, включающие в себя аномальные вклады в уже существующие и принципиально новые мультибозонные взаимодействия [2–5]. Из общих соображений возможно построение обобщенного лагранжиана для подобного рода взаимодействий на базе операторов конечной размерности [6]. Такой подход именуется методом эффективного лагранжиана, включающим в себя не только упомянутые выше операторы, но и соответствующие им новые аномальные константы связи (АКС) [7]. Метод эффективного лагранжиана удобен тем, что позволяет не ограничиваться какой-либо одной моделью, что крайне важно при теоретическом и экспериментальном определениях ограничений на возможные численные значения АКС.

Попытки обнаружения вклада аномальных бозонных взаимодействий уже предпринимались в ряде экспериментов LEP, Tevatron и LHC [8]. В результате этих исследований были получены ограничения на бозонные АКС и показано, что, если таковые эффекты и имеют место, вклад их относительно мал. Из этого, очевидно, следует несколько выводов:

- 1) для обнаружения возможных эффектов требуются коллайдеры нового поколения, с помощью которых можно значительно повысить энергию взаимодействия частиц и точность экспериментов;
- 2) требуется высокая точность теоретических расчетов соответствующих процессов как в рамках СМ (очевидно, с учетом радиационных поправок низшего порядка), так и для РКМ.

Огромным потенциалом для изучения аномальных трех- и четырехбозонных взаимодействий обладают процессы на линейных коллайдерах нового поколения, которые позволят исследовать не только лептон-лептонные, но и фотон-фотонные, фотон-лептонные столкновения при высоких энергиях с возможностью поляризации начальных частиц и детектирования поляризации конечных продуктов реакции [9; 10].

В рамках данной работы исследуется процесс $e^- \gamma \rightarrow \nu_e W^-$ [11; 12], имеющий место в $e\gamma$ -режиме Международного линейного коллайдера (МЛК) (ILC) [13–15]. Этот процесс играет уникальную роль в исследованиях трехбозонных АКС, поскольку является единственным, на базе которого можно наблюдать $W^* W \gamma$ -аномальную вершину [16; 17]. Экспериментально данный процесс до настоящего времени не исследовался, поскольку не существует рабочих установок на встречных $e\gamma$ -пучках, позволяющих производить тяжелые W -бозоны в конечном состоянии.

Кинематика процессов

Рассмотрим следующий процесс:

$$e^-(p, m_e) + \gamma(k, 0) \rightarrow W^-(p_1, m_W) + \nu_e(k_1, 0),$$

где $p(p_1)$ и $k(k_1)$ – 4-импульсы начальных (конечных) частиц; m_e и m_W – массы электрона и W -бозона соответственно.

Для описания кинематики процесса $2 \rightarrow 2$ необходимы два параметра, в качестве которых в ковариантных расчетах часто используют инварианты Мандельштама:

$$s = (p + k)^2, \\ t \equiv -Q^2 = (p - p_1)^2.$$

В таком случае дифференциальное сечение процесса может быть записано в виде

$$d\sigma = \frac{1}{8\pi(s - m_e^2)^2} |\mathfrak{M}|^2 dQ^2, \quad (1)$$

где $|\mathfrak{M}|^2$ – квадрат модуля матричного элемента. Тогда полное сечение определяется формулой

$$\sigma = \int_{Q_{\min}^2}^{Q_{\max}^2} d\sigma.$$

Пределы интегрирования могут быть вычислены как

$$Q_{\max(\min)}^2 = \frac{(s + m_e^2)(s + m_W^2) \pm (s - m_e^2)(s - m_W^2)}{2s} - m_W^2.$$

Радиационные поправки

В случае учета радиационных поправок низшего порядка квадрат модуля матричного элемента в выражении (1) можно переписать в виде

$$|\mathfrak{M}|^2 = |\mathfrak{M}_{\text{борн}}|^2 + 2\text{Re}(\mathfrak{M}_{\text{вирт}} \cdot \mathfrak{M}_{\text{борн}}^*),$$

где $\mathfrak{M}_{\text{борн}}$ – амплитуда процесса в древесном (борновском) приближении; $\mathfrak{M}_{\text{вирт}}$ – амплитуда, включающая однопетлевые поправки. Радиационные поправки описываются 60 собственно-энергетическими диаграммами, 96 вершинными диаграммами и 30 диаграммами типа «бокс». В древесном приближении процесс $e^- \gamma \rightarrow \nu_e W^-$ описывается двумя диаграммами Фейнмана, приведенными на рис. 1.

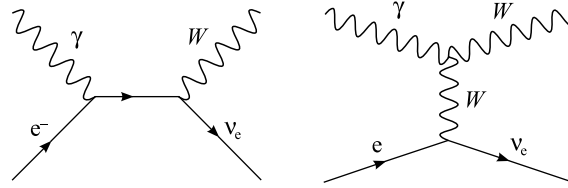


Рис. 1. Диаграммы процесса $e^- \gamma \rightarrow \nu_e W^-$ в древесном приближении через s -каналы (а) и u -каналы (б)

Fig. 1. Diagrams of the $e^- \gamma \rightarrow \nu_e W^-$ scattering in the tree level for the s -channels (a) and u -channels (b)

Вклад однопетлевых диаграмм содержит нефизические ультрафиолетовые (УФ) и инфракрасные (ИК) расходимости. УФ-расходимости устраняются путем учета вклада контрчленов в соответствии с выбранной схемой перенормировки. Нами была использована перенормировка на массовой поверхности. ИК-расходимость устраняется путем учета вклада мягкофотонного тормозного излучения. Данный вклад можно записать как

$$\frac{d\sigma_{\text{МЯГК}}}{dQ^2} = \delta_{\text{МЯГК}} \frac{d\sigma_{\text{борн}}}{dQ^2}.$$

Множитель $\delta_{\text{МЯГК}}$ вычисляется по формуле

$$\delta_{\text{МЯГК}} = -\frac{\alpha}{2\pi^2} [I(p) + I(p_1) - I(p, p_1)],$$

где функции $I(q)$ и $I(q_i, q_j)$ выражаются следующим образом [18; 19]:

$$I(q) = \pi \left[-\Delta^{IR} + \ln \frac{4\Delta E^2}{\mu^2} + \frac{q^0}{|\vec{q}|} \ln \frac{q^0 - |\vec{q}|}{q^0 + |\vec{q}|} \right],$$

$$I(q_i, q_j) = 2\pi \frac{\zeta^2 x_{ij}}{\zeta^2 m_i^2 - m_j^2} \left[\frac{1}{2} \ln \frac{\zeta^2 m_i^2}{m_j^2} \left(-\Delta^{IR} + \ln \frac{4\Delta E}{\mu^2} \right) + \right. \\ \left. + \left\{ \frac{1}{4} \ln^2 \frac{u^0 - |\vec{u}|}{u^0 + |\vec{u}|} + \text{Li}_2 \left(1 - \frac{u^0 + |\vec{u}|}{v} \right) + \text{Li}_2 \left(1 - \frac{u^0 - |\vec{u}|}{v} \right) \right\} \right]_{u=q_j}^{u=\zeta q_i},$$

здесь

$$\zeta = \frac{x_{ij} + \sqrt{x_{ij}^2 - 4m_i^2 m_j^2}}{2m_i^2}; \quad v = \frac{\zeta^2 m_i^2 - m_j^2}{2(\zeta q_i^0 - q_j^0)}, \quad x_{ij} = 2q_i q_j;$$

Δ^{IR} – регуляризатор ИК-расходимости; ΔE – параметр обрезания по энергии тормозного фотона; μ – массовый параметр 'т Хоофта, который возникает в интегралах вследствие применения размерной регуляризации. В случае рассматриваемого процесса

$$p^0 = \frac{s + m_e^2}{2\sqrt{s}}, \quad p_1^0 = \frac{s + m_W^2}{2\sqrt{s}},$$

$$|\vec{p}| = \frac{s - m_e^2}{2\sqrt{s}}, \quad |\vec{p}_1| = \frac{s - m_W^2}{2\sqrt{s}},$$

$$x_{ij} = Q^2 + m_e^2 + m_W^2.$$

Аномальные трехбозонные взаимодействия

Эффективный лагранжиан $WW\gamma$ -взаимодействия может быть записан как [7]

$$\mathcal{L}_{WW\gamma} = -ie \left[\kappa_\gamma W_\mu W_\nu F^{\mu\nu} + \frac{\lambda_\gamma}{m_W^2} W_{\lambda\mu} W^\mu{}_\nu F^{\nu\lambda} + \tilde{\kappa}_\gamma W_\mu W_\nu \tilde{F}^{\mu\nu} + \frac{\tilde{\lambda}_\gamma}{m_W^2} W_{\lambda\mu} W^\mu{}_\nu \tilde{F}^{\nu\lambda} \right], \quad (2)$$

где $\kappa_\gamma, \lambda_\gamma$ – CP -симметричные константы связи; $\tilde{\kappa}_\gamma, \tilde{\lambda}_\gamma$ – CP -антисимметричные константы связи; $F^{\mu\nu}$ – тензор электромагнитного поля; W^μ – поле W -бозона; $V_{\mu\nu} = \partial_\mu V_\nu - \partial_\nu V_\mu$, $\tilde{V}_{\mu\nu} = \frac{1}{2} \epsilon_{\mu\nu\rho\sigma} V^{\rho\sigma}$. Для перехода в СМ надо положить для АКС следующие значения:

$$\kappa_\gamma = 1, \quad \lambda_\gamma = \tilde{\kappa}_\gamma = \tilde{\lambda}_\gamma = 0. \quad (3)$$

Исходя из соотношений (3), удобно ввести дополнительный параметр $\delta\kappa_\gamma = \kappa_\gamma - 1$, а при вычислениях перейти от эффективного лагранжиана к эффективной вершинной функции, т. е. от координатного представления к импульсному. Фактически это означает введение дополнительного правила Фейнмана для соответствующей $W^*W\gamma$ -вершины. Тогда вершинная функция $\Gamma_\gamma^{\alpha\beta\mu}$ может быть представлена как

$$\Gamma_\gamma^{\alpha\beta\mu}(q, q, P) = \frac{\lambda_\gamma}{m_W^2} (q_\nu g^{\rho\alpha} - q^\rho g_\nu^\alpha) (\bar{q}_\rho g_\sigma^\beta - \bar{q}_\sigma g_\rho^\beta) (P^\sigma g^{\mu\nu} - P^\nu g^{\mu\sigma}) + \\ + \frac{\tilde{\lambda}_\gamma}{2m_W^2} (q_\nu g^{\rho\alpha} - q^\rho g_\nu^\alpha) (\bar{q}_\rho g_\sigma^\beta - \bar{q}_\sigma g_\rho^\beta) (P_\gamma g_\tau^\mu - P_\tau g_\gamma^\mu) \epsilon^{\sigma\nu\tau} - \\ - \delta\kappa_\gamma (P^\alpha g^{\beta\mu} - P^\beta g^{\alpha\mu}) + \tilde{\kappa}_\gamma \epsilon^{\alpha\beta\mu\nu} P_\nu.$$

Здесь $q = p_1$, $\bar{q} = k - p_1$, $P = -k$. Вклад аномального взаимодействия описывается диаграммой, представленной на рис. 1, б. Если этой диаграмме поставить в соответствие амплитуду $\mathcal{M}_{\text{зрСМ}}$, то вклад АКС можно записать в виде

$$|\mathcal{M}_{\text{аном}}|^2 = |\mathcal{M}_{\text{зрСМ}}|^2 + 2 \text{Re}(\mathcal{M}_{\text{зрСМ}} \cdot \mathcal{M}_{\text{борн}}^*).$$

Подводя итог, имеем конечное выражение для дифференциального сечения рассеяния:

$$d\sigma_{\text{полн}} = d\sigma_{\text{борн}}(1 + \delta_{\text{мягк}}) + d\sigma_{\text{вирт}} + d\sigma_{\text{аном}}.$$

Ограничения на АКС

Поскольку вклад аномальных взаимодействий (если таковой имеется), очевидно, мал, крайне важно в процессе экспериментов на ускорителях элементарных частиц обеспечить высокую точность. Таковая может быть достигнута не столько за счет улучшения методов детектирования, сколько за счет увеличения светимости коллайдера. В связи с этим наиболее перспективными, по-видимому, являются исследования полных сечений соответствующих процессов.

Ограничения на АКС вводятся исходя из того факта, что вклад аномальных взаимодействий должен превышать экспериментальную погрешность (σ -критерий). Среднеквадратичное отклонение σ определяется из эксперимента. Однако в прогностических расчетах используется значение σ , выведенное из наиболее общих соображений. Условно погрешность может быть разделена на два вклада: абсолютную и относительную. Абсолютная погрешность $\sigma^{\text{абс}}$ фактически представляет собой «цену деления» коллайдера как измерительного прибора, величина которой выражается через интегральную светимость $L_{\text{инт}}$ установки:

$$\sigma^{\text{абс}} \sim L_{\text{инт}}^{-1}.$$

По предварительным оценкам, абсолютная погрешность эксперимента на МЛК в $e\gamma$ -режиме работы будет равна 100 фб. Относительная погрешность $\sigma^{\text{отн}}$ измерения заключается в возможности отделения вклада аномальных взаимодействий на фоне остальных процессов. Мы считали, что $\sigma^{\text{отн}}$ составляет $\sim 1\%$ полного сечения при текущей энергии взаимодействия $\sigma_0(s)$. Тогда

$$\sigma^{\text{погр}} = 100 + 0,01\sigma_0(s),$$

здесь $\sigma^{\text{погр}}$ измеряется в фемтобарнах.

Так как в выражении (2) присутствует целых четыре АКС, при анализе экспериментальных данных применяют метод N -параметрического фитирования, который заключается в том, что N параметров считаются свободными, остальные фиксированы и совпадают со значениями СМ. В данной работе используется двухпараметрическое фитирование по парам CP -антисимметричных $(\tilde{\kappa}_\gamma, \tilde{\lambda}_\gamma)$ и CP -симметричных параметров $(\delta\kappa_\gamma, \lambda_\gamma)$ соответственно.

Численный анализ

Амплитуды и квадраты матричных элементов процессов взаимодействия частиц определялись с помощью системы *Wolfram Mathematica* с привлечением пакетов *FeynCalc*, *FormCalc*. Полученные аналитические выражения были использованы для написания программы численных расчетов на языке C++. Для вычисления однопетлевых интегралов Пассарино – Вельтмана применялся пакет *Loop Tools*, интегрирование осуществлялось по адаптивному квази-Монте-Карло алгоритму *Suave*. Для численных расчетов были выбраны следующие значения параметров эксперимента:

- масса бозона Хиггса $m_H = 125,26$ ГэВ;
- параметр обрезания энергии мягких фотонов $\Delta E = 0,01\sqrt{s}$;
- обрезание по углу рассеяния $\Delta\theta = 20^\circ$.

На рис. 2 представлены графики полных сечений и относительных радиационных поправок. Отметим основные особенности данных графиков. При энергии 320 ГэВ на кривой полного сечения (см. рис. 2, а) явным образом присутствует пик рождения W -бозона величиной 136 пб, после чего значение сечения падает, а при энергии 1 ТэВ достигает уровня 42 пб. Вклад радиационных поправок является значительным и уменьшает абсолютную величину полного сечения в области пика рождения на 6 пб. В свою очередь, абсолютная величина относительных поправок увеличивается с ростом энергии, а при энергии 3 ТэВ достигает 43 %.

Подобное поведение полных сечений процесса свидетельствует о том, что поиск проявлений АКС удобно производить в окрестности W -пика в том случае, если относительный вклад аномальных взаимодействий велик. Если вклад выражен ярче по абсолютной величине, естественно для его нахождения использовать пологий спуск графика в области 500–1000 ГэВ. При незначительных эффектах, индуцируемых АКС, их исследование следует осуществлять при энергиях, превышающих 1 ТэВ.

На рис. 3 представлены ограничения на значения АКС $(\delta\kappa_\gamma, \lambda_\gamma)$ в результате двухпараметрического фитирования при различных энергиях взаимодействия. Кривые 1 и 2 определяют области, удовлетворяющие

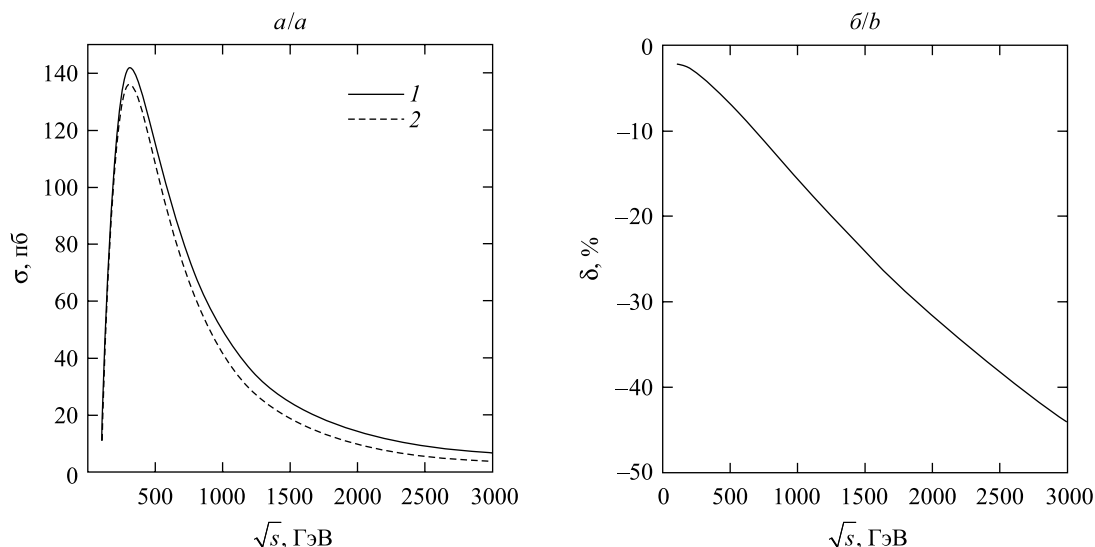


Рис. 2. Полные сечения (а) процесса $e^- \gamma \rightarrow \nu_e W^-$ в борновском приближении (1), с учетом радиационных поправок низшего порядка (2) и относительные радиационные поправки (б)

Fig. 2. Total cross section (a) for the $e^- \gamma \rightarrow \nu_e W^-$ scattering in the Born approximation (1), including the lowest order radiative corrections (2) and the relative radiative corrections (b)

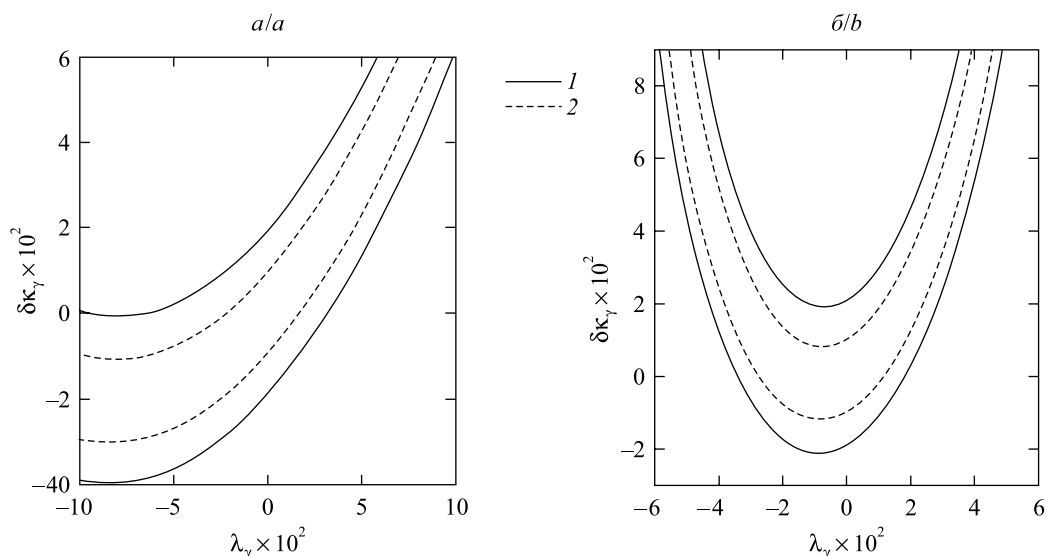


Рис. 3. Результаты двухпараметрического фитирования CP -четных $(\delta\kappa_\gamma, \lambda_\gamma)$ -связей с доверительной вероятностью 95 % (1) и 68 % (2) при энергиях рассеяния 500 ГэВ (а) и 1000 ГэВ (б)

Fig. 3. Two-parameters fit of CP -odd $(\delta\kappa_\gamma, \lambda_\gamma)$ -couplings with 95 % (1) and 68 % (2) confidence level for interaction energy 500 GeV (a) and 1000 GeV (b)

критериям σ и 2σ , или 68- и 95-процентной доверительной вероятности отсутствия проявлений АКС соответственно. Отметим, что для параметров МЛК обе константы имеют порядок 10^{-2} , а при возрастании энергии ограничения усиливаются вблизи окрестностей их значений, соответствующих СМ.

Отличия во вкладах $\delta\kappa_\gamma$ и λ_γ хорошо демонстрирует рис. 4. Анализ графиков позволяет сделать ряд важных выводов. Во-первых, вблизи пика рождения вклады обеих констант существенны, и, очевидно, возможен поиск их проявлений в этой кинематической области. Однако при увеличении энергии $\delta\kappa_\gamma$ -вклад значительно снижается, в то время как λ_γ -вклад начинает стремительно расти при энергии 800 ГэВ, достигая 20 пб при энергии 3 ТэВ. Во-вторых, ограничения на CP -инвариантные константы связи, которые будут определены в экспериментах на МЛК, в несколько раз лучше, чем ранее полученные на LEP [8].

Аналогичным образом можно провести анализ CP -антисимметричных АКС (рис. 5). По величине АКС имеют порядок 10^{-1} и более отчетливую локализацию около своих значений в рамках предсказаний СМ. Отметим также существенное различие в поведении CP -нечетных констант связи с ростом энергии, проиллюстрированное на рис. 6, который отражает результат однопараметрического фитирования по каждой из констант.

При увеличении энергии вклад АКС растет, становясь заметным начиная с энергии около 800 ГэВ. Следует отметить также, что рост $\tilde{\lambda}_\gamma$ -вклада существенно выше роста $\tilde{\kappa}_\gamma$ -вклада. Подобное поведение объясняется наличием калибровочного сокращения: в то время как вклад операторов размерности 4 падает, на их фоне вклад операторов размерности 6 начинает повышаться.

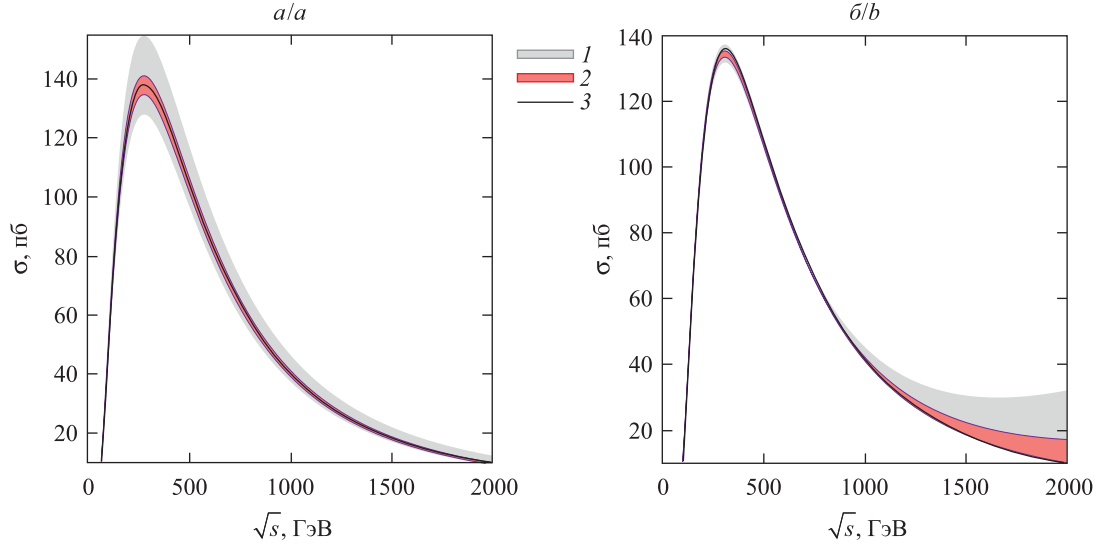


Рис. 4. Полные сечения при наличии $\delta\kappa_\gamma$ -связей (а) и λ_γ -связей (б) из ограничений, полученных на LEP (1), рассчитанных для МЛК (2) в сравнении со значением в рамках предсказаний СМ (3)

Fig. 4. The total cross sections for $\delta\kappa_\gamma$ (a) and λ_γ (b) couplings using the restrictions for LEP (1) and ILC (2) and within the SM predictions (3)

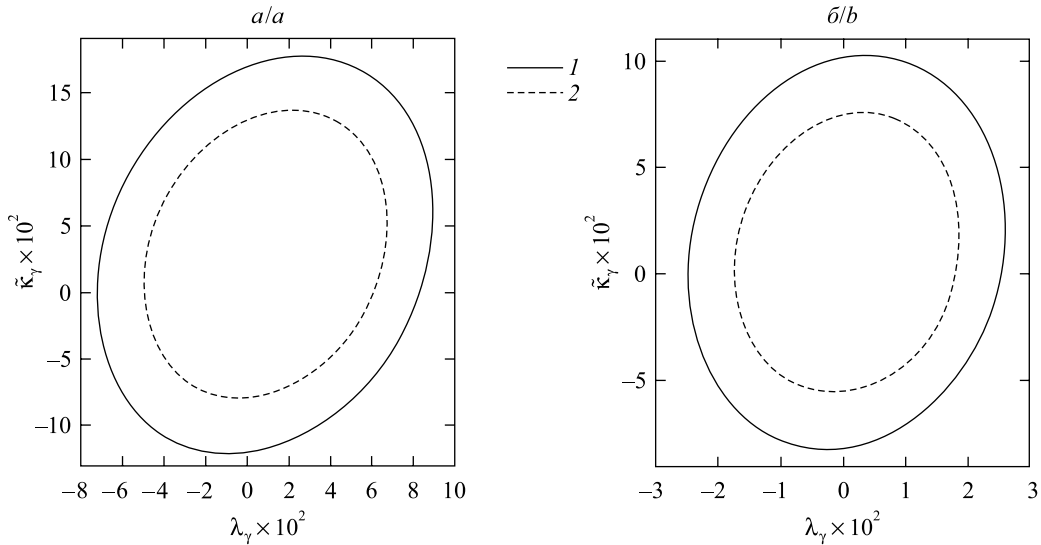


Рис. 5. Результаты двухпараметрического фитирования CP -нечетных $(\tilde{\kappa}_\gamma, \tilde{\lambda}_\gamma)$ -связей с доверительной вероятностью 95 % (1) и 68 % (2) при энергиях рассеяния 500 ГэВ (а) и 1000 ГэВ (б)

Fig. 5. Two-parameters fit of CP -even $(\tilde{\kappa}_\gamma, \tilde{\lambda}_\gamma)$ -couplings with 95 % (1) and 68 % (2) confidence level for interaction energy 500 GeV (a) and 1000 GeV (b)

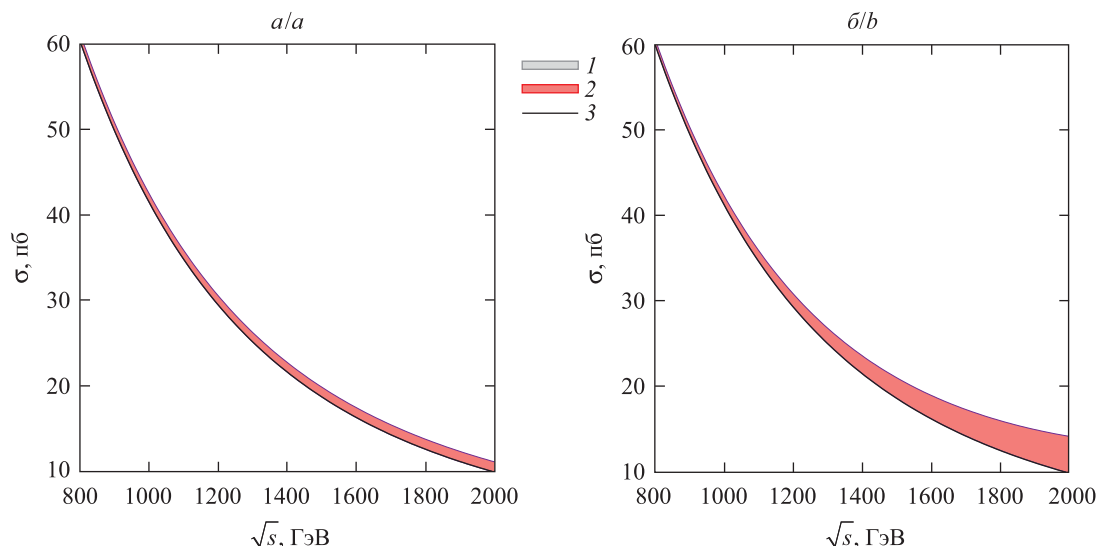


Рис. 6. Области возможных значений полных сечений при наличии $\tilde{\kappa}_\gamma$ -связей (а) и $\tilde{\lambda}_\gamma$ -связей (б) из ограничений, рассчитанных для МЛК (1) в сравнении со значениями, полученными в рамках СМ (2)
Fig. 6. The area of possible the total cross section values for $\tilde{\kappa}_\gamma$ (a) and $\tilde{\lambda}_\gamma$ (b) couplings from the restrictions for ILC (1) and within the SM (2)

Резюмируя сказанное, приведем таблицу, отражающую результаты однопараметрического фитирования рассмотренных АКС в сравнении с данными, полученными в эксперименте LEP.

Результаты однопараметрического определения ограничений на АКС в сравнении с данными LEP с 95-процентной доверительной вероятностью
One-parameter fit results of constraints on the AGC and LEP data with 95 % confidence level

АКС	LEP	МЛК	
		0,5 ТэВ	1,0 ТэВ
$\delta\kappa_\gamma$	[−99; 66]	[−18,78; 19,46]	[−19,14; 21,09]
λ_γ	[−59; 17]	[−64,11; 31,83]	[−34,30; 18,47]
$\tilde{\kappa}_\gamma$	–	[−120,8; 170,3]	[−82,07; 101,5]
$\tilde{\lambda}_\gamma$	–	[−72,23; 83,93]	[−24,75; 25,60]

Заключение

Изучение $W^*W\gamma$ -аномального взаимодействия на базе процесса $e^-\gamma \rightarrow \nu_e W^-$ на линейных коллайдерах представляется крайне перспективной задачей современной теоретической физики. На ускорителях нового поколения, таких как МЛК, будет возможно существенное уточнение ограничений как на уже исследуемые аномальные связи, так и на связи, изучение которых ранее было невозможно в силу недостаточных энергий взаимодействия и точности экспериментальных измерений. Превентивный учет и анализ радиационных поправок низшего порядка, произведенный в данной работе, позволяет сделать вывод о необходимости рассмотрения АКС совместно с радиационными поправками, что крайне важно для фиксации отклонений от СМ. Безусловно, учет поляризационных эффектов и энергетического спектра начальных фотонов вкупе с вкладом жесткого тормозного излучения позволит уточнить теоретические предсказания и практическую применимость полученных результатов, что является естественным путем дальнейших исследований в данном направлении.

Библиографические ссылки

1. Aad G, Abajyan T, Abbott B, Abdallah J, Abdel Khalek S, Abdelalim AA, et al. [ATLAS Collaboration]. Observation of a new particle in the search for the Standard Model Higgs boson with the ATLAS detector at the LHC. *Physics Letters B*. 2012;716(1):1–29. DOI: 10.1016/j.physletb.2012.08.020.

2. Eboli OJP, Gonzalez-Garcia MC, Novaes SF. Quartic anomalous couplings in $e\gamma$ colliders. *Nuclear Physics B*. 1994;411(2–3): 381–396. DOI: 10.1016/0550-3213(94)90455-3.
3. Brodsky SJ, Rizzo TG, Schmidt I. W anomalous moments and the polarization asymmetry zero in $e\gamma \rightarrow \nu W$. *Physical Review D*. 1995;52(9):4929. DOI: 10.1103/PhysRevD.52.4929.
4. Aihara H, Barklow T, Baur U, Busenitz J, Errede S, Fuess TA, et al. Anomalous gauge boson interactions. In: Barklow TL, editor. *Electroweak symmetry breaking and new physics at the TeV scale*. 1996. p. 488–547. DOI: 10.1142/9789812830265_0009.
5. Denner A, Dittmaier S, Roth M, Wackeroth D. Predictions for all processes $e^-e^+ \rightarrow \text{fermions} + \gamma$. *Nuclear Physics B*. 1999; 560(1–3):33–65. DOI: 10.1016/S0550-3213(99)00437-X.
6. Degrande C. A basis of dimension-eight operators for anomalous neutral triple gauge boson interactions. *Journal of High Energy Physics*. 2014;2014(2):101. DOI: 10.1007/JHEP02(2014)101.
7. Hagiwara K, Peccei RD, Zeppenfeld D, Hikasa K. Probing the weak boson sector in $e^-e^+ \rightarrow W^+W^-$. *Nuclear Physics B*. 1987; 282:253–307. DOI: 10.1016/0550-3213(87)90685-7.
8. ALEPH Collaboration, DELPHI collaboration, L3 Collaboration, OPAL Collaboration, LEP Electroweak Working Group. Electroweak measurements in electron – positron collisions at W -boson-pair energies at LEP. *Physics reports*. 2013;532(4):119–244. DOI: 10.1016/j.physrep.2013.07.004.
9. Ginzburg IF, Kotkin GL, Serbo VG, Telnov VI. Colliding γe and $\gamma\gamma$ beams based on the single-pass e^+e^- colliders (vlepp type). *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*. 1983;205(1–2):47–68. DOI: 10.1016/0167-5087(83)90173-4.
10. Ginzburg IF, Kotkin GL, Panfil SL, Serbo VG, Telnov VI. Colliding γe and $\gamma\gamma$ beams based on single-pass e^+e^- accelerators. II. Polarization effects, monochromatization improvement. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*. 1984;219(1):5–24. DOI: 10.1016/0167-5087(84)90128-5.
11. Denner A, Dittmaier S. Electroweak radiative corrections to $e^- \gamma \rightarrow W^- \nu_e$. *Nuclear Physics B*. 1993;398(2):239–264. DOI: 10.1016/0550-3213(93)90108-2.
12. Böhm M, Dittmaier S. The hard bremsstrahlung process $e^- \gamma \rightarrow W^- \nu_e$. *Nuclear Physics B*. 1993;409(1):3–21. DOI: 10.1016/0550-3213(93)90444-T.
13. Baer H, Barklow T, Fujii K, Gao Y, Hoang A, Kanemura S, et al., editors. *The International Linear Collider. Technical Design Report. Volume 2: Physics*. 2013. 189 p.
14. Шершень ИА, Шишкина ТВ. Исследование фермионов различных поколений в процессах столкновения с фотонами высокой энергии. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика*. 2017;1:67–72.
15. Шершень ИА, Шишкина ТВ. Рождение одиночных калибровочных бозонов в процессах высокоэнергетических лептон-фотонных столкновений. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика*. 2018;2:125–132.
16. Anipko DA, Ginzburg IF, Pak AV. Study of anomalous couplings of gauge bosons in the reaction $e^- \gamma \rightarrow W^- \nu \rightarrow l \bar{\nu} \nu$. *Physics of Atomic Nuclei*. 2004;67(12):2209–2215. DOI: 10.1134/1.1842301.
17. Kumar S, Poulouze P. Probing $WW\gamma$ coupling through $e^- \gamma \rightarrow \nu_e W^-$ at ILC. *International Journal of Modern Physics A*. 2015; 30(36):1550215. DOI: 10.1142/S0217751X15502152.
18. 't Hooft G, Veltman M. Scalar one-loop integrals. *Nuclear Physics B*. 1979;153:365–401. DOI: 10.1016/0550-3213(79)90605-9.
19. Akhundov A, Bardin D, Kalinovskaya L, Riemann T. Model independent QED corrections to the process $ep \rightarrow eX$. *Fortschritte der Physik*. 1996;44(5):373–482. DOI: 10.1002/prop.2190440502.

References

1. Aad G, Abajyan T, Abbott B, Abdallah J, Abdel Khalek S, Abdelalim AA, et al. [ATLAS Collaboration]. Observation of a new particle in the search for the Standard Model Higgs boson with the ATLAS detector at the LHC. *Physics Letters B*. 2012;716(1):1–29. DOI: 10.1016/j.physletb.2012.08.020.
2. Eboli OJP, Gonzalez-Garcia MC, Novaes SF. Quartic anomalous couplings in $e\gamma$ colliders. *Nuclear Physics B*. 1994;411(2–3): 381–396. DOI: 10.1016/0550-3213(94)90455-3.
3. Brodsky SJ, Rizzo TG, Schmidt I. W anomalous moments and the polarization asymmetry zero in $e\gamma \rightarrow \nu W$. *Physical Review D*. 1995;52(9):4929. DOI: 10.1103/PhysRevD.52.4929.
4. Aihara H, Barklow T, Baur U, Busenitz J, Errede S, Fuess TA, et al. Anomalous gauge boson interactions. In: Barklow TL, editor. *Electroweak symmetry breaking and new physics at the TeV scale*. 1996. p. 488–547. DOI: 10.1142/9789812830265_0009.
5. Denner A, Dittmaier S, Roth M, Wackeroth D. Predictions for all processes $e^-e^+ \rightarrow \text{fermions} + \gamma$. *Nuclear Physics B*. 1999; 560(1–3):33–65. DOI: 10.1016/S0550-3213(99)00437-X.
6. Degrande C. A basis of dimension-eight operators for anomalous neutral triple gauge boson interactions. *Journal of High Energy Physics*. 2014;2014(2):101. DOI: 10.1007/JHEP02(2014)101.
7. Hagiwara K, Peccei RD, Zeppenfeld D, Hikasa K. Probing the weak boson sector in $e^-e^+ \rightarrow W^+W^-$. *Nuclear Physics B*. 1987; 282:253–307. DOI: 10.1016/0550-3213(87)90685-7.
8. ALEPH Collaboration, DELPHI collaboration, L3 Collaboration, OPAL Collaboration, LEP Electroweak Working Group. Electroweak measurements in electron – positron collisions at W -boson-pair energies at LEP. *Physics reports*. 2013;532(4):119–244. DOI: 10.1016/j.physrep.2013.07.004.
9. Ginzburg IF, Kotkin GL, Serbo VG, Telnov VI. Colliding γe and $\gamma\gamma$ beams based on the single-pass e^+e^- colliders (vlepp type). *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*. 1983;205(1–2):47–68. DOI: 10.1016/0167-5087(83)90173-4.
10. Ginzburg IF, Kotkin GL, Panfil SL, Serbo VG, Telnov VI. Colliding γe and $\gamma\gamma$ beams based on single-pass e^+e^- accelerators. II. Polarization effects, monochromatization improvement. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*. 1984;219(1):5–24. DOI: 10.1016/0167-5087(84)90128-5.
11. Denner A, Dittmaier S. Electroweak radiative corrections to $e^- \gamma \rightarrow W^- \nu_e$. *Nuclear Physics B*. 1993;398(2):239–264. DOI: 10.1016/0550-3213(93)90108-2.
12. Böhm M, Dittmaier S. The hard bremsstrahlung process $e^- \gamma \rightarrow W^- \nu_e$. *Nuclear Physics B*. 1993;409(1):3–21. DOI: 10.1016/0550-3213(93)90444-T.
13. Baer H, Barklow T, Fujii K, Gao Y, Hoang A, Kanemura S, et al., editors. *The International Linear Collider. Technical Design Report. Volume 2: Physics*. 2013. 189 p.

14. Shershan IA, Shishkina TV. The different generations fermions investigation in it scattering by high energy photon beams. *Journal of the Belarusian State University. Physics*. 2017;1:67–72. Russian.
15. Shershan IA, Shishkina TV. Single gauge bosons production in the high-energy lepton-photon collisions processes. *Journal of the Belarusian State University. Physics*. 2018;2:125–132. Russian.
16. Anipko DA, Ginzburg IF, Pak AV. Study of anomalous couplings of gauge bosons in the reaction $e^- \gamma \rightarrow W^- \nu \rightarrow l \bar{\nu} \nu$. *Physics of Atomic Nuclei*. 2004;67(12):2209–2215. DOI: 10.1134/1.1842301.
17. Kumar S, Poullose P. Probing $WW\gamma$ coupling through $e^- \gamma \rightarrow \nu_e W^-$ at ILC. *International Journal of Modern Physics A*. 2015;30(36):1550215. DOI: 10.1142/S0217751X15502152.
18. 't Hooft G, Veltman M. Scalar one-loop integrals. *Nuclear Physics B*. 1979;153:365–401. DOI: 10.1016/0550-3213(79)90605-9.
19. Akhundov A, Bardin D, Kalinovskaya L, Riemann T. Model independent QED corrections to the process $ep \rightarrow eX$. *Fortschritte der Physik*. 1996;44(5):373–482. DOI: 10.1002/prop.2190440502.

Статья поступила в редколлегию 19.09.2019.
Received by editorial board 19.09.2019.

УДК 378.164/.169;543.082/.084:54-16

МЕТРОЛОГИЧЕСКИЕ И ЭКСПЛУАТАЦИОННЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ МНОГОКАНАЛЬНОГО АТОМНО-ЭМИССИОННОГО ВАКУУМНОГО СПЕКТРОМЕТРА ДЛЯ УЧЕБНЫХ И ПРОМЫШЛЕННЫХ ЛАБОРАТОРИЙ С ГЕНЕРАТОРОМ ИСКРОВОГО РАЗРЯДА МС-200УН

**В. М. БЫЧКОВ¹⁾, Я. И. ДИДКОВСКИЙ¹⁾, М. Н. КОВАЛЕНКО¹⁾,
А. А. МИНЬКО¹⁾, М. Р. ПОСЛЕДОВИЧ¹⁾, С. Н. ШАРАШКИН¹⁾, В. М. ЯКОВЕЦ¹⁾**

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

Приведены технические и метрологические характеристики многоканального атомно-эмиссионного вакуумного спектрометра для учебных и промышленных лабораторий с генератором искрового разряда МС-200УН. Использована оригинальная оптическая схема, состоящая из двух полихроматоров: первый предназначен для работы в области вакуумного ультрафиолета в диапазоне длин волн от 170 до 290 нм, второй – в спектральном диапазоне от 290 до 410 нм. В приборе применены многоэлементные полупроводниковые фотоприемники с удаленными защитными окнами, что обеспечивает скоростную регистрацию спектров в вакуумном диапазоне для одновременного определения концентрации нескольких химических элементов в составе исследуемого образца. Показано, что метрологические характеристики атомно-эмиссионного вакуумного спектрометра для учебных и промышленных лабораторий с генератором искрового разряда МС-200УН удовлетворяют требованиям нормативной документации по анализу металлов и сплавов. Таким образом, изготовленный прибор может быть использован как в учебном процессе, так и при проведении рутинных исследований в аналитических (заводских) лабораториях предприятий и организаций.

Ключевые слова: вакуумный атомно-эмиссионный спектрометр; генератор искры; спектральный анализ; спектроскопия; многоэлементные полупроводниковые фотоприемники; ПЗС.

Образец цитирования:

Бычков ВМ, Дидковский ЯИ, Коваленко МН, Минько АА, Последович МР, Шарашкин СН, Яковец ВМ. Метрологические и эксплуатационные характеристики многоканального атомно-эмиссионного вакуумного спектрометра для учебных и промышленных лабораторий с генератором искрового разряда МС-200УН. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика*. 2019;3:51–60.
<https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-3-51-60>

For citation:

Bychkov VM, Didkovsky YI, Kovalenko MN, Minko AA, Pasiadovich MR, Sharashkin SN, Yakavets VM. Metrological and operational characteristics of the multichannel vacuum atomic-emission spectrometer for educational and industrial laboratories with a MS-200UN spark generator. *Journal of the Belarusian State University. Physics*. 2019;3:51–60. Russian.
<https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-3-51-60>

METROLOGICAL AND OPERATIONAL CHARACTERISTICS OF THE MULTICHANNEL VACUUM ATOMIC-EMISSION SPECTROMETER FOR EDUCATIONAL AND INDUSTRIAL LABORATORIES WITH A MS-200UN SPARK GENERATOR

V. M. BYCHKOV^a, Y. I. DIDKOVSKY^a, M. N. KOVALENKO^a,
A. A. MINKO^a, M. R. PASLIADOVICH^a, S. N. SHARASHKIN^a, V. M. YAKAVETS^a

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

Corresponding author: V. M. Bychkov (bychvm@gmail.com)

This work presents the metrological and operational characteristics of the multichannel vacuum atomic-emission spectrometer for educational and industrial laboratories with a MS-200UN spark generator. The spectrometer uses an original optical scheme consisting of two polychromators: the first polychromator is designed to work in the field of vacuum ultraviolet at the wavelength range from 170 to 290 nm; the second polychromator covers the wavelength range from 290 to 410 nm. The multielement semiconductor photodetectors with remote shielding windows offer fast recording of spectra in the vacuum ultraviolet range for simultaneous evaluation of the concentrations of several chemical elements in the samples under study. It is demonstrated that metrological characteristics of the atomic-emission vacuum spectrometer with a MS-200UN spark generator for educational and industrial laboratories meet the requirements of the normative documents standardizing analysis of metals and alloys. The designed spectrometer may be used in educational process and during routine analyses at laboratories of industrial enterprises and other organizations.

Keywords: vacuum atomic-emission spectrometer; spark generator; spectral analysis; spectroscopy; multielement semiconductor photodetectors; CCD.

Введение

Возрастающие требования к современному производству предполагают использование прогрессивных средств и методов контроля не только исходного сырья для обеспечения технологического процесса, но и готовой продукции. Как следствие, возникает потребность в малогабаритных приборах, способных выполнять измерения не только в специализированных лабораториях, но и непосредственно на производстве.

Атомно-эмиссионные спектрометры с искровым возбуждением спектра используют для контроля сырья и готовой продукции в металлургии, машиностроении и других отраслях промышленности. Их широкое применение обусловлено экспрессностью, относительно невысокой ценой, практически полной автоматизацией процесса измерений [1–4]. Особенно актуальна возможность идентификации и анализа содержания серы, фосфора и углерода в сталях и чугунах. Аналитические линии указанных элементов находятся в области вакуумного ультрафиолета (ВУФ). Следовательно, при выборе конструкции спектрометра необходимо обеспечить регистрацию спектров в диапазоне от 170 нм. Задача была решена с помощью двух полихроматоров, один из которых вакуумируется (рабочий диапазон от 170 до 190 нм). Второй полихроматор обеспечивает регистрацию спектров в диапазоне от 290 до 410 нм. В этом диапазоне находятся аналитические линии таких элементов, как Cu (324,7 нм), W (330,0 нм), V (311,1 нм) и многие другие.

Современные многоканальные оптические спектрометры позволяют решать задачи количественного, полуколичественного и качественного атомно-эмиссионного анализа самого широкого перечня материалов, изучать динамику процессов изменения концентрации элементов во времени, снижать пределы обнаружения элементов и получать результаты анализа, удовлетворяющие требованиям отечественных и международных стандартов.

Материалы и методы

В лаборатории спектроскопических систем кафедры физической оптики и прикладной информатики физического факультета БГУ разработан и создан экспериментальный образец атомно-эмиссионного спектрометра с искровым источником возбуждения спектра (ИВС) МС-200УН.

Спектрометр состоит из следующих основных частей (рис. 1):

- спектральный прибор (СП);
- ИВС, который представляет собой высоковольтный искровой CLR-генератор с блоком питания;

- газовое оборудование (ГО);
- многоканальное фотоприемное устройство, состоящее из блока фотоприемников (БФП) и блока питания блока фотоприемников (БП БФП);
- блок управления спектрометром;
- управляющая персональная электронно-вычислительная машина (ПЭВМ);
- принтер.

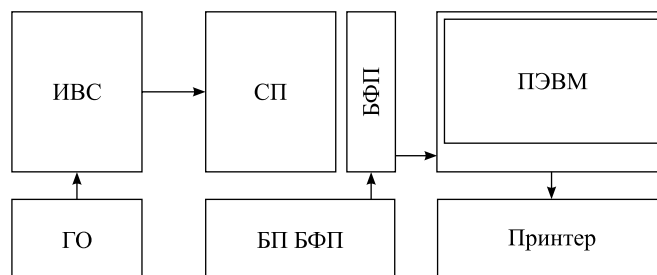


Рис. 1. Блок-схема разработанного и изготовленного спектрометра многоканального атомно-эмиссионного с CLR-генератором МС-200УН

Fig. 1. Block diagram of the designed and manufactured multichannel atomic emission spectrometer with MS-200UN CLR-generator

Прибор предназначен для качественного и количественного анализа химического состава черных и цветных металлов и сплавов на их основе в условиях научных и заводских лабораторий. ПЭВМ предоставляет возможность управлять режимами работы спектрометра с помощью разработанного программного обеспечения, а также получать, обрабатывать и выводить экспериментальные данные. С помощью прибора можно проводить идентификацию и анализ содержания большинства основных и легирующих химических элементов, включая серу, фосфор и углерод, в металлах и сплавах.

На рис. 2 показана компоновка основных деталей в корпусе спектрометра.

Спектральный блок содержит два полихроматора на основе дифракционных решеток, которые обеспечивают рабочий спектральный диапазон прибора (рис. 3). Свет от источника излучения *I* (конденсированной искры) проходит по оптическому каналу штатива и после отражения от светоделительной

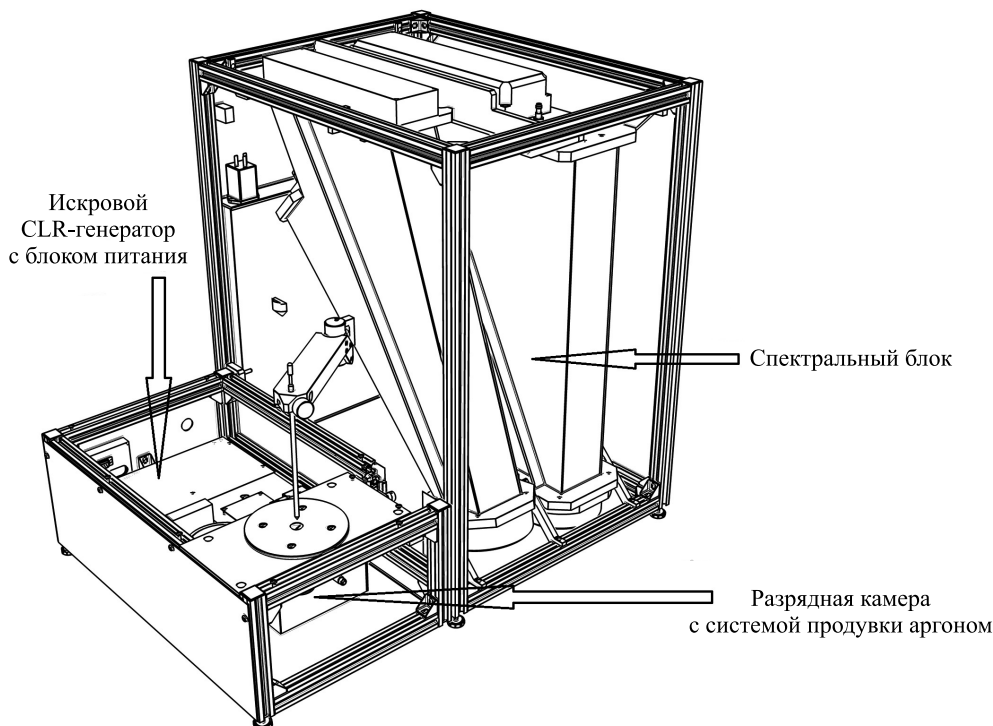


Рис. 2. Компоновка основных деталей в корпусе спектрометра

Fig. 2. Layout of the main parts encased in housing of the spectrometer

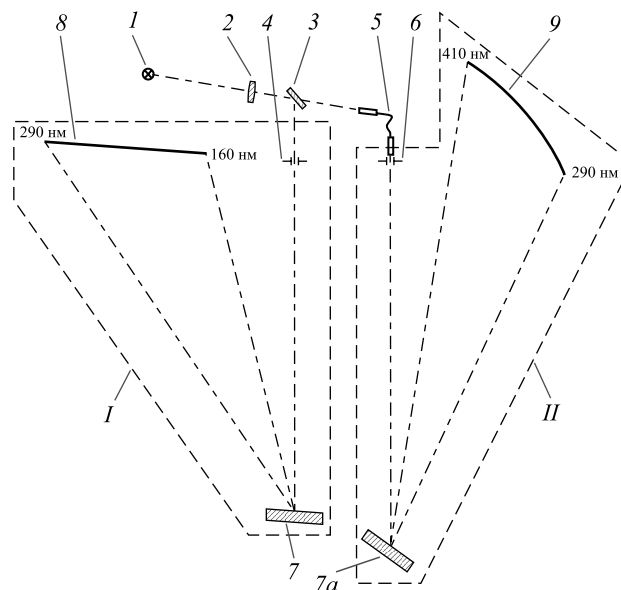


Рис. 3. Оптическая схема прибора, включающая спектральный блок

Fig. 3. Optical layout of the spectrometer including the spectral block

пластинки 3 фокусируется линзой 2 в плоскости входной щели 4 вакуумного полихроматора I (рабочий спектральный диапазон 170–290 нм). Линза 2 выполняет также роль выходного окна штатива. Второй пучок излучения, прошедший через светоделительную пластинку 3, фокусируется на входном торце световода 5, расположенном непосредственно перед входной щелью 6 полихроматора II (рабочий спектральный диапазон 290–410 нм). В определенных пределах рабочий спектральный диапазон полихроматоров может быть перестроен при их юстировке. Полихроматоры I и II выполнены на базе вогнутых голографических дифракционных решеток 7 и 7a типа III (flat field). Таким образом, в полихроматоре I излучение, прошедшее через входную щель 4, разделяется на спектральные компоненты решеткой 7 и фокусируется ей на фокальной поверхности 8. В полихроматоре II излучение, прошедшее через входную щель 6, разделяется на спектральные компоненты решеткой 7a и фокусируется ей на фокальной поверхности 9.

В оптической схеме полихроматоров использованы одинаковые решетки с плотностью штрихов в центре 2500 мм^{-1} и диаметром заштрихованной части 55 мм, но с разными углами установки относительно входной щели и системы регистрации относительно оси решетки. Это обеспечивает различный спектральный диапазон работы полихроматоров. Отметим, что фокусное расстояние данного типа решеток, определяющее светосилу спектрометров, зависит от длины волны падающего излучения и находится в диапазоне от 404 до 470 мм.

Оптическая схема полихроматора I использует паспортный угол установки дифракционной решетки, при котором кривизна поля изображения исправлена, поэтому его фокальная поверхность имеет плоскую форму. В оптической схеме спектрографа II при нестандартном угле установки дифракционной решетки фокальная поверхность имеет криволинейную форму. Оптимальное размещение линейных сенсоров на криволинейной фокальной поверхности дифракционной решетки было выполнено на основе результатов специального расчета, что позволило минимизировать дефокусировку каждого линейного многоканального полупроводникового детектора.

Полихроматоры скомпонованы в корпусах, конструкция которых обеспечивает достаточную жесткость при откачке воздуха из внутреннего пространства для исключения поглощения УФ-излучения атмосферными газами.

Вакуум в герметичном корпусе полихроматора при проведении измерений в области ВУФ поддерживается на уровне 0,3 кПа с помощью мембранного безмасляного насоса [5].

В качестве ИВС в спектрометре используется генератор низковольтной конденсированной искры собственной разработки [6]. Выбор был сделан в пользу низковольтного конденсированного искрового разряда с управляемым высоковольтным поджигом разрядного промежутка. Основными причинами такого выбора стали универсальность этого источника, т. е. возможность анализировать широкую номенклатуру марок сплавов с широкими диапазонами концентраций легирующих элементов, и достаточно высокая стабильность результатов анализов при работе в среде аргона.

Генератор низковольтной конденсированной искры содержит высокочастотный импульсный преобразователь напряжения, построенный по обратноточковой схеме с контролем тока первичной обмотки

высоковольтного трансформатора. Напряжение с выхода преобразователя используется для зарядки батареи высоковольтных конденсаторов, которая вместе с катушкой индуктивности и аналитическим промежутком образует разрядный контур.

Особенность нашей системы заряда рабочей емкости – введение схемы контроля тока насыщения первичной обмотки импульсного трансформатора наряду с контролем величины напряжения на заряжаемой емкости. Такой подход позволил минимизировать потери энергии и выровнять средний ток, потребляемый схемой при работе. С управляющей ПЭВМ оператор может задать частоту следования импульсов, напряжение на накопительном конденсаторе и другие параметры разряда, которые подбираются экспериментальным путем в зависимости от аналитической задачи (вид сплава, диапазон концентраций определяемых элементов и т. п.).

В качестве регистрирующего устройства используется БФП на основе модифицированных линейных ПЗС-приемников TCD1304 производства фирмы *Toshiba* (Япония). Выбор данного типа приемников обусловлен их надежностью, хорошей чувствительностью и динамическим диапазоном. Оба полихроматора оборудованы многоканальным фотоприемным устройством, которое состоит из 5 ПЗС-приемников TCD1304. Таким образом, на каждый спектральный диапазон приходится $5 \times 3648 = 18\,240$ независимых фоточувствительных элементов, что позволяет выбирать оптимальные аналитические линии для количественного и качественного спектрального анализа, а также эталонные линии для калибровки по длинам волн. Для расширения области спектральной чувствительности ПЗС-приемников TCD1304 в область ВУФ их входные заводские стеклянные окна были удалены.

Блок управления спектрометром обеспечивает необходимые режимы работы и обмен информацией между частями спектрометра и ПЭВМ. Он размещается в корпусе прибора. Общее управление осуществляется с помощью ПЭВМ с установленной операционной системой WINDOWS 2000/XP/7/10. Связь с ПЭВМ реализована путем интерфейса *Ethernet*, который обеспечивает удобную высокоскоростную передачу данных. Их окончательная обработка и представление в удобном для оператора виде производятся ПЭВМ под управлением специализированной программы *Vision*.

Результаты и их обсуждение

Метрологическая аттестация спектрометра проводилась с использованием образцов меди катодной М1к по ГОСТ 859–2001 (содержание основного элемента (Cu) – не менее 99,95 %) и комплекта государственных стандартных образцов (ГСО) состава сталей углеродистых и легированных УГ0 – УГ9 [7]. В процессе метрологической аттестации определяли погрешность шкалы длин волн спектрометра (табл. 1), относительное среднее квадратическое отклонение результатов измерения относительной интенсивности спектральных линий, относительную погрешность спектрометра при измерении концентрации элементов в металле (сплаве). Первоначальная калибровка по длинам волн проводилась по линиям меди.

Таблица 1

Результаты определения погрешности шкалы длин волн спектрометра
во время метрологической аттестации (линии меди), нм

Table 1

Errors of the spectrometer wavelength scale determined
in the process of metrological certification (cuprum lines), nm

Параметр	Положение максимума интенсивности спектральной линии		Измеренное значение погрешности шкалы длин волн спектрометра (по модулю)
	Измеренное значение	Табличное значение	
λ_1	197,054	197,049	0,005
λ_2	240,005	240,011	0,006
λ_3	282,429	282,437	0,008

Во время дальнейшей подконтрольной эксплуатации прибора было установлено, что с помощью подбора спектральных линий, используемых для калибровки, погрешность шкалы длин волн может быть уменьшена до менее чем 0,001 нм. При этом неопределенность измерения длины волны одиночной спектральной линии может быть лучше, чем спектральная ширина фоточувствительного элемента ПЗС-линейки, которую находят по его геометрическим размерам (примерно 0,006 нм в диапазоне от 172 до 194 нм). В табл. 2 приведены результаты определения длин волн линий железа после уточненной калибровки, выполненной в диапазоне от 172 до 194 нм по 19 спектральным линиям. Табличные

данные о длинах волн спектральных линий были получены из базы данных NIST [8]. Калибровочная функция спектрометра по длинам волн в данном случае аппроксимируется полиномом второй степени. Результаты показывают (см. табл. 2), что спектрометр может успешно использоваться при проведении качественного анализа неизвестных металлов и сплавов, обеспечивая достаточно точную идентификацию спектральных линий и, таким образом, определение элементов основы и примесей.

Таблица 2

Результаты определения погрешности измерения
длин волн линий железа и углерода, нм

Table 2

Errors in the measured line wavelengths for iron and carbon, nm

Положение максимума интенсивности спектральной линии		Измеренное значение погрешности шкалы длин волн
Измеренное	Табличное	
Железо		
172,486 113 1	172,485 390	0,000 723 1
174,033 478 9	174,033 490	−0,000 011 1
174,158 132 5	174,158 085	0,000 047 5
174,270 872 3	174,271 800	−0,000 927 7
176,411 243 6	176,411 600	−0,000 356 4
177,599 301 1	177,599 700	−0,000 398 9
177,663 867 9	177,664 800	−0,000 932 1
178,133 042 2	178,133 800	−0,000 757 8
178,800 394 0	178,800 390	0,000 004 0
179,816 215 3	179,816 000	0,000 215 3
182,213 939 5	182,213 500	0,000 439 5
182,387 374 2	182,387 110	0,000 264 2
183,587 120 0	183,587 400	−0,000 280 0
185,795 191 8	185,795 990	−0,000 798 2
186,000 823 6	186,000 200	0,000 623 6
190,758 251 6	190,759 100	−0,000 848 4
192,633 815 1	192,634 140	−0,000 324 9
193,040 874 8	193,039 800	0,001 074 8
Углерод		
193,091 019 4	193,091 000	0,000 019 4

Спектральное разрешение прибора составляет 0,015 нм. В качестве иллюстрации его разрешающей способности на рис. 4 приведен зарегистрированный на спектрометре участок спектра железа с двумя спектрально разрешенными линиями железа с близкими интенсивностями с длинами волн 188,730 34 нм (Fe41) и 188,748 4 нм (Fe42) (табличные значения NIST).

Программное обеспечение спектрометра позволяет аппроксимировать градуировочную характеристику полиномом первой или второй степени в линейном или логарифмическом масштабе. При построении градуировочной характеристики были использованы стандартные образцы предприятия. Пример такого построения приведен на рис. 5.

При метрологической аттестации измерения концентраций элементов в сталях выполняли по ГОСТ 27809 [9], а построение градуировочных характеристик для определения концентрации элементов проводили с использованием ГСО состава сталей углеродистых и легированных УГ0 – УГ9. Подготовку стандартных и анализируемых образцов к измерениям осуществляли по ГОСТ 27809.

Значения среднего квадратического отклонения результатов измерения относительной интенсивности спектральных линий, полученные при проведении метрологической аттестации, приведены в табл. 3. Большие (порядка 10^7) измеренные интенсивности сигнала обусловлены регистрацией спектров в режиме суммирования.

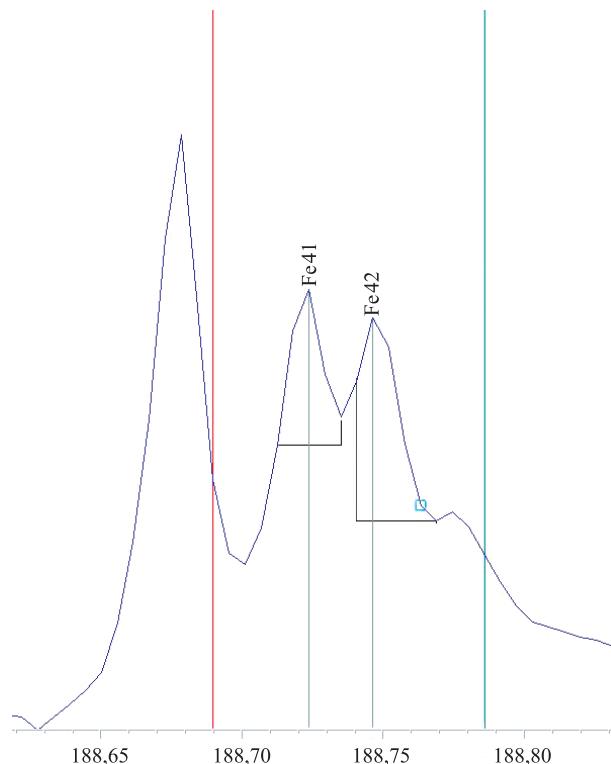


Рис. 4. Участок спектра железа с двумя спектрально разрешенными линиями железа с близкими интенсивностями с длинами волн 188,730 34 нм (Fe41) и 188,748 4 нм (Fe42) (табличные значения NIST)

Fig. 4. Section of a spectrum for iron showing two spectrally resolved iron lines with similar intensities at the wavelengths 188.730 34 nm (Fe41) and 188.748 4 nm (Fe42) (NIST tabular values)

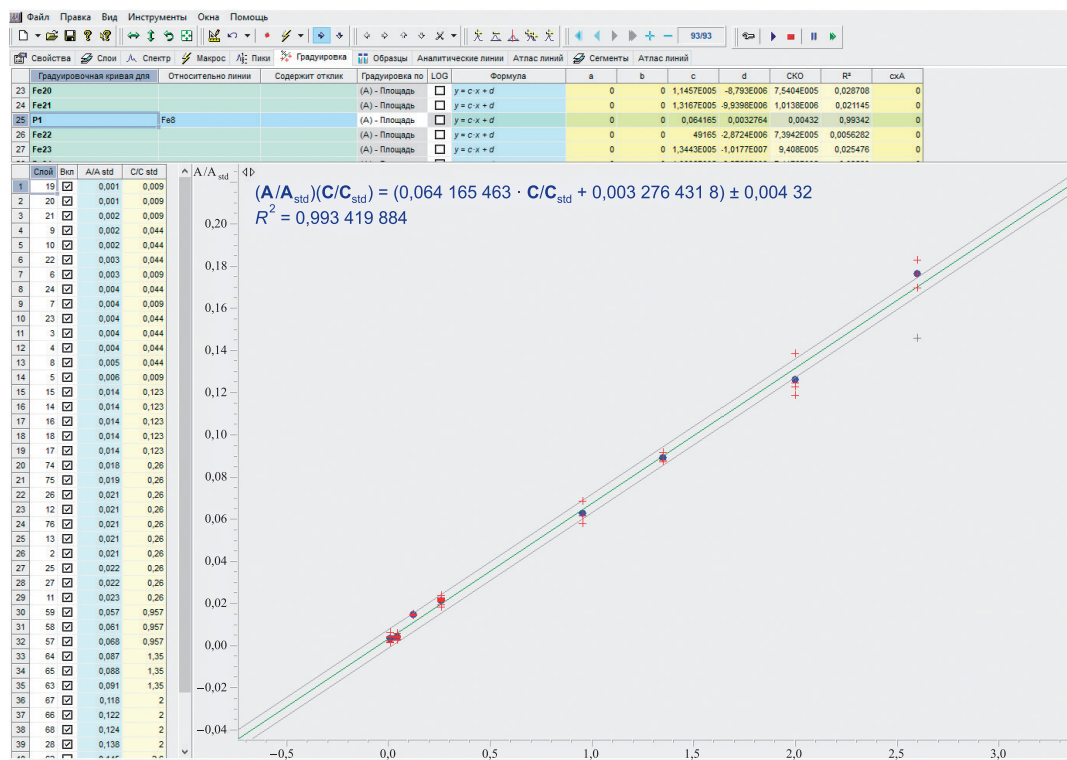


Рис. 5. Градуировочная характеристика для определения концентрации фосфора в чугунах по линии 178,283 8 нм (табличное значение NIST)

Fig. 5. Calibration curve for phosphorus in the cast iron at 178.283 8 nm (NIST tabular values)

Таблица 3

Относительное среднее квадратическое отклонение
результатов измерения относительной интенсивности спектральных линий

Table 3

The experimental results of the determination
of the relative standard deviation of the spectral lines relative intensity

Параметр	Измеренное значение относительной интенсивности спектральных линий, отн. ед.	Измеренное относительное среднее квадратическое отклонение результатов измерения относительной интенсивности спектральных линий, %
λ_1	18 462 711	2,47
λ_2	92 818 874	1,86
λ_3	50 430 815	2,17
λ_4	17 315 639	1,39
λ_5	60 592 318	1,57

Примечание. Допускаемое относительное среднее квадратическое отклонение результатов измерения для всех параметров составляет 3 %.

Значения относительной погрешности спектрометра при измерении концентрации элементов в металле приведены в табл. 4.

Таблица 4

Результаты определения относительной погрешности спектрометра
при измерении концентрации элементов в металле (ГСО УГ), %

Table 4

Relative errors of the spectrometer determined during measurement
of the element concentrations in metal (reference materials UG), %

Элемент	Концентрация элемента в сплаве		Измеренная относительная погрешность спектрометра
	Измеренное значение	Аттестованное значение	
Si	0,419	0,404	3,71
Mn	0,381	0,366	4,10
Cr	1,72	1,79	–3,91
Ni	0,334	0,328	1,83
Cu	0,231	0,239	–3,35

Примечание. Допускаемая относительная погрешность спектрометра для всех элементов составляет 5,0 %.

Источник: [10].

Можно сделать вывод, что спектрометр полностью удовлетворяет требованиям ГОСТ 27809.

Заключение

В работе описан разработанный и изготовленный по заданию 16 подпрограммы «Научно-учебное оборудование» ГНТП «Эталон и научные приборы» многоканальный атомно-эмиссионный вакуумный спектрометр для учебных и промышленных лабораторий с генератором искрового разряда МС-200УН, а также приведены его параметры и результаты исследований метрологических и эксплуатационных характеристик.

Спектрометр МС-200УН с генератором CLR разряда для экспресс-анализа элементного состава металлов и сплавов имеет следующие характеристики:

- диапазон анализируемых элементов Na – U;
- предел обнаружения по Cu не хуже 1 ppm;
- относительное среднее квадратическое отклонение результатов измерения относительной интенсивности спектральных линий не более 3 %;
- потребляемая мощность не более 0,5 кВт;

- одновременная регистрация спектров в диапазоне 170–410 нм;
- спектральное разрешение не хуже 0,015 нм;
- процесс измерения полностью автоматизирован.

Использована компьютерная программа *Vision*, которая обеспечивает автоматизацию и быстрое действие для научных и практических исследований, связанных с определением элементного состава и примесей в металлах и сплавах.

При проведении опытной эксплуатации спектрометра были выполнены измерения концентраций элементов в сталях, чугунах и медных сплавах. Полученные результаты удовлетворяли требованиям действующей нормативно-технической документации. Можно сделать вывод, что спектрометр может быть использован для качественного и количественного определения химических элементов в материалах различного назначения как в учебных, так и заводских лабораториях, а также для выполнения лабораторных и научных работ в области спектрального анализа проводящих веществ и материалов.

Библиографические ссылки

1. Ландсберг ГС. *Оптика*. Москва: Физматлит; 2003. 848 с.
2. Воропай ЕС, Ермалитская КФ, Захогин АП, Патапович МП, Фадаян АР. Атомно-эмиссионный многоканальный спектральный анализ: научное и практическое применение. *Вестник БГУ. Серия 1. Физика. Математика. Информатика*. 2009;1: 4–14.
3. Зайдель АН. *Основы спектрального анализа*. Москва: Наука; 1965.
4. Коваленко МН, Чекан ВА, Маркова ЛВ, Колёда ВВ, Турутин АФ. Аналитический контроль в металлургическом производстве. *Литье и металлургия*. 2001;(4):127–130.
5. Дидковский ЯИ, Коваленко МН, Минько АА, Последович МР. Многоканальный атомно-эмиссионный спектрометр с искровым источником возбуждения спектра. *Вестник БГУ. Серия 1. Физика. Математика. Информатика*. 2015;1:21–25.
6. Дидковский ЯИ, Коваленко МН, Минько АА, Последович МР. Программируемый источник возбуждения спектра для атомно-эмиссионного спектрального анализа. В: *Приборостроение-2012. Материалы 5-й Международной научно-технической конференции; 21–23 ноября 2012 г.; Минск, Беларусь*. Минск: БНТУ; 2012. с. 61–63.
7. Минько АА, Бычков ВМ, Михалевич ВФ. ПМА МН 2488–2015. Спектрометр многоканальный атомно-эмиссионный для учебных и промышленных лабораторий с генератором CLR разряда МС-200УН. Программа и методика метрологической аттестации. Минск: БелГИМ; 2015.
8. National Institute of Standards and Technology (NIST). Atomic Spectra Database [Internet, cited 2018 August 22]. Available from: <https://www.nist.gov/pml/atomic-spectra-database>.
9. ГОСТ 27809–95. Чугун и сталь. Метод спектрографического анализа. Москва: Издательство стандартов «ИПК»; 1996.
10. Институт стандартных образцов. Для спектрального анализа. Стали, УГ [Интернет]. Екатеринбург [цитировано 12 мая 2019 г.]. Доступно по: <http://icrm-ekb.ru/catalog/data/g783d94.html>.

References

1. Landsberg GS. *Optika* [Optics]. Moscow: Fizmatlit; 2003. 848 p. Russian.
2. Voropay ES, Ermalitskaya KF, Zazhagin AP, Patapovich MP, Fadaiyan AR. Atomic emission multichannel spectral analysis: scientific and practical application. *Vestnik BGU. Seriya 1. Fizika. Matematika. Informatika*. 2009;1:4–14. Russian.
3. Seidel AN. *Osnovy spektral'nogo analiza* [Fundamentals of spectral analysis]. Moscow: Nauka; 1965. Russian.
4. Kovalenko MN, Chekan VA, Markova LV, Koleda VV, Turutin AF. [Analytical control in the metallurgical industry]. *Lit'e i metallurgiya*. 2001;(4):127–130. Russian.
5. Didkovskiy YI, Kovalenko MN, Minko AA, Posledovich MR. Multichannel atomic emission spectrometer with a spark generator. *Vestnik BGU. Seriya 1. Fizika. Matematika. Informatika*. 2015;1:21–25. Russian.
6. Didkovskiy YI, Kovalenko MN, Minko AA, Posledovich MR. [Programmable spectrum excitation source for atomic emission spectral analysis]. In: *Priborostroenie-2012. Materialy 5-i Mezhdunarodnoi nauchno-tekhnikeskoi konferentsii; 21–23 noyabrya 2012 g.; Minsk, Belarus* [Instrumentation-2012. Materials of the 5th International scientific and technical conference; 2012 November 21–23; Minsk, Belarus. Minsk: Belarusian National Technical University; 2012. p. 61–63. Russian.
7. Minko AA, Bychkov VM, Mihalevich VF. PMA MN 2488–2015. Multichannel atomic emission spectrometer for educational and industrial laboratories with a CLR spark generator MS-200UN. The program and methodology for metrological certification. Minsk: Institute of Metrology; 2015. Russian.
8. National Institute of Standards and Technology (NIST). Atomic Spectra Database [Internet, cited 2018 August 22]. Available from: <https://www.nist.gov/pml/atomic-spectra-database>.
9. GOST 27809–95. Cast iron and steel. Methods of spectrographic analysis. Moscow: Izdatel'stvo standartov «IPK»; 1996. Russian.
10. Institut standartnykh obraztsov. Dlya spektral'nogo analiza. Stali, UG [Internet]. Yekaterinburg [cited 2019 May 12]. Available from: <http://icrm-ekb.ru/catalog/data/g783d94.html>. Russian.

Статья поступила в редколлегию 26.08.2019.
Received by editorial board 26.08.2019.

Авторы:

Владимир Михайлович Бычков – заведующий учебной лабораторией кафедры ядерной физики физического факультета.

Ярослав Иванович Дидковский – старший научный сотрудник научно-исследовательской лаборатории спектроскопических систем кафедры физической оптики и прикладной информатики физического факультета.

Максим Николаевич Коваленко – заведующий научно-исследовательской лабораторией спектроскопических систем кафедры физической оптики и прикладной информатики физического факультета.

Анатолий Антонович Минько – доктор физико-математических наук, профессор; заведующий кафедрой физической оптики и прикладной информатики физического факультета.

Михаил Романович Последович – кандидат физико-математических наук, доцент; ведущий инженер кафедры физической оптики и прикладной информатики физического факультета.

Сергей Николаевич Шарашкин – старший научный сотрудник научно-исследовательской лаборатории спектроскопических систем кафедры физической оптики и прикладной информатики физического факультета.

Вера Михайловна Яковец – инженер оптического и лазерного оборудования кафедры физической оптики и прикладной информатики физического факультета.

Authors:

Vladimir M. Bychkov, head of the training laboratory, department of nuclear physics, faculty of physics.

bychvm@gmail.com

<https://orcid.org/0000-0002-1379-5389>

Yaroslav I. Didkovsky, senior researcher at the laboratory of spectroscopic systems, department of physical optics and applied informatics, faculty of physics.

yaroslav-didkovskij@yandex.ru

Maksim N. Kovalenko, head of the laboratory of spectroscopic systems, department of physical optics and applied informatics, faculty of physics.

kovalenkoM@bsu.by

Anatoli A. Minko, doctor of science (physics and mathematics), full professor; head of the department of physical optics and applied informatics, faculty of physics.

minko@bsu.by

Mikhail R. Pasliadovich, PhD (physics and mathematics), doцент; leading engineer at the department of physical optics and applied informatics, faculty of physics.

posledov@bsu.by

Sergei N. Sharashkin, senior researcher at the laboratory of spectroscopic systems, department of physical optics and applied informatics, faculty of physics.

sharashkin@bsu.by

Vera M. Yakavets, optical and laser equipment engineer at the department of physical optics and applied informatics, faculty of physics.

optics@bsu.by

ФИЗИКА

КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

CONDENSED STATE PHYSICS

УДК 538.9

ОПРЕДЕЛЕНИЕ МИКРОСКОПИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ГЕТЕРОГЕННЫХ УГЛЕРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ

В. А. ДОРОСИНЕЦ¹⁾, В. А. БОРИСОВ¹⁾

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

Проведены экспериментальные исследования температурной зависимости сопротивления и магнитосопротивления композитных металлоуглеродных образцов С(С₀), проявляющих эффект слабой локализации. Магнитосопротивление при температуре $T = 2,2$ К является знакопеременным, что объясняется вкладом механизма спин-орбитального взаимодействия. Анализ кривых магнитосопротивления позволил рассчитать значения параметров, характеризующих время потери фазы волновой функции при неупругом рассеянии и время спин-орбитального взаимодействия. Для параметра, характеризующего время упругого рассеяния, проведена оценка минимального значения.

Ключевые слова: углерод; квантовая поправка; слабая локализация; магнитосопротивление.

Благодарность. Работа выполнена в рамках научно-исследовательской работы 881/06 «Исследовать свойства интегрированных наноструктур и разработать методы диагностики и предложения по их использованию» (государственная программа научных исследований «Конвергенция»).

Образец цитирования:

Доросинец ВА, Борисов ВА. Определение микроскопических параметров гетерогенных углеродных материалов. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика*. 2019;3:61–67.
<https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-3-61-67>

For citation:

Dorosinets VA, Borisov VA. Determination of microscopical parameters of heterogeneous carbon materials. *Journal of the Belarusian State University. Physics*. 2019;3:61–67. Russian.
<https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-3-61-67>

Авторы:

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

Виктор Андреевич Борисов – студент физического факультета. Научный руководитель – В. А. Доросинец.

Authors:

Vladimir A. Dorosinets, PhD (physics and mathematics); leading researcher at the department of semiconductor physics and nanoelectronics, faculty of physics.

dorosinets@bsu.by

Victor A. Borisov, student at the faculty of physics.

velo_to@mail.ru

DETERMINATION OF MICROSCOPICAL PARAMETERS OF HETEROGENEOUS CARBON MATERIALS

V. A. DOROSINETS^a, V. A. BORISOV^a

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

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

Experimental studies of the temperature dependence of the resistance and magnetoresistance of the composite metal-carbon samples C(Co), which show the effect of weak localization, have been carried out. The magnetoresistance at a temperature $T = 2.2$ K is alternating, which is explained by the spin-orbit interaction. Analysis of the magnetoresistance curves made it possible to calculate the values of the parameters characterizing the phase loss time in inelastic scattering and the spin-orbit interaction time. For the parameter characterizing the elastic scattering time, the minimum value was estimated.

Keywords: carbon; quantum correction; weak localization; magnetoresistance.

Acknowledgements. The work was performed in the framework of the research project 881/06 «Investigate the properties of integrated nanostructures, and develop diagnostic methods and proposals for their usage» (State Research Program «Convergence»).

Введение

Исследование механизмов электропроводности и извлечение микроскопических параметров гетерогенных (композитных) материалов, характеризующих их электрофизические свойства, представляют собой сложную задачу из-за неоднородности материалов, одновременного совместного проявления нескольких механизмов электропроводности, соотношение вкладов которых изменяется для разных типов экспериментов и при неодинаковых условиях их проведения, например при изменении температуры, приложении магнитного поля. К такому классу объектов относятся, в частности, металлоуглеродные материалы C(Co), полученные методом термообработки карбоксилированной целлюлозы после замены в ней путем ионообменной сорбции протонов COOH-групп на катионы кобальта [1]. Образующиеся при термообработке наночастицы кобальта выполняют роль катализатора формирования вокруг них графеновых плоскостей, что приводит к возникновению объектов, получивших в литературе название «луковица». Таким образом, синтезированные композитные материалы состоят из трех частей: аморфной углеродной диэлектрической матрицы, металлических частиц кобальта и окружающих их графеновых плоскостей [2]. Путем подбора исходных материалов и режима их термообработки возможно получение образцов с требуемым соотношением этих трех компонент. В данной статье рассмотрен случай, когда «луковицы» соприкасаются друг с другом, образуя непрерывные высокопроводящие каналы внутри слабопроводящей аморфной углеродной матрицы.

Как известно, для графита значение электропроводности вдоль плоскостей превышает на несколько порядков ее значение в перпендикулярном плоскостям направлении. Поэтому можно предположить, что для данного типа образцов электронный транспорт реализуется вдоль плоскостей, а не посредством туннелирования между наночастицами металла. Следствием неидеальности строения графеновых плоскостей является наблюдение для образцов с подобной структурой эффекта слабой локализации при низких температурах [3–5]. Поскольку каталитическое воздействие кластеров кобальта на окружающую углеродную матрицу пространственно ограничено, вокруг них формируется всего несколько изогнутых графеновых плоскостей, что подтверждается методами электронной микроскопии [2]. Из этого следует второе предположение – о двумерном характере эффекта слабой локализации, реализуемое при выполнении условия, согласно которому длина Таулесса (расстояние, проходимое носителем заряда между двумя последовательными неупругими рассеяниями) не должна превышать толщину проводящего слоя образца.

Теория электропроводности материалов, проявляющих эффект слабой локализации, для двумерного случая достаточно глубоко проработана [6], причем величина квантовой поправки проявляет зависимость от магнитного поля, а магнитосопротивление $\Delta R(B)$ может иметь сложный, в частности знакопеременный, характер [7]. В ряде работ аппроксимация экспериментальных кривых $\Delta R(B)$ использовалась напрямую для определения микроскопических параметров двумерных полупроводников и грязных металлов, в частности тонких слоев углерода в предграфитном состоянии (разупорядоченных пленок графита) [3; 8]. В числе прочих рассчитывались значения времени упругого и неупругого рассеяния носителей заряда, параметров спин-орбитального взаимодействия. При этом анализ достоверности полученных из аппроксимаций значений параметров, как правило, не проводился, что может приводить к ошибочным выводам. В данной работе мы расширили данный метод на класс металлоуглеродных композитов и оценили корректность полученных этим методом значений параметров.

Материалы и методы

Измерения зависимости сопротивления от температуры и магнитосопротивления $\Delta R(B)$ при фиксированной температуре производились с помощью криогенной установки фирмы *Cryogenics* (Англия). Данная система даст возможность варьировать температуру образца в интервале от 1,7 до 300 К, сверхпроводящий магнит позволяет плавно изменять индукцию магнитного поля, которое в данном эксперименте прикладывалось перпендикулярно направлению протекания электрического тока.

Исследованный образец C(Co) синтезировался по методике, описанной в [1]. Мольная доля кобальта в образце составляла $x = 0,198$, длительность предварительного отжига при 300 °С – 2 ч, температура высокотемпературного отжига – 700 °С.

Результаты и их обсуждение

На рис. 1 представлена температурная зависимость сопротивления $R(T)$ исследованного образца. Видно, что в области температур ниже перегиба ($T = 41$ К), которая характеризуется отрицательным значением температурного коэффициента сопротивления, экспериментальная кривая $R(T)$ хорошо описывается логарифмической зависимостью, с небольшим отклонением от нее для самых низких температур эксперимента ($T < 3$ К). Такое поведение величины $R(T)$ характерно при учете квантовой поправки к классической проводимости Друде для двумерного случая проявления эффекта слабой локализации и наблюдается у тонких слоев углерода в предграфитном состоянии независимо от способа их получения [2–4]. Анализ зависимости $R(T)$ для образцов, полученных с использованием данной методики, проведен в работах [2; 5]. Отметим, что из-за гетерогенной структуры образца мы оперируем с его полным сопротивлением, а не удельным сопротивлением или удельной электропроводностью.

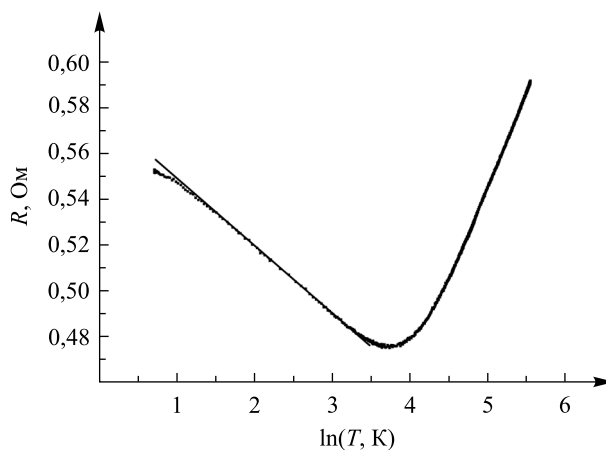


Рис. 1. Температурная зависимость сопротивления образца C(Co); прямая линия соответствует идеальной логарифмической зависимости

Fig. 1. Temperature dependence of the resistance of the sample C(Co); a straight line corresponds to a perfect logarithmic dependence

Наблюдаемое при самых низких температурах отклонение от линейной зависимости $R(T)$ в полулогарифмическом масштабе обычно связывают с возрастанием роли механизма спин-орбитального взаимодействия в интерференции волновых функций электронов при уменьшении вероятности процесса неупругого рассеяния на фононах.

Согласно теории электропроводность материалов, проявляющих эффект слабой локализации, зависит от магнитного поля, причем магнитосопротивление может иметь сложный, в частности знакопеременный, характер [7]. Конкретный вид зависимости $\Delta R(B)$ обусловлен рядом микроскопических параметров, и это дает возможность их определения путем анализа указанной зависимости.

Экспериментальная кривая магнитосопротивления исследованного образца для температуры $T = 2,2$ К представлена на рис. 2, который свидетельствует о знакопеременном характере магнитосопротивления: положительное магнитосопротивление, характерное для малых магнитных полей, сменяется при $B_C = 430,6$ мТл отрицательным магнитосопротивлением при дальнейшем повышении индукции магнитного поля. Аналогичное поведение магнитосопротивления для углеродных материалов в предграфитном

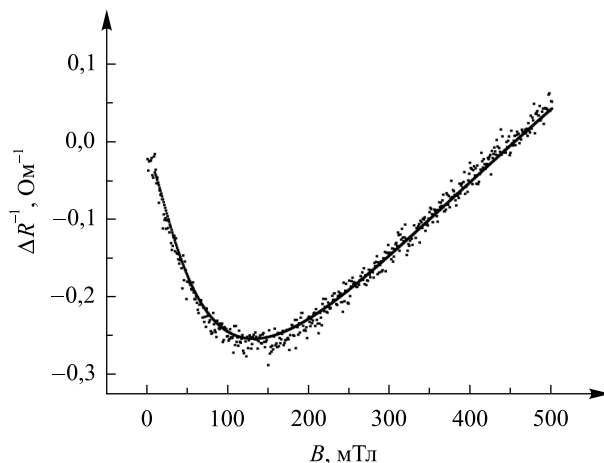


Рис. 2. Зависимость обратного сопротивления образца от магнитного поля при $T = 2,2$ К (точки) и ее аппроксимация формулой (1) (сплошная линия)
Fig. 2. The dependence of the inverse resistance of the sample on the magnetic field at $T = 2.2$ K (points) and its approximation by formula (1) (solid line)

состоянии наблюдалось в работе [8], однако для данного образца значение B_C составляло порядка 1 Тл, что свидетельствует о большом разбросе соотношения параметров, при которых возможно знакопеременное магнитосопротивление.

Поскольку эффект слабой локализации для рассматриваемого образца при $T = 2,2$ К имеет двумерный характер, полная кривая изменения электропроводности $\Delta\sigma(B)$ при приложении магнитного поля B может быть описана формулой Хиками [7]

$$\Delta\sigma(B) = \frac{e}{\pi h} \left[\frac{3}{2} \Psi\left(\frac{1}{2} + \frac{B_2}{B}\right) - \Psi\left(\frac{1}{2} + \frac{B_1}{B}\right) - \frac{1}{2} \Psi\left(\frac{1}{2} + \frac{B_3}{B}\right) - \ln\left(\frac{B_2^{3/2}}{B_1 B_3^{1/2}}\right) \right], \quad (1)$$

где h – постоянная Планка; Ψ – дигамма-функция; B_1 , B_2 и B_3 – параметры, характеризующие процессы потери фазы волновой функции электронов в процессе неупругого рассеяния на примесях и в результате спин-орбитального взаимодействия. Последние, в свою очередь, представляют собой комбинации параметров

$$B_X = \frac{h}{8\pi e D t_X}, \quad (2)$$

здесь X равно 0, I, SO или S; D – коэффициент диффузии; t_X – время рассеяния: t_0 – упругого, t_1 – неупругого, t_{SO} – за счет спин-орбитального взаимодействия, t_S – на магнитной примеси, и вычисляются по формуле

$$B_1 = B_0 + B_{SO} + B_S, \quad B_2 = B_1 + 4 \frac{B_{SO}}{3} + 2 \frac{B_S}{3}, \quad B_3 = B_1 + 2B_S. \quad (3)$$

Эффект слабой локализации возникает в итоге интерференции волновых функций электрона, опиравшего замкнутую траекторию и вернувшегося в исходную точку за счет упругого рассеяния на примесях для двух противоположных направлений движения. Интерференция волновых функций повышает вероятность обратного рассеяния, вследствие чего сопротивление возрастает. Потеря фазы волновой функции при неупругом рассеянии подавляет эффект слабой локализации. Прецессия спина электрона за счет спин-орбитального взаимодействия и изменение ориентации спина при рассеянии на магнитной примеси приводят к подавлению эффекта слабой локализации, что проявляется в отклонении экспериментальной кривой от логарифмической зависимости при самых низких температурах на рис. 1. Первый и третий члены формулы (1) характеризуют процессы рассеивания в триплетном и синглетном каналах соответственно.

Вид формул (1)–(3) дает возможность предположить, что аппроксимация экспериментальных кривых магнитосопротивления формулой (1) может позволить извлечь значения параметров B_1 , B_2 и B_3 . Используя физически обоснованные допущения о доминирующих процессах в магнитосопротивлении, из формул (2), (3) можно оценить значения всех или нескольких имеющих физическое значение параметров B_X . На следующем этапе производится оценка времен, определяющих процессы рассеяния. Из-за невозможности расчета удельной электропроводности образца для анализа рассматривалось значение

выражения $\Delta R^{-1} = A\Delta\sigma$, где A – подгоночная величина. Наилучших результатов аппроксимации экспериментальной кривой на рис. 2 с использованием метода наименьших квадратов математического пакета *Matlab* удалось достичь для параметров $B_1 = 9,3 \cdot 10^3$; $B_2 = 49,13$ и $B_3 = 8,73$ мТл соответственно.

Для проверки корректности полученных величин B_1 , B_2 и B_3 проведено исследование вариативности результата расчета по формуле (1) при изменении значений параметров в окрестности их рассчитанных значений. Анализ показал, что незначительное отклонение от полученных значений для B_2 и B_3 приводило к существенному возрастанию ошибки, в то время как кратное изменение параметра B_1 имело лишь незначительный эффект у точности аппроксимации. В целях определения достоверности полученного значения B_1 была проведена следующая процедура. Из рис. 2 находилось значение индукции магнитного поля, при котором кривая магнитосопротивления пересекала горизонтальную ось ($B_C = 430,6$ мТл), т. е. должно выполняться условие $\Delta R^{-1} = 0$, и в формулу (2) подставлялось это значение для индукции магнитного поля B , а также рассчитанные величины $B_2 = 49,13$ мТл и $B_3 = 8,73$ мТл. Для указанных параметров строились кривые функции ΔR^{-1} в зависимости от параметра B_1 при изменении последнего в пределах от 0,3 до 2,0 Тл, которые представляют абсолютную ошибку для данного значения индукции магнитного поля (рис. 3).

Дополнительно оценивалось влияние шумов измерения на точность определения параметра B_1 . Для этого аналогичные расчеты проводились для ряда значений B_C в диапазоне, соответствующем разбросу экспериментальных точек в окрестности расчетной $B_C = 430,6$ мТл на рис. 2. Из рис. 3 видно, что ошибка аппроксимации изменяется в значительно меньшей степени при многократном изменении B_1 в рассмотренном диапазоне, чем за счет неточности измерений сопротивления при приложении магнитного поля, что свидетельствует о невозможности точного определения параметра B_1 из аппроксимации экспериментальных кривых магнитосопротивления. Поэтому можно заключить, что приведение точного значения параметра B_1 на основании аппроксимации экспериментальных кривых магнитосопротивления является некорректным, возможна лишь оценка его минимального значения, которое составляет для исследованного образца порядка 3 Тл.

При расчете характеристических времен для различных типов рассеяния носителей заряда согласно формуле (2) требуется знание величины коэффициента диффузии D . Анализ литературных источников показал, что наиболее близкими по электрофизическим свойствам среди углеродных материалов к изучаемому образцу являются образцы интеркалированных фтором волокон графита из работы [9]. В частности, для них характерно изменение температурного коэффициента сопротивления

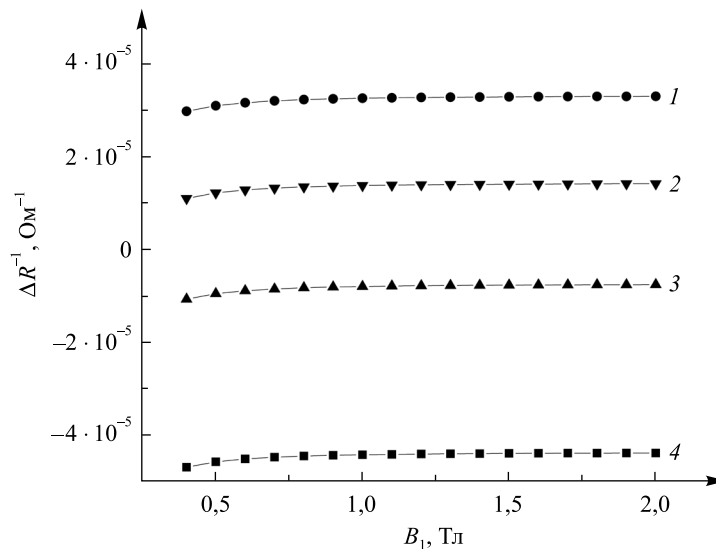


Рис. 3. Ошибка отклонения от нуля рассчитанного значения ΔR^{-1} в точке пересечения аппроксимирующей кривой по формуле (1) с горизонтальной осью при изменении значения параметра B_1 и фиксированных значениях параметров $B_2 = 49,13$ мТл и $B_3 = 8,73$ мТл. Номера кривых соответствуют следующим значениям параметра B_C , мТл: 1 – 430,6; 2 – 428; 3 – 425; 4 – 415

Fig. 3. The error of the deviation of the calculated ΔR^{-1} value from zero at the intersection point of the approximating curve by the formula (1) of the X axis with changing parameter B_1 and the fixed values of the parameters B_2 are 49.13 and 8.73 mT. The numbers of the curves correspond to the following values of the B_C parameter, mT: 1 – 430.6; 2 – 428; 3 – 425; 4 – 415

при сравнимых значениях температур и сопоставимых величинах отрицательного магнитосопротивления. Используя для диффузии электронов значение из работы [9] $D = 6 \text{ см}^2/\text{с}$, которое находится по середине диапазона приводимых в литературе значений для углеродных материалов в предграфитном состоянии, получены оценки времен рассеяния для ряда процессов. Так, для B_3 в формуле (3) можно сохранить только доминирующий вклад от неупругого рассеяния B_1 , и рассчитанное значение для t_1 , равное времени потери фазы волновой функции электрона t_ϕ , достигнет $3,5 \cdot 10^{-11} \text{ с}$. Подставляя данное значение в формулу для длины Таулесса $L_T = (Dt_\phi)^{1/2}$, получим 147 нм. Поскольку расстояние между плоскостями для наших образцов в соответствии с работой [2] составляет 0,370 нм, предположение о двумерном характере электропроводности удовлетворяется при наличии до ~ 400 плоскостей в «луковицах», окружающих наночастицы кобальта, что выполняется с большим запасом согласно микрофотографиям из работы [2].

Из выражения для B_2 в формуле (3), снова пренебрегая B_5 , получим $B_{\text{SO}} = 25,05 \text{ мТл}$, а t_{SO} составит $1,09 \cdot 10^{-11} \text{ с}$. Отметим, что малое значение параметра B_c для исследованного образца находит логическое объяснение как следствие близости значений времен t_ϕ и t_{SO} . Также можно положить $B_1 \approx B_0$, поскольку условие наблюдения эффекта слабой локализации предполагает, что электрон должен испытать много процессов упругого рассеяния до момента потери фазы волновой функции. Учитывая неопределенность при нахождении параметра B_1 , для максимального значения времени упругого рассеяния электронов t_0 при использовании полученной выше оценки минимального значения получим $B_1 = 9,1 \cdot 10^{-14} \text{ с}$. Для сравнения, у меди (из данных работы [10]) при $T = 2 \text{ К}$ можно получить $t_1 = 7,9 \cdot 10^{-11} \text{ с}$, $t_0 = 6,5 \cdot 10^{-15} \text{ с}$, $t_{\text{SO}} = 3,5 \cdot 10^{-14} \text{ с}$. Очевидно, что наиболее сильное отличие наблюдается для времен спин-орбитального рассеяния.

Дополнительно нами был проведен анализ вкладов отдельных членов формулы (1) в общую кривую магнитосопротивления (рис. 4). Отметим, что слабая зависимость полной кривой магнитосопротивления (кривая 4) от индукции магнитного поля является следствием сложения отдельных членов, имеющих значительно более сильную зависимость от B .

Значительный вклад спин-орбитального взаимодействия для исследованного образца не является очевидным и требует пояснения. По нашему мнению, наиболее вероятная причина проявления спин-орбитального взаимодействия связана с рассеянием носителей заряда на поверхности наночастиц кобальта, граничащих с ними аналогично случаю, рассмотренному в работе [11], когда для усиления спин-орбитального взаимодействия на поверхность пленки из магния наносился тонкий слой золота.

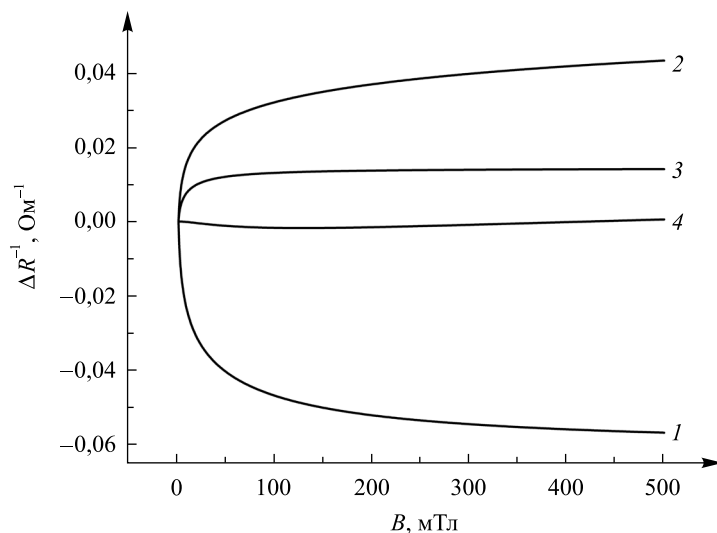


Рис. 4. Температурная зависимость вкладов отдельных членов формулы (1) в результирующее значение магнитосопротивления. Номер кривых 1–3 соответствует порядку следования членов в формуле; 4 – результирующая кривая $\Delta R^{-1}(B)$

Fig. 4. Temperature dependence of individual members contributions of formula (1) to the resulting value of the magnetoresistance. The number of curves 1–3 corresponds to the order of the terms in the formula; 4 – the resulting curve $\Delta R^{-1}(B)$

Заключение

Анализ кривых магнитосопротивления в температурной области, где наблюдаются квантовые поправки к электропроводности Друде, позволяет рассчитать значения микроскопических параметров, характеризующих электропроводящие свойства гетерогенных металлоуглеродных материалов. Особенную тщательность при проведении аппроксимации необходимо проявлять при определении параметра B_1 , характеризующего время упругого рассеяния носителей заряда. Результаты расчета подтверждают правильность предположения о двумерном характере электропроводности в исследованных гетерогенных образцах, следствием чего является проявление эффекта слабой локализации.

Библиографические ссылки

1. Bashmakov IA, Dorosinets VA, Lukashevich MG, Mazanik A, Tihonova T, Zabel T, et al. Preparation, structure, and magnetic properties of cobalt nanoparticles in carbon fibers. *Journal of Materials Research*. 2001;16(10):2832–2835. DOI: 10.1557/JMR.2001.0390.
2. Башмаков ИА, Доросинец ВА, Лукашевич МГ, Мазаник АА, Тихонова ТФ, Скрипка ДА. Получение и электрофизические свойства кобальтосодержащих углеродных волокон. *Физика твердого тела*. 2002;44(9):1614–1621.
3. Bayot V, Piroux L, Michenaud J-P, Issi J-P, Lelaurain M, Moore A. Two-dimensional weak localization in partially graphitic carbons. *Physical Review B*. 1990;41(17):11770–11779. DOI: 10.1103/physrevb.41.11770.
4. Dorosinets VA, Ksenevich VK, Seliuta D, Martunas Z, Valušis G. Investigation of quantum effects in carbonaceous materials near the metal-insulator transition by means of THz photoconductivity. *Acta Physica Polonica A*. 2008;113(3):875–879. DOI: 10.12693/APhysPolA.113.875.
5. Du G, Prigodin VN, Burns A, Joo J, Wang CS, Epstein AJ. Unusual semimetallic behavior of carbonized ion-implanted polymers. *Physical Review B*. 1998;58(8):4485–4495. DOI: 10.1103/PhysRevB.58.4485.
6. Гантмахер ВФ. *Электроны в неупорядоченных средах*. Москва: Физматлит; 2013.
7. Hikami S, Larkin AI, Nagaoka Y. Spin-orbit interaction and magnetoresistance in the two dimensional random system. *Progress of Theoretical Physics*. 1980;63(2):707–710. DOI: 10.1143/PTP.63.707.
8. Wang Yu, Santiago-Aviles JJ. Large negative magnetoresistance and strong localization in highly disordered electrospun pregraphitic carbon nanofiber. *Applied Physics Letters*. 2006;89(12):123119–123119-3. DOI: 10.1063/1.2338573.
9. Piroux L, Bayot V, Issi JP, Dresselhaus MS, Endo M, Nakajima T. Influence of magnetic fields on the two-dimensional electron transport in weakly disordered fluorine-intercalated graphite fibers. *Physical Review B*. 1992;45(24):14315–14320. DOI: 10.1103/physrevb.45.14315.
10. Rosenbaum R. Superconducting fluctuations and magnetoconductance measurements of thin films in parallel magnetic fields. *Physical Review B*. 1985;32(4):2190–2199. DOI: 10.1103/physrevb.32.2190.
11. Bergmann G. Weak localization in thin films: a time-of-flight experiment with conduction electrons. *Physics Reports*. 1984;107(1):1–58. DOI: 10.1016/0370-1573(84)90103-0.

References

1. Bashmakov IA, Dorosinets VA, Lukashevich MG, Mazanik A, Tihonova T, Zabel T, et al. Preparation, structure, and magnetic properties of cobalt nanoparticles in carbon fibers. *Journal of Materials Research*. 2001;16(10):2832–2835. DOI: 10.1557/JMR.2001.0390.
2. Bashmakov IA, Dorosinets VA, Lukashevich MG, Mazanik AA, Tikhonova TF, Skripka DA. [Preparation, structure, and magnetic properties of cobalt nanoparticles in carbon fibers]. *Fizika tverdogo tela*. 2002;44(9):1614–1621. Russian.
3. Bayot V, Piroux L, Michenaud J-P, Issi J-P, Lelaurain M, Moore A. Two-dimensional weak localization in partially graphitic carbons. *Physical Review B*. 1990;41(17):11770–11779. DOI: 10.1103/physrevb.41.11770.
4. Dorosinets VA, Ksenevich VK, Seliuta D, Martunas Z, Valušis G. Investigation of quantum effects in carbonaceous materials near the metal-insulator transition by means of THz photoconductivity. *Acta Physica Polonica A*. 2008;113(3):875–879. DOI: 10.12693/APhysPolA.113.875.
5. Du G, Prigodin VN, Burns A, Joo J, Wang CS, Epstein AJ. Unusual semimetallic behavior of carbonized ion-implanted polymers. *Physical Review B*. 1998;58(8):4485–4495. DOI: 10.1103/PhysRevB.58.4485.
6. Gantmacher VF. *Elektrony v neuporyadochennykh sredakh* [Electrons in Disordered Media]. Moscow: Fizmatlit; 2013. Russian.
7. Hikami S, Larkin AI, Nagaoka Y. Spin-orbit interaction and magnetoresistance in the two dimensional random system. *Progress of Theoretical Physics*. 1980;63(2):707–710. DOI: 10.1143/PTP.63.707.
8. Wang Yu, Santiago-Aviles JJ. Large negative magnetoresistance and strong localization in highly disordered electrospun pregraphitic carbon nanofiber. *Applied Physics Letters*. 2006;89(12):123119–123119-3. DOI: 10.1063/1.2338573.
9. Piroux L, Bayot V, Issi JP, Dresselhaus MS, Endo M, Nakajima T. Influence of magnetic fields on the two-dimensional electron transport in weakly disordered fluorine-intercalated graphite fibers. *Physical Review B*. 1992;45(24):14315–14320. DOI: 10.1103/physrevb.45.14315.
10. Rosenbaum R. Superconducting fluctuations and magnetoconductance measurements of thin films in parallel magnetic fields. *Physical Review B*. 1985;32(4):2190–2199. DOI: 10.1103/physrevb.32.2190.
11. Bergmann G. Weak localization in thin films: a time-of-flight experiment with conduction electrons. *Physics Reports*. 1984;107(1):1–58. DOI: 10.1016/0370-1573(84)90103-0.

УДК 621.315.592

ОБРАЗОВАНИЕ И ОТЖИГ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ В КРЕМНИИ, ИМПЛАНТИРОВАННОМ ИОНАМИ ВОДОРОДА

Ю. М. ПОКОТИЛО¹⁾, А. Н. ПЕТУХ¹⁾, А. В. ГИРО¹⁾

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

Энергетический спектр уровней радиационных дефектов в эпитаксиальном кремнии *n*-типа, облученном ионами водорода с энергией 300 кэВ, исследовался при помощи метода DLTS (deep level transient spectroscopy). Обнаружено увеличение амплитуды пика DLTS с ростом температуры его регистрации, что свидетельствует об образовании областей скопления дефектов с невысокой плотностью смещения, меньшей исходного уровня легирования. После выдержки облученных образцов при комнатной температуре в течение нескольких месяцев данные области распадаются с образованием точечных изолированных *A*-, *E*-центров и водородосодержащих дефектов с уровнем $E_c - 0,31$ эВ. Установлено, что комплексы с таким уровнем образуются путем присоединения к *A*-центру атомов водорода. При температуре $T > 150$ °С этот дефект начинает отжигаться, и одновременно увеличивается концентрация *A*-центра.

Ключевые слова: кремний; ионная имплантация; радиационные дефекты; водород; отжиг; DLTS.

FORMATION AND ANNEALING OF RADIATION DEFECTS IN SILICON, IMPLANTED WITH HYDROGEN IONS

Yu. M. POKOTILO^a, A. N. PETUKH^a, A. V. GIRO^a

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

Corresponding author: A. V. Giro (giro@bsu.by)

Energy spectrum of radiation defect levels in *n*-type epitaxial silicon irradiated with 300 keV hydrogen ions was studied by DLTS (deep level transient spectroscopy) method. The increase in the amplitude of DLTS peak with the increase in the temperature of its registration was found. This indicates the formation of areas of defects accumulation with displacement density lower initial level of doping. After exposure of irradiated samples at room temperature for several months, these areas decay with isolated point *A*-, *E*-centers and hydrogen defects with an $E_c - 0.31$ eV level formation. It is shown that complexes with an $E_c - 0.31$ eV level are formed by attaching hydrogen atoms to *A*-center. At $T > 150$ °C, this defect begins to anneal, and at the same time *A*-center concentration is increased.

Keywords: silicon; ion implantation; radiation defects; hydrogen; annealing; DLTS.

Образец цитирования:

Покотило ЮМ, Петух АН, Гиро АВ. Образование и отжиг радиационных дефектов в кремнии, имплантированном ионами водорода. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика*. 2019;3:68–72.
<https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-3-68-72>

For citation:

Pokotilo YuM, Petukh AN, Giro AV. Formation and annealing of radiation defects in silicon, implanted with hydrogen ions. *Journal of the Belarusian State University. Physics*. 2019;3:68–72. Russian.
<https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-3-68-72>

Авторы:

Юрий Мефодьевич Покотило – кандидат физико-математических наук, доцент; доцент кафедры энергофизики физического факультета.
Алла Николаевна Петух – кандидат физико-математических наук; заведующий учебной лабораторией кафедры энергофизики физического факультета.
Алексей Владимирович Гиро – старший преподаватель кафедры энергофизики физического факультета.

Authors:

Yuri M. Pokotilo, PhD (physics and mathematics), docent; associate professor at the department of energy physics, faculty of physics.
pokotilo@bsu.by
Alla N. Petukh, PhD (physics and mathematics); head of the educational laboratory, department of energy physics, faculty of physics.
petukh@bsu.by
Alexei V. Giro, senior lecturer at the department of energy physics, faculty of physics.
giro@bsu.by

Введение

При облучении кремния *n*-типа частицами, такими как протоны, электроны, γ -кванты, образуются пары Френкеля (междоузельный атом – вакансии), часть из которых затем рекомбинирует, а остальные участвуют в формировании устойчивых дефектов: дивакансии *A*-центра (комплекс кислород – вакансии) и *E*-центра (легирующая примесь – вакансии) [1]. Однако облучение ионами H^+ в связи с высокой реакционной способностью атомарного водорода приводит к следующим особенностям. С одной стороны, водород сам выступает в качестве эффективной ловушки для вакансий и междоузельных атомов, что существенно понижает скорость введения радиационных дефектов (РД). С другой стороны, при взаимодействии с РД водород может полностью пассивировать либо частично изменить их электрические свойства [2]. Цель данной работы – сравнительное исследование при помощи метода DLTS процессов образования РД в кремнии, облученном ионами H^+ и γ -квантами ^{60}Co .

Методика эксперимента

Для исследования использовались диоды Шоттки (Mo – Si), у которых активным базовым слоем служил эпитаксиальный кремний, легированный фосфором, с удельным сопротивлением $\rho = 1,2 \text{ Ом} \cdot \text{см}$ и толщиной $x = 5 \text{ мкм}$. Облучение ионами H^+ с энергией 300 кэВ и дозой $1 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$ проводилось с планарной стороны через многослойный (Ag – Ni – Mo) контакт. Расчет пробега ионов H^+ в данной многослойной структуре с помощью программы TRIM показал, что максимум распределения внедренных ионов и РД локализован в базе на расстоянии $x \approx 1,55 \text{ мкм}$ от плоскости перехода. Параметры РД определялись при помощи метода DLTS [3]. В нашем случае отношение времен выборки составляло $t_2/t_1 = 5$, частота измерительного моста – 1 МГц, напряжение смещения переключалось от 0 до –5 В, что соответствует глубине сканирования базового слоя 1,2–2,1 мкм.

Результаты и их обсуждение

На рис. 1 приведены спектры DLTS облученного ионами H^+ образца. Видно, что непосредственно после облучения (кривая I) в спектре наблюдается лишь один пик с энергией активации $\Delta E = 0,4 \text{ эВ}$ и сечением захвата электронов $\sigma = 8,3 \cdot 10^{-15} \text{ см}^2$, найденными из температурного смещения максимума пика при измерении серии спектров с различными окнами регистрации. В этих измерениях обнаружено возрастание амплитуды пика при увеличении температуры регистрации (рис. 2).

Согласно [4] данный эффект обусловлен изменением концентрации заряженных глубоких уровней в скоплениях дефектов при изменении температуры. Известно, что для скопления дефектов, образованных быстрыми нейтронами реактора, амплитуда пика падает с ростом температуры регистрации [5]. В нашем же случае наблюдается противоположный эффект, который можно объяснить в соответствии с моделью [4] и данными работы [6] образованием при протонном облучении областей с невысокой

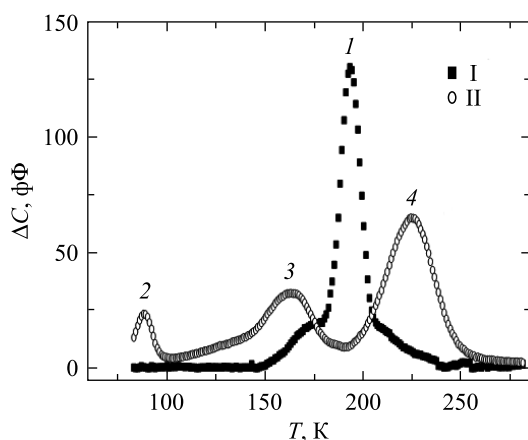


Рис. 1. Спектры DLTS ($\tau = 10,4 \text{ мс}$) диода Шоттки, облученного ионами водорода, непосредственно после облучения (I) и через 5 мес. выдержки при комнатной температуре (II).

Цифрами 1–4 обозначены пики DLTS

Fig. 1. DLTS spectra ($\tau = 10.4 \text{ ms}$) of Schottky diode irradiated with hydrogen ions immediately after irradiation (I) and after 5 months exposure at room temperature (II).

Numbers 1–4 marks DLTS peaks

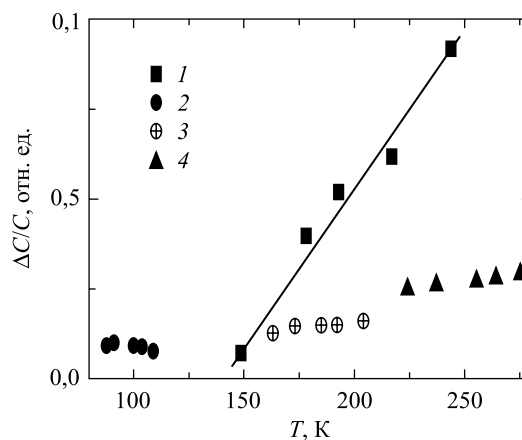


Рис. 2. Зависимости амплитуд пиков DLTS на рис. 1 (1–4) от температуры регистрации

Fig. 2. Dependences of DLTS peaks amplitudes in fig. 1 (1–4) from registration temperature

плотностью смещения, которая меньше исходного уровня легирования. Такие области скопления дефектов неустойчивы [6], поэтому выдержка облученных образцов при комнатной температуре приводит сначала к их развалу, а затем к появлению изолированных точечных дефектов (см. рис. 1, кривая II), амплитуды пиков которых очень слабо зависят от температуры регистрации.

На рис. 3 приведены спектры DLTS для диодов Шоттки, облученных γ -квантами ^{60}Co и ионами H^+ , пронормированные по амплитуде наиболее высокотемпературного пика. Диоды Шоттки, облученные ионами H^+ , перед измерениями выдерживались в течение 5 мес. при комнатной температуре. Построенные для соответствующих пиков DLTS зависимости Аррениуса представлены на рис. 4, а найденные значения параметров дефектов и их идентификация (согласно [7]) приведены в таблице.

Основные параметры уровней радиационных дефектов в кремнии,
облученном ионами H^+ и γ -квантами

The main parameters of radiation defects levels in silicon
irradiated with H^+ ions and γ -quanta

Номер пика	Энергия уровня, эВ	Сечение захвата, 10^{-15} см^2	Температура отжига, $^{\circ}\text{C}$	Идентификация
1	$E_c - (0,165 \pm 0,05)$	5 ± 2	350	$(V - \text{O})^{0/-}$, A-центр
2	$E_c - 0,21$	0,1	—	$W^{=/-}$, дивакансия
3	$E_c - 0,31$	1,6	250	H-центр
4	$E_c - (0,42 \pm 0,01)$	$1,0 \pm 0,3$	150	$(P - V)^{-0}$, E-центр

На рис. 5 представлены данные изохронного отжига исследуемых дефектов. Из анализа полученных результатов следует, что для обоих видов облучения вводятся A-центры (1), E-центры (4) и незначительное количество дивакансий $W^{=/-}$ (2). Более глубокое состояние дивакансии W^{-0} маскируется, по нашему мнению, мощным пиком (4), который, исходя главным образом из температуры его отжига $\sim 150^{\circ}\text{C}$, можно идентифицировать как E-центр.

К особенностям протонного облучения (как видно из рис. 3) можно отнести появление нового дефекта с уровнем $E_c - 0,31$ эВ, а также более низкий относительный вклад A-центра, который при γ -облучении (см. рис. 3, кривая I) и электронном облучении [8] доминирует в спектре DLTS. С учетом вышесказанного можно предположить, что образование водородосодержащего дефекта с уровнем $E_c - 0,31$ эВ происходит за счет A-центра. Как показано в работах [8; 9], низкотемпературное введение водорода в процессе химической полировки кремния, предварительно облученного электронами, приводит к сокращению A-центров за счет присоединения к ним атома водорода и образования нового дефекта с уровнем $E_c - 0,31$ эВ, который можно идентифицировать как VOH -комплекс. Кроме того,

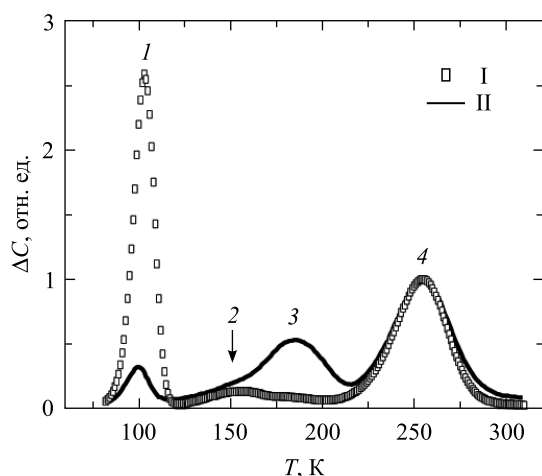


Рис. 3. Нормированные спектры DLTS ($\tau = 0,52$ мс) для диодов Шоттки, облученных γ -квантами (I) и ионами H^+ (II). Цифрами 1–4 обозначены DLTS

Fig. 3. Normalized DLTS spectra ($\tau = 0.52$ ms) for Schottky diodes irradiated with γ -quanta (I) and H^+ ions (II). Numbers 1–4 marks DLTS peaks

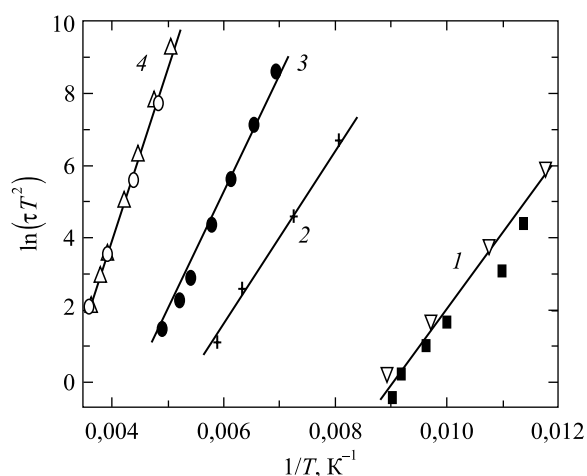


Рис. 4. Зависимости Аррениуса для соответствующих пиков DLTS на рис. 3 (1–4)

Fig. 4. Arrhenius plots for the corresponding DLTS peaks from fig. 3 (1–4)

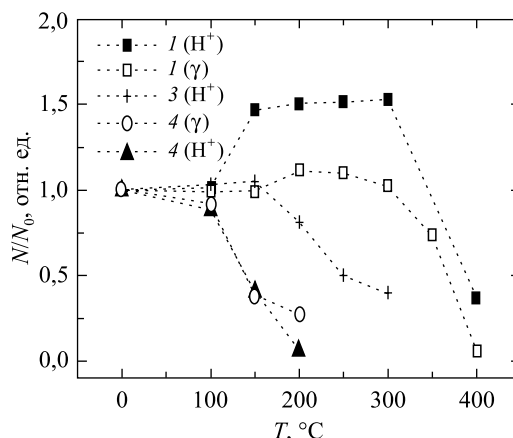


Рис. 5. Зависимость концентрации радиационных дефектов, соответствующих пикам DLTS на рис. 3, от температуры изохронного (20 мин) отжига. Вид облучения указан в скобках

Fig. 5. The dependence of radiation defects concentration, corresponding to DLTS peaks in fig. 3, from the temperature of isochronous (20 min) annealing. The type of exposure is indicated in brackets

в пользу механизма пассивации A -центра свидетельствуют также и наши данные по изохронному отжигу, которые приведены на рис. 5. Видно, что отжиг VOH -комплекса сопровождается увеличением концентрации A -центра, в то время как отжиг A -центра в облученном γ -квантами образце протекает без роста его концентрации.

Закключение

Полученные в работе результаты показали, что при облучении кремния ионами водорода образуются области скопления дефектов с невысокой плотностью смещения, меньшей исходного уровня легирования. Данные области термически неустойчивы и распадаются после длительной (~5 мес.) выдержки образцов при комнатной температуре с образованием A -, E -центров и водородосодержащего дефекта с уровнем $E_c - 0,31$ эВ. Установлено, что данный дефект образуется путем присоединения атома водорода к A -центру, так как при его отжиге происходит увеличение концентрации последнего.

Библиографические ссылки

1. Watkins GD, Corbett JW. Defects in irradiated silicon: electron paramagnetic resonance of the divacancy. *Physical Review*. 1965;138(2A):A543–A555. DOI: 10.1103/PhysRev.138.A543.
2. Pearton SJ, Corbett JW, Stavola M. *Hydrogen in Crystalline Semiconductors*. Berlin: Springer; 1992. DOI: 10.1007/978-3-642-84778-3.
3. Bourgoin J, Lannoo M. *Point Defects in Semiconductors. II. Experimental Aspects*. Berlin: Springer-Verlag; 1983. DOI: 10.1007/978-3-642-81832-5.
4. Антонова ИВ, Васильев АВ, Панов ВИ, Шаймеев ССю. Применение емкостной методики DLTS к исследованию полупроводников с неоднородным распределением примесей (дефектов). *Физика и техника полупроводников*. 1988;22(6):998–1003.
5. Камышан АС, Литвинов ВВ, Парахневич ЕВ, Петух АН, Покотило ЮМ, Шварков ДС. Радиационное дефектообразование в детекторном кремнии, облученном быстрыми нейтронами. В: *Взаимодействие излучений с твердым телом. Материалы III Международной научной конференции; 6–8 октября 1999 г.; Минск, Беларусь. Часть I*. Минск: БГУ; 1999. с. 17–19.
6. Коноплева РФ, Остроумов ВН. *Взаимодействие заряженных частиц высоких энергий с германием и кремнием*. Москва: Атомиздат; 1975.
7. Козлов ВА, Козловский ВВ. Легирование полупроводников радиационными дефектами при облучении протонами и α -частицами. *Физика и техника полупроводников*. 2001;35(7):769–795.
8. Tokuda Y, Seki T. Interaction of hydrogen with the vacancy-oxygen pair produced in n -type silicon by electron irradiation. *Semiconductor Science and Technology*. 2000;15(2):126–129. DOI: 10.1088/0268-1242/15/2/308.
9. Ohmura Y, Takahashi K, Saitoh H, Kon T, Enosawa A. Hydrogenation and passivation of electron-beam-induced defects in N -type Si. *Physica B: Condensed Matter*. 1999;273–274:228–230. DOI: 10.1016/S0921-4526(99)00459-7.

References

1. Watkins GD, Corbett JW. Defects in irradiated silicon: electron paramagnetic resonance of the divacancy. *Physical Review*. 1965;138(2A):A543–A555. DOI: 10.1103/PhysRev.138.A543.
2. Pearton SJ, Corbett JW, Stavola M. *Hydrogen in Crystalline Semiconductors*. Berlin: Springer; 1992. DOI: 10.1007/978-3-642-84778-3.

3. Bourgoin J, Lannoo M. *Point Defects in Semiconductors. II. Experimental Aspects*. Berlin: Springer-Verlag; 1983. DOI: 10.1007/978-3-642-81832-5.
4. Antonova IV, Vasiliev AV, Panov VI, Shaimeev SSyu. [Using of capacitance method DLTS for investigation of semiconductors with inhomogeneous distribution of impurities (defects)]. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov*. 1988;22(6):998–1003. Russian.
5. Kamishan AS, Litvinov VV, Parahnevich EV, Petukh AN, Pokotilo YuM, Shvarkov DS. [Radiative defects in detector silicon irradiated by fast neutrons]. In: *Vzaimodeistvie izlucheni s tverdym telom. Materialy III Mezhdunarodnoi nauchnoi konferentsii; 6–8 oktyabrya 1999 g.; Minsk, Belarus'. Chast' I* [Interaction of radiation with solid. Proceeding of the III International Scientific Conference; 1999 October 6–8; Minsk, Belarus. Part 1]. Minsk: Belarusian State University; 1999. p. 17–19. Russian.
6. Konopleva RPh, Ostroumov VN. *Vzaimodeistvie zaryazhennykh chastits vysokikh energii s germaniem i kremniem* [The interaction of high-energy charged particles with germanium and silicon]. Moscow: Atomizdat; 1975. Russian.
7. Kozlov VA, Kozlovski VV. [The semiconductor doping with radiation induced defects via proton and α -particle irradiation]. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov*. 2001;35(7):769–795. Russian.
8. Tokuda Y, Seki T. Interaction of hydrogen with the vacancy-oxygen pair produced in *n*-type silicon by electron irradiation. *Semiconductor Science and Technology*. 2000;15(2):126–129. DOI: 10.1088/0268-1242/15/2/308.
9. Ohmura Y, Takahashi K, Saitoh H, Kon T, Enosawa A. Hydrogenation and passivation of electron-beam-induced defects in *N*-type Si. *Physica B: Condensed Matter*. 1999;273–274:228–230. DOI: 10.1016/S0921-4526(99)00459-7.

Статья поступила в редакцию 19.07.2019.
Received by editorial board 19.07.2019.

УДК 669.017:539.16

МОДИФИКАЦИЯ ПОВЕРХНОСТИ И РАСПЫЛЕНИЕ СПЛАВОВ FeCrAl ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ ВОДОРОДНОЙ ПЛАЗМЫ

Г. Д. ТОЛСТОЛУЦКАЯ¹⁾, М. А. ТИХОНОВСКИЙ¹⁾,
В. Н. ВОЕВОДИН^{1),2)}, А. В. НИКИТИН¹⁾, А. С. ТОРТИКА¹⁾, Р. Л. ВАСИЛЕНКО¹⁾

¹⁾Институт физики твердого тела, материаловедения и технологий
Национального научного центра «Харьковский физико-технический институт»,
ул. Академическая, 1, 61108, г. Харьков, Украина

²⁾Харьковский национальный университет им. В. Н. Каразина,
площадь Свободы, 4, 61022, г. Харьков, Украина

В работе исследованы процессы распыления и модификации поверхности коммерческих и экспериментальных сплавов FeCrAl, легированных иттрием, молибденом и цирконием. С помощью сканирующей электронной микроскопии показано, что под воздействием низкоэнергетической (500 эВ) водородной плазмы с потоком около $3,2 \cdot 10^{20} \text{ м}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$ и флюенсом $4 \cdot 10^{24} \text{ м}^{-2}$ при комнатной температуре морфология поверхности развивается вследствие образования канавок вдоль границ зерен, макро- и микротрещин, а также ямок, обусловленных распылением преципитатов. Определение состава последних энергодисперсионным рентгеновским спектрометром позволило

Образец цитирования:

Толстолуцкая ГД, Тихоновский МА, Воеводин ВН, Никитин АВ, Тортика АС, Василенко РЛ. Модификация поверхности и распыление сплавов FeCrAl при воздействии низкоэнергетической водородной плазмы. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика*. 2019;3: 73–80 (на англ.).
<https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-3-73-80>

For citation:

Tolstolutskaia GD, Tikhonovsky MA, Voyevodin VN, Nikitin AV, Tortika AS, Vasilenko RL. Surface modification and sputtering of FeCrAl alloys exposed to low-energy hydrogen plasmas. *Journal of the Belarusian State University. Physics*. 2019;3:73–80.
<https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-3-73-80>

Авторы:

Галина Дмитриевна Толстолуцкая – доктор физико-математических наук, профессор; начальник лаборатории физики взаимодействия ионных пучков с материалами.

Михаил Андреевич Тихоновский – кандидат физико-математических наук; начальник лаборатории наноматериалов.

Виктор Николаевич Воеводин – член-корреспондент НАН Украины, доктор физико-математических наук, профессор; директор¹⁾, профессор кафедры реакторного материаловедения и физических технологий физико-технического факультета²⁾.

Аркадий Валерьевич Никитин – кандидат физико-математических наук; научный сотрудник лаборатории физики взаимодействия ионных пучков с материалами.

Александр Степанович Тортика – начальник группы лаборатории наноматериалов.

Руслан Леонидович Василенко – младший научный сотрудник лаборатории электронно-микроскопических исследований структуры облученных материалов.

Authors:

Galina D. Tolstolutskaia, doctor of science (physics and mathematics), full professor; head of the laboratory of physics of interaction of ion beams with materials.

g.d.t@kipt.kharkov.ua

<https://orcid.org/0000-0003-3091-4033>

Michael A. Tikhonovsky, PhD (physics and mathematics); head of the laboratory of nanomaterials.

tikhonovsky@kipt.kharkov.ua

<https://orcid.org/0000-0001-5889-0366>

Victor N. Voyevodin, corresponding member of the National Academy of Sciences of Ukraine, doctor of science (physics and mathematics), full professor; director^a and professor at the department of structural reactor materials and physical technology, faculty of physics and technology^b.

voyev@kipt.kharkov.ua

<https://orcid.org/0000-0003-2290-5313>

Arkadiy V. Nikitin, PhD (physics and mathematics); researcher at the laboratory of physics of interaction of ion beams with materials.

gtolst@ukr.net

<https://orcid.org/0000-0001-8853-1145>

Aleksander S. Tortika, head of the group at the laboratory of nanomaterials.

tortika@kipt.kharkov.ua

<https://orcid.org/0000-0002-0813-341X>

Ruslan L. Vasilenko, junior researcher at the laboratory of electron-microscopic investigations of the structure of irradiated materials.

rvasilenko@kipt.kharkov.ua

<https://orcid.org/0000-0002-4029-9727>

установить, что оксид алюминия преимущественно распределен в зернах сплавов на основе FeCrAl, а оксиды иттрия локализованы по границам зерен. Результаты эрозионных исследований показали, что коэффициенты распыления для водорода у всех сплавов составляют 1,05–0,38 ат./ион и не превышают таковых для чистого железа и хрома в опубликованных данных. Для экспериментальных сплавов, легированных иттрием и молибденом, получено, что коэффициенты распыления в несколько раз меньше, чем у стали SS304, и только в полтора раза выше по сравнению с вольфрамом.

Ключевые слова: ферритные сплавы FeCrAl; водородная плазма; морфология поверхности; эрозия; коэффициент распыления.

Благодарность. Работа выполнена при финансовой поддержке Национальной академии наук Украины (программа «Поддержка развития приоритетных направлений научных исследований» (КПКВК 6541230)).

SURFACE MODIFICATION AND SPUTTERING OF FeCrAl ALLOYS EXPOSED TO LOW-ENERGY HYDROGEN PLASMAS

G. D. TOLSTOLUTSKAYA^a, M. A. TIKHONOVSKY^a,
V. N. VOYEVODIN^{a, b}, A. V. NIKITIN^a, A. S. TORTIKA^a, R. L. VASILENKO^a

^a*Institute of Solid State Physics, Material Science and Technology,
National Science Center «Kharkov Institute of Physics and Technology»,
1 Akademicheskaya Street, Kharkiv 61108, Ukraine*

^b*V. N. Karazin Kharkiv National University, 4 Svobody Square, Kharkiv 61022, Ukraine*

Corresponding author: G. D. Tolstolutskaia (g.d.t@kipt.kharkov.ua)

In the present paper processes of sputtering and surface modification of commercial and experimental FeCrAl composites alloyed with yttrium, molybdenum and zirconium were investigated. Using a field-emission scanning electron microscope, it was shown that under the influence of low-energy (500 eV) hydrogen plasma with a flux about $3.2 \cdot 10^{20} \text{ m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ and fluence $4 \cdot 10^{24} \text{ m}^{-2}$ at T_{room} , surface morphology develops due to the formation of grooves along grain boundaries, macro- and microcracks, as well as intragranular pits due to the sputtering of precipitates. Determination of the composition of precipitates by an energy dispersive X-ray spectrometer allowed to establish that aluminum oxide is preferentially distributed in the grains of FeCrAl-based alloys, and yttrium oxides are localized along grain boundaries. Results of erosion studies indicated that the sputtering yields for hydrogen on all alloys are 1.05–0.38 at./ion and doesn't exceed those for published data for pure iron and chromium. For experimental alloys doped with yttrium and molybdenum found that the obtained sputtering coefficients were in several times lower than for steel SS304 and only one and a half times higher compared to tungsten.

Keywords: FeCrAl ferritic alloys; hydrogen plasma; surface morphology; erosion; sputtering yield.

Acknowledgements. The work was financially supported by the National Academy of Sciences of Ukraine (program «Support of the development of main lines of scientific investigations» (KPKVK 6541230)).

Introduction

A recent interest in Accident Tolerant Fuel cladding for light water reactors has restored the attention to the iron-chromium-aluminum (FeCrAl) ferritic alloy system, which have been used in the non-nuclear industry for over eight decades [1]. FeCrAl alloys have been also considered as a promising candidate for a fusion blanket application [2].

To assess the possibility to use the FeCrAl alloys as plasma-facing materials, there is a need to examine a behavior of these materials under plasma exposure. Due to the large power flux and steady-state environment expected in DEMO the areas of plasma-facing materials will be subjected to largest charge-exchange neutral fluxes at very low energies of the order of 1000 eV and below. Sputtering of plasma-facing materials due to interaction with energetic ions (particularly hydrogen isotopes) is an essential issue in magnetically confined fusion devices because it is directly related to impurity generation as well as to the lifetime of plasma-facing components [3; 4]. For a better understanding of the sputtering processes on FeCrAl alloys it is necessary firstly to know the sputtering of each alloyed element as a reference. However, sputtering data for these elements are still quite limited and for FeCrAl as whole also.

The goal of this work is to experimentally determine the sputtering yields and surface modification of FeCrAl alloys exposed to low-energy, high-flux hydrogen plasma and compares the obtained data of sputtering yields with existing published data for Fe, Cr, SS304 and W.

Material and methods

Five samples (# 1–5) were selected as materials for the study; two of them (# 1 и 2) were commercial Kanthal-type alloys H23U5T. Sample # 1 (round bar 20 mm in diameter) was in delivery state, sample # 2 was the same rod, remelted by the argon-arc method and casted into a cylindrical copper mold 10 mm in diameter. Experimental alloys # 3–5 were melted at the same conditions. High purity metals were used as the raw materials (armco iron, aluminum 99.99 %, electrolytic chromium 99.99 %, molybdenum 99.9 % and zirconium 99.9 %). At least five melting with turning over at each remelting were performed to improve the chemical homogeneity of the ingots. The final solidified ingots were cylindrical bars with a diameter of 10 mm and height of 30 mm, weighing ≈ 30 g.

Microstructure analysis and chemical analysis at individual «points» (size of $5\text{--}10\text{ }\mu\text{m}^2$) showed that aluminum, chromium, silicon, manganese, nickel and molybdenum were fairly uniform distributed in the main matrix phase. In other words, these elements form substitution solid solutions with iron, which is consistent with the known phase diagrams of iron-based binary systems [5]. At the same time, titanium in commercial alloy (samples # 1 and 2) is distributed very unevenly. The matrix phase contains 2–3 times less titanium (0.06–0.13 %) than all over the sample.

The disk-shaped specimens, 10 mm in diameter and about 0.8 mm in thickness, were cut from bar of each material. The surface of each disk was polished mechanically to a mirror-like and then electropolished in a standard electrolyte to remove any mechanically damaged near-surface layer. Prepared specimens have been irradiated with hydrogen ions using glow gas-discharge plasma electrodes at 1000 V. The central portion of the specimen was irradiated through an aperture, providing an easily-observed boundary between irradiated and unirradiated regions. The design and principle of operation of the gaseous plasma source used for irradiation of the samples is described in detail in [6].

The dominant ion component generated in the ion source is H_2^+ . This ion was chosen as the bombarding species to achieve higher particle fluxes. These molecular H_2^+ ions are considered to be identical to 2 individual H ions impinging with the same velocity as the molecular ion. Breakup of the molecular H_2^+ ions on the target surface results in emergence of two H atoms with the kinetic energy of $1/2$ experimentally applied ion energy and the flux is two times the measured ion flux. In our experiments the FeCrAl targets were sputtered with atomic H^+ ions at the ion energy of 500 eV with flux of $3.2 \cdot 10^{20} \text{ m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$. The maximum irradiation fluence was $4 \cdot 10^{24} \text{ m}^{-2}$. The experimental ion flux and fluence were calculated from the measured ion currents and beam spot areas.

The specimen temperature was continuously monitored using a thermocouple in the base of the specimen holder and was attached to the lower surface of specimen. Temperature maintenance on the samples in this device was achieved either by resistive heating or liquid nitrogen cooling and found to be around T_{room} . The temperature was maintained within ± 2.5 K.

The erosion yield was primarily evaluated by a weight-loss technique. Before and after plasma exposure, the weight of each target was measured by a microbalance system, and the erosion rate was then calculated from the weight loss and the total hydrogen fluence. Typical weight losses were between 20 and 160 μg ; the uncertainty in the weight loss determination is estimated to be ± 2 μg .

The surface morphology of the targets exposed to the hydrogen plasma was examined with a field-emission scanning electron microscope JEOL JSM-6710F equipped with an energy dispersive X-ray (EDX) spectrometer.

Results and discussion

Surface morphology and chemical compositions. SEM examination of targets exposed to the hydrogen plasmas has revealed that surface modification of FeCrAl alloys resulted from the variations of sputtering erosion of different topographical structures.

The surface microstructure of the commercial alloy in the initial state is typical for recrystallized material with a grain size $\geq 100\text{ }\mu\text{m}$ and with a lot of precipitates (fig. 1, *a*). Figure 1, *b*, shows that after irradiated with hydrogen gas-discharge plasmas the surface of samples # 1 have the almost rectangular cracks covering over the entire specimen irradiated surface. It should be noted that the development of cracks does not always coincide with the boundaries of the grains. This process can occur mainly at the sites of localization of impurities or stresses.

The ingot from commercial alloy (samples # 2) has microstructure with a larger grain size ($\sim 100\text{ }\mu\text{m}$ up to 1 mm) (fig. 1, *c*). After sputtering the grain boundaries in this case are destroyed more strongly in comparison with

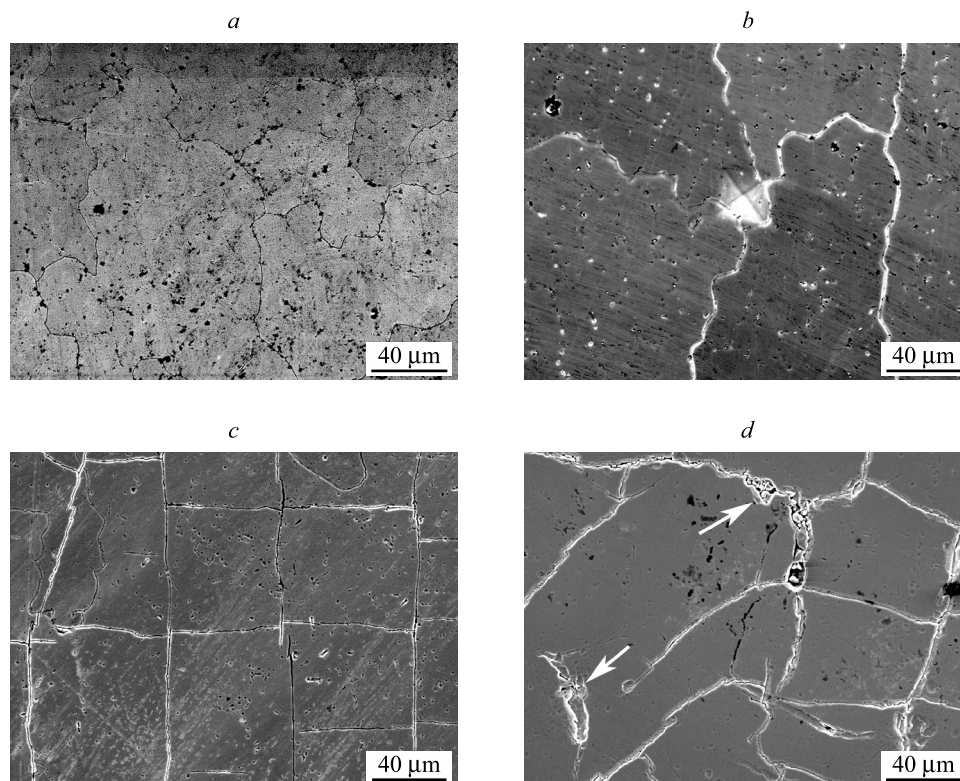


Fig. 1. SEM images of the initial samples surface # 1 (a) and # 2 (b), details of the surface after sputtering of commercial (c) and remelted samples (d).
The trace from the indenter is also visible in the image (b)

the sample in the initial state. The surface morphology is developed due to generation of grooves along grain boundaries, macro and micro cracks and intragranular pits due to the sputtering of precipitates. The chemical compositions for each alloy are specified in the table 1. It should be noted that elements concentration given in the table as «unirradiated» and «sputtered» was determined by scanning over a sufficiently large area (about 1 mm²) and as «precipitate» at individual «points» (size of 5–10 μm²).

Heavily etched sections of grain boundaries (indicated by arrows in fig. 1, d) of remelted FeCrAl (samples # 2) contains 2–3 times more titanium (~0.6 wt. %) and silicon (~2.4 wt. %) than all over the sample. The concentration Fe, Cr and Al practically does not change during the process of sputtering compared to the initial composition.

Table 1

Typical nominal and measured compositions and after sputtering
of as-received and remelted FeCrAl alloys exposed to hydrogen plasma

Sample	Concentration, wt. %						
	Fe	Cr	Al	Other elements			
				Si	Ti	Mn	Ni
# 1. Initial bar (commercial): nominal measured (unirradiated) sputtered	Bal.	22–24	5.0–5.8	To 0.5	0.2–0.5	To 0.3	To 0.6
	Bal.	22.65 ± 0.05	4.04 ± 0.02	0.53 ± 0.03	0.21 ± 0.08	0.28 ± 0.06	0.13 ± 0.06
	Bal.	22.62 ± 0.02	4.19 ± 0.04	0.23 ± 0.06	0.55 ± 0.07	–	–
# 2. Remelted: nominal measured (unirradiated) sputtered precipitate	Bal.	22–24	5.0–5.8	To 0.5	0.2–0.5	To 0.3	To 0.6
	Bal.	22.52 ± 0.07	4.06 ± 0.05	0.58 ± 0.03	0.22 ± 0.08	0.29 ± 0.06	0.14 ± 0.06
	Bal.	22.15 ± 0.03	4.04 ± 0.04	0.62 ± 0.06	–	–	–
	Bal.	22.51 ± 0.05	4.26 ± 0.03	2.42 ± 0.07	0.60 ± 0.07	–	–

Samples (ingots) # 3–5 have anisotropic coarse-grained microstructure (grain size near several millimeters), wherein some grains are elongated in the direction of heat sink. The chemical composition for alloy # 3–5 is given in table 2. The yttrium distribution in the ingots is of greatest interest. Microanalysis showed that

there is no yttrium in the grains body of the matrix phase (its concentration is less than detection limit of about 0.1 at. %). The main amount of yttrium is concentrated at grain boundaries or in precipitations. These precipitations are yttrium oxides. Such yttrium distribution is associated with its low solubility in iron and, as a consequence, in the matrix phase [5].

Table 2

Nominal and measured compositions of FeCrAl alloys # 3–5

Sample	Concentration, wt. %					
	Fe	Cr	Al	Other elements		
				Y	Mo	Zr
# 3 (ingot): nominal measured	Bal. Bal.	21.0 21.84 ± 0.1	6.0 6.07 ± 0.05	1.0 0.83	– –	– –
# 4 (ingot): nominal measured	Bal. Bal.	21.0 21.82 ± 0.05	6.0 5.35 ± 0.05	1.0 0.53 ± 0.03	2.0 2.58 ± 0.05	– –
# 5 (ingot): nominal measured	Bal. Bal.	23.0 23.86 ± 0.19	9.0 8.55 ± 0.13	1.0 0.66 ± 0.02	2.0 2.07 ± 0.01	2.0 1.87 ± 0.16

SEM examination of the FeCrAl alloys targets (# 3 and 4) exposed to the 500 eV hydrogen plasmas has revealed that only already described well-known topographical structures are observed on the surfaces (fig. 2, *a – c*). Spectra 1 and 2 were taken on the surface of FeCrAl after sputtering, where spectrum 1 was taken in the middle of the grain and spectrum 2 from precipitate at the grain boundary (table in fig. 2). Comparison of the compositions from these spectra had shown that the aluminum oxide preferential located in grain and yttrium oxide at the grain boundary. Molybdenum is practically uniformly distributed in the main matrix phase on a sputtered surface.

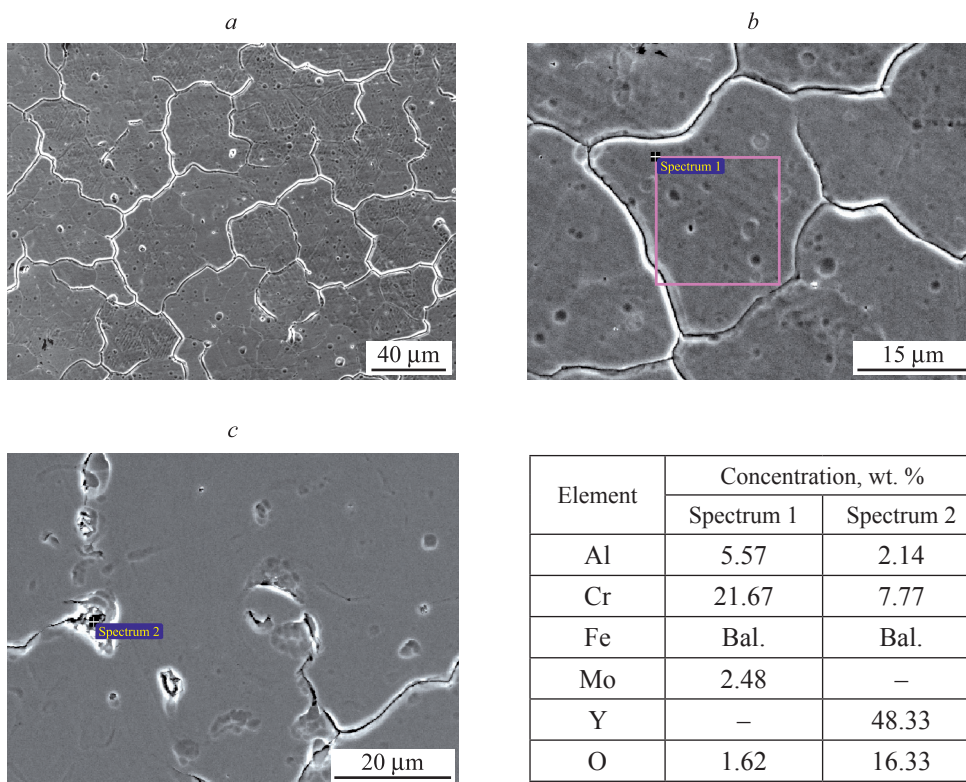


Fig. 2. SEM images of the surface of FeCrAl doped with yttrium + molybdenum after sputtering (*a*), detail of the surface with cracks along grain boundaries (*b*) and precipitates (*c*) and the EDS analyses from the points marked in the images (*b*, *c*)

A significant change in the microstructure FeCrAl is observed when besides alloying with yttrium and molybdenum it was also added zirconium (sample # 5). Firstly, grain refinement occurs, and secondly, the eutectic component appears at the grain boundaries in initial FeCrAl alloys doped with yttrium + molybdenum + zirconium (fig. 3, *a, b*). As in the case of yttrium, the concentration of zirconium in the matrix phase is below the detection limit due to its low solubility in iron [5] (see spectrum 1 in the table in fig. 3). The zirconium concentration in the eutectic is 15.2 ± 1.2 % (average value over several measurements), which is close to eutectic concentration in binary system Fe–Zr [7]. Average values of other elements concentration in eutectic are given in the table in fig. 3 (spectrum 2). Thus, almost all zirconium and yttrium are concentrated in the eutectic; chromium is near uniformly distributed between matrix phase and eutectic, although its concentration in eutectic is lower than in matrix phase.

The surface morphology that is developed due to the hydrogen plasma exposure of FeCrAl alloys doped with yttrium + molybdenum + zirconium is shown in fig. 3, *c*. As well as for other modifications of the alloys it can be seen the grooves along the grain boundaries and cracks develop as a result of sputtering. The cracks have both radial orientation and form a «cellular» structure. Location of grooves and cracks on the surface of the samples repeats the distribution of doping impurities of yttrium, molybdenum and zirconium (see fig. 3, *a*). Spectrum 3 (see table in fig. 3) shows the composition of precipitates appearing at the grain boundaries after sputtering represented mainly by zirconium oxides.

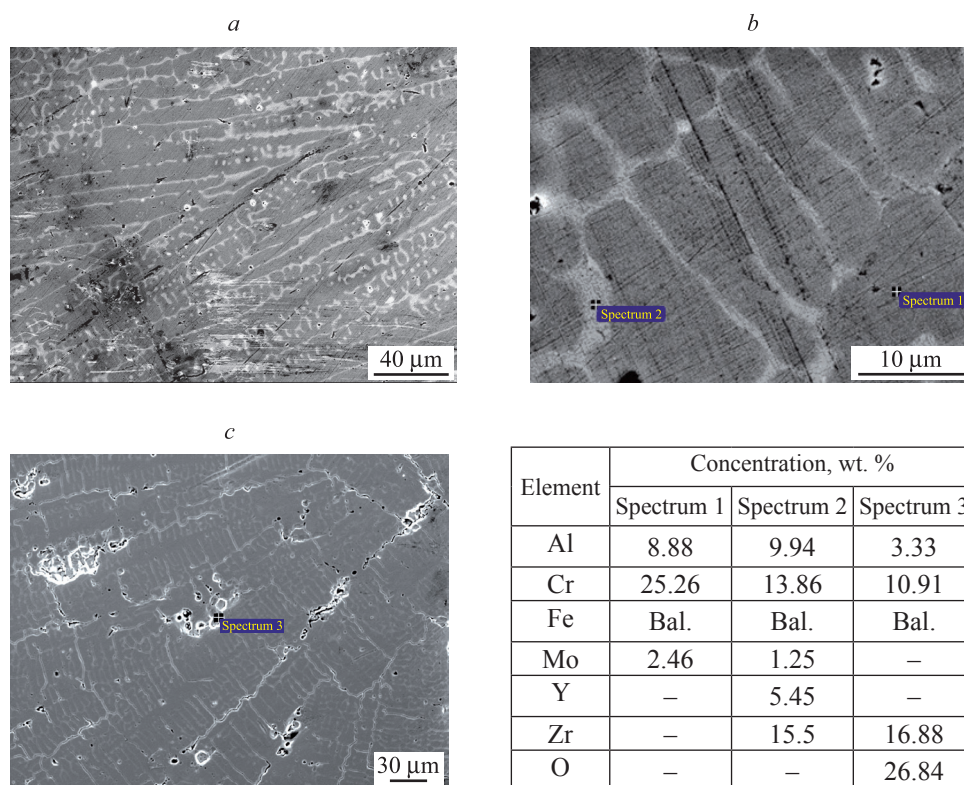


Fig. 3. SEM images of the initial surface of FeCrAl doped with molybdenum + yttrium + zirconium (*a, b*), detail of the surface after sputtering (*c*) and the EDS analyses from the points marked in the images (*b, c*)

Sputtering erosion. As noted above in our experiment's hydrogen plasmas sputtering erosion of FeCrAl alloys was obtained using the weight loss technique. The sputtering yield was then calculated from the weight loss and the total hydrogen fluence.

It should be noted that the following considerations were taken into account when the process of sputtering of FeCrAl was studied. Impurity ions with heavier mass than the main component ions might increase the sputtering rate. They could specially have large effects on the data from light-ion plasmas, i. e., hydrogen and deuterium plasma. Spectroscopic measurement showed that the impurity concentration was less than 0.1 % [6].

The phenomenon of self-sputtering might also introduce systematic error into the results. The mechanism of self-sputtering is as follows; sputtered atoms are ionized in the plasma, flow back to the sample, and hit it after acceleration in the sheath. Therefore, it is necessary to check how large a fraction of sputtered atoms flow back to the sample. The concentration of sputtered atoms in the plasma was measured as a function of the

distance from the sample by the use of the spectroscopic method, and it was concluded that the backflow was not large enough to affect the sputtering yield measurements [8].

Figure 4 shows the results for the sputtering yield of FeCrAl alloys in comparison with published data of pure iron, chromium, SS304 and W sputtering yields determined experimentally and by numerical simulation [9; 10].

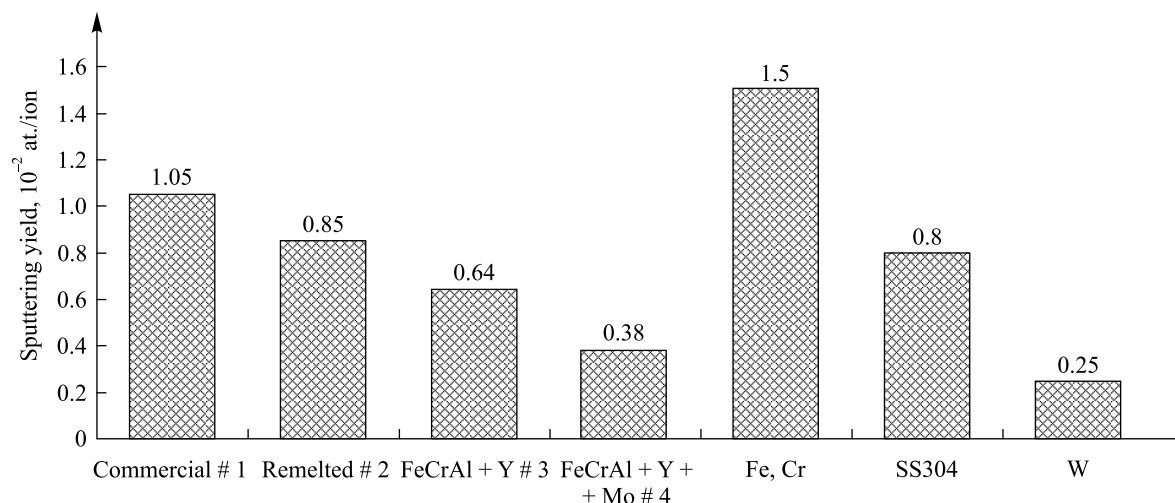


Fig. 4. Experimentally determined sputtering yields of FeCrAl alloys.
For comparison sputtering yields of Fe, Cr, SS304 and W are shown

As seen in fig. 4, values of the experimentally measured sputtering yield of the FeCrAl alloys doped with yttrium exposed to the H plasma are 30–50 % lower in comparison with commercial and remelted samples. Additional alloying with yttrium and molybdenum leads to a decrease in the sputtering coefficient to $0.38 \cdot 10^{-2}$ at./ion those almost three times as less in comparison with published data for pure iron, chromium and SS304 steel. It should be noted that the sputtering coefficients of the alloy with the addition of yttrium and molybdenum are only one and a half times higher compared to tungsten. At present, the sputtering coefficient of tungsten with hydrogen isotopes is considered to be the lowest. However, W-sputtering and an unfavorable neoclassical transport of W-impurities may lead to W accumulation which requires adequate avoidance techniques of large central radiation losses [11]. FeCrAl alloys with middle-Z admixed elements doped yttrium and molybdenum can be considered as a candidate for armor materials of plasma-facing components of tokamak devices.

Conclusion

The sputtering yields and surface modification of commercial Kanthal-type alloys H23U5T and his remelted version, and experimental alloys doped with yttrium + molybdenum + zirconium exposed to low-energy (500 eV), high-flux ($\sim 3.2 \cdot 10^{20} \text{ m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$) with fluence $4 \cdot 10^{24} \text{ m}^{-2}$ of hydrogen plasma are studied. On the FeCrAl alloys surfaces exposed to the H plasmas at room temperature the grooves along grain boundaries, macro and micro cracks and intragranular pits due to the sputtering of precipitates are developed. In the initial state of components of alloys aluminum, chromium, silicon, manganese, nickel and molybdenum were fairly uniformly distributed in the main matrix phase and form substitutional solid solutions with iron. Titanium in commercial alloy is distributed very unevenly: the matrix phase contains 2–3 times less titanium (0.06–0.13 %) than all over the sample. The main amount of yttrium, as yttrium oxides, is concentrated at grain boundaries or in precipitations. The concentration of zirconium in the matrix phase is below the detection limit 0.1 at. %. However, the Zr component with concentration close to eutectic of binary system Fe–Fe₂Zr appears at the grain boundaries. After exposure to hydrogen plasma it has been found that the aluminum oxides preferentially locate in grain but yttrium and zirconium oxides at the grain boundary. Molybdenum is practically uniformly distributed in the main matrix phase on a sputtered surface. The sputtering yields of commercial kanthal-type alloys H23U5T and his remelted version, and experimental FeCrAl alloys doped with yttrium + molybdenum + zirconium exposed to low-energy hydrogen plasma are 1.05–0.38 atoms per incident particle and not exceeding those for pure iron and chromium. For some compositions, e. g., FeCrAl alloys doped with yttrium + molybdenum, it is obtained sputtering coefficients in several times smaller than steel SS304 and only one and a half times higher compared to tungsten. Results reported in this work is thought to be of interest for an understanding of mechanisms of possible formation of erosion structures on the FeCrAl alloys surfaces under exposure to the hydrogen isotope plasmas and predicting possibilities of using these alloys as structural materials of fusion reactors.

Библиографические ссылки

1. Yamamoto Y, Pint BA, Terrani KA, Field KG, Yang Y, Snead LL. Development and property evaluation of nuclear grade wrought FeCrAl fuel cladding for light water reactors. *Journal of Nuclear Materials*. 2015;467(2):703–716. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2015.10.019.
2. Pint BA, Dryepondt SN, Unocic KA, Hoelzer DT. Development of ODS FeCrAl for compatibility in fusion and fission energy applications. *Journal of the Minerals Metals & Materials Society*. 2014;66(12):2458–2466. DOI: 10.1007/s11837-014-1200-z.
3. Sigmund P. Theory of sputtering. I. Sputtering yields of amorphous and polycrystalline targets. *Physical Review*. 1969;184(2):383–345. DOI: 10.1103/PhysRev.187.768.
4. Roth J, Sugiyama K, Alimov V, Hoeschen T, Baldwin MJ, Doerner R. EUROFER as wall material: Reduced sputtering yields due to W surface enrichment. *Journal of Nuclear Materials*. 2014;454(1–3):1–6. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2014.07.042.
5. Банных ОА, Будберг ПБ, Алисова СП. *Диаграммы состояния двойных и многокомпонентных систем на основе железа*. Москва: Металлургия; 1986. 440 с.
6. Nikitin AV, Tolstolutskaia GD, Ruzhytskyi VV, Voyevodin VN, Kopanets IE, Karpov SA, et al. Blister formation on 13Cr2MoNbVB ferritic-martensitic steel exposed to hydrogen plasma. *Journal of Nuclear Materials*. 2016;478:26–31. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2016.05.032.
7. Резниченко ВВ, Сомов АИ, Тихоновский МА. Микроструктура и прочность эвтектической композиции Fe–Fe₂Zr. *Физика металлов и металловедение*. 1973;37(3):657–659.
8. Bohdanský J. A universal relation for the sputtering yield of monatomic solids at normal ion incidence. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. 1984;2(1–3):587–591. DOI: 10.1016/0168-583X(84)90271-4.
9. Andersen HH, Bay HL. Sputtering yield measurements. In: Behrisch R, editor. *Sputtering by Particle Bombardment. I. Physical Sputtering of Single-Element Solids*. Berlin: Springer; 1981. p. 145–218.
10. Sugiyama K, Schmid K, Jacob W. Sputtering of iron, chromium and tungsten by energetic deuterium ion bombardment. *Nuclear Materials and Energy*. 2016;8:1–7. DOI: 10.1016/j.nme.2016.05.016.
11. Wiesen S, Groth M, Wischmeier M, Brezinsek S, Jarvinen A, Reimold F, et al. Plasma edge and plasma-wall interaction modelling: Lessons learned from metallic devices. *Nuclear Materials and Energy*. 2017;12:3–17. DOI: 10.1016/j.nme.2017.03.033.

References

1. Yamamoto Y, Pint BA, Terrani KA, Field KG, Yang Y, Snead LL. Development and property evaluation of nuclear grade wrought FeCrAl fuel cladding for light water reactors. *Journal of Nuclear Materials*. 2015;467(2):703–716. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2015.10.019.
2. Pint BA, Dryepondt SN, Unocic KA, Hoelzer DT. Development of ODS FeCrAl for compatibility in fusion and fission energy applications. *Journal of the Minerals Metals & Materials Society*. 2014;66(12):2458–2466. DOI: 10.1007/s11837-014-1200-z.
3. Sigmund P. Theory of sputtering. I. Sputtering yields of amorphous and polycrystalline targets. *Physical Review*. 1969;184(2):383–345. DOI: 10.1103/PhysRev.187.768.
4. Roth J, Sugiyama K, Alimov V, Hoeschen T, Baldwin MJ, Doerner R. EUROFER as wall material: Reduced sputtering yields due to W surface enrichment. *Journal of Nuclear Materials*. 2014;454(1–3):1–6. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2014.07.042.
5. Bannikh OA, Budberg PB, Alisova SP. *Diagrammy sostoyaniya dvoynykh i mnogokomponentnykh sistem na osnove zheleza* [State diagrams of binary and multicomponent systems on the base of iron]. Moscow: Metallurgiya; 1986. 440 p. Russian.
6. Nikitin AV, Tolstolutskaia GD, Ruzhytskyi VV, Voyevodin VN, Kopanets IE, Karpov SA, et al. Blister formation on 13Cr2MoNbVB ferritic-martensitic steel exposed to hydrogen plasma. *Journal of Nuclear Materials*. 2016;478:26–31. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2016.05.032.
7. Reznichenko VV, Somov AI, Tikhonovsky MA. [Microstructure and strength of the eutectic composition Fe–Fe₂Zr]. *Fizika metallov i metallovedenie*. 1973;37(3):657–659. Russian.
8. Bohdanský J. A universal relation for the sputtering yield of monatomic solids at normal ion incidence. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. 1984;2(1–3):587–591. DOI: 10.1016/0168-583X(84)90271-4.
9. Andersen HH, Bay HL. Sputtering yield measurements. In: Behrisch R, editor. *Sputtering by Particle Bombardment. I. Physical Sputtering of Single-Element Solids*. Berlin: Springer; 1981. p. 145–218.
10. Sugiyama K, Schmid K, Jacob W. Sputtering of iron, chromium and tungsten by energetic deuterium ion bombardment. *Nuclear Materials and Energy*. 2016;8:1–7. DOI: 10.1016/j.nme.2016.05.016.
11. Wiesen S, Groth M, Wischmeier M, Brezinsek S, Jarvinen A, Reimold F, et al. Plasma edge and plasma-wall interaction modelling: Lessons learned from metallic devices. *Nuclear Materials and Energy*. 2017;12:3–17. DOI: 10.1016/j.nme.2017.03.033.

Received by editorial board 20.08.2019.

ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА РЕШЕТОЧНОГО ФЛЮИДА С SRLA-ПОТЕНЦИАЛОМ НА ПЛОСКОЙ ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ

Я. Г. ГРОДА¹⁾, В. С. ГРИШИНА¹⁾, А. ЦЯХ²⁾, В. С. ВИХРЕНКО¹⁾

¹⁾Белорусский государственный технологический университет,
ул. Свердлова, 13а, 220006, г. Минск, Беларусь

²⁾Институт физической химии Академии наук Польши,
ул. Каспржака, 44/52, 01-224, г. Варшава, Польша

Исследован решеточный флюид с отталкиванием ближайших и притяжением третьих соседей на треугольной решетке. Установлена возможность существования в системе двух типов упорядоченных фаз. Для локализации точек фазовых переходов введен геометрический параметр порядка, основанный на разбиении исходной решетки на систему четырех одинаковых треугольных подрешеток. С его помощью определено критическое значение параметра взаимодействия и построена фазовая диаграмма системы. Исследована зависимость критического параметра модели от отношения интенсивностей конкурирующих взаимодействий. Данные моделирования химического потенциала сопоставлены с результатами квазихимического приближения. Показано, что квазихимическое приближение позволяет адекватно оценивать равновесные свойства модели в пределах области его применимости.

Ключевые слова: решеточный флюид; треугольная решетка; конкурирующие взаимодействия; SRLA-потенциал; алгоритм Монте-Карло; параметр порядка; критический параметр; фазовая диаграмма.

Благодарность. Публикация содержит результаты исследований, выполненных при грантовой поддержке научной программы Евросоюза «Horizon-2020» (проект AMD-734276-CONIN) и Министерства образования Республики Беларусь.

Образец цитирования:

Грода ЯГ, Гришина ВС, Цях А, Вихренко ВС. Фазовая диаграмма решеточного флюида с SRLA-потенциалом на плоской треугольной решетке. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика*. 2019;3:81–91. <https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-3-81-91>

For citation:

Groda YaG, Grishina VS, Ciach A, Vikhrenko VS. Phase diagram of the lattice fluid with SRLA-potential on the plane triangular lattice. *Journal of the Belarusian State University. Physics*. 2019;3:81–91. Russian. <https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-3-81-91>

Авторы:

Ярослав Геннадьевич Грода – кандидат физико-математических наук, доцент; доцент кафедры механики и конструирования факультета химической технологии и техники.

Вера Сергеевна Гришина – аспирантка кафедры механики и конструирования факультета химической технологии и техники. Научный руководитель – В. С. Вихренко.

Алина Цях – доктор наук, профессор; профессор лаборатории сложных систем и химической обработки информации.

Вячеслав Степанович Вихренко – доктор физико-математических наук, профессор; профессор кафедры механики и конструирования факультета химической технологии и техники.

Authors:

Yaroslav G. Groda, PhD (physics and mathematics), docent; associate professor at the department of mechanics and engineering, faculty of chemical technology and engineering.

yar.groda@gmail.com

Vera S. Grishina, postgraduate student at the department of mechanics and engineering, faculty of chemical technology and engineering.

grishina@belstu.by

Alina Ciach, doctor of science, full professor; professor at the laboratory of complex systems and chemical information processing.

aciach@ichf.edu.pl

Vyacheslav S. Vikhrenko, doctor of science (physics and mathematics), full professor; professor at the department of mechanics and engineering, faculty of chemical technology and engineering.

vvikhre@gmail.com

PHASE DIAGRAM OF THE LATTICE FLUID WITH SRLA-POTENTIAL ON THE PLANE TRIANGULAR LATTICE

Ya. G. GRODA^a, V. S. GRISHINA^a, A. CIACH^b, V. S. VIKHRENKO^a

^aBelarusian State Technological University, 13a Syjardlova Street, Minsk 220006, Belarus

^bInstitute of Physical Chemistry PAS, 44/52 Kasprzaka Street, Warsaw 01-224, Poland

Corresponding author: Ya. G. Groda (yar.groda@gmail.com)

The lattice system with competing interactions (repulsive between nearest neighbors and attractive between next-next-nearest neighbors) on a triangular lattice is studied. The possibility of existence of two types of ordered phases in the system is established. The initial lattice was splitted into a system of four identical triangular sublattices to describe the ordered phases. The geometric order parameter of the system is introduced. Using the order parameter, the critical value of the interaction parameter is determined and the phase diagram of the system is constructed. The dependence of the critical parameter of the model on the ratio of intensity of competing interactions is investigated. The simulation data for the chemical potential are compared with the results of the quasichemical approximation. It is shown that the quasichemical approximation results in an adequate assessment of the equilibrium properties of the model in the range of its applicability.

Keywords: lattice fluid; triangular lattice; competing interaction; SRLA-potential; Monte Carlo simulation; order parameter; critical parameter; phase diagram.

Acknowledgements. The project has received funding from European Union's «Horizon-2020» research and innovation program under the Marie Skłodowska-Curie grant agreement No. 734276 and the Ministry of Education of Belarus.

Введение

В последнее время наблюдается возросший интерес к изучению систем деформируемых коллоидных частиц, химические и физические свойства которых можно настраивать путем изменения условий окружающей среды [1–4]. Ярким примером таких систем являются микрогели, состоящие из частиц, соединенных полимерной сетью, которая реагирует на изменение внешних условий.

Наряду с чистыми микрогелями большое внимание уделяется гибридным системам HCSS-частиц (hard core soft shell), состоящим из недеформируемого неорганического ядра, заключенного в мягкую полимерную оболочку. Эти частицы способны самостоятельно собираться в упорядоченные структуры на границах раздела газ – жидкость и жидкость – жидкость [5–8]. Такие высокоупорядоченные массивы частиц с твердыми ядрами могут найти применение, например, для стабилизации эмульсий [1; 2; 9], при создании биосенсорных матриц и биоинтерфейсов, где требуется изготовление макроскопических по размерам регулярных структур с нанометровой точностью расположения элементов в них [10; 11].

В [12] предложена одномерная решеточная модель, позволяющая описать процесс самосборки HCSS-частиц на основе решеточного флюида с отталкиванием ближайших и притяжением третьих соседей (SRLA-модель, short range repulsion long range attraction), который в определенной мере является антиподом широко известных систем с SALR-взаимодействием (short range attraction long range repulsion) [13–17]. Было показано, что полученные результаты согласуются с экспериментальными данными.

Настоящая статья посвящена исследованию методами компьютерного моделирования равновесных свойств SRLA-модели решеточного флюида на треугольной решетке.

Модель и алгоритм моделирования

Изучаемая модель представляет собой решеточный флюид, состоящий из n частиц на треугольной решетке, содержащей N решеточных узлов. Частицы, занимающие ближайшие решеточные узлы и узлы, являющиеся соседями третьего порядка, взаимодействуют друг с другом. Энергии взаимодействий равны J_1 и J_3 соответственно. При этом будем полагать $J_1 > 0$, $J_3 < 0$, что соответствует отталкиванию ближайших соседей и притяжению третьих.

Для удобства дальнейшего описания системы в рассмотрение могут быть введены параметр J , определяющий интенсивность взаимодействий в системе, и параметр J^* , равный отношению интенсивностей отталкивания и притяжения:

$$J_1 = J^*J, \quad J_3 = -J, \quad J^* = \left| \frac{J_1}{J_3} \right|.$$

Моделирование равновесных характеристик исследуемой решеточной системы может быть выполнено в большом каноническом ансамбле в рамках стандартного алгоритма Метрополиса [18], применение которого к системам с конкурирующими взаимодействиями подробно описано в [19–21]. По этому алгоритму в системе фиксируется значение химического потенциала μ , а концентрация частиц c и их распределение по решетке определяются непосредственно в ходе моделирования.

Система содержала 10 тыс. решеточных узлов в сочетании с периодическими граничными условиями. Полная длина процедуры моделирования состояла из 70 тыс. шагов алгоритма Монте-Карло (МК) [19–21], из которых первые 20 тыс. шагов отводились на процесс перехода в равновесное состояние, так называемую эквилибризацию системы. Необходимость указанной эквилибризации вызвана тем, что исходное распределение частиц по решетке выбиралось произвольным и могло существенно отличаться от равновесного.

Также следует отметить, что, в отличие от решеточных флюидов на квадратной [19; 20] и простой кубической [21] решетках, при определении координат узлов треугольной решетки более предпочтительным является использование неортогонального базиса, угол между координатными осями которого равен $\frac{\pi}{3}$, поскольку такой базис наилучшим образом отражает симметрию моделируемой системы.

Основные энергетические состояния и параметр порядка модели

Моделирование основных энергетических состояний описанной выше системы показало, что в зависимости от заданного значения химического потенциала она может находиться в одном из состояний, представленных на рис. 1.

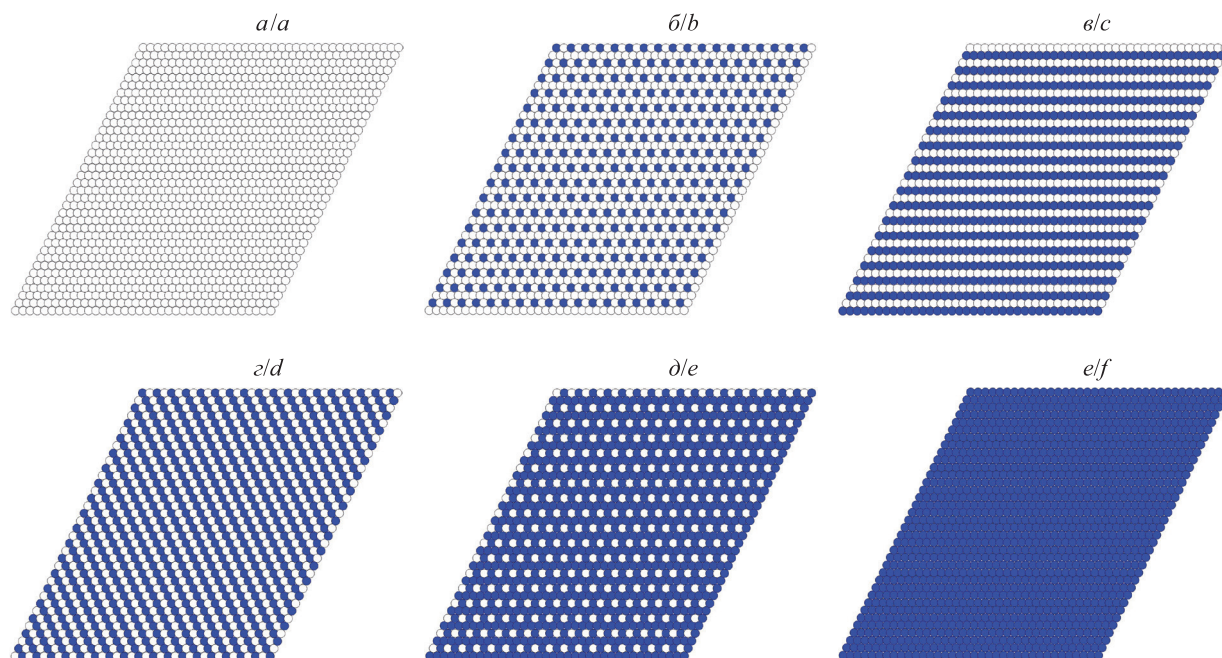


Рис. 1. Основные энергетические состояния модели при различных значениях химического потенциала μ :
 $c = 0$ (вакуум) (a); $c = 0,25$ (б); $c = 0,50$ (в, г); $c = 0,75$ (д); $c = 1,00$ (е)

Fig. 1. Ground state of the model at different values of the chemical potential μ :
 $c = 0$ (vacuum) (a); $c = 0.25$ (b); $c = 0.50$ (c, d); $c = 0.75$ (e); $c = 1.00$ (f)

Необходимо отметить, что при компьютерном моделировании основного энергетического состояния фактически рассматриваются экстремально низкие температуры, тогда как для ускорения перехода системы в равновесное состояние и, как следствие, экономии времени моделирования целесообразным является использование алгоритма отжига [22; 23]. В рамках данного подхода моделирование начинается при достаточно высокой температуре, и на каждом шаге эта температура понижается на некоторую малую величину. В частности, представленные на рис. 1 результаты получены для случая, когда моделирование основного энергетического состояния начиналось при безразмерном параметре взаимодействия $\beta J = 1,5$. Здесь

$$\beta = (k_B T)^{-1},$$

где k_B – постоянная Больцмана; T – температура. Полная длина процедуры моделирования составляла $5 \cdot 10^6$ шагов алгоритма МК, при этом на каждом 100-м шаге параметр взаимодействия увеличивался на 0,01997, что эквивалентно понижению температуры. В конечном итоге это приводило к параметру взаимодействия $\beta J = 1000$.

Анализ полученных результатов показал, что нулевая концентрация ($c = 0$, вакуум) (см. рис. 1, а) соответствует значениям химического потенциала $\frac{\mu}{J} < -3$. В свою очередь, упорядоченная фаза существует: для $c = 0,25$ (см. рис. 1, б) при $-3 < \frac{\mu}{J} < -3 + 2J^*$, для $c = 0,50$ (см. рис. 1, в, г) при $-3 + 2J^* < \frac{\mu}{J} < -3 + 4J^*$, для $c = 0,75$ (см. рис. 1, д) при $-3 + 4J^* < \frac{\mu}{J} < -3 + 6J^*$. И наконец, решетка оказывается полностью заполненной частицами при $\frac{\mu}{J} > -3 + 6J^*$. Графически области существования в системе различных упорядоченных фаз представлены на рис. 2.

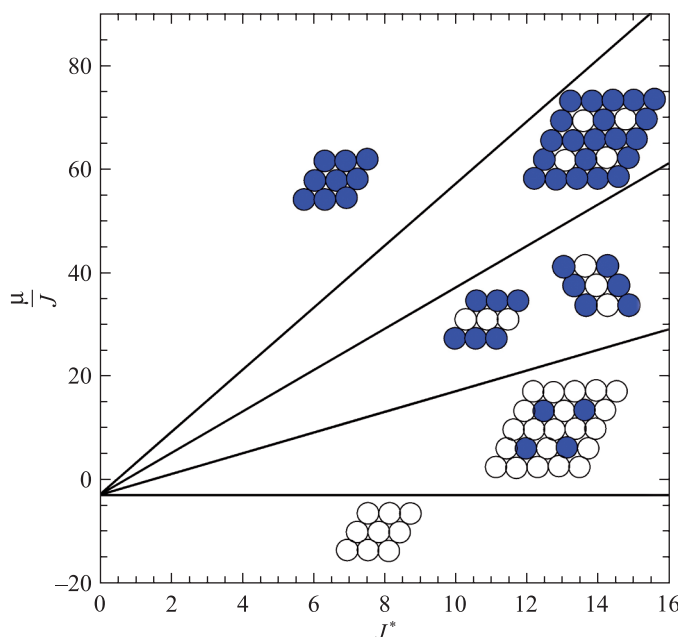


Рис. 2. Области существования упорядоченных фаз в основном энергетическом состоянии модели

Fig. 2. The areas of the existence of ordered phases in the ground state of the model

В отличие от аналогичной системы с SALR-потенциалом, рассмотренной в [16; 17], в исследуемой модели не происходит образования кластеров частиц, а возникает глобальная упорядоченная структура. Такое поведение системы может быть объяснено тем, что отталкивание между ближайшими соседями препятствует процессу кластерообразования.

Для описания всех видов упорядоченных фаз можно использовать разбиение исходной решетки на систему четырех подрешеток. На рис. 3 каждая из подрешеток также является треугольной с параметром $2a$, где a – параметр исходной решетки.

Упорядоченные состояния, представленные на рис. 1, б, д, соответствуют тому, что из четырех подрешеток заполненной или пустой оказывается только одна, и система имеет ось симметрии шестого порядка. При $c = 0,50$ (см. рис. 1, в, г) две подрешетки являются заполненными, две – пустыми, и система распадается на полосы (трех возможных ориентаций) с осью симметрии второго порядка.

Отмеченная симметрия в заполнении подрешеток позволяет по аналогии с [19–21] ввести геометрический параметр порядка δc в виде полуразности между максимальной и минимальной подрешеточными концентрациями, т. е.

$$\delta c = \frac{c_{\max} - c_{\min}}{2}, \quad (1)$$

где $c_{\max}$ и $c_{\min}$ – концентрации частиц на наиболее и наименее заполненных подрешетках соответственно.

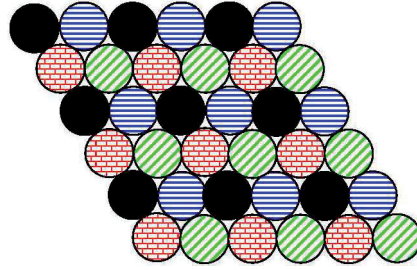


Рис. 3. Подрешеточная структура треугольной решетки с отталкиванием ближайших и притяжением третьих соседей. Одинаково окрашенные решеточные узлы принадлежат одной и той же подрешетке

Fig. 3. The sublattice structure of the triangular lattice with repulsion interaction between the nearest neighbors and attraction interaction between the next-next-nearest neighbors. The lattice sites colored in the same way belong to the same sublattices

Очевидно, что введенный параметр порядка обращается в нуль в неупорядоченном состоянии, т. е. при отсутствии подрешеточной структуры в системе. А в полностью упорядоченных состояниях (см. рис. 1, б – д) он оказывается равным 0,5.

На рис. 4 представлены зависимости удвоенного параметра порядка от химического потенциала, полученные в ходе МК-моделирования. Анализ этих зависимостей (а именно достаточно высокие значения параметра порядка) позволяет утверждать, что оба выбранных параметра взаимодействия βJ (1,0 и 0,8421) соответствуют температурам, существенно меньшим критической температуры, разделяющей области существования в системе упорядоченных и неупорядоченных состояний. При этом, как и предполагалось, максимальная упорядоченность достигается вблизи концентраций, равных 0,25; 0,50 и 0,75.

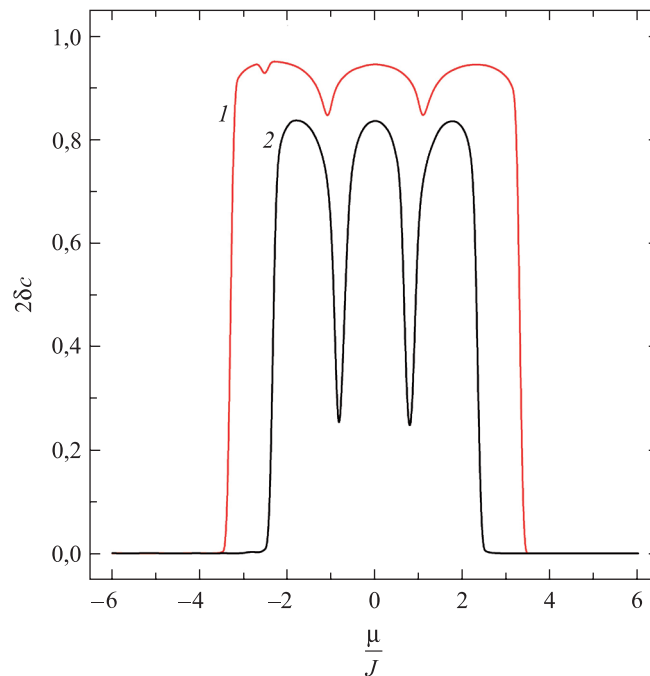


Рис. 4. Зависимость удвоенного параметра порядка от химического потенциала при $J^* = 1$ и $\beta J = 1,0$ (кривая 1), $\beta J = 0,8421$ (кривая 2)

Fig. 4. The doubled order parameter versus chemical potential at $J^* = 1$ and $\beta J = 1.0$ (curve 1), $\beta J = 0.8421$ (curve 2)

Критический параметр системы и ее фазовая диаграмма

По аналогии с исследованными ранее решеточными флюидами с притяжением ближайших и отталкиванием третьих соседей на квадратной [14; 15] и простой кубической решетках [16] может быть рассмотрена зависимость удвоенного параметра порядка от параметра взаимодействия при химическом потенциале $\mu = 0$, соответствующем средней концентрации $c = 0,5$ (рис. 5).

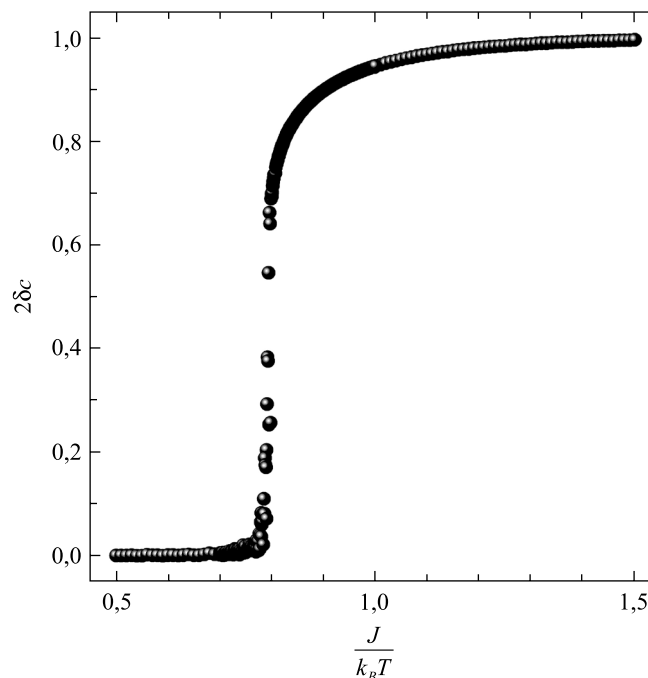


Рис. 5. Зависимость параметра порядка от параметра взаимодействия при $\mu = 0$ и $J^* = 1$

Fig. 5. The order parameter versus the interaction parameter at $\mu = 0$ and $J^* = 1$

Как и в случае систем с отталкиванием ближайших соседей [17; 18] и ранее рассмотренных систем с SLRA-взаимодействиями [14–16], имеет место резкое возрастание параметра порядка, соответствующее фазовому переходу порядок – беспорядок. Также данная зависимость позволяет оценить критическое значение параметра взаимодействия (критический параметр) исследуемой модели, которое оказывается равным $\frac{J}{k_B T_c} = 0,8$, где T_c – критическая температура системы.

Отдельно следует отметить, что, согласно проведенному моделированию, упорядоченные структуры вблизи концентраций 0,25 и 0,75 (см. рис. 1, б и д соответственно) также исчезают при указанном выше значении параметра взаимодействия. Данная величина критического параметра означает, что приведенные на рис. 4 результаты для удвоенного параметра порядка соответствуют температурам $0,8T_c$ (кривая 1) и $0,95T_c$ (кривая 2).

Из рис. 6 видно, что с увеличением притяжения третьих соседей критическая температура модели также увеличивается. Это означает, что существование упорядоченных фаз, представленных на рис. 1, сдвигается в область более высоких температур. Зависимость критического параметра взаимодействия от параметра J^* может быть приблизительно описана экспоненциальной функцией:

$$\frac{J}{k_B T_c} = 0,52 + 0,46 \exp\left(-\frac{J^*}{1,9}\right). \quad (2)$$

Из рис. 5 следует, что введенный соотношением (1) геометрический параметр порядка является достаточно надежным маркером структурных фазовых переходов порядок – беспорядок.

На рис. 7 представлена концентрационная зависимость химического потенциала рассматриваемого решеточного флюида при $J^* = 1$ и проводится сопоставление данных моделирования с результатами квазихимического приближения (КХП) [24; 25]. Необходимо отметить, что для получения кривых 3–6 использовался вариант КХП, в котором не учитывалась подрешеточная структура исследуемой системы. Очевидно, что такой подход применим лишь при температурах выше критической ($\frac{T}{T_c} = 1,05$, $\frac{T}{T_c} = 1,20$ и $\frac{T}{T_c} = 2,00$ – кривые 4, 5 и 6 соответственно). Его использование для изотермы химического потенциала при $\frac{T}{T_c} = 0,95$ (кривая 3) является не вполне корректным.

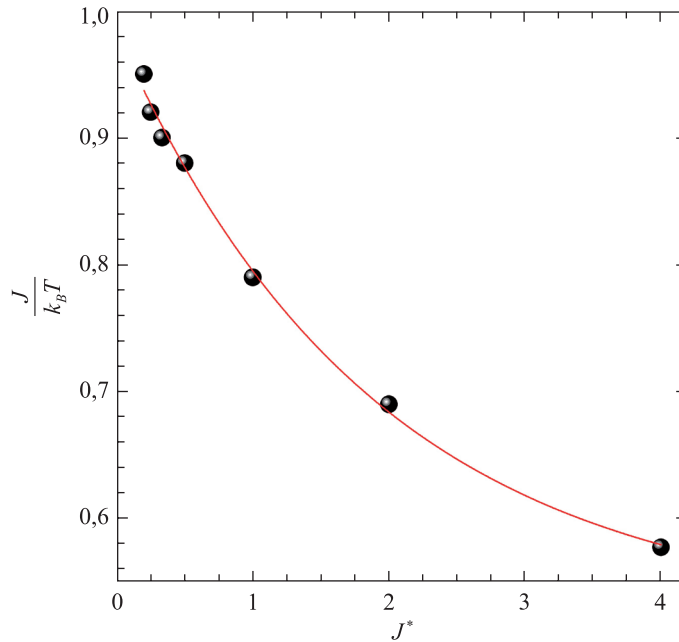


Рис. 6. Зависимость критического параметра взаимодействия $\frac{J}{k_B T_c}$ от отношения интенсивностей взаимодействия J^* ближайших и третьих соседей. Точки – результаты МК-моделирования, кривая соответствует уравнению (2)

Fig. 6. The critical interaction parameter $\frac{J}{k_B T_c}$ versus the ratio of the interaction intensities of the nearest and next-next-nearest neighbors J^* . The full circles represent the MC simulation data, the solid line corresponded expression (2)

Полученные изотермы зависимостей концентрации от химического потенциала при температурах ниже критической качественно соответствуют экспериментальным результатам работы [8]. Увеличение химического потенциала согласуется с повышением поверхностного давления, прикладываемого к пленке, состоящей из HCSS-частиц на границе раздела двух сред. Области значительного изменения концентрации частиц (а следовательно, площади в расчете на частицу) при малых вариациях химического потенциала (давления) (т. е. при большой сжимаемости системы) сменяются областями резких перепадов химического потенциала при малых изменениях концентрации.

Практически горизонтальные участки на изотермах химического потенциала при температурах ниже критической, которые четко просматриваются на кривых 1 и 2 на рис. 7, можно интерпретировать как отражающие наличие двухфазных состояний, когда различные части системы находятся в разных упорядоченных или неупорядоченном состояниях. Крайние левые точки указывают на неупорядоченное «газовое» состояние системы при низких концентрациях. Три промежуточные группы точек соответствуют концентрациям 0,25; 0,5 и 0,75. Конденсированное состояние системы ($c \approx 1$) отображается крайней правой группой точек. С одной стороны, оно может рассматриваться как упорядоченное состояние с гексагональным распределением частиц при наличии дефектов – вакансий, а с другой – как неупорядоченное распределение вакантных узлов при их низкой концентрации, что обуславливает симметрию фазовой диаграммы относительно концентрации $c = 0,5$.

Сопоставление результатов моделирования химического потенциала и подрешеточных концентраций показало, что окончание первого плоского участка ($c \approx 0,25$) соответствует преимущественному размещению частиц в системе на одной подрешетке из четырех. Параметр порядка, введенный соотношением (1), в этом случае практически равен 0,5. В результате второго фазового перехода ($0,25 < c < 0,5$) в системе заполненными являются уже две подрешетки, что соответствует упорядоченным состояниям, представленным на рис. 1, в, г. Аналогично может быть рассмотрено поведение системы и при концентрациях, больших 0,5. В этом случае в приведенных выше рассуждениях достаточно заменить преимущественно заполненные решетки на преимущественно вакантные.

Трассирующие точки на двух нижних кривых на рис. 7 (горизонтальные участки) соответствуют двухфазным состояниям системы, которые не воспроизводятся при моделировании. При увеличении химического потенциала концентрация скачком изменяется на более высокую. При понижении температуры

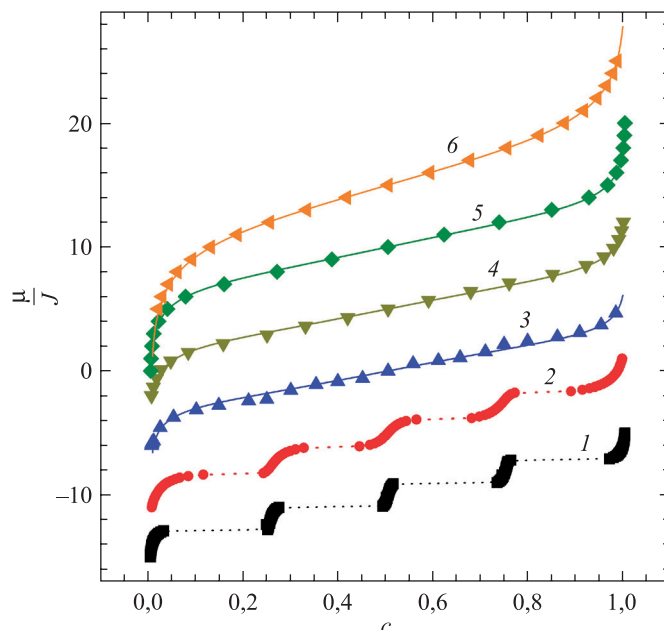


Рис. 7. Зависимость от концентрации химического потенциала системы (в единицах энергии взаимодействия ближайших соседей J) при $J^* = 1$ и $\frac{T}{T_c}$, равном 0,60 (кривая 1); 0,80 (2); 0,95 (3); 1,05 (4); 1,20 (5) и 2,00 (6).

Сплошными линиями представлены результаты КХП, точками и пунктирной линией – данные МК-моделирования.

Для большей наглядности каждая группа кривых смещена на 10 единиц вниз относительно предыдущей. Положение несмещенной кривой 3 характеризуется значением отношения $\frac{\mu}{J} = 0$ при $c = 0,50$, которое не зависит от температуры.

Таким образом, группы кривых 1 и 2 смещены вниз от своего исходного положения, а группы кривых 4, 5 и 6 – вверх

Fig. 7. The chemical potential (in units of the parameter J) versus concentration

at $J^* = 1$ and $\frac{T}{T_c}$ = 0.60 (curves 1); 0.80 (2); 0.95 (3); 1.05 (4); 1.20 (5) and 2.00 (6).

The solid lines represent the QChA results, the full circles and dotted lines are the MC simulation data. Each group of curves is shifted down by 10 units with respect to the previous one for better visibility.

The unshifted curve 3 is characterized by $\frac{\mu}{J} = 0$ at $c = 0.5$, and this point is the same for all the temperatures.

Thus, the groups of curves 1 and 2 are shifted down from their true position, while 4, 5 and 6 are shifted up

диапазон концентраций существования упорядоченных состояний сужается, и уже при $0,5T_c$ становится практически равным нулю, что соответствует основным состояниям системы.

Совместное рассмотрение изотерм химического потенциала и параметра порядка позволяет получить фазовую диаграмму модели (рис. 8). Определенная асимметрия диаграммы обусловлена моделированием хотя и с периодическими граничными условиями, но ограниченной системы и несколько худшей статистикой при больших значениях концентрации частиц. В особенности это сказывается при температурах, близких к критической, когда длина межчастичных корреляций становится большой.

Три из четырех равновесных упорядоченных состояний системы имеют, как и в экспериментальных работах, гексагональную симметрию (при решеточных концентрациях частиц вблизи 0,25; 0,75 и 1,0, что соответствует четырехкратному уменьшению площади, приходящейся на одну частицу (см. рис. 1), тогда как пока не обнаруженные экспериментально полосчатые состояния при концентрации около 0,5 занимают узкую область на фазовой диаграмме системы (см. рис. 8).

Необходимо отметить, что в рамках рассматриваемого алгоритма моделирования определение точек фазовых переходов при температурах, близких к критической, оказывается весьма затруднительным. Эти трудности могут быть частично преодолены путем использования более сложных и требующих значительных вычислительных ресурсов так называемых кластерных алгоритмов, в которых при моделировании изменяется состояние не отдельного решеточного узла, а их некоторой группы [26].

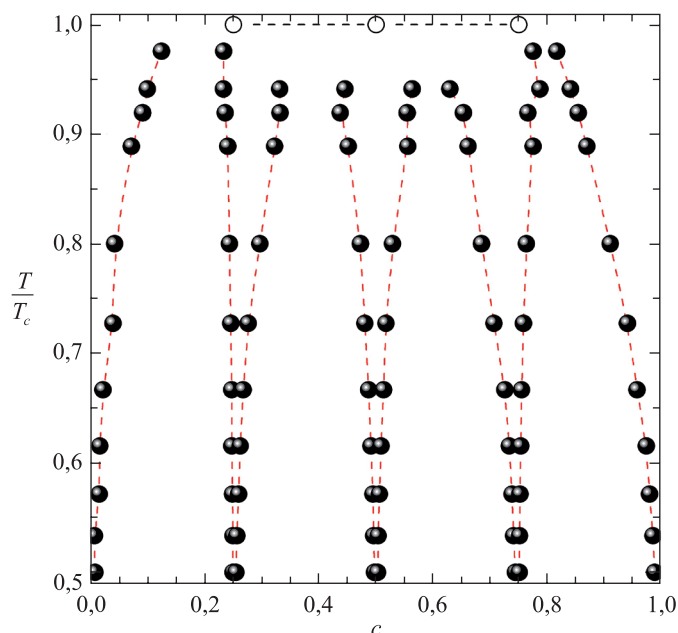


Рис. 8. Фазовая диаграмма решеточного флюида с отталкиванием ближайших и притяжением третьих соседей на треугольной решетке при $J^* = 1$, $\frac{k_B T_c}{J} = 1,25$

Fig. 8. The phase diagram of the lattice fluid on the triangular lattice with repulsion interaction between the nearest neighbors and attraction interaction between the next-next-nearest neighbors at $J^* = 1$, $\frac{k_B T_c}{J} = 1.25$

Заключение

Выполненное моделирование показывает, что использованная решеточная модель системы HCSS-частиц с конкурирующим SRLA-взаимодействием на плотноупакованной треугольной решетке качественно воспроизводит экспериментальные результаты и в перспективе может применяться для количественных исследований путем соответствующей вариации ее параметров. В отличие от систем с SALR-взаимодействием в рассматриваемой модели не наблюдается кластерообразования вследствие межчастичного отталкивания на малых расстояниях, но образуется гексагональное упорядочение в широкой области варьирования термодинамических параметров (концентрации частиц и температуры) с существенным изменением площади, приходящейся на одну частицу.

Наличие макроскопического гексагонального упорядочения хорошо отражается введенным параметром порядка, определяемым через разность концентраций на различных подрешетках. С его помощью может быть построена фазовая диаграмма модели и найден критический параметр системы, выявляющий области существования в ней упорядоченных фаз.

КХП адекватно отражает термодинамические характеристики системы в области неупорядоченных состояний. Для описания упорядоченных состояний необходим учет подрешеточной структуры модели. При этом следует отметить, что построение аналитических приближений для плоской треугольной решетки оказывается существенно более сложным по сравнению со слабоупакованными квадратной и простой кубической решетками. Это, в частности, обусловлено тем, что в случае треугольной решетки возможны два типа упорядоченных фаз (с осями симметрии второго и шестого порядков), которые существенно различаются по своим топологическим свойствам. При известном характере заполнения подрешеток не составляет труда выразить концентрации частиц на каждой из них через среднюю концентрацию частиц в системе и ее параметр порядка. Однако соотношения, устанавливающие такую связь, будут разными для каждого типа глобальной упорядоченности системы, что, по всей видимости, не позволит записать в рамках КХП выражение для свободной энергии решеточного флюида, пригодное для всей области изменения термодинамических параметров. Тем не менее при каждом фиксированном типе упорядоченности свободная энергия системы может быть представлена как функция средней концентрации частиц в системе и ее параметра порядка. В свою очередь, последний может быть найден из условия экстремальности свободной энергии системы.

Библиографические ссылки

1. Rey M, Fernandez-Rodriguez MA, Steinacher M, Scheidegger L, Geisel K, Richtering W, et al. Isostructural solid – solid phase transition in monolayers of soft core – shell particles at fluid interfaces: structure and mechanics. *Soft Matter*. 2016;12(15):3545–3557. DOI: 10.1039/C5SM03062E.
2. Vasudevan SA, Rauh A, Kroger M, Karg M, Isa L. Dynamics and wetting behavior of core – shell soft particles at a fluid – fluid interface. *Langmuir*. 2018;34(50):15370–15382. DOI: 10.1021/acs.langmuir.8b03048.
3. Yunker PJ, Chen K, Gratale MD, Lohr MA, Still T, Yodh AG. Physics in ordered and disordered colloidal matter composed of poly(*N*-isopropylacrylamide) microgel particles. *Reports on Progress in Physics*. 2014;77(5):056601. DOI: 10.1088/0034-4885/77/5/056601.
4. Plamper FA, Richtering W. Functional microgels and microgel systems. *Accounts of Chemical Research*. 2017;50:131–140. DOI: 10.1021/acs.accounts.6b00544.
5. Vogel N, Fernandez-Lopez C, Perez-Juste J, Liz-Marzan LM, Landfester K, Weiss CK. Ordered arrays of gold nanostructures from interfacially assembled Au@PNIPAM hybrid nanoparticles. *Langmuir*. 2012;28(24):8985–8993. DOI: 10.1021/la2051299.
6. Nazli KO, Pester C, Konradi A, Boker A, van Rijn P. Cross-linking density and temperature effects on the self-assembly of SiO₂-PNIPAAm core-shell particles at interfaces. *Chemistry*. 2013;19(18):5586–5594. DOI: 10.1002/chem.201203900.
7. Geisel K, Rudov AA, Potemkin II, Richtering W. Hollow and core-shell microgels at oil-water interfaces: spreading of soft particles reduces the compressibility of the monolayer. *Langmuir*. 2015;31(48):13145–13154. DOI: 10.1021/acs.langmuir.5b03530.
8. Rauh A, Rey M, Barbera L, Zanini M, Karg M, Isa L. Compression of hard core – soft shell nanoparticles at liquid – liquid interfaces: influence of the shell thickness. *Soft Matter*. 2017;13(1):158–169. DOI: 10.1039/C6SM01020B.
9. Pinaud F, Geisel K, Masse P, Catargi B, Isa L, Richtering W, et al. Adsorption of microgels at an oil – water interface: correlation between packing and 2D elasticity. *Soft Matter*. 2014;10(36):6963–6974. DOI: 10.1039/c4sm00562g.
10. Isa L, Kumar K, Muller M, Grolig J, Textor M, Reimhult E. Particle lithography from colloidal self-assembly at liquid – liquid interfaces. *Nano*. 2010;4(10):5665–5670. DOI: 10.1021/nn101260f.
11. Geisel K, Richtering W, Isa L. Highly ordered 2D microgel arrays: compression versus self-assembly. *Soft Matter*. 2014;10(40):7968–7976. DOI: 10.1039/c4sm01166j.
12. Ciach A, Pekalski J. Exactly solvable model for self-assembly of hard core – soft shell particles at interfaces. *Soft Matter*. 2017;13(14):2603–2608. DOI: 10.1039/c7sm00191f.
13. Sear RP, Gelbart WM. Microphase separation versus the vapor-liquid transition in systems of spherical particles. *Journal of Chemical Physics*. 1999;110:4582–4588. DOI: 10.1063/1.478338.
14. Imperio A, Reatto L. A bidimensional fluid system with competing interactions: spontaneous and induced pattern formation. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2004;16(38):S3769–S3789. DOI: 10.1088/0953-8984/16/38/001.
15. Ciach A, Gozdz WT. Mesoscopic description of network-forming clusters of weakly charged colloids. *Condensed Matter Physics*. 2010;13(2):23603. DOI: 10.5488/CMP.13.23603.
16. Pekalski J, Ciach A, Almaraz NG. Periodic ordering of clusters and stripes in a two-dimensional lattice model. I. Ground state, mean-field phase diagram and structure of the disordered phases. *Journal of Chemical Physics*. 2014;140(11):114701. DOI: 10.1063/1.4868001.
17. Almaraz NG, Pekalski J, Ciach A. Periodic ordering of clusters and stripes in a two-dimensional lattice model. II. Results of Monte Carlo simulation. *Journal of Chemical Physics*. 2014;140(16):164708. DOI: 10.1063/1.4871901.
18. Uebing C, Gomer R. A Monte Carlo study of surface diffusion coefficients in the presence of adsorbate-adsorbate interactions. *Journal of Chemical Physics*. 1991;95:7626–7652. DOI: 10.1063/1.461817.
19. Грода ЯГ, Бильданов ЭЭ, Гапанюк ДВ. Критический параметр решеточного флюида с SALR-потенциалом на плоской квадратной решетке. *Труды БГТУ. Серия 3. Физико-математические науки и информатика* [Интернет]. 2018 [процитировано 27 января 2019 г.];1(206):24–28. Доступно по: elib.belstu.by/handle/123456789/25356.
20. Groda YaG, Vikhrenko VS, di Caprio D. Equilibrium properties of the lattice system with SALR interaction potential on a square lattice: quasi-chemical approximation versus Monte Carlo simulation. *Condensed Matter Physics*. 2018;21(4):43002. DOI: 10.5488/CMP.21.43002.
21. Грода ЯГ, Вихренко ВС, ди Каприо Д. Решеточный флюид с притяжением ближайших и отталкиванием третьих соседей на простой кубической решетке. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика*. 2019;2:84–95. DOI: 10.33581/2520-2243-2019-2-84-95.
22. Kirkpatrick S, Gellat CD, Vicci MP. Optimization by simulated annealing. *Science* [Internet; cited 2019 June 11];1983;220: 671–688. Available from: <https://www.jstor.org/stable/1690046>.
23. Zhou E, Chen X. Sequential Monte Carlo simulated annealing. *Journal of Global Optimization*. 2013;55(1):101–124. DOI: 10.1007/s10898-011-9838-3.
24. Groda YaG, Argyrakakis P, Bokun GS, Vikhrenko VS. SCDA for 3D lattice gases with repulsive interaction. *The European Physical Journal B*. 2003;32(4):527–535. DOI: 10.1140/epjb/e2003-00118-3.
25. Вихренко ВС, Грода ЯГ, Бокун ГС. Равновесные и диффузионные характеристики интеркаляционных систем на основе решеточных моделей [Интернет]. Минск: БГТУ; 2008 [процитировано 14 сентября 2018 г.]. 326 с. Доступно по: elib.belstu.by/handle/123456789/2716.
26. Luijten E. Introduction to cluster Monte Carlo algorithms. In: Ferrario M, Ciccotti G, Binder K, editors. *Computer Simulations in Condensed Matter Systems: From Materials to Chemical Biology*. Berlin: Springer; 2006. p. 13–38. (Lecture Notes in Physics; volume 703). DOI: 10.1007/3-540-35273-2_1.

References

1. Rey M, Fernandez-Rodriguez MA, Steinacher M, Scheidegger L, Geisel K, Richtering W, et al. Isostructural solid – solid phase transition in monolayers of soft core – shell particles at fluid interfaces: structure and mechanics. *Soft Matter*. 2016;12(15):3545–3557. DOI: 10.1039/C5SM03062E.
2. Vasudevan SA, Rauh A, Kroger M, Karg M, Isa L. Dynamics and wetting behavior of core – shell soft particles at a fluid – fluid interface. *Langmuir*. 2018;34(50):15370–15382. DOI: 10.1021/acs.langmuir.8b03048.

3. Yunker PJ, Chen K, Gratale MD, Lohr MA, Still T, Yodh AG. Physics in ordered and disordered colloidal matter composed of poly(*N*-isopropylacrylamide) microgel particles. *Reports on Progress in Physics*. 2014;77(5):056601. DOI: 10.1088/0034-4885/77/5/056601.
4. Plamper FA, Richtering W. Functional microgels and microgel systems. *Accounts of Chemical Research*. 2017;50:131–140. DOI: 10.1021/acs.accounts.6b00544.
5. Vogel N, Fernandez-Lopez C, Perez-Juste J, Liz-Marzan LM, Landfester K, Weiss CK. Ordered arrays of gold nanostructures from interfacially assembled Au@PNIPAM hybrid nanoparticles. *Langmuir*. 2012;28(24):8985–8993. DOI: 10.1021/la2051299.
6. Nazli KO, Pester C, Konradi A, Boker A, van Rijn P. Cross-linking density and temperature effects on the self-assembly of SiO₂-PNIPAAm core-shell particles at interfaces. *Chemistry*. 2013;19(18):5586–5594. DOI: 10.1002/chem.201203900.
7. Geisel K, Rudov AA, Potemkin II, Richtering W. Hollow and core-shell microgels at oil-water interfaces: spreading of soft particles reduces the compressibility of the monolayer. *Langmuir*. 2015;31(48):13145–13154. DOI: 10.1021/acs.langmuir.5b03530.
8. Rauh A, Rey M, Barbera L, Zanini M, Karg M, Isa L. Compression of hard core – soft shell nanoparticles at liquid – liquid interfaces: influence of the shell thickness. *Soft Matter*. 2017;13(1):158–169. DOI: 10.1039/C6SM01020B.
9. Pinaud F, Geisel K, Masse P, Catargi B, Isa L, Richtering W, et al. Adsorption of microgels at an oil – water interface: correlation between packing and 2D elasticity. *Soft Matter*. 2014;10(36):6963–6974. DOI: 10.1039/c4sm00562g.
10. Isa L, Kumar K, Muller M, Grolig J, Textor M, Reimhult E. Particle lithography from colloidal self-assembly at liquid – liquid interfaces. *Nano*. 2010;4(10):5665–5670. DOI: 10.1021/nn101260f.
11. Geisel K, Richtering W, Isa L. Highly ordered 2D microgel arrays: compression versus self-assembly. *Soft Matter*. 2014;10(40):7968–7976. DOI: 10.1039/c4sm01166j.
12. Ciach A, Pekalski J. Exactly solvable model for self-assembly of hard core – soft shell particles at interfaces. *Soft Matter*. 2017;13(14):2603–2608. DOI: 10.1039/c7sm00191f.
13. Sear RP, Gelbart WM. Microphase separation versus the vapor-liquid transition in systems of spherical particles. *Journal of Chemical Physics*. 1999;110:4582–4588. DOI: 10.1063/1.478338.
14. Imperio A, Reatto L. A bidimensional fluid system with competing interactions: spontaneous and induced pattern formation. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2004;16(38):S3769–S3789. DOI: 10.1088/0953-8984/16/38/001.
15. Ciach A, Gozdz WT. Mesoscopic description of network-forming clusters of weakly charged colloids. *Condensed Matter Physics*. 2010;13(2):23603. DOI: 10.5488/CMP.13.23603.
16. Pekalski J, Ciach A, Almaraz NG. Periodic ordering of clusters and stripes in a two-dimensional lattice model. I. Ground state, mean-field phase diagram and structure of the disordered phases. *Journal of Chemical Physics*. 2014;140(11):114701. DOI: 10.1063/1.4868001.
17. Almaraz NG, Pekalski J, Ciach A. Periodic ordering of clusters and stripes in a two-dimensional lattice model. II. Results of Monte Carlo simulation. *Journal of Chemical Physics*. 2014;140(16):164708. DOI: 10.1063/1.4871901.
18. Uebing C, Gomer R. A Monte Carlo study of surface diffusion coefficients in the presence of adsorbate-adsorbate interactions. *Journal of Chemical Physics*. 1991;95:7626–7652. DOI: 10.1063/1.461817.
19. Groda YaG, Bildanau EE, Gapanjuk DV. Critical parameter of the lattice fluid with SALR-potential on the simple square lattice. *Trudy BGTU. Seriya 3. Fiziko-matematicheskie nauki i informatika* [Internet]. 2018 [cited 2019 January 27];1(206):24–28. Available from: elib.belstu.by/handle/123456789/25356. Russian.
20. Groda YaG, Vikhrenko VS, di Caprio D. Equilibrium properties of the lattice system with SALR interaction potential on a square lattice: quasi-chemical approximation versus Monte Carlo simulation. *Condensed Matter Physics*. 2018;21(4):43002. DOI: 10.5488/CMP.21.43002.
21. Groda YaG, Vikhrenko VS, di Caprio D. Lattice fluid with attractive interaction between nearest neighbors and repulsive interaction between next-next-nearest neighbors on simple cubic lattice. *Journal of the Belarusian State University. Physics*. 2019;2:84–95. Russian. DOI: 10.33581/2520-2243-2019-2-84-95.
22. Kirkpatrick S, Gellat CD, Vicci MP. Optimization by simulated annealing. *Science* [Internet; cited 2019 June 11];1983;220:671–688. Available from: <https://www.jstor.org/stable/1690046>.
23. Zhou E, Chen X. Sequential Monte Carlo simulated annealing. *Journal of Global Optimization*. 2013;55(1):101–124. DOI: 10.1007/s10898-011-9838-3.
24. Groda YaG, Argyrakis P, Bokun GS, Vikhrenko VS. SCDA for 3D lattice gases with repulsive interaction. *The European Physical Journal B*. 2003;32(4):527–535. DOI: 10.1140/epjb/e2003-00118-3.
25. Vikhrenko VS, Groda YaG, Bokun GS. Ravnovesnye i diffuzionnye kharakteristiki interkalyatsionnykh sistem na osnove reshetchnykh modelei [Internet]. Minsk: Belarusian State Technological University; 2008 [cited 2018 September 14]. 326 p. Available from: elib.belstu.by/handle/123456789/2716. Russian.
26. Luijten E. Introduction to cluster Monte Carlo algorithms. In: Ferrario M, Ciccotti G, Binder K, editors. *Computer Simulations in Condensed Matter Systems: From Materials to Chemical Biology*. Berlin: Springer; 2006. p. 13–38. (Lecture Notes in Physics; volume 703). DOI: 10.1007/3-540-35273-2_1.

ЮБИЛЕИ

JUBILEES

**Евгений Семенович
ВОРОПАЙ**

**Eugene Semenovich
VOROPAY**



Исполнилось 75 лет доктору физико-математических наук, профессору Евгению Семеновичу Воропаю – известному ученому в области молекулярной спектроскопии, лазерной физики и спектрально-оптического приборостроения, лауреату Государственной премии Республики Беларусь, лауреату премии имени А. Н. Севченко, заслуженному работнику БГУ, профессору кафедры лазерной физики и спектроскопии физического факультета.

Е. С. Воропай родился 20 мая 1944 г. в д. Тристенец Узденского района Минской области. После окончания с золотой медалью средней школы в 1961 г. поступил на физический факультет БГУ, в 1966 г. стал аспирантом Института физики АН БССР. В 1969 г. переведен в университет и зачислен на должность старшего инженера кафедры общей физики физического факультета. В 1973 г. – старший преподаватель, в 1976 г. – доцент указанной кафедры. С 1977 г. Е. С. Воропай работает в НИИ прикладных физических проблем (ПФП) БГУ, где с 1979 г. возглавляет лабораторию спектроскопии. С 1997 по 2017 г. – заведующий кафедрой лазерной физики и спектроскопии физического факультета БГУ, в настоящее время – профессор кафедры.

Кандидатская диссертация Е. С. Воропая (1973) посвящена поляризованной люминесценции сложных молекул при двухфотонном возбуждении. Результаты исследований нелинейных оптических явлений в сложных молекулах обобщены в его докторской диссертации «Нелинейная люминесценция и методы ее фотометрии» (1992). Евгением Семеновичем дано теоретическое описание предельной степени поляризации флуоресценции при двухфотонном и многофотонном возбуждении, определены электронно-колебательные состояния, ответственные за процессы двухфотонного поглощения в сложных молекулах, установлены механизмы светового тушения. Е. С. Воропай внес существенный вклад в изучение нелинейных фотофизических процессов, обусловленных спектральной и структурной неоднородностью растворов сложных молекул. Методам и аппаратуре для спектроскопических и нелинейно-оптических исследований посвящена монография «Техника фотометрии высокого амплитудного разрешения».

Под руководством Евгения Семеновича сформировано и успешно развивается научное направление в области лазерной физики и молекулярной спектроскопии, ориентированное на исследование

взаимосвязи спектрально-люминесцентных характеристик со структурными особенностями сложных молекулярных систем. Установлена взаимосвязь таких особенностей ряда полиметиновых красителей с параметрами, определяющими эффективность данных соединений в качестве фотосенсибилизаторов при проведении фотодинамической терапии онкозаболеваний, что позволило создать высокоэффективный фотосенсибилизатор нового поколения для диагностики и терапии.

Е. С. Воропай руководил разработкой и созданием уникальных спектрометрических комплексов и методики их использования в науке и медицине, включая наносекундный импульсный спектрофлуориметр, выпущенный в виде малой серии; комплект малогабаритных спектрометров для учебных и научных применений; гиперспектрометр для проведения спектроскопических исследований с пространственным разрешением; лазерный видеомикроспектрометрический комплекс для анализа характеристик пространственно-сложных объектов; диагностические комплексы, обеспечивающие определение областей локализации новообразований по регистрации лазерно-возбуждаемой флуоресценции; поляризационный люминесцентный микроскоп ППЛИМ-02-05. Последний внесен в государственный реестр и сертифицирован для определения подлинности выпускаемой на УП «Бумажная фабрика» Гознака (г. Борисов) документной бумаги, которая защищена запатентованной поляризационной меткой (разработана на кафедре).

По результатам исследований Евгений Семенович имеет более 700 публикаций, он – автор 4 монографий и 51 авторского свидетельства и патента. Работа Е. С. Воропая по спектроскопии бензтиазольного красителя тиюфлавина Т, выполненная совместно с учеными России, стала фундаментом нового направления в науке, связанного с изучением амилоидных фибрилл, возникновение которых сопряжено с тяжелыми нейродегенеративными заболеваниями, такими как болезни Альцгеймера и Паркинсона. По данным Scopus, указанное исследование имеет более 190 цитирований в престижных международных журналах. Евгений Семенович участвует в работе многих конференций в качестве члена программных комитетов (ICONO/LAT, «Лазерная физика и оптические технологии», «Медэлектроника» и др.).

Руководимые Е. С. Воропаем научные исследования и разработки выполняются в тесном контакте с лабораторией спектроскопии НИИ ПФП имени А. Н. Севченко БГУ. Активно ведется сотрудничество с организациями и учреждениями НАН Беларуси (Институт физики имени Б. И. Степанова, Институт биоорганической химии, Институт микробиологии), Республиканским научно-практическим центром онкологии и медицинской

радиологии имени Н. Н. Александрова, учеными Китая, Германии, Франции, Литвы, России.

Выполненные под руководством Е. С. Воропая разработки неоднократно отмечались дипломами и медалями на конкурсах лучших инновационных проектов и научно-технических разработок года в Санкт-Петербурге: сенсибилизатор нового поколения (диплом I степени, золотая медаль в 2014 г.); лазерный видеомикроспектрометрический комплекс (диплом II степени, серебряная медаль в 2015 г.); люминесцентная метка ценных бумаг со скрытыми степенями защиты и приборы для ее экспресс-идентификации (диплом I степени, золотая медаль в 2016 г.); фотоактивируемый антибактериальный препарат (диплом II степени, серебряная медаль в 2017 г.).

За исследования в области фотофизики сложных органических молекул в 1994 г. Е. С. Воропая вместе с сотрудниками БГУ и НАН Беларуси присуждена Государственная премия в области науки и техники (цикл работ «Флуктуации макроструктуры и фотофизики молекул красителей в растворах»). В 2003 г. ему присуждена премия имени А. Н. Севченко за цикл работ «Анизотропия процессов поглощения и испускания света сложными органическими соединениями».

Постоянное внимание Евгений Семенович уделяет подготовке молодых ученых и научно-организационной работе. Под его руководством защищено 10 кандидатских диссертаций. Е. С. Воропай был консультантом по 2 докторским диссертациям. Он – председатель совета по защите докторских диссертаций при БГУ по специальностям «оптика», «лазерная физика» и «оптические и оптико-электронные приборы и комплексы», член совета по защите докторских диссертаций при Белорусском национальном техническом университете, коллегии национальных экспертов стран СНГ по лазерам и лазерным технологиям, экспертного совета Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (БРФФИ), заместитель председателя экспертного совета по лазерно-оптической технике при Государственном комитете по науке и технологиям Республики Беларусь, сокоординатор государственной программы научных исследований «Электроника и фотоника» (подпрограмма «Фотоника-2»), член бюро государственного экспертного совета № 5 «Фотоника, опто-, микроэлектроника, радиоэлектроника и приборостроение», а также президиума профессорского собрания БГУ, заместитель главного редактора «Журнала Белорусского государственного университета. Физика», член редколлегий «Журнала прикладной спектроскопии».

Е. С. Воропай – высокопрофессиональный лектор. Его лекции по общим и специальным курсам отличает научная содержательность и педагогическое мастерство. Огромное внимание он уделяет

работе со студентами, с глубоким пониманием их индивидуальных способностей помогает решать вопросы выбора направлений будущей профессиональной деятельности.

Заслуги Е. С. Воропая в научной и педагогической работе неоднократно отмечались. Он награжден медалью «За трудовое отличие» (1986), Почетной грамотой Национального собрания Республики Беларусь (2011), Почетной грамотой НАН Беларуси (2006, 2009), Почетной грамотой Министерства здравоохранения Республики Беларусь (2016), нагрудным знаком Министерства образования Республики Беларусь «Выдатнік адукацыі» (2014), почетными грамотами Минвуза БССР и СССР, БРФФИ, ВАК, БГУ, Института физики имени Б. И. Степанова, НИИ ПФП имени А. Н. Севченко. Ему присвоено звание «Заслуженный работник БГУ» (2012), назначалась персональ-

ная надбавка Президента Республики Беларусь за выдающийся вклад в социально-экономическое развитие республики (1999, 2012), его имя занесено на Доску почета БГУ (2014), он отмечен благодарностью ректора университета (2019).

Широкая научная эрудиция, энергия, активная жизненная позиция, принципиальность, умение отстаивать свое мнение, организаторские способности, трудолюбие, доброе и внимательное отношение к людям снискали Евгению Семеновичу высокий авторитет среди коллег, многочисленных учеников, аспирантов и студентов.

Сотрудники физического факультета БГУ, Института физики имени Б. И. Степанова НАН Беларуси и НИИ прикладных физических проблем имени А. Н. Севченко БГУ сердечно поздравляют Евгения Семеновича с юбилеем и желают крепкого здоровья и успехов в научной и педагогической деятельности.

Анатолий Антонович МИНЬКО

Anatoli Antonovich
MINKO



Анатолию Антоновичу Минько, заведующему кафедрой физической оптики и прикладной информатики, доктору физико-математических наук, профессору, лауреату премии Совета Министров БССР, лауреату премии имени А. Н. Севченко, заслуженному работнику БГУ, заслуженному деятелю науки Республики Беларусь, исполнилось 70 лет.

А. А. Минько родился 27 июня 1949 г. в г. Омске-Кировске Омской области Российской Федерации в семье военнослужащего. В 1957 г. семья переехала в г. Старые Дороги Минской области. После окончания с серебряной медалью стародорожской средней школы № 2 в 1966 г. поступил

на физический факультет БГУ. В 1971 г. окончил его с отличием (на 4-м и 5-м курсах – ленинский стипендиат) и был оставлен для работы в БГУ. С ноября 1971 г. переведен в НИИ прикладных физических проблем (ПФП) БГУ, где работал инженером, младшим научным сотрудником, старшим научным сотрудником, заведующим лабораторией оптики конденсированных сред (ЛОКС). В 1979–2008 гг. – заместитель по научной работе директора института. В 1993–2008 гг. – заведующий кафедрой физической оптики на общественных началах (ныне – кафедра физической оптики и прикладной информатики), с 2008 г. – на штатной должности заведующего кафедрой.

В 1977 г. под руководством Л. В. Володько Анатолий Антонович успешно защитил кандидатскую диссертацию, в 1990 г. – докторскую, в 1993 г. ему присвоено звание профессора.

А. А. Минько является одним из основных организаторов в Республике Беларусь исследований по физике и химии жидкокристаллических (ЖК) соединений, руководителем важного научного направления в области оптики и спектроскопии сложных молекулярных систем. Им накоплен, систематизирован и обобщен большой экспериментальный материал по спектроскопии и электрооптическим свойствам бензохинонов и ЖК-соединений.

Анатолий Антонович – научный руководитель государственной научно-технической программы (ГНТП) «ЖК-устройства», ряда научно-исследовательских и опытно-конструкторских разработок в рамках ГНТП «Микроэлектроника», «Эталоны и научные приборы», государственных программ научных исследований, программ Союзного государства «Космос-СГ», «Космос-НТ», «Мониторинг-СГ», проектов Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований. Организовал и успешно ведет совместные исследования с учеными зарубежных стран (Южная Корея, Германия, Польша, Норвегия, Китай, Латвия).

В 1980–90-х гг. под руководством А. А. Минько сформировалась научная школа в области физики и химии жидких кристаллов, были получены новые результаты, которые внедрены в производство: разработаны оригинальные методы создания многоцветных ЖК-дисплеев с улучшенным углом обзора и высокой яркостью; предложен новый подход в получении люминесцентных ЖК-материалов для дисплеев; решена задача формирования бездефектных, стабильных к механическому и температурному воздействию дисплеев; разработаны основы перспективной технологии и способ создания цветных бесполяроидных селективно-рассеивающих ЖК-дисплеев; исследованы электрооптические свойства ЖК-материалов, допированных наночастицами; предложен новый способ конструирования ЖК-дисплеев с большим углом обзора.

Признанием достижений в разработках ЖК-материалов и систем отображения информации на их основе является присуждение премии Совета Министров БССР в 1990 г. за работу «Синтез, физико-химические исследования новых жидкокристаллических материалов, разработка технологий создания жидкокристаллических устройств отображения информации и их практическое применение» (руководитель – А. А. Минько).

В рамках ГНТП «ЖК-устройства» выполнены задания, посвященные получению новых ЖК-материалов, модуляторов, устройств отображения информации: разработаны основы перспективной технологии и способ создания высокоинформатив-

ных электрооптических ЖК-экранов (супертвистовый, двойной супертвистовый, сегнетоэлектрический, активно-матричный), требующих точного удержания зазора, который включает формирование монолитно с подложкой по всей площади экрана с определенной топологией одинаковых по высоте спейсеров. По этой технологии на заводе «Электроника» ПО «Интеграл» был освоен выпуск персонального компьютера МК-90; разработан метод изготовления экранов с высокоточным заданием толщины ЖК-слоя, что позволило получить дисплеи, имеющие аналоговую шкалу серости; созданы установки для измерения основных электрооптических параметров жидких кристаллов; изготовлена опытная партия ЖК-модуляторов для масок электросварщиков; совместно со специальным конструкторским бюро «Немига» ПО «Интеграл» выпущены образцы цветных телевизоров; получены ЖК-материалы для дисплеев, работающих на супер-твист-эффекте.

В 1995 г. на базе ЛОКС по инициативе А. А. Минько была создана совместная лаборатория с фирмой *Samsung* – ныне филиал НИИ ПФП имени А. Н. Севченко БГУ (СЛС-И), руководителем которого он является по настоящее время. В период деятельности филиала работы велись со следующими зарубежными компаниями: *Samsung Display Devices* (Южная Корея), *Philips Electronics Nederland B. V.* (Нидерланды), *Smart Display Co. Ltd.* (Южная Корея), *KSI Co. Ltd.* (Южная Корея), *Samsung Advanced Institute of Technology* (Южная Корея), *TechnoDisplay AS* (Норвегия), *LG Display* (Южная Корея), *Koenig-PA* (Германия).

С 2011 г. в Хэйлунцзянском институте нефтехимии (ХИНХ, Китай) под руководством А. А. Минько ведутся работы по созданию широкотемпературных ЖК-композиций для дисплеев. В 2013–2016 гг. разработаны новые материалы для изготовления дисплеев на органических люминофорах (OLED).

В рамках программ Союзного государства под началом Анатолия Антоновича был создан и испытан экспериментальный образец широкозахватного оптоэлектронного сканера с системой регистрации, хранения и обработки данных в составе многоспектрального инфракрасного радиометра для зондирования Земли в ИК-диапазоне. Разработаны и внедрены в образовательный процесс БГУ ряд спектральных приборов: спектрометр комбинационного рассеяния с микроскопом, универсальный быстродействующий широкодиапазонный спектрофотометр, многоканальный спектрометр с индуктивно связанной микроволновой плазмой.

Результаты научных исследований А. А. Минько обобщены в 3 монографиях, он является автором более 280 публикаций, в том числе 5 учебных пособий, 20 авторских свидетельств на изобретения

и 21 зарубежного патента. Им разработаны учебные программы и курсы лекций по физике жидких кристаллов, кристаллооптике, ЖК-структурам, актуальным вопросам физики, безопасности жизнедеятельности человека.

Анатолий Антонович много внимания уделяет малой родине. В стародорожской школе № 2 создан кабинет физики, организованы встречи преподавателей и студентов физического факультета БГУ с учениками старших классов. В 2019 г. его имя внесено в Книгу народной славы Стародорожского района.

А. А. Минько активно участвует в работе советов БГУ и Института физики НАН Беларуси по защите докторских и кандидатских диссертаций, в 2001–2009 гг. – председатель Государственного экспертного совета по приборостроению, радиоэлектронике и оптике. Член государственных экспертных советов Государственного комитета по науке и технологиям Республики Беларусь, руководитель научно-исследовательской лаборатории «Спектроскопические системы» кафедры физической оптики и прикладной информатики и ЛОКС НИИ ПФП имени А. Н. Севченко БГУ.

Опытный организатор научных исследований, принципиальный и требовательный руководитель, целеустремленный работник, высококвалифицированный педагог, коммуникабельный и доброжелательный человек. Неоднократно награждался

почетными грамотами Министерства образования и БГУ. Награжден почетными грамотами Совета Министров Республики Беларусь, Государственного комитета по науке и технологиям Республики Беларусь, Министерства по чрезвычайным ситуациям Республики Беларусь. В 2001 г. ему была установлена персональная надбавка Президента Республики Беларусь. В 2011 г. награжден юбилейной медалью «У гонар 80-годдзя Нацыянальнай акадэміі навук Беларусі». Заслуженный деятель науки Республики Беларусь (1999), лауреат премии имени А. Н. Севченко (2003), в 2016 г. ему присвоено звание «Заслуженный работник Белорусского государственного университета». В 2019 г. награжден нагрудным знаком Министерства образования Республики Беларусь «Отличник образования».

Талант физика-экспериментатора, умение работать с молодежью в сочетании с активной жизненной позицией и высоким профессионализмом снискали Анатолию Антоновичу глубокое уважение, признание и авторитет.

Коллеги и друзья, сотрудники физического факультета и НИИ ПФП имени А. Н. Севченко БГУ горячо и сердечно поздравляют Анатолия Антоновича Минько с юбилеем и от всей души желают ему долгих лет жизни, крепкого здоровья, счастья и благополучия, новых творческих успехов в науке на благо Республики Беларусь.

Николай Александрович ПОКЛОНСКИЙ

Nikolai Alexandrovich
POKLONSKI



Николаю Александровичу Поклонскому, доктору физико-математических наук, профессору, лауреату премии имени А. Н. Севченко, заслуженному работнику БГУ, профессору кафедры физики полупроводников и наноэлектроники, исполнилось 70 лет.

Н. А. Поклонский родился 14 августа 1949 г. в белорусской деревне Городок Узденского района Минской области в семье ветерана Великой Отечественной войны. В 1971 г. окончил физический факультет Белорусского государственного университета со специализацией по физике полупроводников

и диэлектриков. После окончания университета работал в Институте прикладных физических проблем имени А. Н. Севченко БГУ. С 1973 по 1976 г. обучался в очной аспирантуре университета. В 1982 г. защитил кандидатскую диссертацию, в 2002 г. – докторскую диссертацию по специальности «физика полупроводников». В 1987 г. ему присвоено ученое звание старшего научного сотрудника, в 1997 г. – доцента, в 2003 г. – профессора. С 1986 г. работу в Институте прикладных физических проблем совмещал с чтением курса лекций на физическом факультете БГУ. С 1993 г. – доцент, с 2002 г. – профессор кафедры физики полупроводников и нанoeлектроники. Его наставниками в экспериментальной физике были В. Д. Ткачев, В. Ф. Стельмах, И. З. Рутковский и В. П. Доброго.

Николай Александрович является одним из наиболее авторитетных в Беларуси специалистов по физике и электронике полупроводниковых систем. В сфере макро- и микросистем им развита теория ионизационного равновесия, прыжковой электрической проводимости и термоЭДС для полупроводников с точечными дефектами кристаллической структуры. Открыт эффект поглощения микроволнового электромагнитного излучения электронами, левитирующими над поверхностью природного алмаза, при его фотовозбуждении в области фундаментального поглощения. В синтетических алмазах при комнатной температуре выявлен мазерный эффект на примесных атомах азота. В алмазах, подвергнутых воздействию радиации, обнаружен квазиферромагнетизм – магнитная активность дефектов кристаллической структуры. Измерено размагничивающее поле на поверхности ферромагнитных металлов методом электронного спинового резонанса. Обнаружены инфранизкочастотные автоколебания тока в пленках поликристаллического кремния микронной толщины. Установлено, что введение соли LiCl в микро- и нанопоры ксерогеля SiO₂ резко (на порядки) увеличивает зависимость их электропроводности на переменном токе от влажности воздуха. Выявлены импедансы индуктивного типа в кремниевых диодах, содержащих слой радиационных дефектов в окрестности *p-n*-перехода. Теорема Рамо – Шокли обобщена на случай последовательной RCL-цепи детектора заряженных частиц. Показано, что квадратичное по затухающему току электрическое поле контура сверхпроводящая катушка – резистор обусловлено преобладанием поля электрической поляризации резистора над наведенным индукцией электрическим полем в резисторе. Разработаны и изготовлены микроволновой резонатор для измерения магнитных и электрических параметров материалов, ячейка памяти на основе вертикального биполярного транзистора с коллектором из аморфного кремния, широкополосный фазосдвигающий элемент на основе карбидокремниевого варистора,

датчик давления с рабочим веществом из мелкодисперсного кремния в диэлектрическом связующем, линейка резисторов на основе модифицированных в аргоновой плазме алмазоподобных пленок.

В области наносистем Николаем Александровичем предсказан резонанс Ферми при полносимметричных колебаниях атомов углерода в фуллеренах. Предложена схема магнитоуправляемого электронного ключа на основе углеродных нанотрубок, наполненных магнитоактивными эндофуллеренами. Выдвинута концепция подвижного дефекта упаковки в стопке воронкообразных макромолекул фталоцианина. Впервые показано, что излучательный распад триона в двумерной кристаллической квантовой яме является аналогом эффекта Оже. Изогнутые листы графена предложены в качестве электродов для разложения паров воды на гидроксильные радикалы и атомы водорода. Разработана ячейка памяти и схема электромеханического генератора на основе мембраны из графена, а также концепция нанодинамометра из бислоя графена с туннельной электрической проводимостью между монослоями.

Н. А. Поклонским опубликованы более 250 статей в рецензируемых научных журналах, 2 монографии, 3 учебных пособия, получено 6 патентов. Под его руководством защищено 7 диссертаций на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук.

Николай Александрович является руководителем (от БГУ) двух международных проектов европейской рамочной программы исследований и инноваций «Horizon-2020». Под его научным руководством выполняются совместные исследования с Физико-техническим институтом имени А. Ф. Иоффе РАН (Санкт-Петербург), Институтом радиотехники и электроники имени В. А. Котельникова РАН и Институтом спектроскопии РАН (Москва), а также Институтом исследования и развития (Дананг, Вьетнам).

Николай Александрович активно популяризирует физику: выступает с лекциями в Лицее БГУ, Минском планетарии и на телевидении. В 12-томной «Энциклопедии для школьников и студентов» (Минск: Беларуская энцыклапедыя імя П. Броўкі, 2009 –) под редакцией Н. А. Поклонского изданы: «Физика. Математика» (2010, т. 2, 600 с.), «Мир техники» (2012, т. 4, 712 с.) и «Химия. Биология» (2016, т. 6, 456 с.). Эти добротные книги адресуются молодому поколению страны.

Н. А. Поклонский является председателем Государственного экспертного совета № 33 Высшей аттестационной комиссии Республики Беларусь, заместителем председателя экспертного совета Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований, членом редколлегий изданий «Журнал технической физики» РАН и «Известия

НАН Беларуси. Серия физико-математических наук», членом научно-редакционного совета энциклопедии «Республика Беларусь», членом бюро правления Белорусского физического общества. Он – делегат двух съездов ученых Республики Беларусь (2007, 2017).

Николай Александрович награжден медалью «За трудовые заслуги» в 2014 г., также имеет ряд поощрений и званий (стипендия Президента Республики Беларусь для деятелей науки (2002), Почетная грамота Министерства образования Республики Беларусь (2004), почетные грамоты Высшей аттестационной комиссии Республики Беларусь

(2008, 2016), премия имени А. Н. Севченко Белорусского государственного университета (2008), звание почетного доктора Монгольского национального университета (2012), почетное звание «Заслуженный работник Белорусского государственного университета» (2012)). В 2019 г. награжден нагрудным знаком Министерства образования Республики Беларусь «Отличник образования».

Н. А. Поклонский искренен и доброжелателен в общении.

Коллеги и друзья сердечно поздравляют Николая Александровича с юбилеем и желают ему вдохновения в исследованиях на благо Республики Беларусь.

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

УДК 53(075.8)+531/534(075.8)+539.2(075.8)

Физика [Электронный ресурс] : электрон. учеб.-метод. комплекс для спец. 1-31 05 01 «Химия», направления специальности: 1-31 05 01-01 «Химия (научно-производственная деятельность)»; 1-31 05 01-02 «Химия (научно-педагогическая деятельность)»; 1-31 05 01-03 «Химия (фармацевтическая деятельность)»; 1-31 05 01-04 «Химия (охрана окружающей среды)»; 1-31 05 01-05 «Химия (радиационная, химическая и биологическая защита)»; 1-31 05 04 «Фундаментальная химия»; 1-31 05 02 «Химия лекарственных соединений»; 1-31 05 03 «Химия высоких энергий» : в 3 ч. Ч. 1. Механика и молекулярная физика / И. Р. Гулаков [и др.] ; БГУ. Электрон. текстовые дан. Минск : БГУ, 2019. 269 с. : ил. Библиогр.: с. 251. Режим доступа: <http://elib.bsu.by/handle/123456789/230514>. Загл. с экрана. Деп. 16.09.2019, № 008716092019.

Электронный учебно-методический комплекс (ЭУМК) «Физика. Часть I. Механика и молекулярная физика» подготовлен в соответствии с типовыми учебными программами № ТД-G.530/тип. и № ТД-G.541/тип. в целях учебно-методического обеспечения студентов первого курса химического факультета БГУ. Задачей ЭУМК является систематизация информации, необходимой для изучения данного курса студентами, а также помощь молодым преподавателям в организации практических и лабораторных занятий.

УДК 53(075.8)+537(075.8)

Физика [Электронный ресурс] : электрон. учеб.-метод. комплекс для спец. 1-31 05 01 «Химия», направления специальности: 1-31 05 01-01 «Химия (научно-производственная деятельность)»; 1-31 05 01-02 «Химия (научно-педагогическая деятельность)»; 1-31 05 01-03 «Химия (фармацевтическая деятельность)»; 1-31 05 01-04 «Химия (охрана окружающей среды)»; 1-31 05 01-05 «Химия (радиационная, химическая и биологическая защита)»; 1-31 05 04 «Фундаментальная химия»; 1-31 05 02 «Химия лекарственных соединений»; 1-31 05 03 «Химия высоких энергий» : в 3 ч. Ч. 2. Электричество и магнетизм / И. Н. Медведь [и др.] ; БГУ. Электрон. текстовые дан. Минск : БГУ, 2019. 193 с. : ил. Библиогр.: с. 191. Режим доступа: <http://elib.bsu.by/handle/123456789/230516>. Загл. с экрана. Деп. 17.09.2019, № 008817092019.

Электронный учебно-методический комплекс (ЭУМК) «Физика. Часть II. Электричество и магнетизм» подготовлен в соответствии с типовыми учебными программами № ТД-G.530/тип. и № ТД-G.541/тип. в целях учебно-методического обеспечения студентов второго курса химического факультета БГУ. Задачей ЭУМК является систематизация изучения студентами данного курса, а также помощь молодым преподавателям в организации практических и лабораторных занятий.

УДК 53(075.8)+539.1(075.8)

Физика [Электронный ресурс] : электрон. учеб.-метод. комплекс для спец. 1-31 05 01 «Химия», направления специальности: 1-31 05 01-01 «Химия (научно-производственная деятельность)»; 1-31 05 01-02 «Химия (научно-педагогическая деятельность)»; 1-31 05 01-03 «Химия (фармацевтическая деятельность)»; 1-31 05 01-04 «Химия (охрана окружающей среды)»; 1-31 05 01-05 «Химия (радиационная, химическая и биологическая защита)»; 1-31 05 04 «Фундаментальная химия»; 1-31 05 02 «Химия лекарственных соединений»; 1-31 05 03 «Химия высоких энергий» : в 3 ч. Ч. 3. Оптика. Атомная и ядерная физика / И. Н. Медведь [и др.] ; БГУ. Электрон. текстовые дан. Минск : БГУ, 2019. 173 с. : ил. Библиогр.: с. 171. Режим доступа: <http://elib.bsu.by/handle/123456789/230517>. Загл. с экрана. Деп. 17.09.2019, № 008917092019.

Электронный учебно-методический комплекс (ЭУМК) «Физика. Часть III. Оптика. Атомная и ядерная физика» подготовлен в соответствии с типовыми учебными программами № ТД-G.530/тип. и № ТД-G.541/тип. в целях учебно-методического обеспечения студентов второго курса химического факультета БГУ. Задачей ЭУМК является систематизация изучения студентами данного курса, а также помощь молодым преподавателям в организации практических и лабораторных занятий.

СОДЕРЖАНИЕ

ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ

<i>Кабанова О. С., Рушинова И. И., Мельникова Е. А., Толстик А. Л., Муравский Ал. А., Муравский Ан. А., Хайнцманн Р.</i> Двумерная дифракционная оптическая структура на основе текстурированной фотоориентации полимеризуемого жидкого кристалла.....	4
--	---

ФИЗИКА ЛАЗЕРОВ

<i>Буров Л. И., Горбацевич А. С., Лобацевич П. М.</i> Влияние различных источников флуктуаций на статистические характеристики выходного излучения поверхностно излучающих полупроводниковых лазеров.....	12
---	----

ФИЗИКА ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ЯВЛЕНИЙ

<i>Мороз И. В., Ровба А. А.</i> Радиационная неустойчивость в расщепленном резонаторе.....	22
--	----

ФИЗИКА ЯДРА И ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ

<i>Хасеневич В. В., Шишкина Т. В.</i> Электрослабые однопетлевые поправки к процессу рождения пары фермионов в электрон-позитронной аннигиляции	31
<i>Шершень И. А., Шишкина Т. В.</i> Процесс рождения W -бозона в высокоэнергетических электрон-фотонных столкновениях	41

СПЕКТРАЛЬНЫЕ ПРИБОРЫ

<i>Бычков В. М., Дидковский Я. И., Коваленко М. Н., Минько А. А., Последович М. Р., Шарашкин С. Н., Яковец В. М.</i> Метрологические и эксплуатационные характеристики многоканального атомно-эмиссионного вакуумного спектрометра для учебных и промышленных лабораторий с генератором искрового разряда МС-200УН	51
--	----

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

<i>Доросинец В. А., Борисов В. А.</i> Определение микроскопических параметров гетерогенных углеродных материалов	61
<i>Покотило Ю. М., Петух А. Н., Гиро А. В.</i> Образование и отжиг радиационных дефектов в кремнии, имплантированном ионами водорода.....	68
<i>Толстоуцкая Г. Д., Тихоновский М. А., Воеводин В. Н., Никитин А. В., Тортика А. С., Василенко Р. Л.</i> Модификация поверхности и распыление сплавов FeCrAl при воздействии низкоэнергетической водородной плазмы	73
<i>Грода Я. Г., Гришина В. С., Цях А., Вихренко В. С.</i> Фазовая диаграмма решеточного флюида с SRLA-потенциалом на плоской треугольной решетке	81

ЮБИЛЕИ

<i>Евгений Семенович Воропай.....</i>	92
<i>Анатолий Антонович Минько</i>	94
<i>Николай Александрович Поклонский</i>	96
<i>Аннотации депонированных в БГУ работ.....</i>	99

CONTENTS

OPTICS AND SPECTROSCOPY

<i>Kabanova O. S., Rushnova I. I., Melnikova E. A., Tolstik A. L., Muravsky Al. A., Murauski An. A., Heintzmann R.</i> Two-dimensional diffractive optical structure based on patterned photoalignment of polymerizable liquid crystal.....	4
---	---

LASER PHYSICS

<i>Burov L. I., Gorbatsevich A. S., Labatsevich P. M.</i> The influence various sources of fluctuation on the statistical parameters of the vertical cavity surface emitting lasers output radiation.....	12
---	----

PHYSICS OF ELECTROMAGNETIC PHENOMENA

<i>Maroz I. V., Rouba A. A.</i> Radiation instability in a split-cavity resonator	22
---	----

ATOMIC NUCLEUS AND ELEMENTARY PARTICLE PHYSICS

<i>Khasianevich U. U., Shishkina T. V.</i> Electroweak one-loop corrections to the process of fermion pair production in electron-positron annihilation	31
<i>Shershan I. A., Shishkina T. V.</i> <i>W</i> -boson production in the high energy electron-photon collisions.....	41

SPECTRAL DEVICES

<i>Bychkov V. M., Didkovsky Y. I., Kovalenko M. N., Minko A. A., Pasliadovich M. R., Sharashkin S. N., Yakavets V. M.</i> Metrological and operational characteristics of the multichannel vacuum atomic-emission spectrometer for educational and industrial laboratories with a MS-200UN spark generator.....	51
---	----

CONDENSED STATE PHYSICS

<i>Dorosinets V. A., Borisov V. A.</i> Determination of microscopical parameters of heterogeneous carbon materials.....	61
<i>Pokotilo Yu. M., Petukh A. N., Giro A. V.</i> Formation and annealing of radiation defects in silicon, implanted with hydrogen ions.....	68
<i>Tolstolutsкая G. D., Tikhonovsky M. A., Voyevodin V. N., Nikitin A. V., Tortika A. S., Vasilenko R. L.</i> Surface modification and sputtering of FeCrAl alloys exposed to low-energy hydrogen plasmas	73
<i>Groda Ya. G., Grishina V. S., Ciach A., Vikhrenko V. S.</i> Phase diagram of the lattice fluid with SRLA-potential on the plane triangular lattice	81

JUBILEES

<i>Eugene Semenovich Voropay</i>	92
<i>Anatoli Antonovich Minko</i>	94
<i>Nikolai Alexandrovich Poklonski</i>	96
Indicative abstracts of the papers deposited in BSU.....	99

Журнал включен Высшей аттестационной комиссией Республики Беларусь в Перечень научных изданий для опубликования результатов диссертационных исследований по физико-математическим наукам (в области теоретической, экспериментальной и прикладной физики).

Журнал включен в библиографическую базу данных научных публикаций «Российский индекс научного цитирования» (РИНЦ).

**Журнал Белорусского
государственного университета. Физика.
№ 3. 2019**

Учредитель:
Белорусский государственный университет

Юридический адрес: пр. Независимости, 4,
220030, г. Минск.

Почтовый адрес: пр. Независимости, 4,
220030, г. Минск.

Тел. (017) 259-70-74, (017) 259-70-75.

E-mail: jphys@bsu.by

URL: <https://journals.bsu.by/index.php/physics>

«Журнал Белорусского государственного университета. Физика» издается с января 1969 г. До 2017 г. выходил под названием «Вестник БГУ. Серия 1, Физика. Математика. Информатика» (ISSN 1561-834X).

Редактор *Т. Р. Джум*
Технический редактор *В. В. Пишкова*
Корректор *Л. А. Меркуль*

Подписано в печать 30.09.2019.

Тираж 125 экз. Заказ 361.

Республиканское унитарное предприятие
«Информационно-вычислительный центр
Министерства финансов Республики Беларусь».
ЛП № 02330/89 от 03.03.2014.
Ул. Кальварийская, 17, 220004, г. Минск.

© БГУ, 2019

**Journal
of the Belarusian State University. Physics.
No. 3. 2019**

Founder:
Belarusian State University

Registered address: 4 Niezaliežnasci Ave.,
Minsk 220030.

Correspondence address: 4 Niezaliežnasci Ave.,
Minsk 220030.

Tel. (017) 259-70-74, (017) 259-70-75.

E-mail: jphys@bsu.by

URL: <https://journals.bsu.by/index.php/physics>

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

Editor *T. R. Dzhum*
Technical editor *V. V. Pishkova*
Proofreader *L. A. Merkul'*

Signed print 30.09.2019.

Edition 125 copies. Order number 361.

Republican Unitary Enterprise
«Informatsionno-vychislitel'nyi tsentr
Ministerstva finansov Respubliki Belarus'».
License for publishing No. 02330/89, 3 March, 2014.
17 Kal'varyjskaja Str., Minsk 220004.

© BSU, 2019