



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

1

2024

МИНСК
БГУ

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

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

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

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ

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

EDITORIAL BOARD

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

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

EDITORIAL COUNCIL

<i>Anufrik S. S.</i>	Yanka Kupala State University of Grodno, Grodno, Belarus.
<i>Fedosyuk V. M.</i>	State Scientific and Production Association «Scientific and Practical Materials Research Centre of NAS of Belarus», Minsk, Belarus.
<i>Gusev O. K.</i>	Belarusian National Technical University, Minsk, Belarus.
<i>Kazak N. S.</i>	State Scientific and Production Association «Optics, Optoelectronics and Laser Technology» of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus.
<i>Kilin S. Y.</i>	National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus.
<i>Kononov V. A.</i>	«LOTIS TII», Minsk, Belarus.
<i>Malyarevich A. M.</i>	Belarusian National Technical University, Minsk, Belarus.
<i>Penyazkov O. G.</i>	A. V. Luikov Heat and Mass Transfer Institute of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus.
<i>Pilipenko V. A.</i>	JSC «Integral», Minsk, Belarus.
<i>Pletyukhov V. A.</i>	Brest State University named after A. S. Pushkin, Brest, Belarus.
<i>Semchenko I. V.</i>	State Scientific and Production Association «Optics, Optoelectronics and Laser Technology» of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus.
<i>Shkadarevich A. P.</i>	Unitary Enterprise «STC “LEMT” of the BelOMO», Minsk, Belarus.

УДК 535.37

РАЗРАБОТКА КОМПЛЕКСНОГО ПОДХОДА, ОСНОВАННОГО НА МЕТОДАХ ИМИТАЦИОННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОГО АНАЛИЗА ДАННЫХ, ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ СИСТЕМ ПРИКЛАДНОЙ ФЛУОРЕСЦЕНТНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Н. Н. ЯЦКОВ¹⁾, В. В. АПАНАСОВИЧ¹⁾

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

Для исследования биомолекулярных соединений в системах обеспечения прикладной флуоресцентной спектроскопии предлагается применять комплексный подход, основанный на методах имитационного моделирования и интеллектуального анализа данных и включающий имитационные модели физических процессов, методы и алгоритмы интеллектуального анализа данных, программные средства автоматизации исследования молекулярных и клеточных систем. Идея комплексного подхода состоит в использовании имитационного моделирования биофизических процессов, протекающих в объекте исследования, отборе наиболее информативных экспериментальных данных, определении характеристик объекта с применением алгоритмов интеллектуального анализа данных. Эффективность алгоритмов разработанного подхода проверена в ходе анализа смоделированных и экспериментальных данных для систем флуоресцентной спектроскопии. В качестве практической реализации предложенного подхода

Образец цитирования:

Яцков НН, Апанасович ВВ. Разработка комплексного подхода, основанного на методах имитационного моделирования и интеллектуального анализа данных, для исследования систем прикладной флуоресцентной спектроскопии. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика*. 2024;1:4–15 (на англ.).
EDN: VJIKKO

For citation:

Yatskou MM, Apanasovich VV. Simulation modelling and data mining approach for the study of applied fluorescence spectroscopy systems. *Journal of the Belarusian State University. Physics*. 2024;1:4–15.
EDN: VJIKKO

Авторы:

Николай Николаевич Яцков – кандидат физико-математических наук, доцент; заведующий кафедрой системного анализа и компьютерного моделирования факультета радиопизики и компьютерных технологий.

Владимир Владимирович Апанасович – доктор физико-математических наук, профессор; профессор кафедры системного анализа и компьютерного моделирования факультета радиопизики и компьютерных технологий.

Authors:

Mikalai M. Yatskou, PhD (physics and mathematics), docent; head of the department of systems analysis and computer simulation, faculty of radiophysics and computer technologies.
yatskou@bsu.by

Vladimir V. Apanasovich, doctor of science (physics and mathematics), full professor; professor at the department of systems analysis and computer simulation, faculty of radiophysics and computer technologies.
apanasovichv@gmail.com

<https://orcid.org/0000-0003-4525-4234>

создана вычислительная платформа *FluorSimStudio* для обработки измерений флуоресценции с временным разрешением. Цифровая платформа представляет собой открытую систему и позволяет добавлять сложные модели анализа с учетом создания новых алгоритмов моделирования и обработки данных. Применение комплексного подхода повышает эффективность исследования биофизических систем при анализе больших данных.

Ключевые слова: флуоресцентная спектроскопия; обработка данных; имитационное моделирование; интеллектуальный анализ данных; вычислительная платформа.

SIMULATION MODELLING AND DATA MINING APPROACH FOR THE STUDY OF APPLIED FLUORESCENCE SPECTROSCOPY SYSTEMS

M. M. YATSKOU^a, V. V. APANASOVICH^a

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

Corresponding author: M. M. Yatskou (yatskou@bsu.by)

For the study of biomolecular compounds in applied fluorescence spectroscopy supporting systems an integrated approach, based on simulation modelling and data mining methods and including simulation models of physical processes, methods and algorithms for data mining, and software for studying molecular and cellular systems is proposed. The idea of an integrated approach is in using simulation modelling of biophysical processes occurring in the object of study, selecting the most informative experimental data, and determining the characteristics of the object using data mining algorithms. The effectiveness of the algorithms of the proposed approach is verified by analysing simulated and experimental data of fluorescence spectroscopy systems. As a practical implementation of the developed integrated methodology, the computational platform *FluorSimStudio* was developed for processing time-resolved fluorescence measurements. The digital platform is an open system and allows addition of complex analysis models, taking into account the development of new modelling and data processing algorithms. The use of complex analysis improves the efficiency of studying biophysical systems during big data analysis.

Keywords: fluorescence spectroscopy; data processing; simulation modelling; data mining; computational platform.

Introduction

Experimental fluorescence spectroscopy methods are used to investigate the optical properties of molecular compounds and therefore are applied in the studies of artificial photonic materials, protein complexes, biopolymers, biological membranes, cell biomarkers and organic tissues [1–3]. The standing development of methods is driven due to the improvements of effective molecular fluorophores, including genetically expressed proteins (for example, green fluorescent protein (GFP)), semiconductor nanoparticles and quantum dots, optical systems for laser excitation and photon detection, allowing for high-precision measurements, and computer technologies for data storage and processing [4–6]. Novel experimental high-throughput techniques, integrating pulsed, phase and modulation methods for detecting fluorescence decay times, form the basis of modern fluorescence microscopy and allow obtaining big datasets, characterised by high spectral, time and spatial resolution [6; 7]. The main fluorescence spectroscopy and microscopy techniques for studying complex molecular systems in «cuvettes» and living cells are fluorescence-lifetime imaging microscopy, fluorescence recovery after photobleaching and its derivatives (fluorescence loss in photobleaching and fluorescence localisation after photobleaching), fluorescence fluctuation spectroscopy (combining fluorescence correlation spectroscopy, fluorescence cross-correlation spectroscopy, photon counting histogram (PCH) and fluorescence intensity distribution analysis), fluorescence sensing [1; 7].

The advantage of the modern experimental fluorescence spectroscopy methods is the expanding degree of accuracy of measurements, achieved through the use of multichannel spectral, time and spatial resolutions, which significantly enhances the volume of recorded data, but simultaneously increases the efficiency of studying physical processes with a wide dynamic range of changes in parameters and measurement conditions, and allows to study complex multicomponent molecular systems in a series of clinical experiments. One of the major limitations in processing big fluorescence spectroscopy data is the lack of universal effective automated supporting and decision-making systems, including protocols for planning and conducting experiments, software for processing and analysing data, modelling and interpreting the studied biophysical processes. Presently,

systems for collecting and processing fluorescence spectroscopy data have been implemented to study optical processes in molecular compounds [6; 8]. Their advantages are acceptable performance and barely reasonable support of experimental investigations. However, these systems are not complex, used for specific types of biomolecular compounds and specialised experimental equipment, they are not organised in the form of a universal technique or approach to big data analysis, and provide a limited set of physical interpretation models and software analysis tools, which lets us to conclude that it is necessary to systematise existing solutions, integrating the most effective methods of data analysis, physical models (for example, based on simulation modelling) into a complex approach. The development of new improved supporting and decision-making systems should simplify and automate the processing of fluorescent experimental measurements, increase the accuracy of estimated parameters, and expand the limits of interpretation and prediction of physical processes.

The existing data analysis approaches to processing fluorescence spectroscopy data can be divided into classical and modern, based on machine learning or data mining algorithms. Classical methods consider separate or joint analysis of datasets using deconvolution, least squares, maximum likelihood, Bayesian, target and global analysis to estimate the parameters of mathematical models of optical processes and systems [9]. New approaches are based on: i) projection transformations and following parameter estimation (for example, transformation of fluorescence intensities into the phasor space (phasor analysis)); ii) using machine learning techniques, mainly artificial neural networks and ensemble algorithms, to estimate the model parameters; iii) segmentation of cell or tissue images and subsequent classification by a machine learning algorithm [10–14]. The main disadvantages of existing data processing methods are limited efficiency, that is due to the use of nonphysical analytical models (multi-exponential or polynomial decompositions), poor accuracy in parameter estimating when analysing noisy data (phasor analysis, neural networks), slow computations (global and Bayesian analysis), the need for the large training datasets (neural networks), special requirements for computing resources (the usage of video cards or multiprocessor nodes to accelerate neural network computing), and finally the lack of specialised software for automated data processing. Therefore, the primary task is to develop an integrated data analysis approach that eliminates the main drawbacks of existing methods, which would include physical models of the processes and systems under study, effective methods and software for processing a series of fluorescence spectroscopy data [15–17]. It should include descriptions of molecular systems at various levels of generalisation, from simple molecular compounds in solutions and films to complex cellular systems involved in various diseases.

In this paper, we propose an integrated approach based on simulation modelling and data mining methods for the study of biomolecular compounds in applied fluorescence spectroscopy systems. It includes simulation models of physical processes, methods and algorithms for data mining, and software for automating data analysis. As a practical implementation, the developed integrated methodology is integrated into the computational platform *FluorSimStudio* for processing fluorescence kinetic curves obtained through time-resolved fluorescence experiments.

Methodology

It is assumed that through a series of experiments generating big datasets some object, i. e. biophysical process or biomolecular compound, is investigated, whose essential properties or characteristics, for example, a set of biophysical parameters $A = \{a_1, a_2, \dots, a_p\}$ (e. g., electronic excitation energy transfer rate constants, protein concentrations and diffusion coefficients, biochemical reaction rate constants, etc.), must be determined during data analysis. The number of parameters P is determined depending on the level of detail (abstraction) of physical description and complexity of the investigated object. The parameters should be sufficient to adequately explain the behaviour of the object. In an integrated approach data mining algorithms are applied to multidimensional datasets to select the most informative or significant data for further in-depth analysis and finding estimates of parameters A using simulation models. Let us consider the main components of a complex approach.

Data. Let there be N observations, samples or measurements $H_E = \{E_1, E_2, \dots, E_N\}$ of the investigated object E , kept in the database or obtained in a real physical experiment. Let us consider the formalisation of conducting an experiment to investigate the object under study (fig. 1).

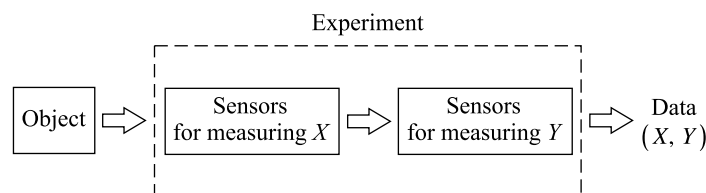


Fig. 1. Scheme of studying an object in a physical experiment

We assume that the experiment combines a set of sensors to record some properties of the observations of the object. The registered object properties are known as features, attributes, or variables and can be of two types. The first ones, denoted X , are independent measurements, including external influences (this can also include time as a signal), set by the experiment designer or researcher. The second ones, denoted Y , are measurements depending on the selected values of the characteristics of the first group. Independent measurements X are usually called features (or inputs, predictors, independent variables), and dependent Y – target variables (or outputs, responses, dependent variables) that determine solutions to data analysis problems. As a result of measuring the properties of observations, a dataset $D = \{X, Y\}$ (or (X, Y)) is recorded that combines independent and dependent variables of observations. The data structure of the object is considered in terms of selected attributes X and dependent variables Y .

Measurements over observations form feature vectors $X_1, X_2, \dots, X_K$ and an input data matrix X . Measurements over observations with fixed values $X_1, X_2, \dots, X_K$ form vectors of target features or output characteristics $Y_1, Y_2, \dots, Y_R$ and an output data matrix Y . The data (X, Y) obtained from a real experiment are presented in the form of a table, containing the recorded values of the properties of the object.

**A set of multidimensional data recorded
in some physical experiment and representing observations
or measurements H_E of the investigated object E**

H_E	X				Y			
	X_1	X_2	...	X_K	Y_1	Y_2	...	Y_R
E_1	x_{11}	x_{12}	...	x_{1K}	y_{11}	y_{12}	...	y_{1R}
E_2	x_{21}	x_{22}	...	x_{2K}	y_{21}	y_{22}	...	y_{2R}
...	...	...	...	...	...	...	...	...
E_N	x_{N1}	x_{N2}	...	x_{NK}	y_{N1}	y_{N2}	...	y_{NR}

The model of the data can be represented as

$$Y = \Xi(X), \quad (1)$$

where Ξ is a set of correspondence operators that transforms independent features X into dependent variables Y .

Data mining. Let us consider the formulation of the data analysis problem. The general task of data analysis is to find functional transformations Π (correspondence estimates Ξ) and their parameters Θ , transforming the original set of features X into a theoretical set of dependent characteristics

$$Y^T = \Pi(X, \Theta), \quad (2)$$

such that the condition of minimal difference between the observed output characteristics Y and the theoretical Y^T is satisfied.

By data mining models we assume mathematical models that provide solutions to problems (1) and (2), i. e. functional transformations (for parametric models) $\mathcal{M} = \{\Pi(X, \Theta) | \Theta \in D_\Theta\}$, where $\Pi: X \times \Theta \rightarrow Y$, D_Θ – set of admissible values of parameters Θ or parameter space. The model parameters Θ , in the general case, do not coincide with the physical parameters A .

In practice, such models are built based on existing known experimental data, representing the so-called expert-labeled, reference or training data. The specificity of data mining models is the lack of consideration of the physical principles of the processes in the object under study. The model is built according to so-called precedents or existing examples, based on behavioural assessments of which it is planned to predict the behaviour of the object in the future. The most popular data mining models are cluster algorithms, decision trees, associative rules, mathematical functions (analytical models), and neural networks [18].

As data mining methods, we consider computational algorithms μ for finding estimates of unknown parameters Θ of the data mining models, i. e. the method is a mapping $\mu: X \times Y \rightarrow \mathcal{M}$, which associates an arbitrary finite data sample (X, Y) with some algorithm for determining parameters Θ , such that the condition of minimal difference between the observed output characteristics Y and the theoretical Y^T is satisfied. The most popular data mining methods are statistical analysis (regression and variance analysis, data dimensionality reduction), classification and prediction (artificial neural networks, decision trees, k -nearest neighbours, Bayesian networks), cluster analysis, optimisation, association rule search and data visualisation [18].

The experimental data mining diagram is shown in fig. 2. The overall task of data analysis can be divided into components that form the basis of data mining. The main tasks of data mining include classification, regression, cluster analysis, data dimensionality reduction, association rule search and visualisation [18].

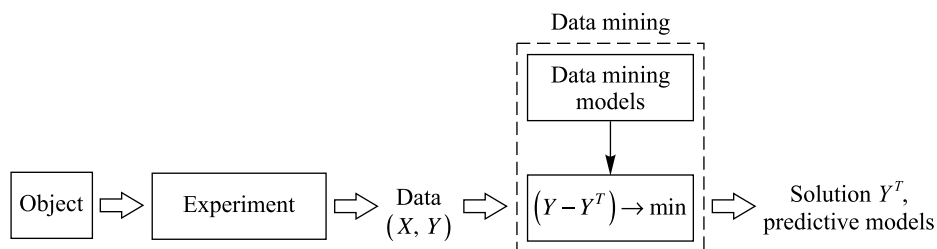


Fig. 2. Scheme of studying an object in an experiment using data mining

An important feature of data models is that they can be used to build a predictive model and obtain an exact solution to the problem. This is often sufficient, for example, for classifying images of cancer cells or multi-exponential smoothing of fluorescence decay kinetic curves [19–21]. The disadvantage of this approach is the impossibility of reproducing a detailed description of the physical processes occurring in the object. To eliminate this drawback, it is necessary to use physical models, for example, based on simulation modelling.

Simulation modelling. The basis of simulation modelling is Monte Carlo methods [22–24], which are stochastic modelling algorithms based on the use of random numbers and statistical probabilities for solving applied problems. Traditionally, Monte Carlo methods find applications in two directions: when checking the reliability of approximate solutions obtained as a result of analytical calculations, i. e. to confirm the developed theories by numerical experiment [15; 25]; to compare simulated and experimental data, followed by a deeper interpretation of the data in terms of simulation models [26; 27]. The presented work deals with the second direction of applications of simulation modelling methods.

In modelling, the investigated object E can be considered as a biophysical process (for example, electronic excitation energy transport in a molecular system or actin polymerisation in a cell) or a biomolecular system (molecules, cells or cell populations). Let object E be described by a mathematical (analytical or simulation) model M (fig. 3).

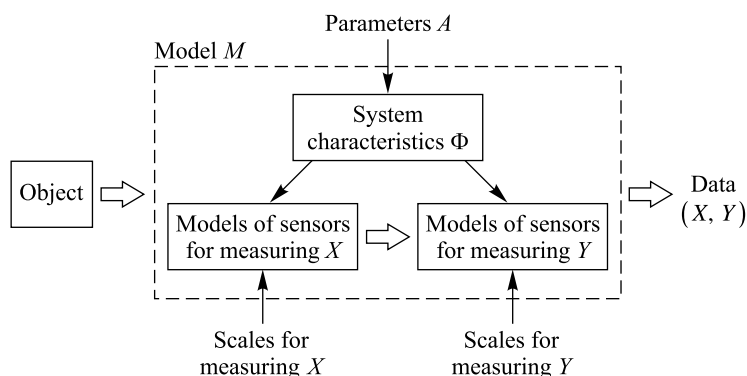


Fig. 3. Scheme of the mathematical model of the object

When constructing a mathematical model, it is necessary to take into account the measurement scales of the features X and the characteristics of the system states Φ (systems of equations or modelling algorithms that describe the behaviour of the object) for given values of the physical parameters of the model A . The characteristics of the system states Φ are represented by a matrix of features X , including response components system or output signals Y . Then the mathematical model of the object can be represented as the expression

$$M = \{X, \Phi, A, F\},$$

where F is the operator of functional transformations

$$Y = F\{X, A\}.$$

The mathematical model describes the real processes occurring in the investigated object. It can be presented in the form of a «white box», since it takes into account the physics of the occurring processes in the object. The dataset for subsequent analysis is a table of characteristics of system states X and output

signals Y . At the initial moment of the investigation, the internal structure and relationships between the components of the object E are known. The task is to clarify the functional dependencies F and estimate the model parameters A . It should be noted that the «black box» models $\mathcal{M}$ in the form of data mining models are analytical approximation models ($F = \Pi$, parameters Θ), not taking into account the physics of the process under study.

An integrated approach to big data analysis. This work suggests to use simulation modelling and data mining methods to study biomolecular systems, a feature of which is the use of simulation modelling algorithms to reproduce biophysical processes in the systems under study. The idea of an integrated approach consists of studying the investigated object using simulation modelling of biophysical processes occurring in it, comparing simulated and the most informative experimental data, selected by the data dimensionality reduction methods, and determining the parameters of physical processes using optimisation algorithms.

A diagram of the studying an object (some biophysical process or biomolecular compound) using the developed integrated approach is shown in fig. 4.

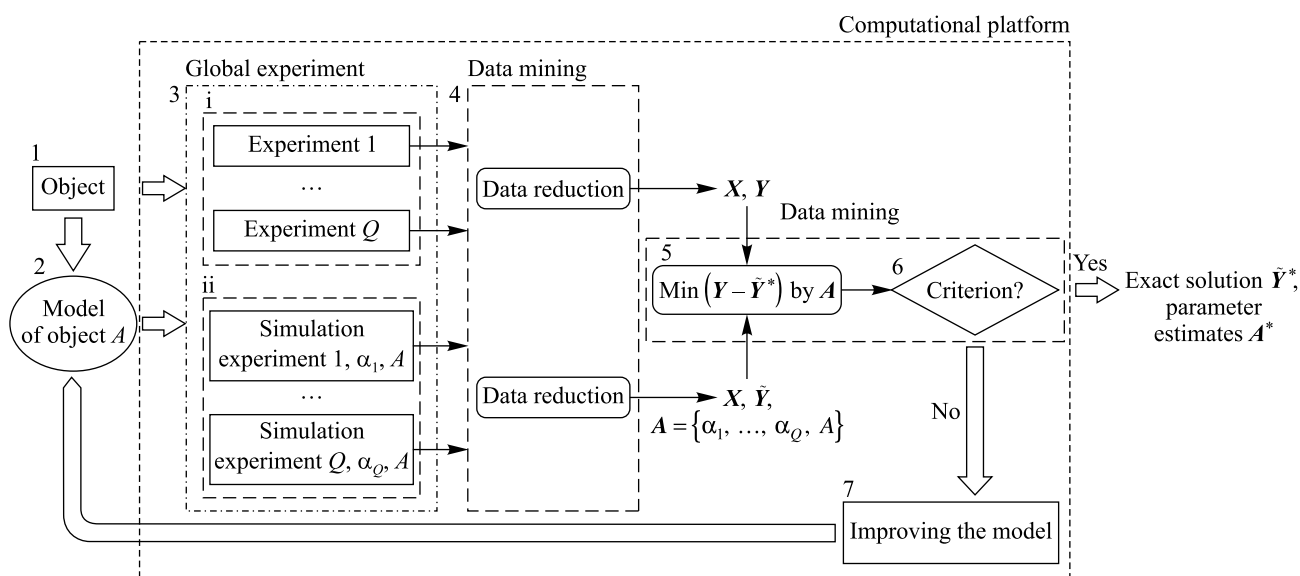


Fig. 4. Scheme of studying an object using the developed integrated approach

The study of the object (block 1) is carried out by considering the physical model of the object (block 2) and a series of Q real and simulated experiments that form a global experiment (block 3). Simulation experiment includes modelling of the experimental equipment and the object. The data of individual experiments are converted to a single format in order to reduce and eliminate inhomogeneities of various distortions associated with specific experiments. Filtering, normalisation, vectorisation, or special data transformations, such as logarithmic, are performed to reduce the effect of outliers. In block 4, data dimensionality reduction is performed. Data are compressed by the dimensionality reduction methods in order to exclude uninformative, redundant data or noise, and essential informative data are extracted. Sets of transformed data from various experiments are collected into a combined dataset (X, Y) for subsequent processing using data mining and simulation modelling methods (block 5). The parameters of individual experiments $\alpha_1, \dots, \alpha_Q$, and the model of object A are collected into a single set A and then refined during the analysis of the combined data. The analysis of individual experiments can be carried out independently or in a complex manner. The advantage of integrated analysis is the combination of data from various experiments into one large set, which provides a generalisation and an increase in the statistical power of the results and, as a consequence, an increase in the accuracy of the analysis. Some parameters A are fixed (they are global for the experiments), limited (in the case of dependent experiments), or remain free for accurate estimation using optimisation methods. Optimisation methods are used to evaluate free or adjustable parameters A^* of the global simulation model of the object, built on the basis of models of individual experiments. If the desired accuracy of the correspondence between the experimental and simulated data is achieved, which is determined by the given statistical criterion in block 6 (for example, the quantitative χ^2 , Kolmogorov – Smirnov and Romanovskii criteria, as well as diagram plots of the weighted residuals, their autocorrelation functions, and histograms [15]), then the analysis process is completed and a solution is provided (an estimated set of parameters and an accurate mathematical model of the object capable of

predicting its behaviour in the pre-cases of a desirable accuracy). Otherwise, in block 7, the description of the object is improved (including the deepening of the object formalisation, collection of new data, changing models, conducting additional experiments, changing the parameters of the object or environment) and move to block 2 to perform the next iteration of data analysis. The presented scheme is a general approach, the specific implementation is determined by the type of the solved problem and should be designed taking into account the specifics of the conducted experiments.

In the integrated approach, various methods and algorithms should be tried, moving from simple models to complex ones, performing a gradual complication of the models and increasing the circumstantiation of the process under consideration. When working with big data, it is necessary to choose an adequate level of refinement of the mathematical model, corresponding to the desired depth of the object investigation, the volume of datasets and the power of the available computing resources.

Error analysis. When carrying out computer modelling, it is important to confirm the adequacy of the simulation models, the reliability, confidence and reproducibility of the results obtained, as well as achieving the desired modelling accuracy. Assuming that the optimal model parameters have been chosen, three stages of confirming its adequacy can be considered, i. e. the model must meet the following requirements [28–30]:

- be physical, based on consideration of the physics of processes «from first principles», which includes the selection of the most accurate laws for describing probability distributions for the random variables and processes under consideration;

- be confirmed by an analytical description or experiment under certain control conditions, various balance equations and internal technical verification tests of algorithms. In the literature, this requirement is often referred to as model verification;

- be confirmed experimentally, for example, to ensure a minimum error when compared with experimental data according to some pre-established statistical criterion. Provided that the first and second requirements are met, the criterion allows to assess the validity or adequacy of the models. The following test results are possible:

- the criterion value is unacceptable to confirm the statistical significance of the model. Therefore, the model is not supported by experimental data and is assumed to be inadequate. Inadequacy may be a consequence of suboptimal selection of model parameters or model inaccuracy. Inadequacy should be eliminated by clarifying the model parameters, expanding the formalisation of the modelled processes, moving to a deeper level of the consideration, or completely replacing the model, achieving an improvement in the value of the criterion;

- the criterion takes optimal values for a large set of models, which corresponds to the limitations of the selected criterion or the redundancy of models (for example, in problems of analysing fluorescence decay curves, this is a large number of exponentials, a high-degree polynomial, a multilayer neural network, a simulation model taking into account the modelling of insignificant processes, not affecting the output characteristic);

- the criterion tends to the best value in an extreme or excessively accurate manner, which corresponds to overtraining of the model. The situation is typical for overfitting a regression model when approximating experimental noise in the data – the model loses an important generalisation property.

The most reliable model is assessed using cross-validation or bootstrap algorithms [31; 32].

Examples of biophysical systems for investigation in integrated data analysis approach. Let us consider the possibilities of applying an integrated approach to the analysis of big data using examples of molecules, biopolymers, proteins and cell systems, studied by fluorescence spectroscopy methods and representing groups of data associated with the processes of electronic excitation energy transfer at the level of molecules and their compounds and with the processes of protein interaction at the cell level. These systems and processes are studied in the construction of molecular photonic artificial antenna systems and in the diagnosis of oncological diseases; they are combined by such an area of experimental research as applied fluorescence spectroscopy. In the experiments, the fluorescence of molecular compounds or luminescent dyes, that mark the molecules of the samples, is studied. The samples are exposed to laser radiation at the excitation wavelength of the molecules or dyes, and the intensity of fluorescence emission is then recorded. Optical processes and molecular systems are studied using the intensity of emitted fluorescence. What is common in the study of objects of these systems are the area of experimental methods for obtaining data, formalisation of the description of objects and their observations, analysis and modelling algorithms, mathematical models used to describe biophysical processes, formalism of data presentation (see table). We adhere to the following scheme for describing the system: object of study – observations or measurements of the object – features or attributes of the object – formulation of the problem to be solved in terms of an integrated approach.

Molecules. The object of study is the process of energy transfer in artificially created molecular systems [1; 33]. Object observations are the optical spectra and fluorescence decay curves recorded for the molecular compounds

of interest under specified experimental conditions. Features are absorption (emission) wavelengths, time counts of photon registration on the detector, physical parameters characterising experimental samples (concentration of molecules, type of solution, temperature, day of measurement, etc.). The dependent variable is the fluorescence intensity at specified times, excitation and emission wavelengths. The problem of regression is solved, namely, finding a model and its parameters that satisfactorily describe the kinetic curves of fluorescence decay. Simulation modelling of electronic excitation energy transfer processes in molecular systems is carried out. In an integrated approach, fluorescence decay curves are grouped in clusters, the medoids of clusters are found, the medoid curves are analysed using simulation models, the result of which is the estimated parameters of energy transfer processes. Different clusters of decay curves are associated with molecular compounds based on the estimated parameters. In the case of a small set of fluorescence decay curves, the integrated approach is reduced to a single analysis of the decay curves using simulation models according to the simulation-based approach [34].

Proteins. The object of study is the processes of diffusion and aggregation of proteins in various environments (for example, proteins involved in the formation of cancer cells [35; 36]). In fluorescence fluctuation spectroscopy experiments, the fluorescence intensity of molecular complexes is recorded, which allows to estimate the size of the protein complex [37]. Observations of the object are PCHs of fluorescence intensity fluctuations for fluorescently-labeled proteins at a given recording time interval. Features are histogram channels represented by the photon frequencies detected during a certain short time interval. The dependent variable is a marker of the type of protein or molecular complex. Simulation modelling of the proteins diffusion and aggregation processes is carried out. In the integrated approach, the grouping of PCHs, the determination of medoids of PCH clusters and the analysis of PCHs using simulation models are performed, the result of which is the estimated parameters of the proteins diffusion and aggregation processes.

In fluorescence spectroscopy experiments conducted on cells (*in vitro* and *in vivo*), fluorescence analysis allows to estimate the parameters of association and dissociation reactions (or in the general case of polymerisation) to molecular protein complexes [38; 39]. Observations are kinetic curves of increase and recovery of fluorescence after photobleaching of proteins. Features are the time of occurred and detected fluorescence emission events of a luminescent protein. The dependent variable is protein fluorescence recorded at the indicated times. The regression problem is solved, namely, finding a model of protein polymerisation and its parameters that satisfactorily describe the fluorescence intensity. Simulation modelling of protein polymerisation processes in a cell is carried out. In the integrated approach, fluorescence curves are processed, data cluster medoids are found and analysed using simulation models, which result in estimated parameters of protein polymerisation processes.

Cells. The object of the study is a cancer disease, determined by the characteristics of cell microobjects in a luminescent image [40; 41]. Observations are highlighted (segmented) cells in the image (contours of nuclei or cytoplasm), affected by disease. Features (properties of segmented microobjects in the image) are cell characteristics obtained as a result of segmentation of cell contours (size, colour, orientation, etc. [19]). The dependent variable is a marker of cell cancerous type or stage of disease. The problem of classifying cells into cancerous (non-cancerous) or determining the stage of the disease is solved. Simulation modelling reproduces the stages of the disease with given parameters. In an integrated approach, the stages of cancer are modelled, parameters corresponding to cancerous (non-cancerous) cells are determined, microobjects of images are classified into one or another type of cell susceptible to a certain stage of the disease. Simulation modelling may not be used if expert solutions are given in the form of labeled images of cancer cells.

Computational platform for the implementation of integrated approach methods and algorithms.

The developed integrated approach to the analysis of big experimental data can be practically implemented in the form of a computing platform or programming environment that combines computational algorithms of mathematical models and analysis methods, as well as auxiliary software tools for data processing. In the structure of the computational approach, the platform integrates implementations of simulation models, analysis algorithms and analysis quality assessment (see fig. 4).

As a demonstrative example of the practical implementation of the developed complex methodology, integrating simulation modelling and data mining algorithms, the computational platform *FluorSimStudio* has been developed for processing fluorescence kinetic curves in time-resolved fluorescence experiments [42]. The user's work is carried out through a web application hosted at <https://dsa-cm.shinyapps.io/FluorSimStudio>. An example of the package interface window is shown in fig. 5. The main interface window consists of nine panels corresponding to six stages of analysis: loading, modelling and clustering data, reducing data dimensionality by the principal component analysis, fitting medoids (data analysis), visualising and interpreting the results, information about the authors of the development, and instructions for using the computational resource.

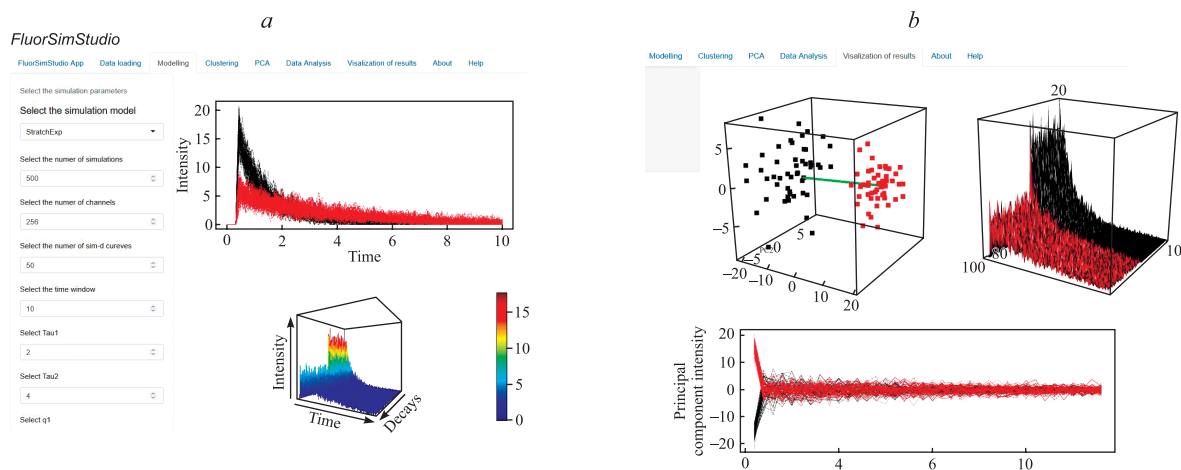


Fig. 5. FluorSimStudio web application interface windows: examples of simulation modelling the stretched-exponential fluorescence decay dataset (a) and analysis results visualisation (b) of clustered fluorescence decay curves

The platform is not intended for data collection and storage, development of new analysis algorithms, organisation of parallelised computational systems for big data analysis. Its main task is to provide the user with computing tools for the implementation of developed simulation models, methods of modelling and analysis of big data, instruments for assessing the quality of analysis, visualisation and interpretation of data.

Results

Application of an integrated approach to the analysis of molecular systems. We consider two examples that confirm the fundamental applicability of the developed integrated approach to the analysis of molecular systems in fluorescence spectroscopy experiments.

Time-resolved fluorescence spectroscopy. The effectiveness of the algorithms of the developed approach was tested during the analysis of fluorophore systems under various parameters of a computational experiment. Simulated time-resolved fluorescence datasets, representing three fluorophore systems and characterised by one-, two- and stretched-exponential fluorescence decay laws were studied [16]. The stretched-exponential model is a represent of the donor fluorescence intensity decay in the presence of Förster type of energy transfer in a donor – acceptor molecular system. The donor fluorescence in three dimensional space can be written as

$$i(t, i_0, q, \tau_D) = i_0 \exp \left\{ -\frac{t}{\tau_D} - q \left(\frac{t}{\tau_D} \right)^{\frac{1}{2}} \right\},$$

where i_0 is the fluorescence intensity at time $t = 0$; $q = 0.5[C_A]/[C_{A0}]$, where C_{A0} and C_A are the critical and actual concentrations of acceptors; τ_D is the fluorescence decay time of donors [16]. The application of the algorithms of the developed approach to the analysis of datasets made it possible to accurately determine the fluorescence lifetimes of fluorophores. The accuracy of the estimated parameters by complex analysis is higher than in the case of using the classical approach based on separate processing of each dataset using analytical models of fluorescence decay (fig. 6, a). The developed approach requires significantly less time and the number of calculations of the theoretical model, and allows faster and more accurate determination of the parameters of biophysical and optical processes in molecular compounds in comparison with the classical method. The use of simulation models of optical-physical processes significantly increases the efficiency of parameter estimation in the case of analysis of complex molecular systems, such as photonic antennas based on metalloporphyrin films or zeolite crystals [43; 44], when the parameters of the molecular environment and the mechanisms of electronic excitation energy transfer, necessary to create accurate analytical models, are unknown.

Fluorescence fluctuation spectroscopy. The effectiveness of the analysis algorithms developed within the framework of the proposed approach was confirmed by simulated and experimental PCH measurements of fluctuations in the fluorescence intensity of the green fluorescent protein GFP-S65T [45; 46]. Analysis of experimental data on the GFPs in cell lysates revealed the presence of monomeric and dimeric forms of proteins (fig. 6, b–f). Monomers of the GFP demonstrate a spherical data cluster in the space of the first two principal

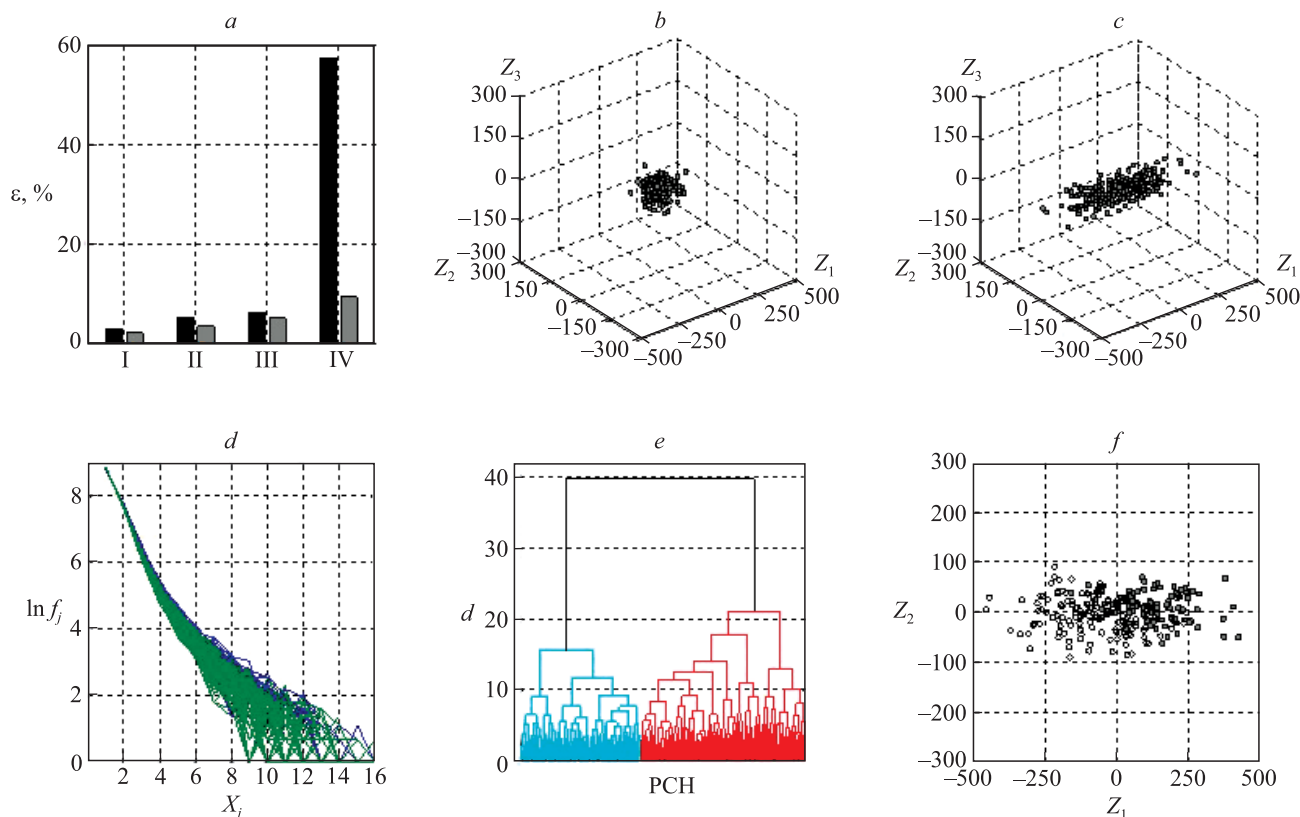


Fig. 6. Examples of the application of an integrated approach to the analysis of molecular compounds in experiments with time-resolved fluorescence (a) and fluorescence fluctuation (b–f) spectroscopies:

- (a) error ε in assessing the accuracy of reconstructing the parameters of simulated fluorescence decay curves of fluorophore systems characterised by one-exponential (I and II), two-exponential (III) and stretched-exponential (IV) laws of fluorescence decay, using classical (black) and developed (gray) methods. Digital labels (I–IV) of the abscissa axis denote the following modelling parameters: fluorescence decay times $\tau_1 = 2$ ns and $\tau_2 = 4$ ns, number of curves is 200, standard deviation of parameters $\sigma = 0.1$ (I); $\tau_1 = 1.4$ ns and $\tau_2 = 2$ ns, number of curves is 200, $\sigma = 0.1$ (II); $\tau_1 = 0.5$ ns and $\tau_2 = 2$ ns, their contributions (normalised to one) $p_1 = 0.2$, $p_2 = 0.8$ and $p_1 = 0.8$, $p_2 = 0.2$, respectively, for two sets of decay curves, number of curves is 200, $\sigma = 0.1$ (III); donor fluorescence decay time $\tau_D = 2$ ns, acceptor concentration q is equal 1 and 0.2 for two sets of decay curves, number of curves is 200, $\sigma = 0.1$ (IV); (b) and (c) are photon counting histograms PCHs of monomeric and dimeric forms of the green fluorescent protein GFP in the coordinates of the most informative components Z_1 , Z_2 and Z_3 , calculated by the principal component method; (d) PCH on a logarithmic scale in the space of the initial features $X_1, X_2, \dots, X_{16}$, f_j are frequencies of occurrence of the number of photons during a certain short time interval; (e) dendrograms of PCH, d is a measure of similarity of clusters; (f) PCH in the space of the first two principal components Z_1 and Z_2 . In illustrations d–f colours and symbols indicate monomeric and dimeric forms of proteins

components (see fig. 6, b), while an elongated ellipsoidal cloud is observed for a mixture of monomeric and dimeric forms of protein compounds (see fig. 6, c). Note that accurate separation of monomeric and dimeric forms of a protein is difficult to achieve using classical analytical methods, which involve a separate analysis of PCHs. Further assessment of the parameters of protein complexes can be made by analysing the medoids of the resulting PCH clusters using classical analysis or simulation algorithms.

Conclusions

The integrated approach to processing big datasets in applied fluorescence spectroscopy has been developed, which is based on simulation modelling and data mining methods for the study of optical processes in biophysical systems. Its main feature is the use of simulation modelling algorithms to reproduce biophysical processes in the systems under study and data mining to determine the most informative data. The effectiveness of the algorithms was verified by analysing simulated and experimental data representing systems of molecules and proteins that are studied in time-resolved fluorescence and fluorescence fluctuation spectroscopy experiments. The developed analysis approach, in comparison with the classical one, quickly and more accurately determines the parameters of biophysical and optical processes in molecular compounds. The proposed methodology of the developed integrated approach was realised in the computational platform *FluorSimStudio*, intended for processing fluorescence decay curves of molecular systems. It provides high productivity of processing

large fluorescence datasets, is hosted on the server and can be used in the educational process and for the study of time-resolved fluorescence spectroscopy systems. By the developed integrated approach, it is possible to increase the accuracy of assessing the studied characteristics of biophysical processes in comparison with the classical approach, based on separate processing of each dataset, to deepen knowledge about the physics and essence of the processes under study, to create new predictive tools when analytical models do not exist or the derivation of analytical solutions is difficult due to increasing complexity of a system represented by big data.

References

1. Lakowicz JR. *Principles of fluorescence spectroscopy*. 3rd edition. New York: Springer; 2006. XXVI, 954 p. DOI: 10.1007/978-0-387-46312-4.
2. Verveer PJ, editor. *Advanced fluorescence microscopy: methods and protocols*. New York: Humana Press; 2015. XI, 294 p. (Methods in molecular biology; volume 1251). DOI: 10.1007/978-1-4939-2080-8.
3. Demchenko AP. *Introduction to fluorescence sensing. Volume 1, Materials and devices*. 3rd edition. Cham: Springer; 2020. XXII, 657 p. DOI: 10.1007/978-3-030-60155-3.
4. Weinacht TC, Pearson BJ. *Time-resolved spectroscopy: an experimental perspective*. Boca Raton: CRC Press; 2019. XII, 358 p. (Textbook series in physical sciences). DOI: 10.1201/9780429440823.
5. Buckup T, Léonard J, editors. *Multidimensional time-resolved spectroscopy*. Cham: Springer; 2019. IX, 320 p. (Topics in current chemistry collections). DOI: 10.1007/978-3-030-02478-9.
6. Gryczynski Z, Gryczynski I. *Practical fluorescence spectroscopy*. Boca Raton: CRC Press; 2020. XX, 772 p. DOI: 10.1201/9781315374758.
7. Cox G, editor. *Fundamentals of fluorescence imaging*. Singapore: Jenny Stanford Publishing; 2019. XVIII, 458 p. DOI: 10.1201/9781351129404.
8. König K, editor. *Multiphoton microscopy and fluorescence lifetime imaging: applications in biology and medicine*. Berlin: Walter de Gruyter; 2018. XXX, 450 p. DOI: 10.1515/9783110429985.
9. Datta R, Heaster TM, Sharick JT, Gillette AA, Skala MC. Fluorescence lifetime imaging microscopy: fundamentals and advances in instrumentation, analysis, and applications. *Journal of Biomedical Optics*. 2020;25(7):071203. DOI: 10.1117/1.JBO.25.7.071203.
10. Datta R, Gillette A, Stefely M, Skala MC. Recent innovations in fluorescence lifetime imaging microscopy for biology and medicine. *Journal of Biomedical Optics*. 2021;26(7):070603. DOI: 10.1117/1.JBO.26.7.070603.
11. Xiao D, Zang Z, Xie W, Sapermsap N, Chen Y, Li DDU. Spatial resolution improved fluorescence lifetime imaging via deep learning. *Optics Express*. 2022;30(7):11479–11494. DOI: 10.1364/OE.451215.
12. Wang Q, Li Y, Xiao D, Zang Z, Jiao Z, Chen Y, et al. Simple and robust deep learning approach for fast fluorescence lifetime imaging. *Sensors*. 2022;22(19):7293. DOI: 10.3390/s22197293.
13. Ji M, Zhong J, Xue R, Su W, Kong Y, Fei Y, et al. Early detection of cervical cancer by fluorescence lifetime imaging microscopy combined with unsupervised machine learning. *International Journal of Molecular Sciences*. 2022;23(19):11476. DOI: 10.3390/ijms231911476.
14. Place BC, Troublefield CA, Murphy RD, Sinai AP, Patwardhan AR. Machine learning based classification of mitochondrial morphologies from fluorescence microscopy images of *Toxoplasma gondii* cysts. *PLOS One*. 2023;18(2):e0280746. DOI: 10.1371/journal.pone.0280746.
15. Yatskou MM. *Computer simulation of energy relaxation and transport in organized porphyrin systems* [dissertation on the Internet]. Wageningen: Ponsen & Looijen Printing Establishment; 2001 [cited 2023 April 4]. 176 p. Available from: <https://edepot.wur.nl/193545>.
16. Yatskou MM, Skakun VV, Apanasovich VV. Method for processing fluorescence decay kinetic curves using data mining algorithms. *Journal of Applied Spectroscopy*. 2020;87(2):333–344. DOI: 10.1007/s10812-020-01004-3.
17. Yatskou MM, Apanasovich VV. Simulation modelling and machine learning platform for processing fluorescence spectroscopy data. In: Tuzikov AV, Belotserkovsky AM, Lukashevich MM, editors. *Pattern recognition and information processing. Revised selected papers of the 15th International conference; 2021 September 21–24; Minsk, Belarus*. Cham: Springer; 2022. p. 178–190 (Communications in computer and information science; volume 1562). DOI: 10.1007/978-3-030-98883-8_13.
18. Murphy KP. *Probabilistic machine learning: an introduction* [Internet]. Cambridge: MIT Press; 2022 [cited 2022 July 7]. 864 p. Available from: <https://mitpress.mit.edu/9780262369305/probabilistic-machine-learning>.
19. Lisitsa Y, Yatskou M, Skakun V, Apanasovich V. Classification methods for the analysis of segmented objects on fluorescent images of cancer cells. *Vestnik of Polotsk State University. Part C, Fundamental Sciences* [Internet]. 2020 [cited 2023 November 1];4: 15–22. Available from: <https://journals.psu.by/fundamental/article/view/440>. Russian.
20. Apanasovich VV, Novikov EG, Yatskov NN, Koehorst RBM, Schaafsma TJ, van Hoek A. Study of the Zn-porphyrin structure by fluorescence spectroscopy methods. *Journal of Applied Spectroscopy*. 1999;66(4):613–616. DOI: 10.1007/BF02675396.
21. Meyer M, Yatskou MM, Pfenninger M, Huber S, Calzaferri G, Digris A, et al. Excitation energy migration in a photonic dye-zeolite antenna: computational techniques. *Journal of Computational Methods in Science and Engineering*. 2003;3(3):395–402. DOI: 10.3233/JCM-2003-3303.
22. Dimov IT. *Monte Carlo methods for applied scientists*. Singapore: World Scientific Publishing; 2008. XV, 291 p. DOI: 10.1142/2813.
23. Rubinstein RY, Kroese DP. *Simulation and the Monte Carlo method*. 3rd edition. Hoboken: John Wiley & Sons; 2017. XVII, 414 p. (Wiley series in probability and statistics). DOI: 10.1002/9781118631980.
24. Binder K, Heermann DW. *Monte Carlo simulation in statistical physics: an introduction*. 6th edition. Cham: Springer; 2019. XVII, 258 p. (Graduate texts in physics). DOI: 10.1007/978-3-030-10758-1.
25. Halavatyi AA, Nazarov PV, Al Tanoury Z, Apanasovich VV, Yatskou MM, Friederich E. A mathematical model of actin filament turnover for fitting FRAP data. *European Biophysics Journal*. 2010;39(4):669–677. DOI: 10.1007/s00249-009-0558-2.

26. Apanasovich VV, Novikov EG, Yatskov NN. Data analysis in time-resolved fluorescence spectroscopy using computer simulation. In: Thompson RB, editor. *Advances in fluorescence sensing technology III. Proceedings of BIOS'97, part of Photonics West; 1997 February 8–14; San Jose, USA*. Bellingham: SPIE; 1997. p. 515–522 (Proceedings of SPIE; volume 2980). DOI: 10.1117/12.273558.
27. Apanasovich VV, Novikov EG, Yatskov NN. Analysis of the decay kinetics of fluorescence of complex molecular systems using the Monte Carlo method. *Journal of Applied Spectroscopy*. 2000;67(5):842–851. DOI: 10.1023/A:1004111716211.
28. Durán JM. *Computer simulations in science and engineering: concepts, practices, perspectives*. Cham: Springer; 2018. XXI, 209 p. (The frontiers collection). DOI: 10.1007/978-3-319-90882-3.
29. Zeigler BP, Muzy A, Kofman E. *Theory of modeling and simulation: discrete event and iterative system computational foundations*. 3rd edition. [S. l.]: Academic Press; 2018. XXIV, 667 p. DOI: 10.1016/C2016-0-03987-6.
30. Tang J, Leu G, Abbass HA. *Simulation and computational red teaming for problem solving*. Hoboken: John Wiley & Sons; 2020. XXVII, 464 p. (IEEE Press series on computational intelligence). DOI: 10.1002/9781119527183.
31. Kohavi R. A study of cross-validation and bootstrap for accuracy estimation and model selection. In: *IJCAI'95. Proceedings of the 14th International joint conference on artificial intelligence; 1995 August 20–25; Montreal, Canada. Volume 2*. San Francisco: Morgan Kaufmann Publishers; 1995. p. 1137–1143.
32. Liu L, Özsu MT, editors. *Encyclopedia of database systems*. New York: Springer; 2009. CCCXLV, 4355 p. DOI: 10.1007/978-0-387-39940-9.
33. Yatskou MM, Donker H, Koehorst RBM, van Hoek A, Schaafsma TJ. A study of energy transfer processes in zinc-porphyrin films using Monte Carlo simulation of fluorescence decay. *Chemical Physics Letters*. 2001;345(1–2):141–150. DOI: 10.1016/S0009-2614(01)00867-3.
34. Yatskou MM, Donker H, Novikov EG, Koehorst RBM, van Hoek A, Apanasovich VV, et al. Nonisotropic excitation energy transport in organized molecular systems: Monte Carlo simulation-based analysis of fluorescence and fluorescence anisotropy decay. *The Journal of Physical Chemistry A*. 2001;105(41):9498–9508. DOI: 10.1021/jp0044227.
35. Giganti A, Friederich E. The actin cytoskeleton as a therapeutic target: state of the art and future directions. In: Meijer L, Jézéquel A, Roberge M, editors. *Cell cycle regulators as therapeutic targets*. Roscoff: Life in Progress Editions; 2003. p. 511–525 (Progress in cell cycle research; volume 5). PMID: 14593746.
36. Pollard TD. Actin and actin-binding proteins. *Cold Spring Harbor Perspectives in Biology*. 2016;8(8):a018226. DOI: 10.1101/cshperspect.a018226.
37. Kitamura A, Kinjo M. State-of-the-art fluorescence fluctuation-based spectroscopic techniques for the study of protein aggregation. *International Journal of Molecular Sciences*. 2018;19(4):964. DOI: 10.3390/ijms19040964.
38. Halavatyi AA, Nazarov PV, Medves S, van Troys M, Ampe C, Yatskou M, et al. An integrative simulation model linking major biochemical reactions of actin-polymerization to structural properties of actin filaments. *Biophysical Chemistry*. 2009;140(1–3):24–34. DOI: 10.1016/j.bpc.2008.11.006.
39. Al Tanoury Z, Schaffner-Reckinger E, Halavatyi A, Hoffmann C, Moes M, Hadzic E, et al. Quantitative kinetic study of the actin-bundling protein L-plastin and of its impact on actin turn-over. *PLOS One*. 2010;5(2):e9210. DOI: 10.1371/journal.pone.0009210.
40. Lisitsa EV, Yatskou MM, Apanasovich VV, Apanasovich TV, Shytsik MM. Simulation model for three-channel luminescent images of cancer cell populations. *Journal of Applied Spectroscopy*. 2015;81(6):996–1003. DOI: 10.1007/s10812-015-0041-z.
41. Lisitsa YV, Yatskou MM, Apanasovich VV, Apanasovich TV. Algorithm for automatic segmentation of nuclear boundaries in cancer cells in three-channel luminescent images. *Journal of Applied Spectroscopy*. 2015;82(4):634–643. DOI: 10.1007/s10812-015-0156-2.
42. Yatskou MM, Apanasovich VV. Computational platform FluorSimStudio for processing kinetic curves of fluorescence decay using simulation modeling and data mining algorithms. *Journal of Applied Spectroscopy*. 2021;88(3):571–579. DOI: 10.1007/s10812-021-01211-6.
43. Yatskov NN, Apanasovich VV, Koehorst RBM, van Hoek A, Schaafsma TJ. Electronic spectra and fluorescence polarization kinetics of thin Zn-porphyrin films. *Journal of Applied Spectroscopy*. 2003;70(3):372–377. DOI: 10.1023/A:1025177320845.
44. Yatskou MM, Meyer M, Huber S, Pfenniger M, Calzaferri G. Electronic excitation energy migration in a photonic dye-zeolite antenna. *ChemPhysChem*. 2003;4(6):567–587. DOI: 10.1002/cphc.200300567.
45. Yatskou MM, Skakun VV, Nederveen-Schippers L, Kortholt A, Apanasovich VV. Complex analysis of fluorescence intensity fluctuations of molecular compounds. *Journal of Applied Spectroscopy*. 2020;87(4):685–692. DOI: 10.1007/s10812-020-01055-6.
46. Skakun VV, Yatskou MM, Nederveen-Schippers L, Kortholt A, Apanasovich VV. Component analysis of photon counting histograms in fluorescence fluctuation spectroscopy experiments. *Journal of Applied Spectroscopy*. 2022;89(5):930–939. DOI: 10.1007/s10812-022-01450-1.

Received 07.12.2023 / revised 07.12.2023 / accepted 15.12.2023.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЛИДАРНЫХ ИЗМЕРЕНИЙ КОНЦЕНТРАЦИИ МОЛЕКУЛ ГАЛОИДОВОДОРОДОВ В АТМОСФЕРЕ МЕТОДОМ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА

В. Е. ПРИВАЛОВ¹⁾, В. Г. ШЕМАНИН^{2), 3)}, В. В. ДЬЯЧЕНКО³⁾

¹⁾Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
ул. Политехническая, 29, 195251, г. Санкт-Петербург, Россия

²⁾Филиал Белгородского государственного технологического университета им. В. Г. Шухова
в г. Новороссийске, ул. Мысхакское шоссе, 75, 353919, г. Новороссийск, Россия

³⁾Новороссийский политехнический институт (филиал)
Кубанского государственного технологического университета,
ул. Карла Маркса, 20, 353900, г. Новороссийск, Россия

Выполнено компьютерное моделирование лидара комбинационного рассеяния света для дистанционного измерения содержания молекул галоидоводородов на уровне предельно допустимой концентрации и выше, и определены оптимальные параметры такого лидара. С использованием предложенного ранее варианта лидарного уравнения для комбинационного рассеяния света оценена возможность лидарных измерений концентрации исследуемых молекул на заданном уровне в атмосферном пограничном слое при горизонтальном зондировании на расстоянии до 1500 м в режиме синхронного счета фотонов. В этом уравнении учтены конечная ширина лазерной линии и аппаратная функция лидара комбинационного рассеяния света при зондировании молекул галоидоводородов в атмосферном пограничном слое, а также спектральная зависимость дифференциальных сечений полос колебательного комбинационного рассеяния света данными молекулами, коэффициентов ослабления лазерного излучения в атмосфере и спектральная чувствительность фотоприемника. Установлено, что предложенный лидар комбинационного рассеяния света позволяет измерить содержание молекул галоидоводородов на уровне предельно допустимой концентрации на расстоянии до 89 м (для бромоводорода), 277 м (для фтороводорода) и почти 1486 м (для хлороводорода).

Ключевые слова: лидар комбинационного рассеяния света; лазерное излучение; молекулы галоидоводородов; расстояние зондирования; время измерения.

Благодарность. Работа выполнена при финансовой поддержке грантов Российского фонда фундаментальных исследований (проекты 19-42-230004 и 19-45-230009).

Образец цитирования:

Привалов ВЕ, Шеманин ВГ, Дьяченко ВВ. Моделирование лидарных измерений концентрации молекул галоидоводородов в атмосфере методом комбинационного рассеяния света. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2024;1:16–25.
EDN: JZSPAN

For citation:

Privalov VE, Shemanin VG, Dyachenko VV. Simulation of lidar measurements of the concentration of hydrogen halide molecules in the atmosphere using the Raman method. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2024;1:16–25. Russian.
EDN: JZSPAN

Авторы:

Вадим Евгеньевич Привалов – доктор физико-математических наук, профессор; профессор кафедры физики Физико-механического института.

Валерий Геннадьевич Шеманин – доктор физико-математических наук; профессор кафедры технических дисциплин²⁾, главный научный сотрудник кафедры инженерных дисциплин и управления³⁾.

Владимир Викторович Дьяченко – доктор географических наук; профессор кафедры инженерных дисциплин и управления.

Authors:

Vadim E. Privalov, doctor of science (physics and mathematics), full professor; professor at the department of physics, Institute of Physics and Mechanics.

vaevpriv@yandex.ru
<https://orcid.org/0000-0003-2904-7382>

Valery G. Shemanin, doctor of science (physics and mathematics); professor at the department of technical sciences^b and chief researcher at the department of engineering sciences and management^c.

vshemanin@mail.ru
<https://orcid.org/0000-0003-0707-489X>

Vladimir V. Dyachenko, doctor of science (geography); professor at the department of engineering sciences and management.
v-v-d@mail.ru

<https://orcid.org/0000-0003-0479-2909>

SIMULATION OF LIDAR MEASUREMENTS OF THE CONCENTRATION OF HYDROGEN HALIDE MOLECULES IN THE ATMOSPHERE USING THE RAMAN METHOD

V. E. PRIVALOV^a, V. G. SHEMANIN^{b, c}, V. V. DYACHENKO^c

^aPeter the Great St. Petersburg Polytechnic University,

29 Politekhnikeskaya Street, Saint Petersburg 195251, Russia

^bBranch of the Belgorod State Technological University named after V. G. Shukhov in Novorossiysk,

75 Myskhakskoe shosse Street, Novorossiysk 353919, Russia

^cNovorossiysk Polytechnic Institute (branch), Kuban State Technological University,

20 Karla Marksa Street, Novorossiysk 353900, Russia

Corresponding author: V. G. Shemanin (vshemanin@mail.ru)

Computer simulation of the Raman lidar for remote measurement of the hydrogen halide molecules concentration at the maximum permissible concentration level and above was performed and the optimal parameters of such lidar were determined. Using the previously proposed variant of the Raman lidar equation its parameters estimation were made for lidar measurements of the studied molecules of concentration at a given level in the atmospheric boundary layer during horizontal ranging at the distance up to 1500 m in the synchronous photon counting mode. This equation takes into account the finite width of the laser line and the hardware function of the Raman lidar, as well as the spectral dependence of the vibrational Raman differential cross sections of hydrogen halide molecules, the extinction coefficients of the laser radiation in the atmosphere and the photodetector spectral sensitivity. It was found that the proposed Raman lidar can measure the concentration of hydrogen halide molecules at the maximum permissible concentration level at the distance up to 89 m (for hydrogen bromide), 277 m (for hydrogen fluoride) and almost 1486 m (for hydrogen chloride).

Keywords: Raman lidar; laser radiation; hydrogen halide molecules; ranging distance; measurement time.

Acknowledgements. This work was carried out with the financial support of the Russian Foundation for Basic Research grants (projects 19-42-230004 and 19-45-230009).

Введение

Галоидоводороды – фтороводород (HF), хлороводород (HCl) и бромоводород (HBr) – неорганические вещества, в состав которых входит водород¹ [1]. Они являются неизменными компонентами газовых выбросов, загрязняющих атмосферу на ядерно-химических, газо- и нефтехимических предприятиях. К примеру, хлороводород – это бесцветный газ, дымящий во влажном воздухе. Он легко растворяется в воде (до 500 объемов газа на 1 объем воды), а образующаяся при этом кислота оказывает прижигающее действие на слизистые оболочки и кожу. Так как хлороводород тяжелее воздуха и растворим в воде, он может накапливаться и перемещаться как по поверхности земли, так и по воде. Развитие химии и технологии соединений фтора привело к появлению многочисленных фторсодержащих продуктов. В последнее время фтор стал основой ряда крупномасштабных производств, выпускающих соединения, без которых не обходится ни одна отрасль промышленности. Особенно большие количества фтороводорода выделяются при нанесении на изделия гальванических покрытий (фосфатировании).

Измерение концентрации молекул галоидоводородов проводят газохроматографическим методом или экспресс-методом с использованием индикаторных трубок. Газохроматографический метод достаточно трудоемкий, но с его помощью можно отслеживать загрязнения на уровне предельно допустимых концентраций (ПДК). Метод с применением индикаторных трубок более быстрый, но менее чувствительный. По этой причине интерес представляет оценка потенциальных возможностей системы лазерного дистанционного зондирования атмосферы вокруг источников выбросов с функцией непрерывного мониторинга, корректировки алгоритма работы системы, может, даже с использованием машинного обучения для своевременного обнаружения и отслеживания перемещения облака загрязнения галоидоводородов при аварийных ситуациях.

Одним из вариантов лазерного дистанционного зондирования молекул галоидоводородов в атмосфере может быть лидар комбинационного рассеяния света (КРС) [1–5], обеспечивающий измерение их концентраций на уровне ПДК и выше. Значение ПДК² [1] будет использовано в качестве нижней границы концентрации молекул в атмосферном пограничном слое.

¹ГН 2.1.6.3492-17. Предельно допустимые концентрации (ПДК) загрязняющих веществ в атмосферном воздухе городских и сельских поселений (с изменениями, утвержденными постановлением Главного государственного санитарного врача Российской Федерации от 31.05.2018 г. № 37) / Федер. служба по надзору в сфере защиты прав потребителей и благополучия человека. М. : Федер. центр гигиены и эпидемиологии Роспотребнадзора, 2019. 55 с.

²Там же.

Ранее в работах [3; 6; 7] было предложено лидарное уравнение для КРС газовыми молекулами с учетом конечной ширины лазерной линии. Используя это уравнение и уточнив его решение [6; 7], оценим возможность лидарных измерений концентрации молекул галоидоводородов на заданном уровне в атмосферном пограничном слое при горизонтальном зондировании на расстоянии до 1500 м в режиме синхронного счета фотонов. Уточнить решение лидарного уравнения для измерения концентрации исследуемых молекул позволит учет конечной ширины лазерной линии, соотношения полуширин полос КРС и аппаратной функции лидара.

Целью настоящей работы являются компьютерное моделирование лидара КРС для дистанционного измерения концентрации молекул галоидоводородов на уровне ПДК и выше в атмосферном пограничном слое на расстоянии до 1500 м и определение оптимальных параметров такого лидара.

Лидар КРС и лидарное уравнение

Оптическая схема лидара КРС (рис. 1) построена, как и в работах [1–3]. В качестве зондирующего излучения используется излучение третьей, второй и первой гармоник YAG: Nd-лазера с длинами волн 355; 532 и 1064 нм, длительностью импульсов $\tau_0 = 10$ нс и энергией в импульсе 20; 40 и 100 мДж соответственно при частоте следования лазерных импульсов до 10 кГц [8]. Излучение лазера 8 направляется глухим зеркалом 4 вдоль оси приемного телескопа [1; 3], а излучение КРС исследуемыми молекулами в направлении назад собирается приемным телескопом типа Ньютона со сферическим зеркалом 1 диаметром 400 мм и фокусируется линзовым объективом 2 в волоконный ввод 3 микроспектрометра 9 типа FSD-8, работающего на линии с персональным компьютером (ПК).

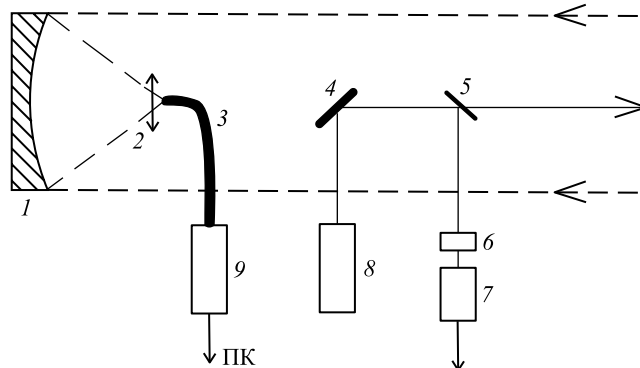


Рис. 1. Оптическая схема лидара КРС:

1 – сферическое зеркало приемного телескопа; 2 – линзовый объектив; 3 – волоконный ввод;
4 – глухое зеркало; 5 – стеклянная пластина; 6 – интерференционный светофильтр;
7 – фотоприемник; 8 – лазер; 9 – микроспектрометр

Fig. 1. Lidar optical layout:

1 – spherical mirror of the receiving telescope; 2 – lens objective; 3 – fiber input;
4 – blind mirror; 5 – glass plate; 6 – interference light filter;
7 – photodetector; 8 – laser; 9 – microspectrometer

Часть лазерного излучения направляется стеклянной пластиной 5 через интерференционные светофильтры 6, имеющие максимумы пропускания на длинах волн 355; 532 и 1064 нм, на фотоприемник 7, напряжение с которого записывается платой сбора данных в ПК для контроля энергии лазерного импульса и определения начала отсчета времени измерения.

Число фотонов излучения КРС исследуемыми молекулами на фотоприемнике лидара можно получить из лидарного уравнения для КРС в направлении назад в режиме счета фотонов [3; 6] как интеграл в интервале от $\nu_R - \Gamma_a$ до $\nu_R + \Gamma_a$ [6]:

$$n(\nu, z) = \frac{n_0 c \tau_1 G(z) f t S_0 N(z) \frac{d\sigma}{d\Omega} \int_{\nu_R - \Gamma_a}^{\nu_R + \Gamma_a} T_0(\nu_0, z) T(\nu_R, z) \Phi(\nu) A(\nu) d\nu}{2z^2}, \quad (1)$$

где $n(\nu, z)$ – число фотонов, зарегистрированное фотоприемником лидара на частоте ν_R КРС с расстояния зондирования z ; n_0 – число фотонов на частоте ν_0 лазерного излучения, а $\Phi(\nu)$ – их распределение (будем считать его гауссовым распределением с полушириной Γ_0) [8–10]; c – скорость света; τ_1 – время одного измерения; $G(z)$ – геометрическая функция лидара ($0 < G(z) < 1$) [1; 9]; f – частота следования ла-

зерных импульсов; t – время измерения (накопления сигнала); S_0 – площадь приемной апертуры телескопа; $N(z)$ – концентрация исследуемых молекул; $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ – дифференциальное сечение КРС исследуемыми молекулами; $T_0(v_0, z)$ и $T(v_R, z)$ – пропускание атмосферы, эти сомножители определяются выражениями [1; 9]

$$T_0(v_0, z) = \exp \left[- \int_0^z \alpha(v_0, r) dr \right], \quad T(v_R, z) = \exp \left[- \int_0^z \alpha(v_R, r) dr \right],$$

здесь $\alpha(v_0, r)$ и $\alpha(v_R, r)$ – коэффициенты ослабления на частотах лазерного излучения и КРС исследуемыми молекулами; $A(v)$ – аппаратная функция (спектральный коэффициент пропускания приемной системы лидара) [3; 5; 9], имеющая лоренцеву форму и настроенная точно на частоту v_R полосы КРС молекулами галоидоводородов с полушириной Γ_a , которая больше, чем Γ_R и Γ_0 . Перепишем уравнение (1) в виде

$$n(v, z) = \frac{B}{z^2} N(z) t I(v, z). \quad (2)$$

В этом выражении введены константа B , определяемая как

$$B = \frac{c\tau_1}{2} S_0 f,$$

и функция $I(v, z)$, которая с использованием интеграла ошибок [6; 7] может быть представлена в виде

$$I(v, z) = G(z) n_0 \frac{d\sigma}{d\Omega} \cdot 0,34 K_1 \xi(v) T_0(v_0, z) T(v_R, z),$$

где K_1 – лидарная константа на частоте v_0 лазерного излучения (измерена экспериментально в работе [11]); $\xi(v)$ – относительная спектральная чувствительность фотоприемника на частоте v_R КРС (взята из справочника [12]).

Компьютерное моделирование лидарного уравнения

Будем считать, что дифференциальное сечение КРС исследуемыми молекулами постоянно внутри интервала интегрирования по частоте, как и коэффициенты ослабления на частотах лазерного излучения и КРС этими молекулами [13]. В качестве меры эффективности лидара будем использовать время измерения из уравнения (2):

$$t = \frac{n(v, z) z^2}{B N(z) I(v, z)}. \quad (3)$$

Рассмотрим однократное КРС и однородную атмосферу [1; 9; 13]. Значения ПДК и частоты собственных колебаний молекул $\tilde{\nu}$ взяты из работ [1; 9; 11; 14]. Значения дифференциальных сечений КРС для всех молекул и выбранных длин волн лазерного излучения (355; 532 и 1064 нм) определены по данным экспериментальных измерений, проведенных при комнатной температуре и нормальном давлении на длине волны 532 нм для водорода [15] и фтороводорода [3] и на длине волны 435,8 нм для хлороводорода [9; 14] и бромоводорода [14]. Расчет выполнен с учетом зависимости $\frac{1}{\lambda^4}$, а его результаты собраны в таблицу.

Основные параметры моделирования лидарного уравнения

The main parameters for the lidar equation simulation

Длина волны, нм	Частота, ГГц	Дифференциальное сечение КРС, 10^{30} см^2	Коэффициент ослабления на частоте лазерного излучения, км^{-1}	Коэффициент ослабления на частоте КРС, км^{-1}	Относительная спектральная чувствительность фотоприемника
Фтороводород ($\tilde{\nu} = 3959 \text{ см}^{-1}$; ПДК = $0,02 \text{ мг/м}^3$ ($6,02 \cdot 10^{17} \text{ м}^{-3}$))					
355	845	15,03	0,31	–	–
413,1	726	–	–	0,24	0,58
532	564	2,98	0,16	–	–
674	445	–	–	0,15	0,93

Окончание таблицы
Ending of the table

Длина волны, нм	Частота, ГГц	Дифференциальное сечение КРС, 10^{30} см^2	Коэффициент ослабления на частоте лазерного излучения, км^{-1}	Коэффициент ослабления на частоте КРС, км^{-1}	Относительная спектральная чувствительность фотоприемника
1064	282	0,19	0,12	—	—
1838,4	163	—	—	0,095	0,02
435,8	688	—	—	—	—
Хлороводород ($\tilde{\nu} = 2886 \text{ см}^{-1}$; ПДК = $0,2 \text{ мг/м}^3$ ($3,07 \cdot 10^{18} \text{ м}^{-3}$))					
355	845	6,15	0,31	—	—
395,5	759	—	—	0,25	0,54
532	564	1,22	0,16	—	—
628,5	477	—	—	0,15	0,98
1064	282	0,08	0,12	—	—
1535,5	195	—	—	0,097	0,05
435,8	688	2,7	—	—	—
Бромоводород ($\tilde{\nu} = 2560 \text{ см}^{-1}$; ПДК = $0,1 \text{ мг/м}^3$ ($1,23 \cdot 10^{17} \text{ м}^{-3}$))					
355	845	10,00	0,31	—	—
391,9	766	—	—	0,24	0,55
532	564	1,98	0,16	—	—
619,3	484	—	—	0,15	1,00
1064	282	0,12	0,12	—	—
1462,3	205	—	—	0,11	0,05
435,8	688	4,4	—	—	—

Пр и м е ч а н и е. Выделенное курсивом значение дифференциального сечения КРС для фтороводорода взято из статьи [3], для хлороводорода – из работ [9; 14], для бромоводорода – из работы [14].

Приведенные в таблице значения коэффициентов ослабления лазерного излучения в атмосфере для указанных частот взяты из работы [12]. Поперечное сечение зеркала приемного телескопа лидара принято равным $0,12 \text{ м}^2$, а шаг по расстоянию выбран равным $7,5 \text{ м}$, что соответствует времени одного измерения 50 нс , за которое может быть зарегистрировано 200 фотонов [10].

Результаты и их обсуждение

Чтобы оценить возможности предложенного лидара КРС по зондированию молекул HF , HCl и HBr , рассмотрим компьютерное моделирование уравнения (3), полагая, что $G(z) = 1$, а концентрация исследуемых молекул $N(z)$ достигает ПДК, указанных в таблице. Решим уравнение (3) для длин волн лазерного излучения 355 ; 532 и 1064 нм с энергиями в импульсе 20 ; 40 и 100 мДж соответственно и частотой следования лазерных импульсов 10 кГц в диапазоне расстояний зондирования от 5 до 1500 м . В качестве примера для этого случая на рис. 2, а, представлены результаты решения уравнения (3) для молекул хлороводорода с концентрацией $1,0 \cdot 10^{18} \text{ м}^{-3}$ как зависимость времени измерения (в логарифмическом масштабе) от расстояния зондирования.

Если ограничить время измерения величиной 2000 с ($\approx 30 \text{ мин}$ (максимальная продолжительность отбора проб загрязняющих веществ при определении разовых концентраций в соответствии с п. 4.1 ГОСТ 17.2.3.01-86³)), то диапазон расстояний зондирования уменьшится до 200 м . Результаты решения уравнения (3) для молекул хлороводорода с концентрацией $1,0 \cdot 10^{18} \text{ м}^{-3}$ в таком случае представлены на рис. 2, б.

³ГОСТ 17.2.3.01-86. Охрана природы. Атмосфера. Правила контроля качества воздуха населенных пунктов. Взамен ГОСТ 17.2.3.01-77 ; введ. 01.01.1987. М. : Стандартиформ, 2005. 4 с.

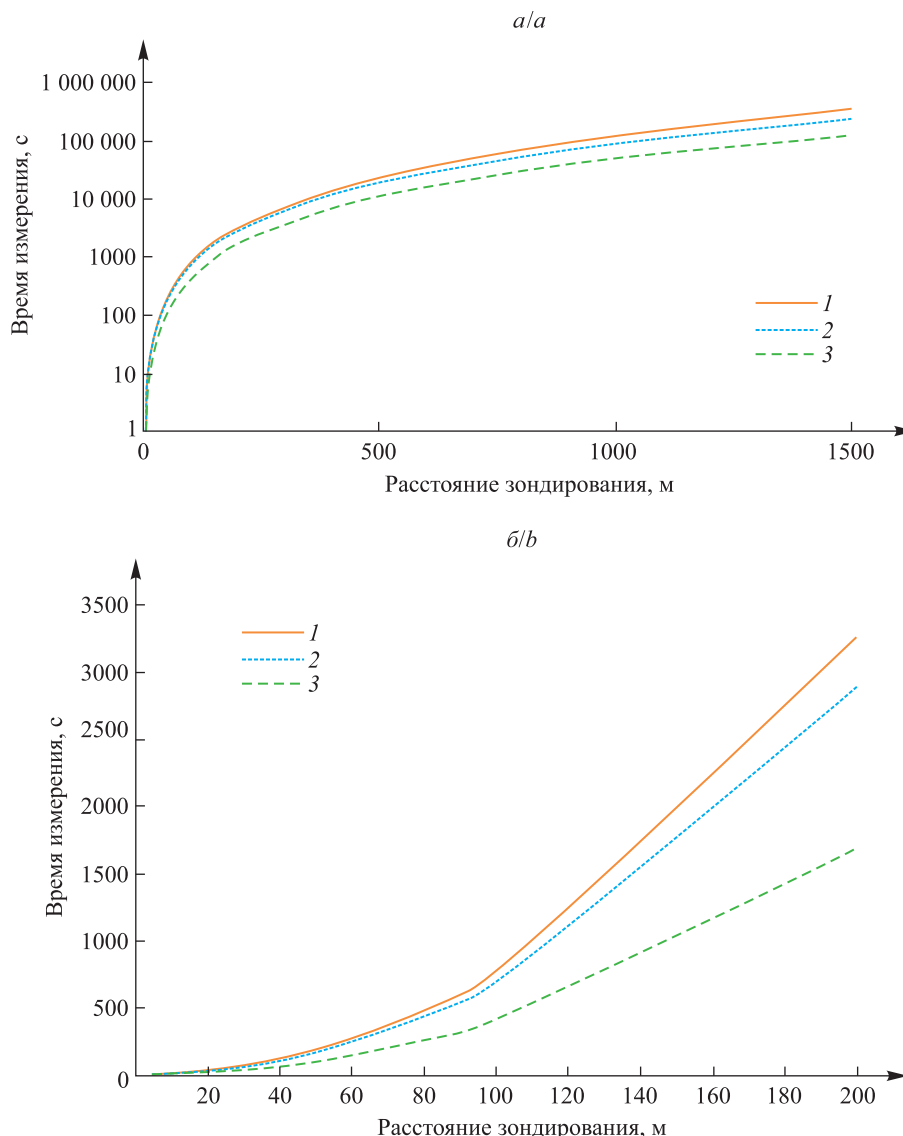


Рис. 2. Графики зависимости времени измерения (в логарифмическом масштабе) от расстояния зондирования в диапазоне до 1500 м (а) и 200 м (б) для молекул хлороводорода с концентрацией $1,0 \cdot 10^{18} \text{ м}^{-3}$ в атмосферном пограничном слое при выбранных длинах волн лазерного излучения (1 – 355 нм; 2 – 532 нм; 3 – 1064 нм)

Fig. 2. The plots of the logarithmic dependence of the measurement time on the ranging distance in the range up to 1500 m (a) and 200 m (b) for hydrogen chloride molecules with a concentration of $1.0 \cdot 10^{18} \text{ м}^{-3}$ in the atmospheric boundary layer at selected laser radiation wavelengths (1 – 355 nm; 2 – 532 nm; 3 – 1064 nm)

Для сравнения с кривыми, приведенными на рис. 2, б, на рис. 3 представлены результаты решения уравнения (3) для молекул фтороводорода с концентрацией $1,0 \cdot 10^{17} \text{ м}^{-3}$ как зависимость времени измерения от расстояния зондирования в диапазоне до 200 м, которые находятся в хорошем соответствии с результатами работы [3]. Кривые 1 и 2 практически совпали. Аналогичные зависимости для молекул бромоводорода с той же концентрацией ($1,0 \cdot 10^{17} \text{ м}^{-3}$) представлены на рис. 4.

Как следует из уравнения (3), в нашей экспериментальной ситуации время измерения убывает обратно пропорционально концентрации исследуемых молекул и растет с увеличением расстояния зондирования. Кроме того, из сравнения рис. 2–4 видно, что это связано и со спектральной зависимостью дифференциальных сечений полос колебательного КРС данными молекулами, коэффициентов ослабления лазерного излучения в атмосфере и спектральной чувствительностью фотоприемника. Взятые для моделирования разные значения энергии лазерного импульса на выбранных длинах волн также вносят свой вклад в эти зависимости. В итоге получается, что при зондировании молекул HCl и HBr на расстоянии до 200 м наименьшее время измерения достигается на длине волны лазерного излучения 1064 нм, а при зондировании молекул HF – на длине волны 355 нм.

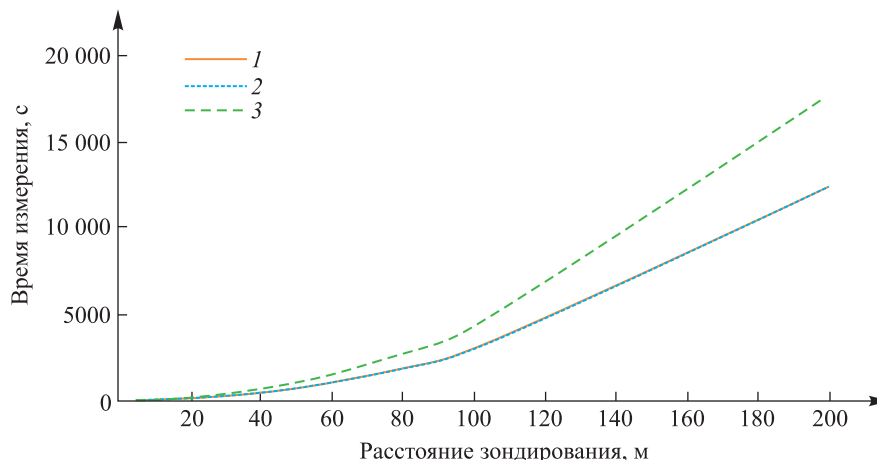


Рис. 3. Графики зависимости времени измерения (в логарифмическом масштабе) от расстояния зондирования для молекул фтороводорода с концентрацией $1,0 \cdot 10^{17} \text{ м}^{-3}$ в атмосферном пограничном слое при выбранных длинах волн лазерного излучения (1 – 355 нм; 2 – 532 нм; 3 – 1064 нм)

Fig. 3. The plots of the logarithmic dependence of the measurement time on the ranging distance for hydrogen fluoride molecules with a concentration of $1.0 \cdot 10^{17} \text{ м}^{-3}$ in the atmospheric boundary layer at selected laser radiation wavelengths (1 – 355 нм; 2 – 532 нм; 3 – 1064 нм)

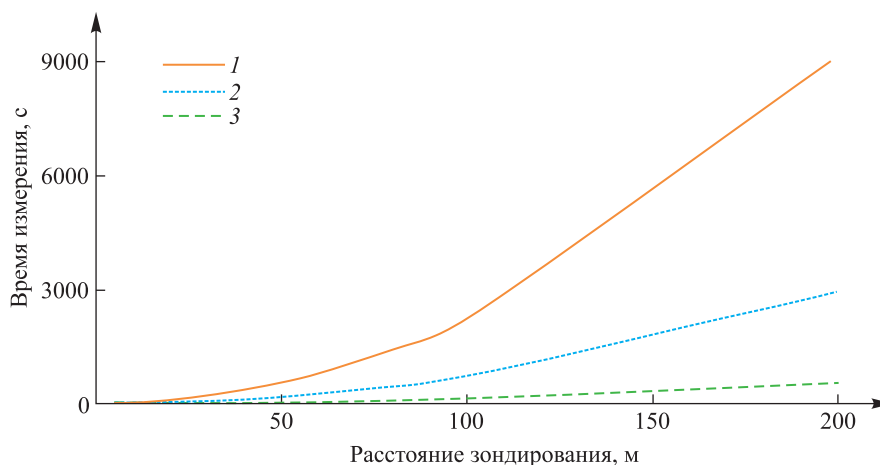


Рис. 4. Графики зависимости времени измерения (в логарифмическом масштабе) от расстояния зондирования для молекул бромоводорода с концентрацией $1,0 \cdot 10^{17} \text{ м}^{-3}$ в атмосферном пограничном слое при выбранных длинах волн лазерного излучения (1 – 355 нм; 2 – 532 нм; 3 – 1064 нм)

Fig. 4. The plots of the logarithmic dependence of the measurement time on the ranging distance for hydrogen bromide molecules with a concentration of $1.0 \cdot 10^{17} \text{ м}^{-3}$ in the atmospheric boundary layer at selected laser radiation wavelengths (1 – 355 нм; 2 – 532 нм; 3 – 1064 нм)

Время измерения для молекул бромоводорода с концентрациями до $1,0 \cdot 10^{23} \text{ м}^{-3}$ в атмосферном пограничном слое на длине волны лазерного излучения 1064 нм, рассчитанное по уравнению (3), также убывает обратно пропорционально концентрации исследуемых молекул (рис. 5).

Очевидно, что дальнейшее уменьшение измеряемой концентрации молекул возможно за счет увеличения времени измерения и частоты следования лазерных импульсов или их энергии. Диапазон времени измерения для исследуемых молекул можно оценить по графикам, представленным на рис. 6. Для всех молекул взяты концентрации, равные ПДК, и лазерное излучение на длине волны 1064 нм.

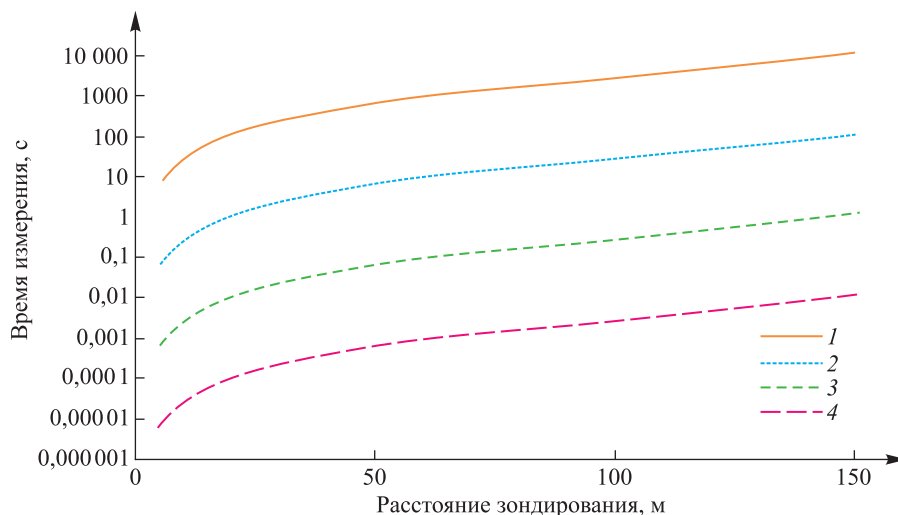


Рис. 5. Графики зависимости времени измерения (в логарифмическом масштабе) от расстояния зондирования для молекул бромоводорода с различной концентрацией в атмосферном пограничном слое ($1 - 1,0 \cdot 10^{17} \text{ м}^{-3}$; $2 - 1,0 \cdot 10^{19} \text{ м}^{-3}$; $3 - 1,0 \cdot 10^{21} \text{ м}^{-3}$; $4 - 1,0 \cdot 10^{23} \text{ м}^{-3}$) при длине волны лазерного излучения 1064 нм

Fig. 5. The plots of the logarithmic dependence of the measurement time on the ranging distance for hydrogen bromide molecules with different concentrations in the atmospheric boundary layer ($1 - 1,0 \cdot 10^{17} \text{ м}^{-3}$; $2 - 1,0 \cdot 10^{19} \text{ м}^{-3}$; $3 - 1,0 \cdot 10^{21} \text{ м}^{-3}$; $4 - 1,0 \cdot 10^{23} \text{ м}^{-3}$) at a laser radiation wavelength 1064 nm

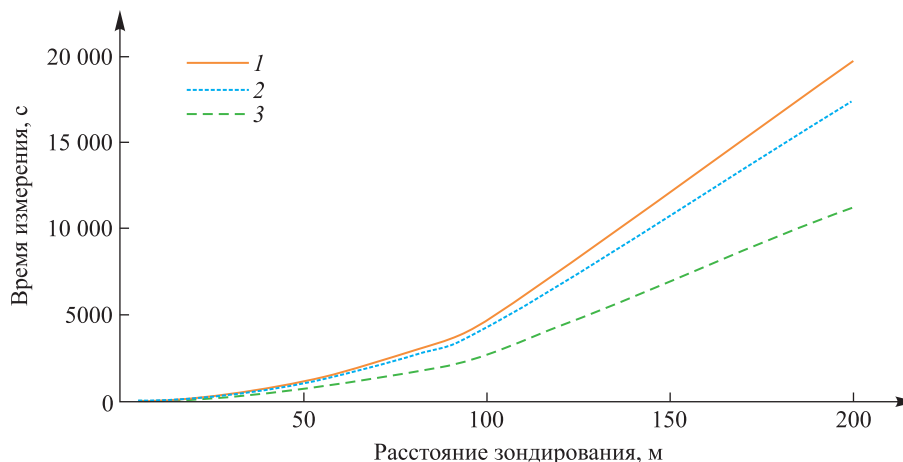


Рис. 6. Графики зависимости времени измерения (в логарифмическом масштабе) от расстояния зондирования для молекул галогенидов водорода с концентрацией на уровне ПДК в атмосферном пограничном слое ($1 - \text{хлороводород } (3,07 \cdot 10^{18} \text{ м}^{-3})$; $2 - \text{фтороводород } (6,02 \cdot 10^{17} \text{ м}^{-3})$; $3 - \text{бромоводород } (1,23 \cdot 10^{17} \text{ м}^{-3})$) при длине волны лазерного излучения 1064 нм

Fig. 6. The plots of the logarithmic dependence of the measurement time on the ranging distance for hydrogen halide molecules at the maximum permissible concentration level in the atmospheric boundary layer ($1 - \text{hydrogen chloride } (3.07 \cdot 10^{18} \text{ м}^{-3})$; $2 - \text{hydrogen fluoride } (6.02 \cdot 10^{17} \text{ м}^{-3})$; $3 - \text{hydrogen bromide } (1.23 \cdot 10^{17} \text{ м}^{-3})$) at a laser radiation wavelength 1064 nm

Как видно из рис. 6, наименьшее время измерения концентрации на уровне ПДК получено для молекулы HCl: 33,3 с на расстоянии 50 м и 134,6 с на расстоянии 100 м. Далее следует молекула HF со временем измерения, равным 178,6 с на расстоянии 50 м и 722,5 с на расстоянии 100 м. Время измерения концентрации молекул HBr составило 553,7 с на расстоянии 50 м и 2239,5 с на расстоянии 100 м. Если, как и выше, ограничить время измерения величиной 2000 с (≈ 30 мин), то молекулу HBr можно зарегистрировать на уровне ПДК только на расстоянии зондирования до 89 м.

Заклучение

Результаты компьютерного моделирования лидара КРС для зондирования молекул галоидоводородов в атмосферном пограничном слое позволяют сделать вывод о том, что выбранные значения его параметров дают возможность измерить концентрации на уровне ПДК всех исследованных молекул. Бромоводород определяется на расстоянии зондирования до 89 м, фтороводород – 277 м, хлороводород – почти 1486 м.

Стоит отметить, что учет конечной ширины лазерной линии и аппаратной функции лидара КРС при зондировании исследованных молекул в атмосферном пограничном слое проявляется в увеличении лидарного сигнала при условии $\Gamma_a \gg \Gamma_R$ и $\Gamma_a \gg \Gamma_0$, но вместе с тем и в повышении шума. По этой причине при минимальной ширине лазерных линий решающим становится выбор оптимальной полуширины интерференционных светофильтров.

Библиографические ссылки

1. Привалов ВЕ, Фотиади АЭ, Шеманин ВГ. *Лазеры и экологический мониторинг атмосферы*. Санкт-Петербург: Лань; 2013. 287 с. (Учебники для вузов. Специальная литература).
2. Dyachenko VV, Privalov VE, Shemanin VG. Computer simulation of the Raman lidar equation for the carbon cycle molecules in the atmosphere. *Optical Memory and Neural Networks (Information Optics)*. 2022;31(1):36–45. DOI: 10.3103/S1060992X22010040.
3. Privalov VE, Shemanin VG. Lidar probing of Raman scattering by hydrofluoride molecules in an atmospheric boundary layer. *Journal of Applied Spectroscopy*. 2021;88(4):802–806. DOI: 10.1007/s10812-021-01243-y.
4. Самохвалов ИВ, Копытин ЮД, Ипполитов ИИ, Балин ЮС, Зуев ВВ, Клишкин ВМ и др. *Лазерное зондирование тропосферы и подстилающей поверхности*. Зуев ВЕ, редактор. Новосибирск: Наука; 1987. 262 с.
5. Зуев ВЕ, Зуев ВВ. *Дистанционное оптическое зондирование атмосферы*. Санкт-Петербург: Гидрометеоиздат; 1992. 232 с. (Современные проблемы атмосферной оптики; том 8).
6. Привалов ВЕ, Шеманин ВГ. Лидарное уравнение с учетом конечной ширины линии генерации лазера. *Известия Российской академии наук. Серия физическая*. 2015;79(2):170–180. DOI: 10.7868/S0367676515020209.
7. Привалов ВЕ, Шеманин ВГ. Учет ширины линии лазерного излучения в лидарном уравнении для комбинационного рассеяния света. *Оптический журнал*. 2015;82(9):11–15.
8. Борейшо АС, редактор. *Лазеры: применения и приложения*. Санкт-Петербург: Лань; 2016. 520 с. (Учебники для вузов. Специальная литература).
9. Межерис Р. *Лазерное дистанционное зондирование*. Городецкий ИГ, Филюшкин ВВ, переводчики; Карасев АБ, редактор. Москва: Мир; 1987. 550 с.
10. Глазов ГН. *Статистические вопросы лидарного зондирования атмосферы*. Лопасов ВП, редактор. Новосибирск: Наука; 1987. 311 с.
11. Привалов ВЕ, Шеманин ВГ. *Параметры лидаров для дистанционного зондирования газовых молекул и аэрозоля в атмосфере*. Санкт-Петербург: Балтийский государственный технический университет «Военмех» имени Д. Ф. Устинова; 2001. 56 с.
12. Прохоров АМ, редактор. *Справочник по лазерам. Том 1*. Москва: Советское радио; 1978. 504 с.
13. Донченко ВА, Кабанов МВ, Кауль БВ, Самохвалов ИВ. *Атмосферная электрооптика*. Томск: Издательство научно-технической литературы; 2010. 220 с.
14. Хинкли ЭД, редактор. *Лазерный контроль атмосферы*. Москва: Мир; 1979. 416 с.
15. Privalov VE, Shemanin VG. Raman lidar system for the hydrogen molecules remote sensing in atmosphere. *Optics and Spectroscopy*. 2022;130(3):331–335. DOI: 10.21883/EOS.2022.03.53558.2707-21.

References

1. Privalov VE, Fotiadi AEh, Shemanin VG. *Lazery i ehkologicheskii monitoring atmosfery* [Lasers and environmental monitoring of the atmosphere]. Saint Petersburg: Lan'; 2013. 287 p. (Uchebniki dlya vuzov. Spetsial'naya literatura). Russian.
2. Dyachenko VV, Privalov VE, Shemanin VG. Computer simulation of the Raman lidar equation for the carbon cycle molecules in the atmosphere. *Optical Memory and Neural Networks (Information Optics)*. 2022;31(1):36–45. DOI: 10.3103/S1060992X22010040.
3. Privalov VE, Shemanin VG. Lidar probing of Raman scattering by hydrofluoride molecules in an atmospheric boundary layer. *Journal of Applied Spectroscopy*. 2021;88(4):802–806. DOI: 10.1007/s10812-021-01243-y.
4. Samokhvalov IB, Kopytin YuD, Ippolitov II, Balin YuS, Zuev VV, Klimkin VM, et al. *Lazernoe zondirovanie troposfery i podstilayushchei poverkhnosti* [Laser sensing of the troposphere and the underlying surface]. Zuev VE, editor. Novosibirsk: Nauka; 1987. 262 p. Russian.
5. Zuev VE, Zuev VV. *Dstantsionnoe opticheskoe zondirovanie atmosfery* [Remote optical sensing of the atmosphere]. Saint Petersburg: Gidrometeoizdat; 1992. 232 p. (Sovremennye problemy atmosfernoii optiki; volume 8). Russian.
6. Privalov VE, Shemanin VG. [Lidar equation taking into account the finite width of the laser generation line]. *Izvestiya Rossiiskoi akademii nauk. Seriya fizicheskaya*. 2015;79(2):170–180. Russian. DOI: 10.7868/S0367676515020209.
7. Privalov VE, Shemanin VG. [Taking the line width of the laser radiation into account in the lidar equation for Raman scattering of light]. *Opticheskii zhurnal*. 2015;82(9):11–15. Russian.
8. Boreisho AS, editor. *Lazery: primeneniya i prilozheniya* [Lasers: use and applications]. Saint Petersburg: Lan'; 2016. 520 p. (Uchebniki dlya vuzov. Spetsial'naya literatura). Russian.

9. Measures RM. *Laser remote sensing: fundamentals and applications*. New York: John Wiley & Sons; 1984. XII, 510 p.
Russian edition: Measures R. *Lazernoe distantsionnoe zondirovanie*. Gorodetskii IG, Filyushkin VV, translators; Karasev AB, editor. Moscow: Mir; 1987. 550 p.
10. Glazov GN. *Statisticheskie voprosy lidarnogo zondirovaniya atmosfery* [Statistical issues of lidar sensing of the atmosphere]. Lopasov VP, editor. Novosibirsk: Nauka; 1987. 311 p. Russian.
11. Privalov VE, Shemanin VG. *Parametry lidarov dlya distantsionnogo zondirovaniya gazovykh molekul i aehrozolya v atmosfere* [Lidar parameters for remote sensing of gas molecules and aerosol in the atmosphere]. Saint Petersburg: Baltic State Technical University «Voenmeh» named after D. F. Ustinov; 2001. 56 p. Russian.
12. Prokhorov AM, editor. *Spravochnik po lazeram. Tom 1* [Lasers handbook. Volume 1]. Moscow: Sovetskoe radio; 1978. 504 p. Russian.
13. Donchenko VA, Kabanov MV, Kaul' BV, Samokhvalov IV. *Atmosfernaya ehlektrooptika* [Atmospheric electro-optics]. Tomsk: Izdatel'stvo nauchno-tekhnicheskoi literatury; 2010. 220 p. Russian.
14. Hinkley ED, editor. *Laser monitoring of the atmosphere*. Berlin: Springer-Verlag; 1976. XV, 382 p. (Topics in applied physics; volume 14). DOI: 10.1007/3-540-07743-X.
Russian edition: Hinkley ED, editor. *Lazernyi kontrol' atmosfery*. Moscow: Mir; 1979. 416 p.
15. Privalov VE, Shemanin VG. Raman lidar system for the hydrogen molecules remote sensing in atmosphere. *Optics and Spectroscopy*. 2022;130(3):331–335. DOI: 10.21883/EOS.2022.03.53558.2707-21.

Получена 18.12.2023 / исправлена 20.12.2023 / принята 20.12.2023.
Received 18.12.2023 / revised 20.12.2023 / accepted 20.12.2023.

УДК 621.373.826

ПРОСТРАНСТВЕННЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ Nd:YAG-ЛАЗЕРА ИМПУЛЬСНОГО ДАЛЬНОМЕРА В ШИРОКОМ ДИАПАЗОНЕ ТЕМПЕРАТУР ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ

В. Е. ОРЕХОВА¹⁾, В. Э. КИСЕЛЬ²⁾, К. А. ОРЕХОВ¹⁾

¹⁾Пеленг, ул. Макаенка, 25, 220114, г. Минск, Беларусь

²⁾Белорусский национальный технический университет,
пр. Независимости, 65, 220013, г. Минск, Беларусь

Исследованы пространственные характеристики импульсного лазера на основе цилиндрического кристалла иттрий-алюминиевого граната, легированного ионами Nd^{3+} (Nd:YAG), с кондуктивно охлаждаемой боковой поверхностью для применения в составе систем измерения дальности авиационного базирования при энергии лазерных импульсов не менее 80 мДж на длине волны 1064 нм. Разработана конфигурация системы поперечной диодной накачки для цилиндрического кристалла Nd:YAG диаметром 4 мм с концентрацией ионов Nd^{3+} 0,9 ат. %, обеспечивающая эффективность накачки не менее 0,65. С использованием программного обеспечения *OpticStudio* и *LASCAD* рассчитаны профили поглощения излучения накачки для различных центральных длин волн излучения накачки и определена величина тепловой линзы в лазерном кристалле для частот следования импульсов 1,0; 4,0; 12,5; 22,0 Гц. Проведена оценка расходимости пучка лазерного излучения для плоского резонатора с переменной внутренней линзой. Экспериментально исследовано пространственное распределение лазерного излучения в дальней зоне для частот следования импульсов 1,0; 4,0; 12,5; 22,0 Гц в диапазоне температур окружающей среды от -40 до $+60$ °C при стабилизации температуры источника диодной накачки элементами Пельтье. Показано, что энергетическая расходимость лазерного излучения по уровню $\frac{1}{e^2}$ не превышает 1,9 мрад. При фиксированной температуре для

Образец цитирования:

Орехова ВЕ, Кисель ВЭ, Орехов КА. Пространственные характеристики Nd:YAG-лазера импульсного дальномера в широком диапазоне температур окружающей среды. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика*. 2024;1:26–41.
EDN: KGDKBX

For citation:

Orehova VE, Kisel VE, Orekhov KA. Spatial characteristics of a Nd:YAG laser for pulsed rangefinder over broad ambient temperature range. *Journal of the Belarusian State University. Physics*. 2024;1:26–41. Russian.
EDN: KGDKBX

Авторы:

Виктория Евгеньевна Орехова – инженер-исследователь I категории научно-конструкторского управления «Космос».
Виктор Эдвардович Кисель – доктор физико-математических наук, профессор; заведующий научно-исследовательским центром оптических материалов и технологий, профессор кафедры лазерной техники и технологии приборостроительного факультета.
Константин Александрович Орехов – ведущий инженер-исследователь научно-конструкторского управления «Космос».

Authors:

Viktoria E. Orehova, research engineer of the 1st category at the research and development department «Cosmos».
ve.orehova@gmail.com
Viktor E. Kisel, doctor of science (physics and mathematics), full professor; head of the research centre for optical materials and technologies and professor at the department of laser technique and technology, faculty of instrumentation.
vekisel@bntu.by
Konstantin A. Orekhov, leading research engineer at the research and development department «Cosmos».
orehov@peleng.by

частот следования импульсов 1,0; 4,0; 12,5; 22,0 Гц и числа зарегистрированных импульсов не менее 45 двойное среднеквадратичное угловое отклонение энергетических центров масс профилей лазерного пучка в дальней зоне относительно усредненного положения энергетического центра масс для частоты следования импульсов 4,0 Гц не превышает 0,5 мрад. Полученные значения расходимости и двойных среднеквадратичных угловых отклонений энергетических центров масс профилей лазерного пучка в дальней зоне указывают на возможность применения лазера в составе дальномера на борту беспилотных летательных аппаратов.

Ключевые слова: лазерный дальномер; диодная накачка; расходимость лазерного пучка; Nd:YAG.

SPATIAL CHARACTERISTICS OF A Nd:YAG LASER FOR PULSED RANGEFINDER OVER BROAD AMBIENT TEMPERATURE RANGE

V. E. OREKHOVA^a, V. E. KISEL^b, K. A. OREKHOV^a

^a*Peleng, 25 Makajonka Street, Minsk 220114, Belarus*

^b*Belarusian National Technical University, 65 Niezaliezhnasci Avenue, Minsk 220013, Belarus*

Corresponding author: V. E. Orekhova (ve.orehova@gmail.com)

Spatial characteristics of a pulsed laser based on neodymium-doped yttrium aluminium garnet (Nd:YAG) rod with conductively cooled barrel surface are investigated for use as part of airborne rangefinding systems for a pulse energy values not less than 80 mJ at a wavelength of 1064 nm. Diode side-pumping system configuration has been developed for a Nd:YAG rod with a diameter of 4 mm and Nd³⁺ ions concentration of 0.9 at. % with pump efficiency not less than 0.65. The pump light absorption profiles have been calculated for various central pump light wavelengths, and the value of thermal lens in laser rod has been determined for pulse repetition rates of 1.0; 4.0; 12.5; 22.0 Hz using the *OpticStudio* and *LASCAD* softwares. Laser beam divergence has been evaluated for a flat-flat resonator with variable internal lens. Spatial distribution of laser beam was experimentally studied in the far field over ambient temperatures range of –40 to +60 °C for pulse repetition rates of 1.0; 4.0; 12.5; 22.0 Hz while stabilising diode pumping source temperature by Peltier module. It is shown that divergence for a beam containing 86.5 % of total energy does not exceed 1.9 mrad. Double standard deviation of the far-field laser beam profile centroids relative to averaged centroid position for a pulse repetition rate of 4.0 Hz does not exceed 0.5 mrad at a fixed temperature for pulse repetition rates of 1.0; 4.0; 12.5; 22.0 Hz and recorded pulse number not less than 45. The obtained values of divergence and double standard deviation of the far-field laser beam profile centroids show the possibility to use the laser as part of rangefinder on board unmanned aerial vehicles.

Keywords: laser rangefinder; diode pumping; laser beam divergence; Nd:YAG.

Введение

Мощные твердотельные импульсные Nd:YAG-лазеры, функционирующие в режиме модуляции добротности, имеют широкое применение в оптических системах измерения дальности, аэрозольных лидарах и др. [1–9]. Для обеспечения наибольшей точности определения расстояния до предмета, расположенного под некоторым углом к направлению лазерного пучка, а также возможности измерения дальности на дистанциях от 10 км одними из наиболее существенных характеристик лазера в составе дальномера являются расходимость и стабильность пространственного положения лазерного пучка.

Типичные значения расходимости лазерного излучения в таких системах составляют 0,2–0,7 мрад [4, p. 31; 10, p. 878; 11; 12]. В целях уменьшения расходимости лазерного пучка на выходе излучения из резонатора располагают расширяющий телескоп. Для корректной работы дальномера авиационного базирования требуется обеспечить достаточную стабильность пространственных характеристик излучения в широком диапазоне температур окружающей среды для частот следования импульсов от единиц до десятков герц.

В настоящей работе исследованы характеристики твердотельного лазера для применения в составе дальномера на борту беспилотных летательных аппаратов. Рассмотрены результаты расчетов профиля поглощения излучения накачки для лазерного кристалла Nd:YAG с односторонней поперечной диодной накачкой. Проведена оценка расходимости лазерного пучка. Представлены результаты измерений расходимости и двойного среднеквадратичного углового отклонения энергетических центров масс профилей лазерного излучения в дальней зоне для прототипа лазера с термоэлектрической стабилизацией температуры диодного источника накачки и энергией импульса лазерного излучения не менее 80 мДж в диапазоне температур окружающей среды от –40 до +60 °C для частот следования импульсов 1,0; 4,0; 12,5; 22,0 Гц. Показано, что предложенная конфигурация обеспечивает возможность работы дальномера на расстоянии не менее 20 км.

Расчет отражателя квантрона

Лазер на основе цилиндрического кристалла Nd:YAG имеет плоский резонатор длиной 450 мм с трипель-призмой и зеркалами на одной подложке. Он способен генерировать короткие импульсы в режиме активной модуляции добротности, при этом источник накачки механически не связан с отражателем и лазерным кристаллом, а установлен на боковую стенку корпуса лазера [13]. При разработке отражателя квантрона учитывались следующие требования.

1. Конфигурация отражателя должна обеспечивать возможность использования в качестве источника накачки импульсных лазерных диодных матриц с центральной длиной волны лазерного излучения в пределах 800–810 нм, шириной спектральной линии на полувысоте 5 нм, общей мощностью в пике не менее 2200 Вт при эффективности накачки не менее 0,6.

2. Конфигурация системы накачки должна быть компактной и технологичной, ее производство не должно существенно повышать стоимость оптической системы.

3. Для обеспечения стабильности выходных характеристик лазера в широком диапазоне температур окружающей среды допускается применять термоэлектрический метод стабилизации температуры источника накачки с энергопотреблением не более 40 Вт.

Центральная длина волны лазерных диодных матриц при температуре +22 °С составляет 802 нм. Изменение длины волны излучения накачки в зависимости от температуры для применяемой модели лазерных диодных матриц составляет 0,3 нм/°С. Ширина излучающей площадки вдоль быстрой оси равна 3,4 мм. Расходимость излучения накачки вдоль быстрой оси на полувысоте составляет $40^\circ \pm 5^\circ$.

Для рассматриваемого твердотельного лазера с заданной конфигурацией резонатора целесообразно обеспечить наименьшие поперечные размеры лазерного кристалла, определяющие ограничивающую апертуру внутри резонатора. Это позволит снизить расходимость генерируемых лазерных импульсов путем подавления мод высших порядков в случае, когда радиус лазерного кристалла превышает радиус нулевой поперечной (TEM_{00}) моды, а также обеспечит компактные размеры квантрона. Минимальный поперечный размер лазерного кристалла определяется исходя из соблюдения требований к лучевой прочности покрытий оптических элементов внутри резонатора [14]. В исследуемом лазере применяются SiO_2 -покрытия, наносимые электронно-лучевым методом (*e-beam*), для них типичные значения лучевой прочности составляют около 10 Дж/см². Известно, что при работе в атмосфере на длине волны 1064 нм с длительностью импульса приблизительно 10 нс для покрытий данного типа характерно снижение лучевой прочности в 1,5–2,3 раза [15; 16] с ростом количества импульсов, приходящихся на фиксированную область покрытия, от 1 до 1000. Кроме того, предполагается, что поток лазерного излучения в сечении оптической оси резонатора имеет неравномерное распределение и в отдельных зонах может превышать усредненный поток до 2 раз. Исходя из указанных соображений, а также необходимости обеспечить двукратный запас лучевой прочности для внутрирезонаторной оптики, можно заключить, что плотность энергии лазерного излучения не должна превышать 0,9 Дж/см². С учетом выбранного коэффициента отражения выходного зеркала ($\rho = 0,25$) согласно работе [13] минимальный диаметр рабочей

зоны лазерного кристалла составит не менее 3,7 мм при наличии фаски или защитной диафрагмы с радиусом, на 0,2 мм меньшим радиуса торца. В целях обеспечения практичности производства (цилиндрические лазерные кристаллы с целочисленным диаметром, кратным 1 мм, широко представлены на мировом рынке) диаметр кристалла Nd:YAG был выбран равным 4 мм.

Боковая поверхность цилиндрического кристалла матированная. Угловой профиль рассеяния излучения, проходящего через боковую поверхность кристалла, аппроксимирован распределением Гаусса со среднеквадратичным отклонением $\sigma = 0,45^\circ$. Концентрация ионов Nd^{3+} 0,9 ат. % выбрана в целях обеспечения высокого коэффициента поглощения излучения накачки, достаточного для достижения требуемой эффективности накачки.

Для компактности габаритов использована конфигурация с односторонней накачкой. Разработана форма отражателя, состоящая из одной цилиндрической диффузно отражающей поверхности и двух плоских зеркально отражающих поверхностей (рис. 1).

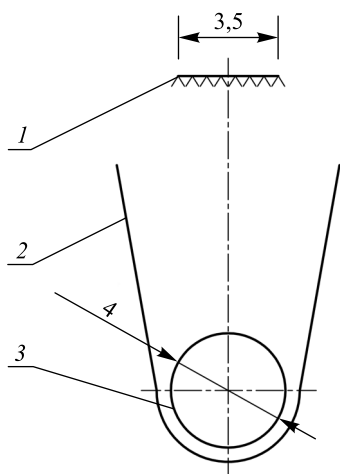


Рис. 1. Поперечное сечение системы накачки с отражателем:

1 – источник накачки (матрица лазерных диодов);
2 – отражатель; 3 – лазерный кристалл

Fig. 1. Pumping configuration cross section:

1 – pump source (laser diode array);
2 – reflector; 3 – laser crystal

Матрицы лазерных диодов расположены в ряд вдоль оси лазерного кристалла таким образом, что их быстрая ось перпендикулярна оси кристалла.

Наибольшая эффективность накачки наблюдается для длин волн излучения матриц лазерных диодов, соответствующих наибольшему значению эффективного коэффициента поглощения излучения накачки в лазерном кристалле $k_{\text{eff}}(\lambda_0)$ при центральной длине волны излучения накачки λ_0 , вычисляемого по формуле

$$k_{\text{eff}}(\lambda_0) = \frac{\ln\left(\int \alpha(\lambda - \lambda_0) e^{-k(\lambda)d_0} d\lambda\right)}{d_0},$$

где

$$\alpha(\lambda - \lambda_0) = \frac{1}{\sigma_{\text{LDA}} \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{\lambda - \lambda_0}{\sigma_{\text{LDA}}} \right)^2},$$

$$\int \alpha(\lambda - \lambda_0) d\lambda = 1,$$

e – экспонента; $k(\lambda)$ – коэффициент поглощения излучения накачки для длины волны λ ; $d_0 = 5$ мм – расчетная длина пути внутри лазерного кристалла; $\sigma_{\text{LDA}} = 2,12$ нм – среднеквадратичное отклонение распределения Гаусса для линии с шириной спектра на полувысоте 5 нм.

С использованием программного обеспечения *OpticStudio* методом трассировки лучей проведено численное моделирование профиля поглощения в сечении, перпендикулярном оси лазерного кристалла, для различных длин волн излучения накачки (рис. 2).

Для эффективной накачки лазерного кристалла подходит источник накачки с длиной волны излучения 806–809 нм. Профили поглощения излучения накачки в сечении, перпендикулярном оси лазерного кристалла, имеют несимметричное относительно центра распределение (рис. 3).

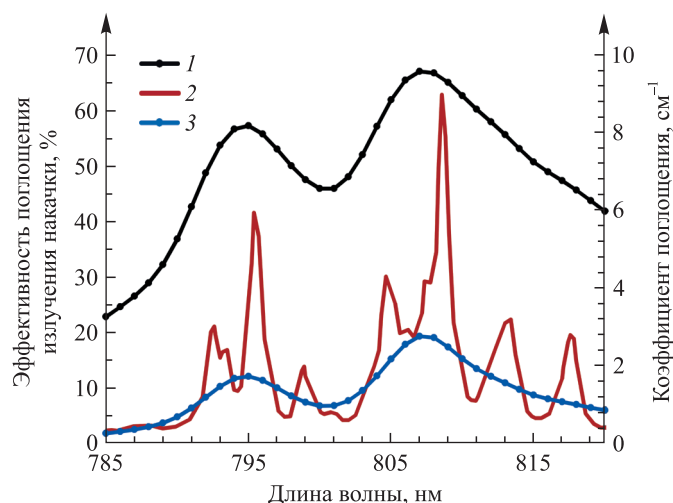


Рис. 2. Зависимость параметров системы накачки от длины волны:

- 1 – расчетная зависимость эффективности накачки цилиндрического кристалла Nd:YAG от центральной длины волны для диодного источника накачки с шириной спектра излучения на полувысоте 5 нм; 2 – зависимость коэффициента поглощения кристалла Nd:YAG с концентрацией ионов Nd^{3+} 1,0 ат. % от длины волны (взята из работы [17]); 3 – расчетная зависимость эффективного коэффициента поглощения кристалла Nd:YAG с концентрацией ионов Nd^{3+} 1,0 ат. % от центральной длины волны для диодного источника накачки с шириной спектра излучения на полувысоте 5 нм

Fig. 2. Dependence of pumping system parameters on wavelength:

- 1 – calculated dependence of Nd:YAG rod pump efficiency on central wavelength for diode pump source with emission spectrum full width at half maximum (FWHM) of 5 nm; 2 – dependence of Nd:YAG rod absorption coefficient on wavelength for Nd^{3+} ions concentration of 1.0 at. % (taken from work [17]); 3 – calculated dependence of Nd:YAG rod effective absorption coefficient on central wavelength for Nd^{3+} ions concentration of 1.0 at. % and diode pump source with emission spectrum FWHM of 5 nm

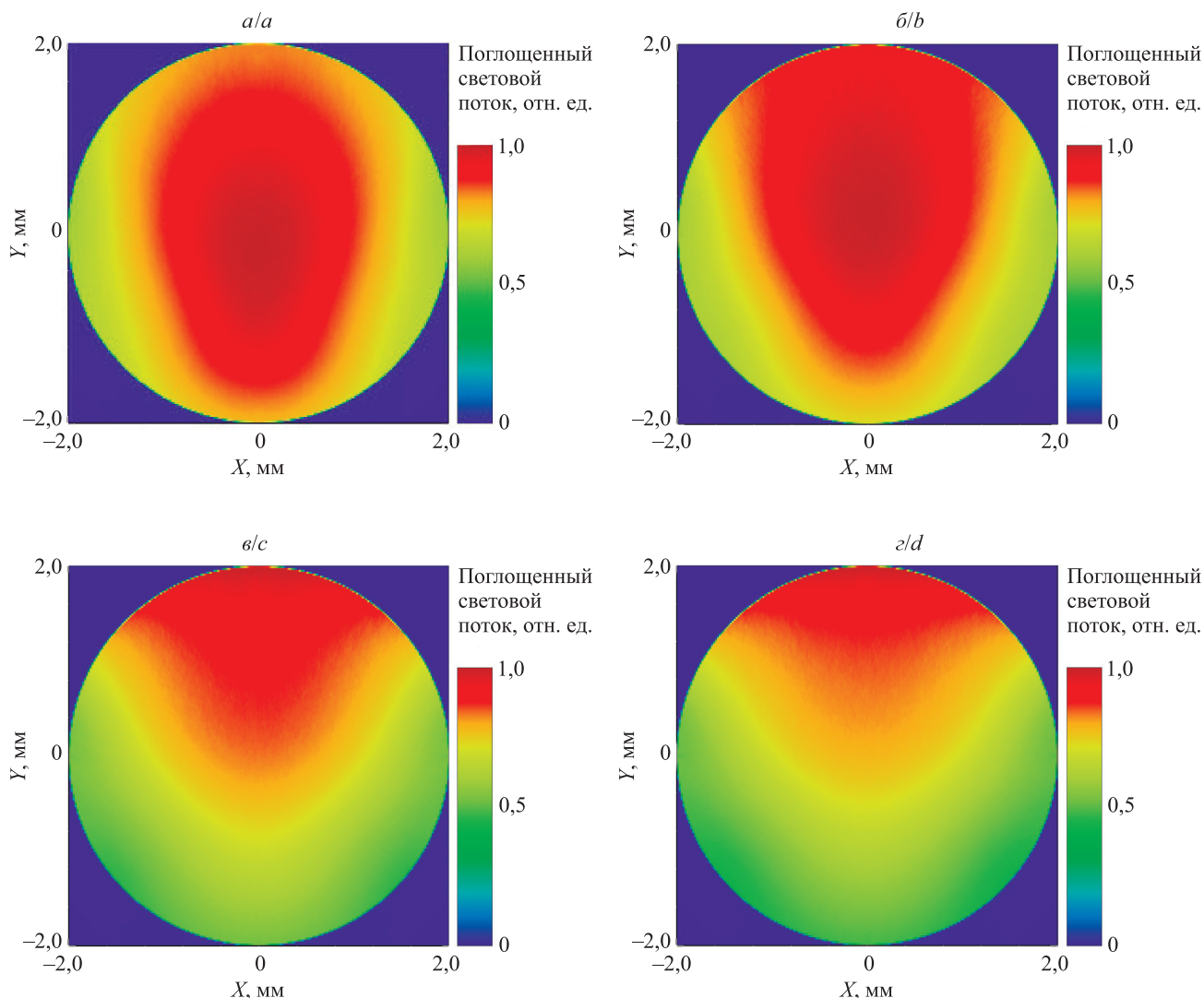


Рис. 3. Результаты численного моделирования в программном обеспечении *OpticStudio* профиля поглощения излучения накачки цилиндрического кристалла Nd:YAG диаметром 4 мм с концентрацией ионов Nd^{3+} 0,9 ат. % для диодного источника накачки с шириной спектра на полувысоте 5 нм и центральной длиной волны излучения 800 нм (а), 803 нм (б), 806 нм (в), 807 нм (г)

Fig. 3. The results of pump emission absorption profile numerical simulation using *OpticStudio* software for Nd:YAG rod diameter of 4 mm and Nd^{3+} ions concentration of 0.9 at. %, diode pump source with emission spectrum FWHM of 5 nm and central emission wavelength of 800 nm (a), 803 nm (b), 806 nm (c), 807 nm (d)

Наличие в профиле поглощения излучения накачки при длине волны, соответствующей наибольшему значению $k_{\text{eff}}(\lambda_0)$, области с повышенной плотностью поглощенной энергии может способствовать снижению инверсии населенностей в лазерном кристалле за счет усиленной спонтанной люминесценции, а также возникновению асимметричной термолинзы, приводящей к разъюстировке и ухудшению стабильности лазерного пучка в дальней зоне после включения лазера. Для минимизации указанного эффекта далее рассматривалась накачка при центральной длине волны 806 нм, соответствующей более равномерному профилю распределения энергии накачки в сравнении с таковым при накачке в пике поглощения с длиной волны 807–808 нм.

Расчет расходимости лазерного излучения

Для того чтобы в генерации лазерного излучения была задействована максимальная часть объема лазерного кристалла, использован плоский линейный резонатор, обеспечивающий постоянный поперечный размер нулевой моды вдоль всей длины лазерного кристалла в приближении малой оптической силы тепловой линзы [18, р. 586].

В табл. 1 приведены параметры кристалла Nd:YAG, использованные при расчетах.

Таблица 1

Свойства кристалла Nd:YAG

Table 1

Nd:YAG rod properties

Параметры	Значение
Теплопроводность, Вт/(м · К)	14
Температурный коэффициент показателя преломления	$9,1 \cdot 10^{-6}$
Коэффициент теплового расширения, K^{-1}	$7,5 \cdot 10^{-6}$
Эластооптический коэффициент: радиальный тангенциальный	0,017 –0,0025
Показатель преломления	1,816
Длина волны излучения, нм	1064

Распределение поглощенной энергии в сечении лазерного кристалла оказывает влияние на модовый состав лазерного излучения, а также величину тепловой линзы в лазерном кристалле вдоль двух взаимно перпендикулярных осей. С использованием программного обеспечения *LASCAD* методом конечных элементов проведен расчет величины стационарной тепловой линзы для частот следования импульсов 1,0; 4,0; 12,5; 22,0 Гц (табл. 2) в приближении постоянного значения температуры боковой поверхности лазерного кристалла, через которую производится отвод тепла из внутреннего объема кристалла. Это значение принималось равным исходной температуре лазерного кристалла.

Таблица 2

**Расчетные фокусные расстояния
стационарной тепловой линзы в лазерном кристалле
для различных частот следования импульсов**

Table 2

**Calculated focal lengths of stationary thermal lens
in laser crystal for various pulse repetition rates**

Частота следования импульсов, Гц	Фокусное расстояние, м	
	Вдоль оси x	Вдоль оси y
1,0	240	250
4,0	60	62
12,5	19	20
22,0	11	11

Значения фокусных расстояний стационарной тепловой линзы для различных частот следования импульсов после начала работы лазера определяют модовый состав излучения. Расходимость нулевой моды лазерного резонатора на выходе определена методом матричной оптики [19, p. 171–175].

Матрица прохода через лазерный кристалл (M_{lc}) имеет вид

$$M_{lc} = M_{lc_n} M_{lc_f} M_{lc_n},$$

$$M_{lc_n} = \begin{pmatrix} 1 & \frac{l_{lc}}{2n_{lc}} \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$M_{lc_f} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -\frac{1}{f_{lc}} & 1 \end{pmatrix},$$

где M_{lc_n} – матрица прохода через половину длины лазерного кристалла; M_{lc_f} – матрица прохода через собирающую линзу с фокусным расстоянием, равным фокусному расстоянию тепловой линзы в лазерном

кристалле; l_{lc} – длина лазерного кристалла; n_{lc} – показатель преломления лазерного кристалла; f_{lc} – фокусное расстояние тепловой линзы в лазерном кристалле.

Матрица обхода через резонатор в обе стороны (M) определяется как

$$M = M_{l1} M_{lc} M_{l2} M_{l2} M_{lc} M_{l1},$$

$$M_{l1} = \begin{pmatrix} 1 & l_1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$M_{l2} = \begin{pmatrix} 1 & l_2 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

где $l_1 = 20$ мм – расстояние от ближнего (по отношению к выходному зеркалу) торца лазерного кристалла до выходного зеркала; $l_2 = 330$ мм – длина оптического пути от дальнего (по отношению к выходному зеркалу) торца лазерного резонатора до глухого зеркала.

Согласно работе [20, р. 235] определены комплексный параметр (q) и радиус нулевой моды в перетяжке на выходном зеркале (ω_0):

$$q = \frac{M_{0,0} - M_{1,1}}{2M_{1,0}} + \sqrt{\frac{M_{0,1}}{M_{1,0}} + \left(\frac{M_{0,0} - M_{1,1}}{2M_{1,0}} \right)^2},$$

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{q\lambda}{i\pi}},$$

где $\lambda = 1064$ нм – длина волны лазерного излучения; i – мнимая единица.

Пространственное качество пучка (M^2) и расходимость излучения (θ) оценивались в зависимости от соотношения величин r и ω_0 согласно работам [20, р. 235; 21, с. 47]:

$$M^2 = \left(\frac{r}{\omega_0} \right)^2, \quad r > \omega_0,$$

$$M^2 = \frac{2,44}{1,27} = 1,9, \quad r < \omega_0,$$

$$\theta = \frac{2M^2\lambda}{\pi r},$$

где $r = 1,8$ мм – радиус ограничивающей апертуры защитной диафрагмы внутри лазерного резонатора. Расчетные значения радиуса нулевой моды, пространственного качества пучка и расходимости лазерного излучения приведены в табл. 3.

Таблица 3

Расчетные значения радиуса нулевой моды в перетяжке на выходном зеркале, пространственного качества пучка и расходимости лазерного излучения для различных частот следования импульсов

Table 3

Calculated TEM₀₀ mode beam waist values at output mirror, spatial beam quality factor and laser beam divergence for various pulse repetition rates

Частота следования импульсов, Гц	Радиус нулевой моды, мм	Пространственное качество пучка	Расходимость лазерного излучения, мрад
1,0	1,80	1,92	0,721
4,0	1,30	1,91	0,719
12,5	0,98	3,35	1,260
22,0	0,86	4,43	1,670

Описание экспериментальной установки

Проведено экспериментальное исследование пространственного распределения излучения лазера в дальней зоне. Лазер был помещен в термокамеру с прозрачным окном для вывода лазерного пучка наружу. Лазерный пучок падает на плоскопараллельную пластину, выполняющую функцию светоделителя. За плоскопараллельной пластиной в ходе лазерного пучка установлен датчик энергии J-50MB-IR (Coherent, США) с измерителем Labmax-TOP (Coherent) для регистрации величины энергии генерируемых коротких лазерных импульсов. В ходе отраженного пучка расположены ослабляющие фильтры, собирающая линза с фокусным расстоянием $f_l = 758$ мм и инфракрасная камера SP928 (Ophir, США), размещенная таким образом, что ее фоточувствительная площадка находится в фокальной плоскости собирающей линзы (рис. 4).

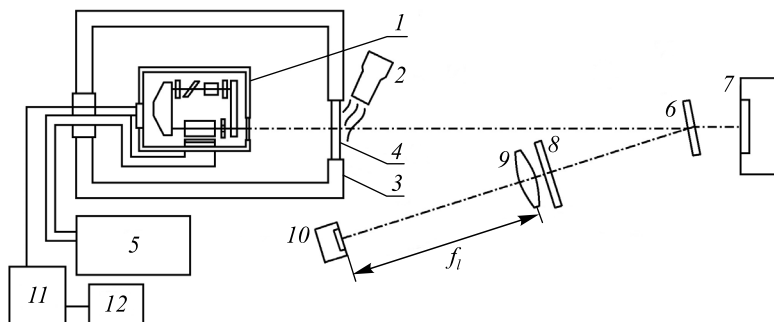


Рис. 4. Принципиальная схема стенда для проведения измерений энергии импульса и пространственного распределения интенсивности лазерного излучения в дальней зоне:
1 – лазерный резонатор в герметичном корпусе; 2 – промышленный фен; 3 – термокамера; 4 – окно; 5 – водяная система охлаждения теплооттока корпуса лазера; 6 – плоскопараллельная пластина; 7 – датчик энергии; 8 – оптический ослабляющий фильтр; 9 – собирающая линза; 10 – камера; 11 – блок электроники для управления работой лазера; 12 – компьютер

Fig. 4. Schematic diagram of the bench used for pulse energy and spatial far-field laser beam intensity distribution:

1 – laser in a sealed housing; 2 – industrial fan; 3 – thermal chamber; 4 – window; 5 – water cooling system for laser housing heat sink; 6 – optical flat; 7 – energy sensor; 8 – optical attenuating filter; 9 – collecting lens; 10 – camera; 11 – electronics unit to control the operation of laser; 12 – computer

Расходимость лазерного излучения измерялась методом фокального пятна. Рабочая температура теплооттока лазерных диодных матриц была равна $+35$ °С, что соответствует центральной длине волны излучения накачки 806 нм. Температура теплооттока лазерных диодных матриц регулировалась элементами Пельтье, имеющими мощность охлаждения до 30 Вт, с точностью до $\pm 0,5$ °С, отвод тепла от горячей стороны элемента Пельтье осуществлялся сбросом на радиатор с водяным охлаждением. Измерения проводились для температур внутри термокамеры -40 ; -10 ; $+5$; $+17$; $+25$; $+35$; $+45$; $+60$ °С и частот следования импульсов 1,0; 4,0; 12,5; 22,0 Гц с длительностью цикла импульсов 2 мин. Количество зарегистрированных импульсов в каждом цикле было не менее 45. При температурах окружающей среды -40 и -10 °С для предотвращения выпадения росы на окне термокамеры использовался промышленный фен. Во всем диапазоне температур окружающей среды и частот следования импульсов в течение цикла импульсов энергия лазерного импульса составляла не менее 80 мДж при энергии накачки не более 0,51 Дж [13].

Результаты и их обсуждение

Измерение расходимости лазерного излучения. Методом фокального пятна была измерена энергетическая расходимость лазерного излучения по уровню $\frac{1}{e^2}$ в течение цикла импульсов длительностью 2 мин. Энергия накачки составляла 0,49 Дж для температур окружающей среды от $+5$ до $+60$ °С и 0,51 Дж для температур окружающей среды -40 и -10 °С. Как видно из рис. 5, для частот следования импульсов 12,5 и 22,0 Гц значение расходимости растет на протяжении первых 20 с и далее не изменяется.

Расходимость лазерного излучения в наибольшей степени зависит от частоты следования импульсов (рис. 6) и в наименьшей степени – от температуры окружающей среды. Для различных частот следования импульсов и температур окружающей среды расходимость лазерного излучения в начале цикла равна $(1,0 \pm 0,1)$ мрад, а в конце цикла составляет от 1,0 до 1,8 мрад.

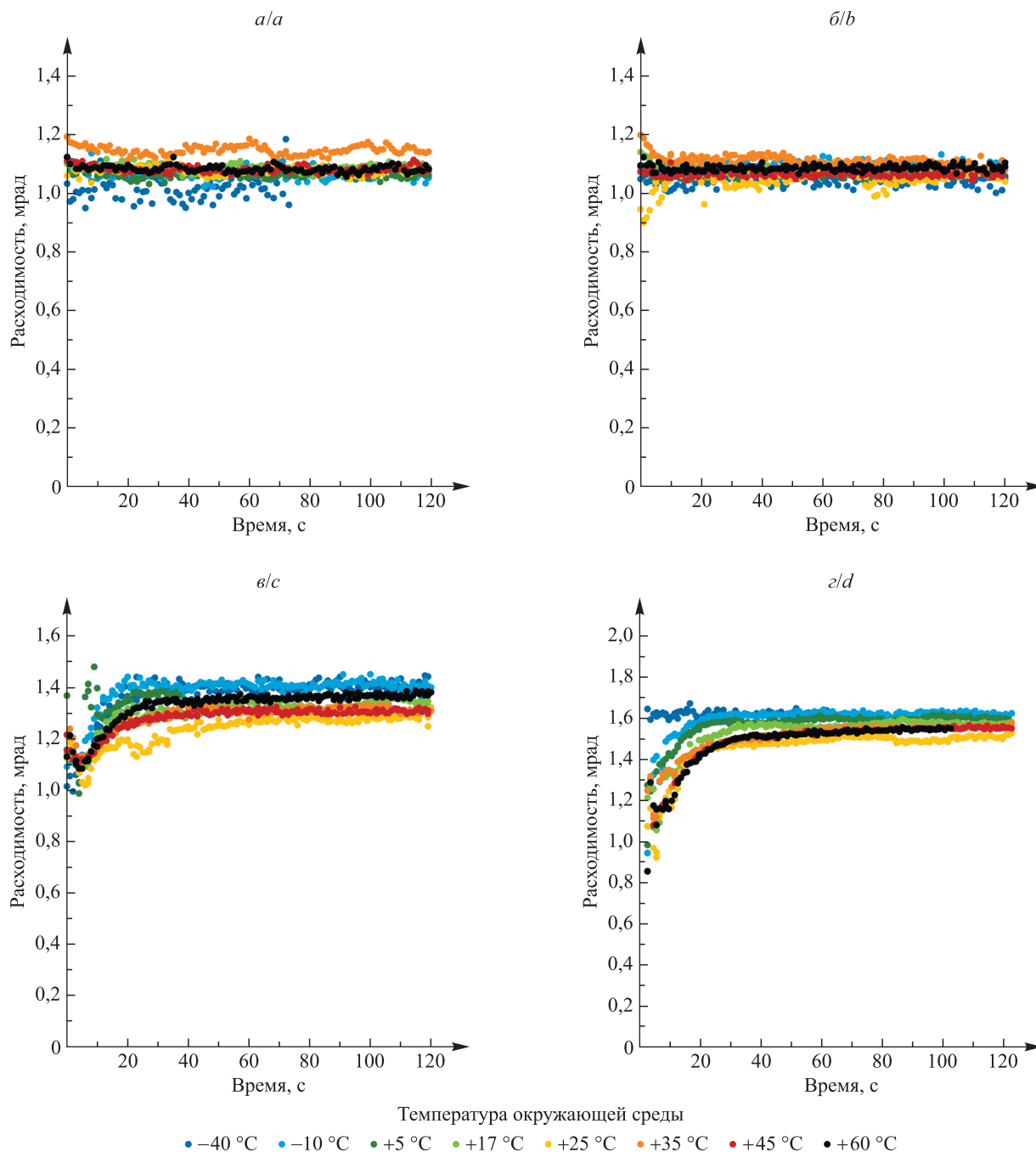


Рис. 5. Экспериментально полученные значения расходимости излучения для частот следования импульсов 1,0 Гц (а), 4,0 Гц (б), 12,5 Гц (в), 22,0 Гц (г)

Fig. 5. Experimentally obtained values of divergence for pulse repetition rates of 1.0 Hz (a), 4.0 Hz (b), 12.5 Hz (c), 22.0 Hz (d)

Измеренная величина расходимости растет в процессе формирования тепловой линзы в лазерном кристалле после начала работы лазера. Расходимость лазерного излучения в конце цикла повышается с ростом частоты следования импульсов из-за увеличения оптической силы тепловой линзы, вследствие чего происходит смещение резонатора из положения на границе устойчивости в более устойчивую область с возрастанием расходимости нулевой поперечной моды и количества поддерживаемых резонатором мод высоких порядков.

Расчетные и измеренные в диапазоне температур от -40 до $+60$ °C значения расходимости отличаются. Разница между ними составляет от 42 до 60 % (от расчетного значения расходимости) для частоты следования импульсов 1,0 Гц, от 46 до 54 % для частоты следования импульсов 4,0 Гц, от $-2,3$ до 9,5 % для частоты следования импульсов 12,5 Гц и от $-6,6$ до 3,5 % для частоты следования импульсов 22,0 Гц.

Измеренные значения расходимости лазерного излучения могут отличаться от расчетных значений из-за конечной точности метода фокального пятна, механической разъюстировки резонатора, наличия механических напряжений в лазерном кристалле вследствие отклонений формы изготовленных деталей квантрона от требуемой формы, а также из-за конечной точности расчета фокусного расстояния стационарной тепловой линзы, которое определялось в приближении постоянной температуры всей боковой поверхности лазерного кристалла без учета областей, не используемых для отвода тепла, и без учета ее нагрева в течение цикла.

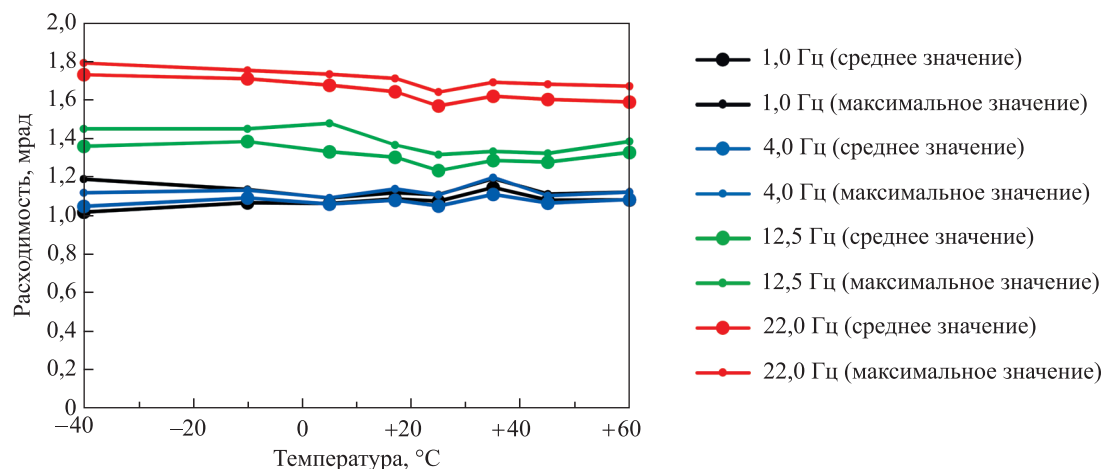


Рис. 6. Среднее и максимальное экспериментально полученные значения расходимости излучения для частот следования импульсов 1,0; 4,0; 12,5; 22,0 Гц

Fig. 6. Average and maximum experimentally obtained values of divergence for pulse repetition rates of 1.0; 4.0; 12.5; 22.0 Hz

Существует несколько причин, по которым измеренные значения расходимости для частот следования импульсов 1,0 и 4,0 Гц значительно превышают расчетные значения, а для частот следования импульсов 12,5 и 22,0 Гц согласуются с расчетными значениями с точностью не хуже 10 %. На расходимость при низких частотах следования импульсов оказывает влияние мгновенная тепловая линза, сформированная в кристалле сразу после поглощения излучения накачки перед началом генерации лазерного излучения. Неоптимальная юстировка лазерного резонатора в большей степени отражается на менее устойчивом резонаторе [22, р. 279], в данном случае на резонаторе с более низкой частотой следования импульсов. Для частоты следования импульсов 1,0 Гц расходимость лазерных импульсов оценивалась в приближении дифракционной расходимости излучения с плоским волновым фронтом, проходящим через круглое отверстие, без учета иного влияния. В оценке расходимости для частот следования импульсов от 4,0 Гц не учитывалось влияние дифракции на ограничивающей апертуре внутри резонатора. В случае когда поперечный размер световой зоны лазерного кристалла мало отличается от размера отверстия защитной диафрагмы, дифракционная составляющая расходимости для высоких частот следования импульсов будет значительно снижена за счет уменьшения поперечных размеров пучка [13] в результате действия собирающей тепловой линзы внутри лазерного кристалла.

Расходимость лазерного пучка в конце цикла при частотах следования импульсов 12,5 и 22,0 Гц может быть снижена за счет подбора оптимального внутреннего диаметра защитной диафрагмы (не менее 3,7 мм), при котором моды высших порядков при частотах следования импульсов 12,5 и 22,0 Гц будут значительно подавлены, но вместе с тем с учетом экранирования энергия лазерного импульса будет составлять не менее 80 мДж во всем диапазоне частот следования импульсов.

Измерение двойного среднеквадратичного углового отклонения лазерного пучка от усредненного положения. Определены энергетические центры масс профилей лазерного излучения для различных частот следования импульсов в дальней зоне (рис. 7).

Кроме того, определены максимальные и двойные среднеквадратичные угловые отклонения лазерного пучка от усредненного положения для частоты следования импульсов 4,0 Гц при различных частотах следования импульсов (рис. 8). Количество точек для каждого цикла составляло от 45 до 170. Максимальные угловые отклонения не превышают 0,4 мрад, а двойные среднеквадратичные угловые отклонения – 0,5 мрад. Наибольшие отклонения направления лазерного пучка наблюдаются для самой высокой частоты следования импульсов (22,0 Гц), а также для температуры окружающей среды -40°C .

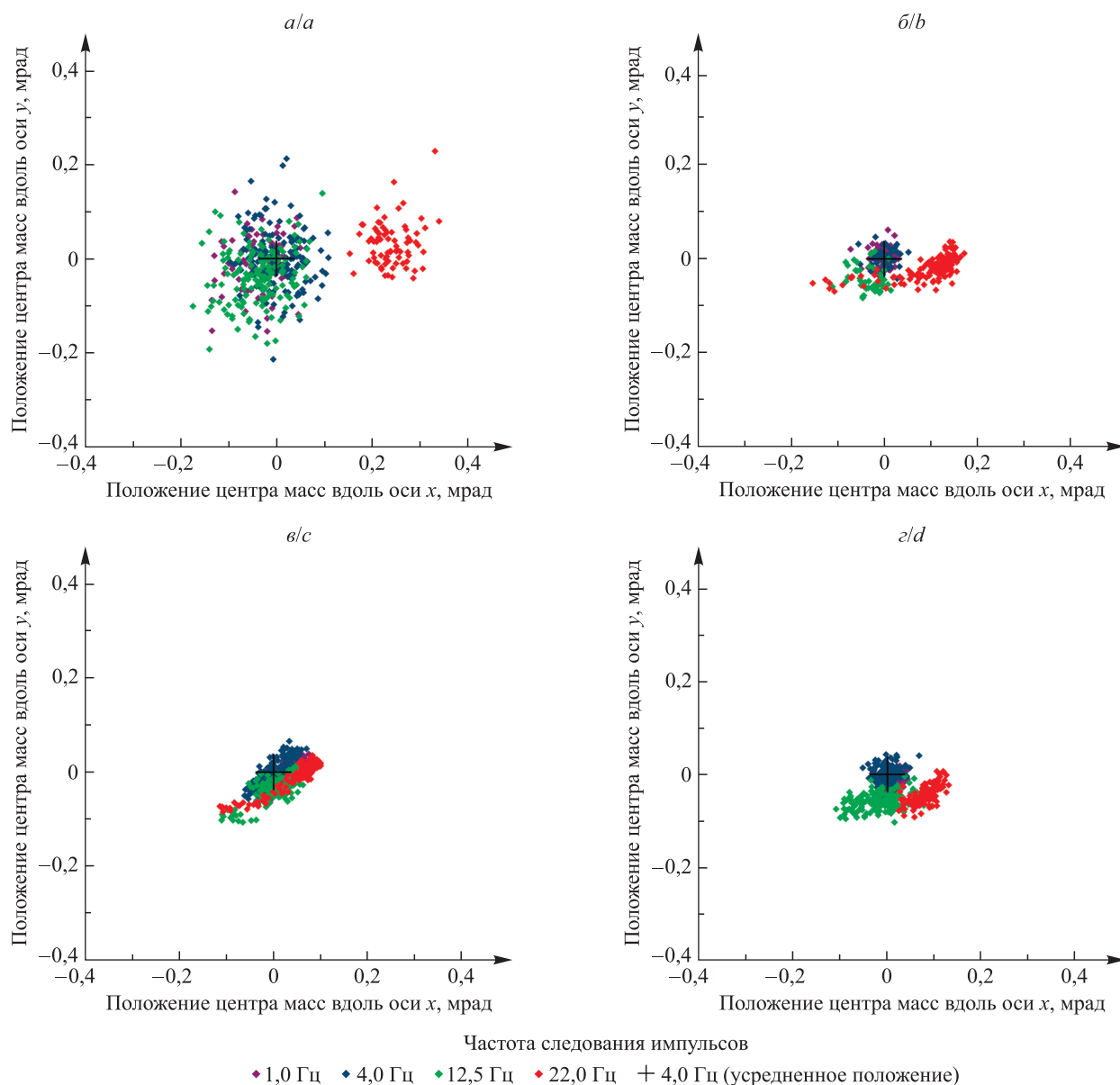


Рис. 7. Экспериментально полученное распределение поперечных угловых положений центров масс лазерного пучка с частотами следования импульсов 1,0; 4,0; 12,5; 22,0 Гц и их усредненное положение для частоты следования импульсов 4,0 Гц в течение цикла длительностью 2 мин при температуре окружающей среды -40°C (а), $+5^{\circ}\text{C}$ (б), $+35^{\circ}\text{C}$ (в), $+60^{\circ}\text{C}$ (г)

Fig. 7. Experimentally obtained angular position distribution of laser beam centroids during 2 min cycle for pulse repetition rates of 1.0; 4.0; 12.5; 22.0 Hz and its averaged position for a pulse repetition rate of 4.0 Hz at ambient temperature of -40°C (a), $+5^{\circ}\text{C}$ (b), $+35^{\circ}\text{C}$ (c), $+60^{\circ}\text{C}$ (d)

Изменение направления лазерных импульсов может происходить по ряду причин. Корпус лазера деформируется вследствие изменения температуры окружающей среды, а также в результате работы элемента Пельтье и нагрева лазерных диодных матриц, что может вызывать разъюстировку резонатора и смещение направления лазерного пучка. К разъюстировке также могут приводить деформации лазерного кристалла и деталей отражателя под воздействием излучения накачки.

Помимо деформаций, разъюстировку и смещение направления выходящего из резонатора излучения вызывает поперечный градиент температуры, возникающий в лазерном кристалле из-за неравномерности мгновенной тепловой линзы при односторонней накачке.

Неравномерный нагрев деталей отражателя вследствие частичного поглощения энергии накачки и однонаправленный поток тепла с отражателя на корпус также оказывают влияние на градиент температуры в лазерном кристалле. Сдвиг длины волны накачки в результате нагрева лазерных диодных матриц с последующим изменением профиля накачки и мгновенной тепловой линзы, а также рост оптической силы тепловой линзы и вызванное им изменение модового состава во время формирования стационарной тепловой линзы могут приводить к смещению направления выходящего излучения.

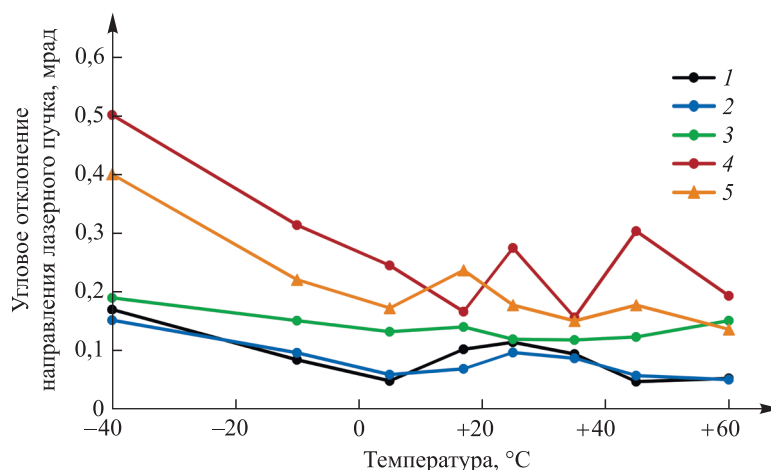


Рис. 8. Экспериментально полученная зависимость угловых отклонений направления лазерного пучка относительно усредненного положения центра масс для частоты следования импульсов 4,0 Гц от температуры:
1–4 – двойные среднеквадратичные угловые отклонения
для частот следования импульсов 1,0; 4,0; 12,5; 22,0 Гц соответственно;
5 – максимальное зарегистрированное значение отклонения

Fig. 8. Experimentally obtained dependence of the laser beam direction deviations relative to averaged centroid position for a pulse repetition rate of 4.0 Hz on temperature:
1–4 – double standard deviations for pulse repetition rates 1.0; 4.0; 12.5; 22.0 Hz respectively;
5 – maximum deviation value obtained

На увеличение значений углового отклонения лазерного пучка при температуре окружающей среды $-40\text{ }^{\circ}\text{C}$ оказывают влияние условия проведения измерений. Использование обдува окна термокамеры приводит к неоднородности температурного распределения воздуха в ходе распространения лазерного пучка, что, в свою очередь, вызывает рост величины двойных среднеквадратичных угловых отклонений энергетических центров масс лазерного пучка в дальней зоне.

Рассмотрен процесс изменения пространственного распределения интенсивности лазерного излучения в дальней зоне для частоты следования импульсов 22,0 Гц при температуре окружающей среды $+35\text{ }^{\circ}\text{C}$ (рис. 9). Форма и положение энергетического центра масс лазерного пучка после начала работы лазера изменяются. В течение первых 5 с происходит незначительное смещение энергетического центра масс по горизонтали влево при небольшом увеличении размеров пучка. После 5-й и до 20-й секунды наблюдаются постепенный рост размеров пучка и смещение энергетического центра масс вправо. Модовый состав лазерного пучка формируется в течение 20 с. Спустя 20 с после начала работы лазера изменение положения и увеличение размеров пучка в дальней зоне останавливаются. Изображение пучка в дальней зоне через 20 с после начала работы лазера идентично изображению пучка через 120 с после начала работы лазера, так как конструкция лазера достигает состояния, аналогичного стационарному состоянию, при котором для каждого последующего импульса прекращается рост и устанавливается близкая к постоянной от импульса к импульсу временная зависимость распределения температуры в корпусе, отражателе и лазерном кристалле.

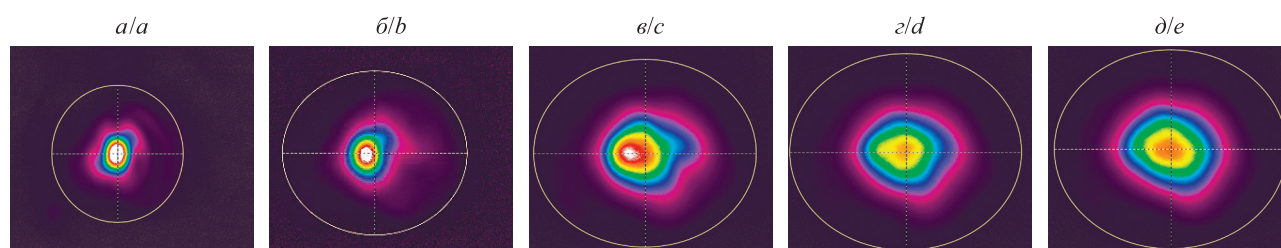


Рис. 9. Экспериментально полученное пространственное распределение интенсивности лазерного излучения в дальней зоне для частоты следования импульсов 22,0 Гц при температуре окружающей среды $+35\text{ }^{\circ}\text{C}$:
а – 1 с после начала работы лазера; б – 5 с после начала работы лазера; в – 12 с после начала работы лазера;
г – 20 с после начала работы лазера; д – 120 с после начала работы лазера

Fig. 9. Experimentally obtained spatial far-field intensity distribution of laser beam at ambient temperature of $+35\text{ }^{\circ}\text{C}$ for pulse repetition rate of 22.0 Hz:
а – 1 s after start; б – 5 s after start; в – 12 s after start;
г – 20 s after start; д – 120 s after start

Стабильность направления лазерного пучка для высоких частот следования импульсов может быть повышена путем использования более механически стабильной конструкции корпуса и тепловой изоляции от нее источника накачки, а также за счет выбора системы накачки, обеспечивающей более равномерный профиль поглощения.

Определение дальности измерений

Для дальномера при измерении расстояния до объекта, поверхность которого отражает свет по закону Ламберта [23], зависимость пиковой мощности, падающей на чувствительную площадку фотоприемного устройства (P_r), от мощности излучения лазера (P_{tr}) и дальности протяженного объекта (d) описывается формулой

$$P_r = P_{tr} \tau_{tr} \tau_{atm}^2 \rho \tau_r \cdot 2 \cos \beta \frac{S}{2\pi d^2} \frac{t_0}{t_b},$$

где $P_{tr} = \frac{E_{tr}}{t_0}$ – пиковая мощность излучения на выходе из лазера, E_{tr} – энергия импульса лазера, а t_0 – длительность импульса лазера; τ_{tr} – пропускание передающего канала системы дальномера; τ_{atm} – пропускание атмосферы; ρ – коэффициент отражения исследуемого удаленного объекта на длине волны 1064 нм; τ_r – коэффициент пропускания приемной части дальномера; β – угол падения лазерного излучения на поверхность исследуемого удаленного объекта; S – площадь апертуры объектива приемного канала дальномера; t_b – длительность уширенного импульса лазера в результате отражения под углом к поверхности. Величины t_b и τ_{atm} [24] определяются как

$$t_b = t_0 + 2 \frac{d \theta \operatorname{tg} \beta}{c},$$

$$\tau_{atm} = \exp \left(-3,912 \frac{d}{S_m} \left(\frac{0,55}{\lambda} \right)^q \right),$$

$$q = 0,585 (S_m)^{\frac{1}{3}},$$

где c – скорость света; S_m – метеорологическая дальность видимости, км; значения λ приводятся в микрометрах.

При отсутствии высокоинтенсивного шумового сигнала, вызываемого отражением солнечного света от поверхности Земли, дальность измерений лазера может быть определена как расстояние d , на котором мощность полезного сигнала P_r , падающего на фотоприемник дальномера, превышает пороговую мощность фотоприемного устройства P_{th} .

Проведен расчет мощности сигнала, падающего на чувствительную площадку, для объекта, расположенного под углом $\beta = 45^\circ$ на расстоянии $d = 20$ км. Используемые типовые значения параметров дальномера приведены в табл. 4.

Таблица 4

Внутренние параметры дальномера, использованные для расчета максимальной рабочей дальности

Table 4

Internal parameters used to calculate maximum operating distance for rangefinder

Параметры	Значение
E_{tr} , Дж	$80 \cdot 10^{-3}$
t_0 , с	$10 \cdot 10^{-9}$
τ_{tr}	0,97
ρ	0,3
τ_r	0,6
S , м ²	0,003
S_m , км	20
k	5
P_{th} , Вт	$10 \cdot 10^{-9}$

Для обеспечения низкой расходимости лазерного излучения (до $\theta = 0,3$ мрад) следует использовать расширяющий телескоп с кратностью не более $\times 0,167$ на выходе излучения из резонатора. Тогда световой диаметр выходного окуляра телескопа будет составлять от 24 мм. Размер лазерного излучателя с расширяющим телескопом может быть уменьшен до $60 \times 50 \times 200$ мм для применения в составе оптико-электронных систем на борту беспилотных летательных аппаратов.

Расчетная мощность излучения, падающая на чувствительную площадку, превышает пороговую мощность фотоприемного устройства в 3 раза, что позволяет зарегистрировать поступивший сигнал.

Заключение

Показана возможность функционирования лазера с односторонней диодной накачкой и термоэлектрической системой стабилизации температуры источника накачки в диапазоне температур окружающей среды от -40 до $+60$ °C при частотах следования импульсов 1,0; 4,0; 12,5; 22,0 Гц в течение 2 мин. При энергии импульса лазерного излучения не менее 80 мДж расходимость лазерного излучения составляет от 1,0 до 1,8 мрад, максимальное угловое отклонение направления лазерного пучка в дальней зоне не превышает 0,4 мрад. Пространственные характеристики излучения слабо зависят от температуры окружающей среды и устанавливаются постоянными спустя не более 20 с после включения лазера.

Показана возможность применения излучателя в составе дальномера для работы на расстоянии до 20 км при использовании на выходе излучения из резонатора расширяющего телескопа с кратностью не более $\times 0,167$.

Проведены расчет и экспериментальное измерение расходимости лазерного излучения для частот следования импульсов 12,5 и 22,0 Гц. Расчетные и измеренные значения совпадают в пределах погрешности измерений. В дальнейшем, помимо уменьшения габаритов лазера, для повышения стабильности пучка планируется добавление тепловой изоляции между корпусом и источником накачки, а также разработка более механически стабильной конструкции корпуса лазера и формы отражателя, обеспечивающей более равномерный профиль поглощения излучения накачки.

Библиографические ссылки

1. Coney AT, Beecher S, Damzen MJ, Elder I. High-energy Q-switched Nd:YAG oscillator and amplifier development for large-mode, low-alignment sensitivity applications. *Laser Physics Letters*. 2022;19(8):085001. DOI: 10.1088/1612-202X/ac73f9.
2. Sabatini R, Richardson MA, editors. *Airborne laser systems testing and analysis*. [S. l.]: Research and Technology Organisation, North Atlantic Treaty Organisation; 2010. Report No.: RTO-AG-300-V26. Chapter 2.1, General; p. 2-1 (RTO AGARDograph 300); (Flight test techniques series; volume 26).
3. Maini AK. *Handbook of defence electronics and optronics: fundamentals, technologies and systems*. Hoboken: John Wiley & Sons; 2018. Chapter 10.3.5.1, Nd:YAG and Nd:Glass range finders; p. 874–875.
4. Sabatini R, Richardson MA, Gardi A, Ramasamy S. Airborne laser sensors and integrated systems. *Progress in Aerospace Sciences*. 2015;79:15–53. DOI: 10.1016/j.paerosci.2015.07.002.
5. Polyakov VM, Kovalev AV, Uskov AV. Optimisation of the optical scheme of a compact double-pass Nd:YAG amplifier for range finding. *Quantum Electronics*. 2018;48(1):13–18. DOI: 10.1070/QEL16539.
6. Bahuguna KC, Sharma P, Vasan NS, Gaba SP. Laser range sensors. *Defence Science Journal*. 2007;57(6):881–890. DOI: 10.14429/dsj.57.1827.
7. Semwal K, Bhatt SC. Diode-pumped Nd:YAG eye-safe laser. *Applied Innovative Research* [Internet]. 2020 [cited 2023 February 25];2(3):181–184. Available from: <https://nopr.niscares.in/bitstream/123456789/55990/1/AIR%202%283%29%20181-183.pdf>.
8. Ashraf MM, Siddique M. Simulation of diode-pumped Q-switched Nd:YAG laser generating eye-safe signal in IOPO environment. *Optics and Photonics Journal*. 2012;2(3):167–172. DOI: 10.4236/opj.2012.23025.
9. Kaskow M, Gorajek L, Zendzian W, Jabczynski J. MW peak power KTP-OPO-based «eye-safe» transmitter. *Opto-Electronics Review*. 2018;26(2):188–193. DOI: 10.1016/j.opelre.2018.04.005.
10. Maini AK. *Handbook of defence electronics and optronics: fundamentals, technologies and systems*. Hoboken: John Wiley & Sons; 2018. Chapter 10.3.7, Some representative LRF systems; p. 878–884.
11. Goldberg L, Nettleton J, Shilling B, Trussel W, Hays A. Compact laser sources for laser designation, ranging and active imaging. In: Wood GL, Dubinskii MA, editors. *Laser source technology for defence and security III. Proceedings of the defense and security symposium; 2007 April 9–10; Orlando, USA*. Bellingham: The International Society for Optical Engineering; 2007. Paper No. 65520G (Proceedings of SPIE; volume 6552). DOI: 10.1117/12.722143.
12. Nejad SM, Olyaei S. Low-noise high-accuracy TOF laser range finder. *American Journal of Applied Sciences*. 2008;5(7):755–762. DOI: 10.3844/ajassp.2008.755.762.
13. Орехова ВЕ, Кисель ВЭ, Орехов КА. Импульсный лазер с диодной накачкой для дальномеров, работающих в широком диапазоне температур. *Приборы и методы измерений*. 2023;14(1):27–37. DOI: 10.21122/2220-9506-2023-14-1-27-37.
14. Degnan JJ. Theory of the optimally coupled Q-switched laser. *IEEE Journal of Quantum Electronics*. 1989;25(2):214–220. DOI: 10.1109/3.16265.
15. Jensen L, Jupé M, Mädebach H, Ehlers H, Starke K, Ristau D, et al. Damage threshold investigations of high-power laser optics under atmospheric and vacuum conditions. In: Exarhos GJ, Guenther AH, Lewis KL, Ristau D, Soileau MJ, Stolz CJ, editors. *Laser-induced damage in optical materials – 2006. Proceedings of the 38th annual Boulder damage symposium; 2006 September 25–27; Boulder, USA*. Bellingham: The International Society for Optical Engineering; 2006. Paper No. 64030U (Proceedings of SPIE; volume 6403). DOI: 10.1117/12.696443.

16. Wernham D. Optical coatings in space. In: Lequime M, Macleod HA, Ristau D, editors. *Advances in optical thin films IV. Proceedings of SPIE optical systems design; 2011 September 5–7; Marseille, France*. Bellingham: The International Society for Optical Engineering; 2011. Paper No. 81680F (Proceedings of SPIE; volume 8168). DOI: 10.1117/12.902318.
17. Lu J, Prabhu M, Song J, Li C, Xu J, Ueda K, et al. Optical properties and highly efficient laser oscillation of Nd:YAG ceramics. *Applied Physics B: Lasers and Optics*. 2000;71(4):469–473. DOI: 10.1007/s003400000394.
18. Hodgson N, Weber H. *Laser resonators and beam propagation: fundamentals, advanced concepts and applications*. 2nd edition. New York: Springer; 2005. Chapter 17.1, Porro prism resonators; p. 585–591.
19. Svelto O. *Principles of lasers*. 5th edition. Hanna DC, translator and editor. New York: Springer; 2010. XXI, 620 p. DOI: 10.1007/978-1-4419-1302-9.
20. Hodgson N, Weber H. *Laser resonators and beam propagation: fundamentals, advanced concepts and applications*. 2nd edition. New York: Springer; 2005. Chapter 5.2.3, The TEM₀₀ mode; p. 235–241.
21. Аняньев ЮА. *Оптические резонаторы и лазерные пучки*. Москва: Наука; 1990. 264 с.
22. Hodgson N, Weber H. *Laser resonators and beam propagation: fundamentals, advanced concepts and applications*. 2nd edition. New York: Springer; 2005. Chapter 5.4.2, Two aperture limited mirrors; p. 277–279.
23. Burns HN, Christodoulou CG, Boreman GD. System design of a pulsed laser rangefinder. *Optical Engineering*. 1991;30(3):323–329. DOI: 10.1117/12.55801.
24. Ставров АА, Поздняков МГ. Импульсные лазерные дальномеры для оптико-локационных систем. *Доклады БГУИР* [Интернет]. 2003 [процитировано 18 марта 2023 г.];1(2):59–65. Доступно по: <https://libeldoc.bsuir.by/handle/123456789/30959>.

References

1. Coney AT, Beecher S, Damzen MJ, Elder I. High-energy Q-switched Nd:YAG oscillator and amplifier development for large-mode, low-alignment sensitivity applications. *Laser Physics Letters*. 2022;19(8):085001. DOI: 10.1088/1612-202X/ac73f9.
2. Sabatini R, Richardson MA, editors. *Airborne laser systems testing and analysis*. [S. l.]: Research and Technology Organisation, North Atlantic Treaty Organisation; 2010. Report No.: RTO-AG-300-V26. Chapter 2.1, General; p. 2-1 (RTO AGARDograph 300); (Flight test techniques series; volume 26).
3. Maini AK. *Handbook of defence electronics and optronics: fundamentals, technologies and systems*. Hoboken: John Wiley & Sons; 2018. Chapter 10.3.5.1, Nd:YAG and Nd:Glass range finders; p. 874–875.
4. Sabatini R, Richardson MA, Gardi A, Ramasamy S. Airborne laser sensors and integrated systems. *Progress in Aerospace Sciences*. 2015;79:15–53. DOI: 10.1016/j.paerosci.2015.07.002.
5. Polyakov VM, Kovalev AV, Uskov AV. Optimisation of the optical scheme of a compact double-pass Nd:YAG amplifier for range finding. *Quantum Electronics*. 2018;48(1):13–18. DOI: 10.1070/QEL16539.
6. Bahuguna KC, Sharma P, Vasan NS, Gaba SP. Laser range sensors. *Defence Science Journal*. 2007;57(6):881–890. DOI: 10.14429/dsj.57.1827.
7. Semwal K, Bhatt SC. Diode-pumped Nd:YAG eye-safe laser. *Applied Innovative Research* [Internet]. 2020 [cited 2023 February 25];2(3):181–184. Available from: <https://nopr.niscares.in/bitstream/123456789/55990/1/AIR%202%283%29%20181-183.pdf>.
8. Ashraf MM, Siddique M. Simulation of diode-pumped Q-switched Nd:YAG laser generating eye-safe signal in IOPO environment. *Optics and Photonics Journal*. 2012;2(3):167–172. DOI: 10.4236/opj.2012.23025.
9. Kaskow M, Gorajek L, Zendzian W, Jabczynski J. MW peak power KTP-OPO-based «eye-safe» transmitter. *Opto-Electronics Review*. 2018;26(2):188–193. DOI: 10.1016/j.opelre.2018.04.005.
10. Maini AK. *Handbook of defence electronics and optronics: fundamentals, technologies and systems*. Hoboken: John Wiley & Sons; 2018. Chapter 10.3.7, Some representative LRF systems; p. 878–884.
11. Goldberg L, Nettleton J, Shilling B, Trussel W, Hays A. Compact laser sources for laser designation, ranging and active imaging. In: Wood GL, Dubinskii MA, editors. *Laser source technology for defence and security III. Proceedings of the defense and security symposium; 2007 April 9–10; Orlando, USA*. Bellingham: The International Society for Optical Engineering; 2007. Paper No. 65520G (Proceedings of SPIE; volume 6552). DOI: 10.1117/12.722143.
12. Nejad SM, Olyae S. Low-noise high-accuracy TOF laser range finder. *American Journal of Applied Sciences*. 2008;5(7):755–762. DOI: 10.3844/ajassp.2008.755.762.
13. Orekhova VE, Kisel VE, Orekhov KA. Diode-pumped laser for rangefinders operating over wide temperature range. *Devices and Methods of Measurements*. 2023;14(1):27–37. Russian. DOI: 10.21122/2220-9506-2023-14-1-27-37.
14. Degnan JJ. Theory of the optimally coupled Q-switched laser. *IEEE Journal of Quantum Electronics*. 1989;25(2):214–220. DOI: 10.1109/3.16265.
15. Jensen L, Jupé M, Mädebach H, Ehlers H, Starke K, Ristau D, et al. Damage threshold investigations of high-power laser optics under atmospheric and vacuum conditions. In: Exarhos GJ, Guenther AH, Lewis KL, Ristau D, Soileau MJ, Stolz CJ, editors. *Laser-induced damage in optical materials – 2006. Proceedings of the 38th annual Boulder damage symposium; 2006 September 25–27; Boulder, USA*. Bellingham: The International Society for Optical Engineering; 2006. Paper No. 64030U (Proceedings of SPIE; volume 6403). DOI: 10.1117/12.696443.
16. Wernham D. Optical coatings in space. In: Lequime M, Macleod HA, Ristau D, editors. *Advances in optical thin films IV. Proceedings of SPIE optical systems design; 2011 September 5–7; Marseille, France*. Bellingham: The International Society for Optical Engineering; 2011. Paper No. 81680F (Proceedings of SPIE; volume 8168). DOI: 10.1117/12.902318.
17. Lu J, Prabhu M, Song J, Li C, Xu J, Ueda K, et al. Optical properties and highly efficient laser oscillation of Nd:YAG ceramics. *Applied Physics B: Lasers and Optics*. 2000;71(4):469–473. DOI: 10.1007/s003400000394.
18. Hodgson N, Weber H. *Laser resonators and beam propagation: fundamentals, advanced concepts and applications*. 2nd edition. New York: Springer; 2005. Chapter 17.1, Porro prism resonators; p. 585–591.
19. Svelto O. *Principles of lasers*. 5th edition. Hanna DC, translator and editor. New York: Springer; 2010. XXI, 620 p. DOI: 10.1007/978-1-4419-1302-9.
20. Hodgson N, Weber H. *Laser resonators and beam propagation: fundamentals, advanced concepts and applications*. 2nd edition. New York: Springer; 2005. Chapter 5.2.3, The TEM₀₀ mode; p. 235–241.

21. Anan'ev YuA. *Opticheskie rezonatory i lazernye puchki* [Optical cavities and laser beams]. Moscow: Nauka; 1990. 264 p. Russian.
22. Hodgson N, Weber H. *Laser resonators and beam propagation: fundamentals, advanced concepts and applications*. 2nd edition. New York: Springer; 2005. Chapter 5.4.2, Two aperture limited mirrors; p. 277–279.
23. Burns HN, Christodoulou CG, Boreman GD. System design of a pulsed laser rangefinder. *Optical Engineering*. 1991;30(3): 323–329. DOI: 10.1117/12.55801.
24. Stavrov AA, Pozdniakov MG. Pulse laser rangefinders for optic location systems. *Doklady BGUIR* [Internet]. 2003 [cited 2023 March 18];1(2):59–65. Available from: <https://libeldoc.bsuir.by/handle/123456789/30959>. Russian.

Получена 04.10.2023 / исправлена 24.10.2023 / принята 25.10.2023.
Received 04.10.2023 / revised 24.10.2023 / accepted 25.10.2023.

ФИЗИКА И ТЕХНИКА ПОЛУПРОВОДНИКОВ

SEMICONDUCTOR PHYSICS AND ENGINEERING

УДК 621.382

МЕХАНИЗМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АЛЮМИНИЯ С ПОЛИКРЕМНИЕМ ПРИ ФОРМИРОВАНИИ ОМИЧЕСКОГО КОНТАКТА МЕТОДАМИ ДЛИТЕЛЬНОЙ И БЫСТРОЙ ТЕРМООБРАБОТОК

**В. А. ПИЛИПЕНКО^{1), 2)}, Н. С. КОВАЛЬЧУК¹⁾, Д. В. ЖИГУЛИН¹⁾,
Д. В. ШЕСТОВСКИЙ¹⁾, В. М. АНИЩИК²⁾, В. В. ПОНАРЕДОВ²⁾**

¹⁾«Интеграл» – управляющая компания холдинга «Интеграл»,
ул. Казинца, 121а, 220108, г. Минск, Беларусь

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

Установлено, что формирование омического контакта между алюминием и поликремнием протекает за счет взаимной диффузии алюминия в поликремний и кремния в алюминий. Показано, что их диффузия в основном протекает по межзеренной области как в пленке поликремния, так и в пленке алюминия. Определены коэффициенты диффузии алюминия в поликремний и кремния в алюминий при температуре термообработки 450 °С, используемой при создании полупроводниковых приборов и интегральных микросхем. Отмечено, что диффузионные процессы подчиняются эффекту Киркендалла, приводящему к смещению межфазной границы алюминий – поликремний к поверхности пленки двуокиси кремния вплоть до полного растворения поликремния в алюминии. Образование конгломератов поликремния происходит при остывании пленки алюминия за счет выделения из нее на поверхность пленки SiO₂ кремния. Выделение кремния начинается в местах расположения тройных точек (стыков трех зерен) в структуре пленки алюминия, поскольку из-за большой межзеренной области подвижность атомов кремния в них максимальна. В дальнейшем данные места становятся центрами сегрегации кремния, что и приводит к образованию конгломератов поликремния в пленке алюминия. В отличие от длительной термообработки применение быстрой термообработки не вызывает формирования таких конгломератов, а диффузионные процессы мало изменяют границу раздела алюминий – поликремний из-за короткого времени температурного воздействия.

Ключевые слова: диффузия; межзеренная область; граница раздела алюминий – поликремний; коэффициент диффузии; конгломерат поликремния; быстрая термообработка; длительная термообработка; растровая электронная микроскопия.

Образец цитирования:

Пилипенко ВА, Ковальчук НС, Жигулин ДВ, Шестовский ДВ, Анищик ВМ, Понарядов ВВ. Механизм взаимодействия алюминия с поликремнием при формировании омического контакта методами длительной и быстрой термообработок. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика*. 2024;1:42–48. EDN: FPDZZZ

For citation:

Pilipenka UA, Kovalchuk NS, Zhyhulin DV, Shestovski DV, Anishchik VM, Ponariadov VV. Mechanism of interaction of aluminium with polysilicon when forming an ohmic contact by methods long and rapid heat treatments. *Journal of the Belarusian State University. Physics*. 2024;1:42–48. Russian. EDN: FPDZZZ

Сведения об авторах см. на с. 48.

Information about the authors see p. 48.

MECHANISM OF INTERACTION OF ALUMINIUM WITH POLYSILICON WHEN FORMING AN OHMIC CONTACT BY METHODS LONG AND RAPID HEAT TREATMENTS

U. A. PILIPENKA^{a, b}, N. S. KOVALCHUK^a, D. V. ZHYHULIN^a,
D. V. SHESTOVSKI^a, V. M. ANISHCHIK^b, V. V. PONARIADOV^b

^a«Integral» – Holding Management Company, 121a Kazinka Street, Minsk 220108, Belarus

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

Corresponding author: D. V. Zhyhulin (zhygulin@mail.ru)

It has been established that the formation of ohmic contact between aluminium and polysilicon occurs due to the mutual diffusion of aluminium into polysilicon and silicon into aluminium. It is shown that their diffusion mainly occurs through the intergranular space in both the polysilicon film and the aluminium film. The diffusion coefficients of aluminium in polysilicon and silicon in aluminium were determined at a heat treatment temperature of 450 °C, used in the creating of semiconductor devices and integrated circuits. It is noted that diffusion processes obey the Kirkendall effect, leading to a displacement of the aluminium – polysilicon interface to the surface of the silicon dioxide film until the complete dissolution of polysilicon in aluminium. The formation of polysilicon conglomerates occurs when the aluminium film cools due to the release of silicon from it onto the surface of the SiO₂ film. The precipitation of silicon begins at the locations of triple points (the junction of three grains) in the structure of the aluminium film, since due to their large intergranular space, the mobility of silicon atoms in them is maximum. Subsequently, these places become centers of silicon segregation, which leads to the formation of polysilicon conglomerates in the aluminium film. In contrast to long heat treatment, the use of rapid heat treatment does not lead to the formation of such conglomerates, and diffusion processes little change the aluminium – polysilicon interface due to the short time of exposure to temperature.

Keywords: diffusion; intergranular space; aluminium – polysilicon interface; diffusion coefficient; silicon conglomerate; rapid heat treatment; long heat treatment; scanning electron microscopy.

Введение

Важным вопросом при создании полупроводниковых приборов и интегральных микросхем высокой степени интеграции и быстродействия является процесс металлизации. Он состоит в соединении определенным образом активных и пассивных элементов на одном кристалле. Основным моментом при этом является формирование надежных омических контактов к мелкозалегающим *p-n*-переходам биполярных транзисторов, сток-истоковым областям КМОП-транзисторов, низко- и высоколегированному поликремнию, а также контактов между несколькими слоями металлизации. Наиболее полно противоречивым требованиям, предъявляемым к материалу металлизации, отвечает алюминий [1–3].

Для обеспечения низкого контактного сопротивления при формировании контакта между различными уровнями разводки полупроводниковых приборов осуществляют длительную термическую или импульсную фотонную обработку системы алюминий – кремний при температуре 450–510 °C в течение 6–30 мин или 3–7 с соответственно [4]. Если имеющиеся литературные данные о процессах и механизмах формирования омических контактов между алюминием и кремнием, а также между слоями алюминиевой металлизации носят исчерпывающий характер [4–10], то аналогичные данные относительно контактов между алюминием и поликремнием практически отсутствуют.

Материалы и методы исследования

Для понимания механизмов взаимодействия алюминия с поликремнием при создании между ними омического контакта использовались результаты, полученные в работе [11]. Для дополнительного исследования границы раздела алюминий – поликремний до и после длительной и быстрой термообработки с поверхности образцов химическим травлением удалялась пленка алюминия и проводился анализ поверхности пленки поликремния на растровом электронном микроскопе (РЭМ) S-4800 (Hitachi, Япония) с энергодисперсионным спектрометром Quantax-200 (Bruker, Германия).

Результаты и их обсуждение

Как следует из работы [11], длительная термообработка структуры Al/poly-Si/SiO₂/Si при температуре 450 °C в течение 20 мин приводит к полному растворению поликремния в алюминии с последующей сегрегацией кремния на поверхности двуокиси кремния и образованием конгломератов поликремния при остывании пленки алюминия. Для объяснения данного процесса будем учитывать тот факт, что взаимодействие алюминия с поликремнием сопровождается потоком атомов кремния к межфазной границе

алюминий – поликремний и потоком атомов алюминия в противоположном направлении. Это приводит к их диффузионному перераспределению как в алюминии, так и в поликремнии. Поскольку структура этих пленок является поликристаллической, то диффузионные процессы в них идут в основном по межзеренной области, а следовательно, протекают ускоренно [12]. Учитывая малую растворимость кремния в алюминии и алюминия в поликремнии, это должно приводить к их более высокой растворимости в межзеренной области и глубокой диффузии по толщине пленок в широком диапазоне температур.

Для подтверждения предположения о высокой растворимости кремния в межзеренной области пленки алюминия изучалась поверхность поликремния в исходной структуре Al/poly-Si/SiO₂/Si после удаления с нее пленки алюминия. Поскольку магнетронное напыление пленки алюминия на структуру poly-Si/SiO₂/Si проводится при температуре ~300 °С, то можно предположить, что кремний диффундирует по межзеренной области, чему способствует мелкозернистая структура поликремния. Так как размер зерен пленки поликремния не превышает 100 нм, а размер зерен пленки алюминия составляет 0,3–1,0 мкм, то площадь межзеренной области для поликремния будет значительно большей, чем для алюминия. Если учесть, что межзеренная область характеризуется высокой концентрацией дефектов и координационно-ненасыщенных связей, являющихся ловушками для диффундирующих элементов, то благодаря обменному механизму захвата происходит высвобождение атомов алюминия (кремний замещает алюминий) в пленке алюминия и атомов кремния (алюминий замещает кремний) в пленке поликремния. Данный процесс будет иметь место как при напылении пленки алюминия на структуру poly-Si/SiO₂/Si, так и при термообработке полученной структуры Al/poly-Si/SiO₂/Si. Обменный механизм захвата будет осуществляться до тех пор, пока все ловушки не будут заполнены и процесс не придет к своему насыщению. Это означает, что после удаления алюминия с поверхности поликремния распределение захваченного на ловушки кремния будет соответствовать картине распределения границ зерен в пленке алюминия. Анализ изображения такой поверхности, полученного с помощью РЭМ (рис. 1), полностью подтверждает модель взаимной диффузии алюминия и кремния в указанной выше системе.

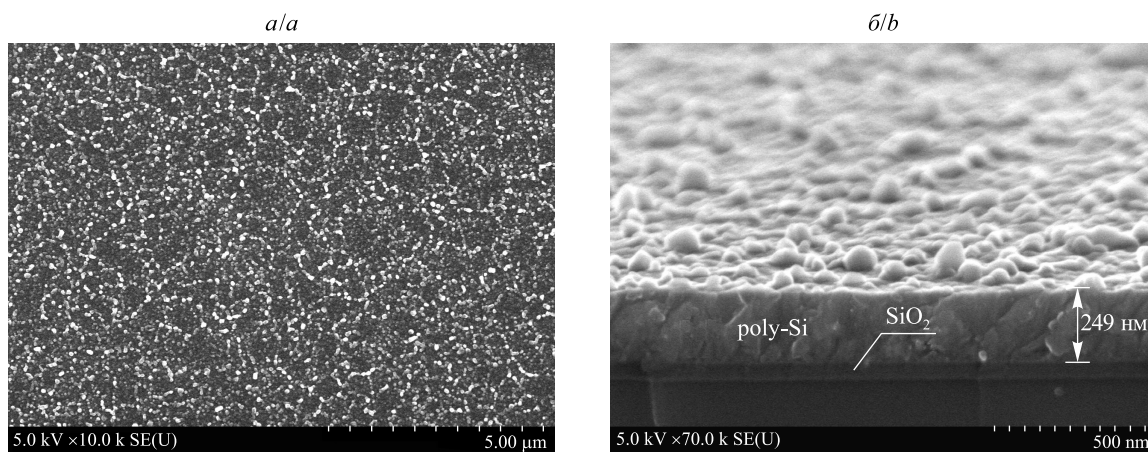


Рис. 1. РЭМ-изображение поверхности поликремния в структуре Al/poly-Si/SiO₂/Si с удаленной пленкой алюминия сразу после ее напыления:

a – поверхность поликремния без наклона; *б* – поверхность поликремния с наклоном под углом 70°

Fig. 1. Scanning electron microscopy (SEM) image of a polysilicon surface in the Al/poly-Si/SiO₂/Si structure with the aluminium film removed immediately after its deposition:

a – polysilicon surface without tilt; *b* – polysilicon surface at an angle of 70°

Для понимания механизма полного растворения поликремния в алюминии с последующим образованием в нем конгломератов поликремния рассмотрим процесс взаимной диффузии в системе алюминий – поликремний при длительной термообработке (450 °С, 20 мин). Поскольку такой процесс должен сопровождаться смещением межфазной границы алюминий – поликремний в сторону двуокси кремния вплоть до достижения алюминием ее поверхности, то на первом этапе определим возможность протекания взаимной диффузии в данной системе.

Оценим коэффициенты диффузии кремния в алюминий и алюминия в поликремний с учетом того, что имеет место полное растворение поликремния в алюминии. В этом случае глубина диффузии кремния в алюминий будет соответствовать толщине пленки алюминия (~1,5 мкм), а глубина диффузии алюминия в поликремний – толщине пленки поликремния (0,25 мкм). Для вычисления коэффициентов диффузии (*D*) воспользуемся хорошо известным выражением, описывающим зависимость глубины диффузии (*h*) от времени термообработки (*t*) [13]:

$$h = 2(Dt)^{\frac{1}{2}}. \quad (1)$$

Расчет по формуле (1) показал, что коэффициенты диффузии кремния в алюминий (D_{Si}) и алюминия в поликремний (D_{Al}) для системы алюминий – поликремний при формировании между ними омического контакта с учетом времени термообработки ($t = 20$ мин) составляют $D_{Si} = 4,6 \cdot 10^{-6}$ см²/с и $D_{Al} = 1,3 \cdot 10^{-7}$ см²/с. Как видно из результатов расчета, $D_{Si} \gg D_{Al}$, следовательно, согласно эффекту Киркендалла [8] межфазная граница алюминий – поликремний должна перемещаться в сторону двуокиси кремния вплоть до достижения алюминием ее поверхности, т. е. до полного растворения поликремния в алюминии.

Реализация данного процесса обусловлена, с одной стороны, достаточной концентрацией подвижных атомов кремния и алюминия в межзеренной области пленок поликремния и алюминия соответственно, а с другой стороны, наличием свободной межзеренной области в пленке алюминия.

Выполнение первого условия объясняется значительно большей площадью межзеренной области в поликремнии, а следовательно, и большим количеством ловушек для алюминия. В процессе взаимной диффузии алюминия и кремния происходит рост концентрации свободного кремния в этой области за счет захвата им алюминия с последующей диффузией кремния в алюминий. Учитывая, что в межзеренной области поликремния, кроме кремния, высвобождающегося из-за захвата алюминия, имеется значительное количество подвижных атомов кремния, их общая концентрация будет достаточно высокой для быстрого протекания процесса растворения поликремния в алюминии.

Выполнение второго условия обусловлено тем, что вышеперечисленные процессы, связанные со взаимной диффузией в структуре Al/poly-Si/SiO₂/Si, идут по всему объему пленок поликремния и алюминия. Необходимо учитывать два обстоятельства: наличие в пленке алюминия тройных точек, в которых имеется большее свободное пространство [14], чем в межзеренной области в точке соприкосновения двух зерен, и большую толщину пленки алюминия (1,5 мкм) по сравнению с толщиной пленки поликремния (0,25 мкм). Эти два обстоятельства обеспечивают достаточное место для исключения насыщения алюминия кремнием при температуре 450 °С, приводя к полному растворению поликремния в алюминии. Поскольку максимальная свободная площадь в межзеренной области находится в тройных точках, то и концентрация кремния в них будет максимальной.

Анализ диаграммы фазового равновесия системы алюминий – поликремний показывает, что при повышении температуры увеличивается растворимость кремния в алюминии, а при понижении температуры происходит интенсивное выделение кремния из алюминия [5]. Следует отметить, что имеет место неравномерное выделение кремния на поверхность пленки двуокиси кремния при остывании структуры Al/poly-Si/SiO₂/Si, которое связано с неравномерной растворимостью кремния при взаимодействии алюминия с поликремнием. Поскольку максимальная концентрация кремния наблюдается в тройных точках межзеренной области, где подвижность атомов примеси максимальна, то при понижении температуры нагрева выделение кремния начинается именно с этих мест. В дальнейшем они становятся зародышами для формирования конгломератов поликремния. Протекание вышеуказанных процессов при длительной термообработке структуры Al/poly-Si/SiO₂/Si подтверждают данные, приведенные в работе [11], а также скан структуры Al/poly-Si/SiO₂/Si (рис. 2).

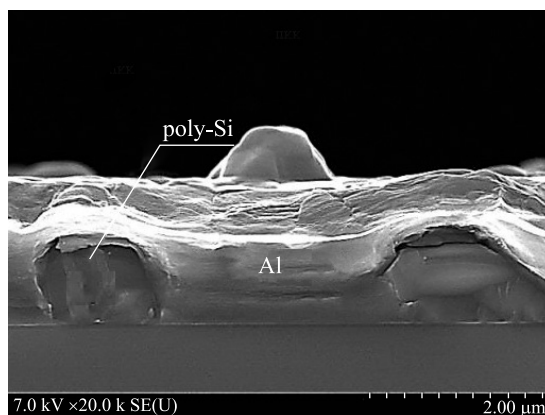


Рис. 2. РЭМ-изображение поперечного сечения структуры Al/poly-Si/SiO₂/Si после длительной термообработки (450 °С, 20 мин)

Fig. 2. SEM image of the cross section of the Al/poly-Si/SiO₂/Si structure after long heat treatment (450 °C, 20 min)

Совершенно иная картина наблюдается при использовании быстрой термообработки, обеспечивающей получение необходимых температур (450–510 °C) за 7 с при эффективном времени термообработки не более 2 с. Такой нагрев позволяет уменьшить время диффузионных процессов, ответственных за образование поликристаллических конгломератов в пленке алюминия, в 600 раз. Поскольку все описанные выше процессы носят чисто диффузионный характер, то следовало ожидать отсутствия образования конгломератов поликремния в алюминии при таком нагреве. Приведенные в работе [11] данные показывают, что при импульсном фотонном нагреве происходит незначительное растворение поликремния в алюминии без образования в нем конгломератов поликремния. Это подтверждают полученные методом РЭМ изображения поверхности поликремния в структуре Al/poly-Si/SiO₂/Si (рис. 3).

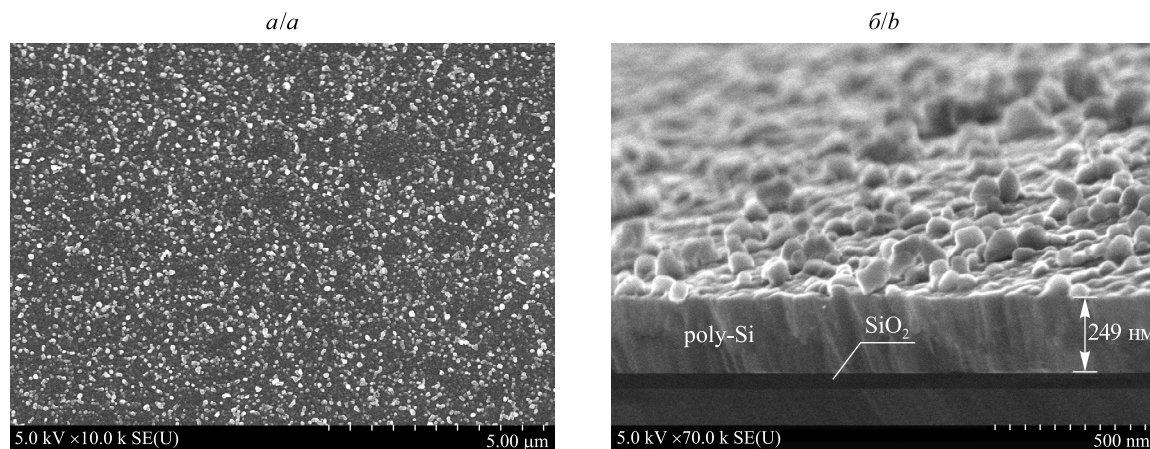


Рис. 3. РЭМ-изображение поверхности поликремния в структуре Al/poly-Si/SiO₂/Si с удаленной пленкой алюминия после быстрой термообработки (450 °C, 7 с):
а – поверхность поликремния без наклона; б – поверхность поликремния с наклоном под углом 70°

Fig. 3. SEM image of a polysilicon surface in the Al/poly-Si/SiO₂/Si structure with the aluminium film removed after rapid heat treatment (450 °C, 7 s):
а – polysilicon surface without tilt; б – polysilicon surface at an angle of 70°

Сопоставление микроструктуры поверхности поликремния до термообработки (см. рис. 1) с аналогичной микроструктурой после быстрой термообработки (см. рис. 3) показывает их полную идентичность, что подтверждает вывод о незначительных диффузионных процессах при ее проведении.

Заключение

Установлено, что формирование омического контакта между алюминием и поликремнием происходит за счет взаимной диффузии алюминия в поликремний и кремния в алюминий. При длительной термообработке данный процесс подчиняется эффекту Киркендалла, приводящему к смещению межфазной границы алюминий – поликремний к поверхности пленки двуокиси кремния вплоть до полного растворения поликремния в алюминии. Формирование конгломератов поликремния на поверхности SiO₂ протекает в местах расположения тройных точек в структуре пленки алюминия за счет выделения из нее кремния при остывании. Это приводит к образованию зародышей для формирования поликристаллических конгломератов кремния в результате его сегрегации в данных местах. Применение быстрой термообработки не вызывает образования таких конгломератов, а диффузионные процессы мало изменяют границу раздела алюминий – поликремний и не приводят к значительному растворению поликремния в алюминии из-за короткого времени температурного воздействия.

Библиографические ссылки

1. Могэб К, Фрейзер Д, Фичтнер У, Паррильо Л, Маркус Р, Стейдел К и др. *Технология СБИС. Книга 2*. Зи С, редактор. Москва: Мир; 1986. 453 с.
2. Достанко АП. *Технология интегральных схем*. Минск: Вышэйшая школа; 1982. 206 с.
3. Наливайко ОЮ, Солодуха ВА, Пилипенко ВА, Колос ВВ, Белоус АИ, Челядинский АР и др. *Базовые технологические процессы изготовления полупроводниковых приборов и интегральных микросхем на кремнии. Том 3*. Турцевич АС, редактор. Минск: Интегралполиграф; 2013. 783 с.
4. Пилипенко ВА. *Быстрые термообработки в технологии СБИС*. Минск: Издательский центр БГУ; 2004. 531 с.
5. Поут Дж, Ту К, Мейер Дж, редакторы. *Тонкие пленки: взаимная диффузия и реакции*. Москва: Мир; 1982. 576 с.

6. Пилипенко ВА, Молофеев ВМ, Пономарь ВН, Михнюк АН, Борздов ВМ. Моделирование морфологии пленок алюминия до и после различных видов термообработки. *Инженерно-физический журнал*. 2003;76(4):99–103.
7. Пилипенко ВА, Пономарь ВН, Горушко ВА. Управление свойствами тонкопленочных систем с применением импульсной фотонной обработки. *Инженерно-физический журнал*. 2003;76(4):95–98.
8. Пилипенко ВА, Пономарь ВН, Горушко ВА, Тарасик МИ, Янченко АМ. Улучшение термостабильности пленок алюминия и его сплавов на кремнии с использованием быстрой термообработки. *Вестник Белорусского государственного университета. Серия 1, Физика. Математика. Информатика*. 1998;3:53–58.
9. Пилипенко ВА, Рожков ВВ, Горушко ВА. Модель взаимодействия кремния с алюминием при фотонной обработке. *Электронная техника. Серия 2, Полупроводниковые приборы*. 1990;3:24–28.
10. Буйко ЛД, Лесникова ВП, Пилипенко ВА, Рожков ВВ. Особенности взаимодействия системы Al – Si при термической и импульсной оптической обработках. *Электронная техника. Серия 6, Материалы*. 1984;2:16–19.
11. Пилипенко ВА, Ковальчук НС, Жигулин ДВ, Шестовский ДВ, Анищик ВМ, Понарядов ВВ. Влияние длительной и быстрой термообработок на формирование границы раздела алюминий – поликремний. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика*. 2023;2:51–57. DOI: 10.33581/2520-2243-2023-2-51-57.
12. Афонин НН, Логачева ВА. Модель взаимодиффузии при формировании тонких пленок металлов на монокристаллическом кремнии в условиях ограниченной растворимости компонентов. *Конденсированные среды и межфазные границы*. 2022;24(1):129–135. DOI: 10.17308/kcmf.2022.24/9063.
13. Мазель ЕЗ, Пресс ФП. *Планарная технология кремниевых приборов*. Москва: Энергия; 1974. 384 с.
14. Поletaев ГМ, Новоселова ДВ, Зоря ИВ, Старостенков МД. Исследование формирования избыточного свободного объема в тройных стыках границ зерен при кристаллизации на примере никеля. *Физика твердого тела*. 2018;60(5):846–850. DOI: 10.21883/FTT.2018.05.45775.062.

References

1. Mogab C, Fraser D, Fichtner W, Parrillo L, Marcus R, Steidel C, et al. *Tekhnologiya SBIS. Kniga 2 [VLSI technology. Book 2]*. Sze C, editor. Moscow: Mir; 1986. 453 p. Russian.
2. Dostanko AP. *Tekhnologiya integral'nykh skhem [Integrated circuit technology]*. Minsk: Vyshhejschaja shkola; 1982. 206 p. Russian.
3. Nalivaiko OYu, Solodukha VA, Pilipenko VA, Kolos VV, Belous AI, Chelyadinskii AR, et al. *Bazovye tekhnologicheskie protsessy izgotovleniya poluprovodnikovyykh priborov i integral'nykh mikroskhem na kremnii. Tom 3 [Basic technological processes for manufacturing semiconductor devices and integrated circuits on silicon. Volume 3]*. Turtsevich AS, editor. Minsk: Integralpoligraf; 2013. 783 p. Russian.
4. Pilipenko VA. *Bystrye termoobrabotki v tekhnologii SBIS [Rapid heat treatment in VLSI technology]*. Minsk: Publishing Centre of the Belarusian State University; 2004. 531 p. Russian.
5. Poate JM, Tu KN, Mayer JW, editors. *Thin films: interdiffusion and reactions*. New York: John Wiley and Sons; 1978. X, 578 p. (The Electrochemical Society series).
Russian edition: Poate J, Tu K, Mayer J, editors. *Tonkie plenki: vzaimnaya diffuziya i reaktsii*. Moscow: Mir; 1982. 576 p.
6. Pilipenko VA, Molofeev VM, Ponomar VN, Mikhnyuk AN, Borzdov VM. [Modelling the morphology of aluminum films before and after various types of heat treatment]. *Inzhenerno-fizicheskii zhurnal*. 2003;76(4):99–103. Russian.
7. Pilipenko VA, Ponomar VN, Gorushko VA. [Controlling the properties of thin film systems using pulsed photonic processing]. *Inzhenerno-fizicheskii zhurnal*. 2003;76(4):95–98. Russian.
8. Pilipenko VA, Ponomar VN, Gorushko VA, Tarasik MI, Yanchenko AM. Improvement of thermal stability of aluminum and aluminum alloy films on silicon using rapid thermal processing. *Vestnik Belorusskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya 1, Fizika. Matematika. Informatika*. 1998;3:53–58. Russian.
9. Pilipenko VA, Rozhkov VV, Gorushko VA. [Model of interaction between silicon and aluminum during photonic processing]. *Electronic Engineering. Series 2, Semiconductor Devices*. 1990;3:24–28. Russian.
10. Buiko LD, Lesnikova VP, Pilipenko VA, Rozhkov VV. [Features of the interaction of the Al – Si system during thermal and pulsed optical processing]. *Electronic Engineering. Series 6, Materials*. 1984;2:16–19. Russian.
11. Pilipenko UA, Kovalchuk NS, Zhyhulin DV, Shestovski DV, Anishchik VM, Ponariadov VV. Effect of long-term and rapid thermal treatments on the formation of the aluminium – polysilicon interface. *Journal of the Belarusian State University. Physics*. 2023;2:51–57. Russian. DOI: 10.33581/2520-2243-2023-2-51-57.
12. Afonin NN, Logachova VA. A model of interdiffusion occurring during the formation of thin metal films on single-crystal silicon under conditions of limited solubility of the components. *Condensed Matter and Interphases*. 2022;24(1):129–135. Russian. DOI: 10.17308/kcmf.2022.24/9063.
13. Mazel EZ, Press FP. *Planarnaya tekhnologiya kremnievykh priborov [Planar silicon technology]*. Moscow: Ehnergiya; 1974. 384 p. Russian.
14. Poletaev GM, Novoselova DV, Zorya IV, Starostenkov MD. [Study of the formation of excess free volume at triple junctions of grain boundaries during crystallisation using the example of nickel]. *Fizika tverdogo tela*. 2018;60(5):846–850. Russian. DOI: 10.21883/FTT.2018.05.45775.062.

Получена 20.11.2023 / принята 28.11.2023.
Received 20.11.2023 / accepted 28.11.2023.

Авторы:

Владимир Александрович Пилипенко – доктор технических наук, член-корреспондент НАН Беларуси, профессор; заместитель директора по научному развитию государственного центра «Белмикроанализ»¹⁾, профессор кафедры физики полупроводников и нанoeлектроники физического факультета²⁾.

Наталья Станиславовна Ковальчук – кандидат технических наук, доцент; заместитель генерального директора, главный инженер.

Дмитрий Владимирович Жигулин – начальник сектора физико-технического анализа государственного центра «Белмикроанализ».

Дмитрий Викторович Шестовский – инженер-технолог отдела перспективных технологических процессов.

Виктор Михайлович Анищик – доктор физико-математических наук, профессор; профессор кафедры физики твердого тела и нанотехнологий физического факультета.

Владимир Васильевич Понарядов – кандидат физико-математических наук, доцент; заведующий учебной лабораторией кафедры физики твердого тела и нанотехнологий физического факультета.

Authors:

Uladzimir A. Pilipenka, doctor of science (engineering), corresponding member of the National Academy of Sciences of Belarus, full professor; deputy director for scientific development at the state centre «Belmicroanalysis»^a and professor at the department of semiconductor physics and nanoelectronics, faculty of physics^b.

office@bms.by

Natalia S. Kovalchuk, PhD (engineering), docent; deputy general director and chief engineer.

Dmitry V. Zhyhulin, head of the sector of physical and technical analysis, state centre «Belmicroanalysis».

zhygulin@mail.ru

Dmitry V. Shestovski, engineer-technologist at the department of advanced technological processes.

dshestovski@integral.by

Viktor M. Anishchik, doctor of science (physics and mathematics), full professor; professor at the department of solid state physics and nanotechnologies, faculty of physics.

Vladimir V. Ponariadov, PhD (physics and mathematics), docent; head of the training laboratory, department of solid state physics and nanotechnologies, faculty of physics.

ponariadov@bsu.by

УДК 535.343.2

ПЛАЗМОННОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ ИНФРАКРАСНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В ПЕРИОДИЧЕСКИХ СТРУКТУРАХ $\text{Si}/\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2/\text{Si}/\text{Al}$ С ОКОШЕЧНЫМ ПОВЕРХНОСТНЫМ СЛОЕМ

А. И. МУХАММАД¹⁾, О. Ю. НАЛИВАЙКО²⁾, В. В. КОЛОС²⁾, П. И. ГАЙДУК¹⁾

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

²⁾«Интеграл» – управляющая компания холдинга «Интеграл»,
ул. Казинца, 121а, 220108, г. Минск, Беларусь

Методом инфракрасной фурье-спектрометрии получены спектры пропускания и отражения периодических структур $\text{Si}/\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2/\text{Si}$ и $\text{Si}/\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2/\text{Si}/\text{Al}$ с окошечным поверхностным слоем до и после проведения термического отжига. Экспериментальные спектры пропускания и поглощения исследованы в сравнении с теоретическими спектрами, рассчитанными с помощью метода конечных разностей во временной области. Отмечена хорошая

Образец цитирования:

Мухаммад АИ, Наливайко ОЮ, Колос ВВ, Гайдук ПИ. Плазмонное поглощение инфракрасного излучения в периодических структурах $\text{Si}/\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2/\text{Si}/\text{Al}$ с окошечным поверхностным слоем. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика*. 2024;1:49–56.
EDN: BTVMYJ

For citation:

Mukhammad AI, Nalivaiko OYu, Kolos VV, Gaiduk PI. Plasmon absorption of infrared radiation in periodic structures $\text{Si}/\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2/\text{Si}/\text{Al}$ with window surface layer. *Journal of the Belarusian State University. Physics*. 2024;1:49–56. Russian.
EDN: BTVMYJ

Авторы:

Асия Имрановна Мухаммад – аспирантка кафедры физической электроники и нанотехнологий факультета радиоп физики и компьютерных технологий. Научный руководитель – П. И. Гайдук.

Олег Юрьевич Наливайко – кандидат технических наук; заместитель главного технолога.

Владимир Владимирович Колос – кандидат физико-математических наук; заместитель заведующего отраслевой лабораторией новых технологий и материалов.

Петр Иванович Гайдук – доктор физико-математических наук, доцент; профессор кафедры физической электроники и нанотехнологий факультета радиоп физики и компьютерных технологий.

Authors:

Asiya I. Mukhammad, postgraduate student at the department of physical electronics and nanotechnologies, faculty of radio-physics and computer technologies.

ret.muhammadail@bsu.by

Oleg Yu. Nalivaiko, PhD (engineering); deputy chief technologist.

onalivaiko@integral.by

Vladimir V. Kolos, PhD (physics and mathematics); deputy head of the laboratory of new technologies and materials.

vvkolos@integral.by

Peter I. Gaiduk, doctor of science (physics and mathematics), docent; professor at the department of physical electronics and nanotechnologies, faculty of radiophysics and computer technologies.

gaiduk@bsu.by

корреляция теоретических и экспериментальных спектров пропускания. Обнаружено, что после проведения термического отжига коэффициент пропускания структур снижается на 5–20 %. Продemonстрировано, что осаждение на обратную сторону структуры пленки алюминия толщиной 90 нм не влияет на коэффициент пропускания неотожженной структуры, но более чем на 20 % уменьшает коэффициент пропускания отожженной структуры. Показано, что интенсивность поглощения структуры n^+ -Si/poly-Si/Si₃N₄/SiO₂/Si/Al не опускается ниже 70 % в диапазоне длин волн 2,5–9,0 мкм, при этом интенсивность пика поглощения на длине волны 4,3 мкм составляет 87 %. Установлено, что появление в спектрах поглощения отожженной структуры пиков поглощения на длинах волн 4,3 и 8,0 мкм может быть связано с возникновением плазмонных эффектов из-за периодичности структуры.

Ключевые слова: плазмонное поглощение; периодические структуры; спектры поглощения; фурье-спектроскопия; легированный кремний.

Благодарность. Работа выполнена при финансовой поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (грант № T22-030).

PLASMON ABSORPTION OF INFRARED RADIATION IN PERIODIC STRUCTURES Si/Si₃N₄/SiO₂/Si/Al WITH WINDOW SURFACE LAYER

A. I. MUKHAMMAD^a, O. Yu. NALIVAICO^b, V. V. KOLOS^b, P. I. GAIDUK^a

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

^b«Integral» – Holding Management Company, 121a Kazinka Street, Minsk 220108, Belarus

Corresponding author: A. I. Mukhammad (rct.muhammada1@bsu.by)

Transmission and reflection spectra of periodic window structures Si/Si₃N₄/SiO₂/Si and Si/Si₃N₄/SiO₂/Si/Al before and after thermal annealing were obtained using Fourier transform infrared spectrometry. Experimental transmission and absorption spectra were studied in comparison with theoretical ones. Theoretical spectra were calculated using the finite difference time domain method. The theoretical transmission spectra are in good correlation with the experimental ones. It was found that after thermal annealing, the transmission level of the structure drops by 5–20 %. It has been shown that deposition of a 90 nm thick aluminium film on the back side of the structure does not affect the transmission level of the structure without annealing, but reduces the transmission level of the annealed structure by more than 20 %. It was noted that the absorption intensity of the n^+ -Si/poly-Si/Si₃N₄/SiO₂/Si/Al structure does not fall below 70 % in the wavelength range of 2.5–9.0 μm. In this case, the intensity of the absorption peak at a wavelength of 4.3 μm is 87 %. It has been established that the appearance of absorption peaks at wavelengths of 4.3 and 8.0 μm in the absorption spectra of the annealed structure can be associated with the manifestation of plasmonic effects arising due to the periodicity of the structure.

Keywords: plasmonic absorption; periodic structures; absorption spectra; Fourier spectroscopy; doped silicon.

Acknowledgements. This work was carried out with financial support of the Belarusian Republican Foundation for Fundamental Research (grant No. T22-030).

Введение

Недорогое производство поглотителей излучения в среднем и дальнем инфракрасных диапазонах имеет важное значение для изготовления различных устройств – от тепловизоров до инфракрасных датчиков [1]. В последние годы были предложены материалы и структуры, эффективно поглощающие излучение в инфракрасной области спектра. Среди них особый интерес представляют метаматериалы, которые могут быть спроектированы как совершенные поглотители [2; 3]. В этом случае отражение и пропускание практически полностью подавляются, что приводит к почти идеальному поглощению [4]. Кроме того, поглотители из метаматериалов обычно имеют толщину в диапазоне 0,5–3,0 мкм, что дает возможность изготавливать тонкие и легкие неохлаждаемые микроболометры [2; 4]. Для повышения эффективности поглощения используются поверхностные или локализованные плазмоны [2; 5; 6]. Такие поглотители обычно состоят из трех слоев: периодически структурированного проводящего (металлического) поверхностного слоя, диэлектрического промежуточного слоя и сплошного проводящего (металлического) слоя. Решающее значение при проектировании поглотителя имеет структурированный поверхностный слой, поскольку его можно настроить таким образом, чтобы он обеспечивал практически нулевое отражение в нужном диапазоне длин волн [5]. Поверхностный слой может представлять собой

периодически расположенные островки как тривиальной (квадратной, цилиндрической), так и сложной (например, дендритоподобной или пирамидальной) формы, а также вытравленные в сплошном слое окошки указанных форм [2–6]. Влияние периода расположения окошек (островков) поверхностного слоя на спектр поглощения структуры было предметом исследования разных авторских групп [2; 5; 6], но в большинстве схожих структур период расположения окошек (островков) сопоставим с исследуемым диапазоном длин волн. Промежуточный слой диэлектрика используется для создания двух отдельных границ раздела проводящий слой – диэлектрик, на которых могут поддерживаться плазмонные колебания [5].

В области ближнего и среднего инфракрасных диапазонов как проводящие слои в поглощающих структурах могут использоваться слои высоколегированных полупроводников, например кремния [1; 2; 5–8]. Применение сильнолегированного кремния ($1 \cdot 10^{19} - 1 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$) в качестве плазмонного материала было исследовано разными авторами, которые подтвердили его плазмонные свойства в инфракрасной области спектра [5–8]. Изменяя уровень легирования кремния, можно изменять его плазменную частоту и за счет этого настраивать частоту плазмонного резонанса в нужном диапазоне длин волн [7; 8]. Сплошной проводящий слой используется как для минимизации уровня пропускания всей поглощающей структуры, так и для увеличения уровня ее поглощения благодаря поверхностным плазмонам, которые распространяются на границе раздела с диэлектрическим слоем.

В настоящей работе методом инфракрасной фурье-спектроскопии исследованы спектры пропускания, отражения и поглощения периодических структур $\text{Si}/\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2/\text{Si}$ и $\text{Si}/\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2/\text{Si}/\text{Al}$ с окошечным поверхностным слоем, а также рассчитаны теоретические спектры пропускания и поглощения этих структур.

Материалы и методы исследования

В качестве исходных подложек использовались пластины монокристаллического кремния марки КДБ-10. После стандартной операции химической очистки в смеси Каро и перекисно-аммиачном растворе методом пиролитического окисления на подложке был выращен слой диоксида кремния (SiO_2) толщиной 160 нм. Затем методом химического осаждения из газовой фазы при активации индуктивно связанной плазмой на установке STE ICP200D (*SemiTEq*, Россия) последовательно наносились слои нитрида кремния (Si_3N_4) толщиной 150 нм и слой поликристаллического кремния (poly-Si) толщиной 840 нм. Легирование слоя поликристаллического кремния проводилось путем имплантации ионов мышьяка с энергией 60 кэВ до концентрации $3,1 \cdot 10^{15}$ ионов на 1 см^2 . Для формирования периодической структуры применялась технология традиционной фотолитографии с последующим плазмохимическим травлением. В поверхностном слое кремния до слоя Si_3N_4 вытравливались квадратные окошки размером $a = 4 \text{ мкм}$ с периодом расположения $P = 8 \text{ мкм}$. После этого подложка образцов стравливалась с одной стороны в смеси азотной и плавиковой кислот до толщины около 1500 нм. Модель структуры после осаждения всех слоев и фотолитографии представлена на рис. 1, а. На рис. 1, б, приведена микрофотография поверхностного слоя сформированной структуры с размером окошек 2 мкм и периодом их расположения 6 мкм, полученная с помощью растрового электронного микроскопа (РЭМ). Для активации примеси и кристаллизации аморфизированного слоя кремния образцы исследуемых структур подвергались термическому отжигу в атмосфере азота при температуре 1000 °С в течение 10 мин. На обратную сторону части образцов методом термического осаждения на вакуумном посту ВУП-5 (*Selmi*, Украина) наносилась пленка алюминия толщиной 90 нм.

Спектры пропускания и отражения образцов исследуемых структур $\text{Si}/\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2/\text{Si}$ и $\text{Si}/\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2/\text{Si}/\text{Al}$ измерялись в диапазоне длин волн 2–25 мкм с помощью инфракрасного фурье-спектрометра Spectrum-3 Optica (*PerkinElmer*, США). Спектры пропускания снимались с диафрагмой 2 мм, накоплением 1 мин и разрешением 4 см^{-1} . Для регистрации спектров отражения применялась приставка зеркального отражения с углом падения луча 80°. Спектры отражения снимались с диафрагмой 2 мм, накоплением 2 мин и разрешением 4 см^{-1} . Экспериментальные спектры поглощения рассчитывались на основе измеренных спектров отражения и пропускания по формуле $A(\lambda) = 100 - R(\lambda) - T(\lambda)$, где $A(\lambda)$, $R(\lambda)$, $T(\lambda)$ – доля (в процентах) поглощенного, отраженного и прошедшего излучений соответственно.

Теоретические спектры пропускания, отражения и поглощения были получены с применением метода конечных разностей во временной области (*finite difference time domain*, FDTD) в программе *FDTD Solution*¹ [9; 10]. В процессе моделирования над и под структурой использовались граничные условия идеально согласованных слоев (*perfectly matched layer*, PML). Такие слои поглощают все падающее на них излучение, что позволяет избежать появления отраженного излучения, связанного с наличием границ. В остальных случаях использовались периодические граничные условия, поскольку исследуемая структура имела периодический поверхностный слой, в процессе моделирования проводился расчет спектров пропускания, отражения и поглощения для одного периода² [10]. Моделирование выполнялось

¹Lumerical FDTD Solutions // Lumerical Solutions Inc. : website. Vancouver, 2003–2020. URL: <https://www.lumerical.com/products/fdtd/> (date of access: 05.01.2020).

²Ibid.

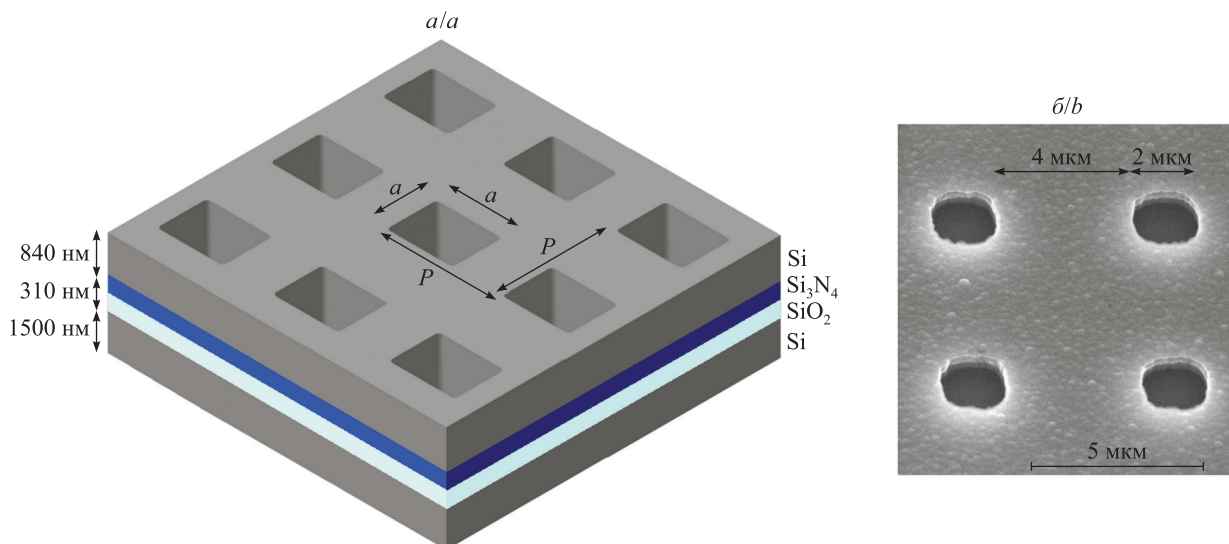


Рис. 1. Модель исследуемой структуры (а) и РЭМ-изображение поверхности структуры Si/Si₃N₄/SiO₂/Si с размером окошек 2 мкм и периодом их расположения 6 мкм (б)

Fig. 1. Model of the simulated structure (a) and scanning electron microscopy image of the surface of the Si/Si₃N₄/SiO₂/Si structure with a window size of 2 μm and a window period of 6 μm (b)

в диапазоне длин волн 2,5–25,0 мкм, шаг сетки в области структуры составлял 5 нм. Области, прилегающие к структуре, считались заполненными воздухом. Шаг сетки в этих областях составлял 50 нм. Интенсивность поглощения рассчитывалась в соответствии с соотношением $A(\lambda) + R(\lambda) + T(\lambda) = 1$, где $A(\lambda)$, $R(\lambda)$, $T(\lambda)$ – доля поглощенного, отраженного и прошедшего излучений соответственно. Коэффициент преломления и коэффициент экстинкции аморфного и поликристаллического кремния, нитрида и диоксида кремния взяты в работах [11; 12]. Диэлектрическая проницаемость слоев кремния с различной степенью легирования рассчитана с помощью модели Друде – Лоренца, описывающей поведение свободных электронов в металле или полупроводнике [7–9].

Результаты и их обсуждение

На рис. 2 приведено сравнение экспериментальных и теоретических спектров пропускания структур Si/Si₃N₄/SiO₂/Si до и после термического отжига. Поскольку ионная имплантация приводит к аморфизации приповерхностного слоя [13], окошечный поверхностный слой структуры до термического отжига состоял из двух подслоев: подслоя poly-Si толщиной около 690 нм и подслоя *a*-Si толщиной около 150 нм (см. рис. 2, а). При проведении термического отжига происходят рекристаллизация аморфного слоя и электрическая активация имплантированной примеси [13]. Поверхностный слой структуры после отжига включал подслой *n*⁺-Si толщиной около 740 нм и подслой poly-Si толщиной около 100 нм (см. рис. 2, б).

На рис. 2, а, б, заметна хорошая корреляция теоретических и экспериментальных спектров пропускания исследуемых структур. Некоторые расхождения наблюдаются в диапазоне длин волн около 2,5–7,0 мкм: коэффициент пропускания в теоретических спектрах на 5–15 % больше, чем в экспериментальных. Несмотря на расхождение в интенсивности, положение пиков пропускания и полос поглощения для теоретических и экспериментальных кривых пропускания, приведенных на рис. 2, совпадает. В диапазоне длин волн 7–25 мкм экспериментальные и теоретические спектры пропускания как отоженной, так и неотоженной структуры ведут себя практически идентично. В диапазоне длин волн 8,5–10,0 мкм в спектрах пропускания как отоженной, так и неотоженной структуры наблюдается резкое уменьшение коэффициента пропускания, при этом в спектре пропускания структуры после термического отжига это уменьшение более заметно. Вероятно, расхождения наблюдаются из-за того, что фотолитография может обеспечить результаты только с некоторой точностью. Например, при травлении углы скругляются (см. рис. 1, б), при этом точно предсказать форму полученных окошек практически невозможно [2]. Из-за неидеальности формы окошек после травления их размер может отличаться на десятки нанометров, что в ряде случаев приводит к уширению некоторых пиков пропускания и полос поглощения. После травления подложки в смеси кислот толщина оставшегося слоя Si также может отличаться.

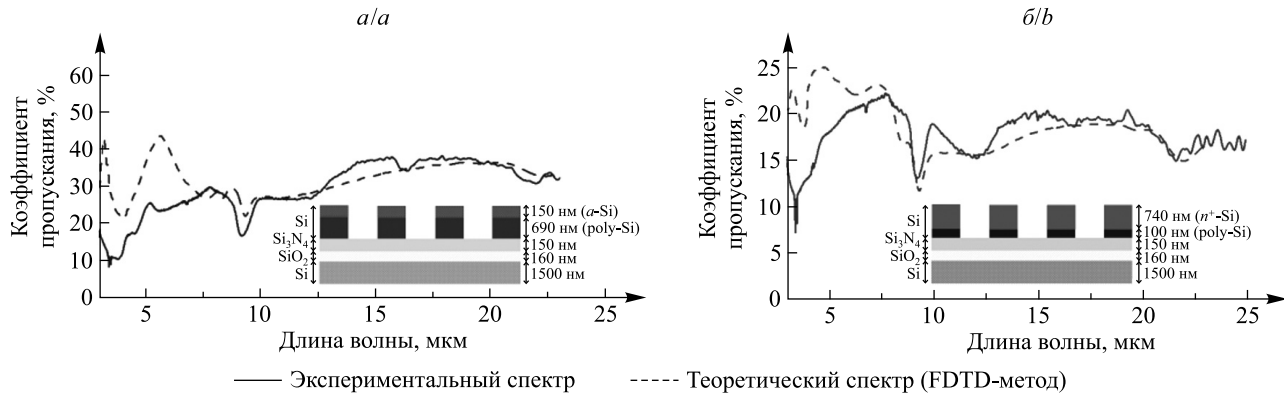


Рис. 2. Сравнение экспериментальных и теоретических спектров пропускания структур a -Si/poly-Si/Si₃N₄/SiO₂/Si (a) и n^+ -Si/poly-Si/Si₃N₄/SiO₂/Si (b)

Fig. 2. Comparison of experimental and theoretical transmission spectra of the structures a -Si/poly-Si/Si₃N₄/SiO₂/Si (a) and n^+ -Si/poly-Si/Si₃N₄/SiO₂/Si (b)

На рис. 3 представлены экспериментальные спектры пропускания структур Si/Si₃N₄/SiO₂/Si и Si/Si₃N₄/SiO₂/Si/Al до и после термического отжига (пленка алюминия осаждалась уже после отжига исходной структуры). Из рис. 3 видно, что неотожженные структуры (a -Si/poly-Si/Si₃N₄/SiO₂/Si и a -Si/poly-Si/Si₃N₄/SiO₂/Si/Al) пропускают в среднем на 10–20 % больше, чем отожженные структуры (n^+ -Si/poly-Si/Si₃N₄/SiO₂/Si и n^+ -Si/poly-Si/Si₃N₄/SiO₂/Si/Al), практически во всем исследованном диапазоне длин волн. Различий между спектрами пропускания структур a -Si/poly-Si/Si₃N₄/SiO₂/Si и a -Si/poly-Si/Si₃N₄/SiO₂/Si/Al не выявлено. Коэффициент пропускания для обеих структур возрастает с 10 % на длине волн 3,5 мкм до 35 % на длине волн 20 мкм с небольшими провалами на длинах волн 9,5; 12,5; 16,5 мкм.

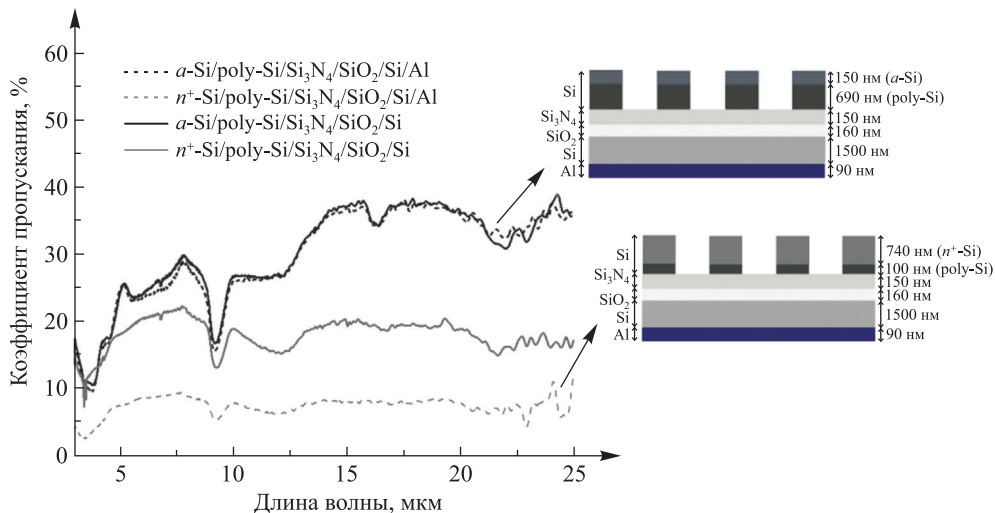


Рис. 3. Экспериментальные спектры пропускания структур Si/Si₃N₄/SiO₂/Si и Si/Si₃N₄/SiO₂/Si/Al до и после термического отжига

Fig. 3. Experimental transmission spectra of the structures Si/Si₃N₄/SiO₂/Si and Si/Si₃N₄/SiO₂/Si/Al before and after thermal annealing

Кривая поглощения структуры n^+ -Si/poly-Si/Si₃N₄/SiO₂/Si ведет себя схожим образом с кривой поглощения структуры a -Si/poly-Si/Si₃N₄/SiO₂/Si, но пропускает меньше, чем структура до проведения термического отжига: различие между ними в диапазоне длин волн 5–10 мкм составляет в среднем 5 %, а в диапазоне длин волн 10–25 мкм увеличивается до 15–20 %. Несколько иначе ведет себя структура n^+ -Si/poly-Si/Si₃N₄/SiO₂/Si/Al, коэффициент пропускания которой практически во всем исследованном диапазоне длин волн находится в пределах около 7–8 %, за исключением небольших провалов на длинах волн 3,0; 9,5; 12,5 мкм. Кривая поглощения этой структуры значительно отличается от рассмотренных выше кривых.

На рис. 4 представлены экспериментальные спектры поглощения структур Si/Si₃N₄/SiO₂/Si и Si/Si₃N₄/SiO₂/Si/Al после проведения термического отжига. На выносном рисунке приведены экспе-

риментальный и теоретический спектры поглощения структуры $\text{Si}/\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2/\text{Si}/\text{Al}$ после термического отжига, а также экспериментальные спектры пропускания и отражения этой структуры. Кривая пропускания после небольшого подъема до 15 % в диапазоне длин волн 2–3 мкм остается на уровне 3–9 % во всем исследованном диапазоне длин волн. Кривая отражения не поднимается выше 30 %, а на длине волны 5 мкм наблюдается провал до 7 %.

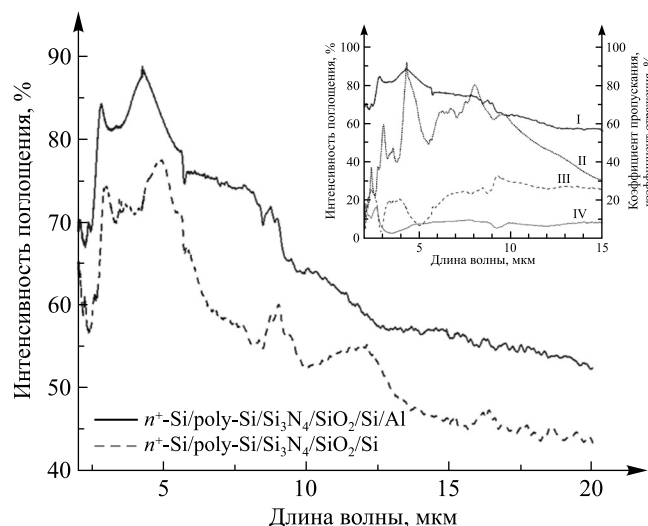


Рис. 4. Экспериментальные спектры поглощения структур $\text{Si}/\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2/\text{Si}$ и $\text{Si}/\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2/\text{Si}/\text{Al}$ после термического отжига. На выносном рисунке приведены экспериментальный (I) и теоретический (II) спектры поглощения структуры $\text{Si}/\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2/\text{Si}/\text{Al}$, а также экспериментальные спектры отражения (III) и пропускания (IV) этой структуры

Fig. 4. Experimental absorption spectra of the structures $\text{Si}/\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2/\text{Si}$ and $\text{Si}/\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2/\text{Si}/\text{Al}$ after thermal annealing. External figure shows experimental (I) and theoretical (II) absorption spectra of the $\text{Si}/\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2/\text{Si}/\text{Al}$ structure, as experimental reflection (III) and transmission (IV) spectra of this structure

Кривые поглощения, представленные на рис. 4, ведут себя схожим образом, при этом структура с дополнительным слоем алюминия поглощает в среднем на 10 % больше во всем исследованном диапазоне длин волн. Для обоих спектров характерен пик поглощения небольшой интенсивности на длине волны 2,8–3,2 мкм. В диапазоне длин волн 2–3 мкм наблюдается резкий рост интенсивности поглощения (практически на 20 %): с 57 до 73 % для структуры $n^+\text{-Si/poly-Si/Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2/\text{Si}$ и с 67 до 84 % для структуры $n^+\text{-Si/poly-Si/Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2/\text{Si}/\text{Al}$. В спектре поглощения структуры $n^+\text{-Si/poly-Si/Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2/\text{Si}/\text{Al}$ основной пик поглощения расположен в диапазоне длин волн 3,5–5,0 мкм. Этот пик имеет симметричную треугольную форму и достигает наибольшей интенсивности (87 %) на длине волны 4,3 мкм, после чего интенсивность поглощения падает до 75 % на длине волны 6 мкм. На длине волны около 8 мкм наблюдается широкая полоса поглощения с небольшой интенсивностью (75 %). Затем кривая поглощения медленно убывает до интенсивности 55 % на длине волны 20 мкм, кроме диапазона длин волн 8,5–9,5 мкм, где интенсивность поглощения возрастает до 74 %. В целом интенсивность поглощения структуры $n^+\text{-Si/poly-Si/Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2/\text{Si}/\text{Al}$ не опускается ниже 80 % в диапазоне длин волн 2,6–5,3 мкм и 70 % в диапазоне длин волн 2,5–9,0 мкм.

Основной пик в спектре поглощения структуры $n^+\text{-Si/poly-Si/Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2/\text{Si}$ немного сдвинут в более длинноволновую область относительно основного пика в спектре поглощения структуры $n^+\text{-Si/poly-Si/Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2/\text{Si}/\text{Al}$. Он располагается в диапазоне длин волн 4,3–5,5 мкм и достигает наибольшей интенсивности (75 %) на длине волны 5 мкм. После этого интенсивность поглощения резко падает до 55 % на длине волны 8 мкм. Как и в спектре поглощения структуры $n^+\text{-Si/poly-Si/Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2/\text{Si}/\text{Al}$, в диапазоне длин волн 8,5–9,5 мкм присутствует полоса поглощения с максимальной интенсивностью 60 % на длине волны 9 мкм. Также полоса поглощения с небольшой интенсивностью имеется в диапазоне длин волн 10–13 мкм, что не наблюдается в спектре поглощения структуры $n^+\text{-Si/poly-Si/Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2/\text{Si}/\text{Al}$.

Сравнительный анализ теоретического и экспериментального спектров поглощения структуры $n^+\text{-Si/poly-Si/Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2/\text{Si}/\text{Al}$ (см. рис. 4, выносной рисунок) показывает неплохую корреляцию положений пиков поглощения. Однако интенсивность поглощения в теоретическом спектре меньше практически во всем исследованном диапазоне длин волн. Это может быть связано с методикой травления, при которой подложка травится неравномерно, что и увеличивает интенсивность поглощения. В теоретическом спектре поглощения структуры $n^+\text{-Si/poly-Si/Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2/\text{Si}/\text{Al}$ также хорошо заметны

пики поглощения на длинах волн 3,0; 4,3; 8,0 мкм, при этом пик поглощения в диапазоне длин волн 7,5–8,5 мкм более выражен, чем полоса поглощения в данном диапазоне в экспериментальном спектре: его интенсивность достигает практически 80 % на длине волны 8 мкм.

Часть пиков кривых пропускания и полос поглощения в спектрах пропускания, представленных на рис. 3, вероятнее всего, объясняются наличием в структуре диэлектрических слоев диоксида и нитрида кремния. Для всех приведенных выше спектров поглощения характерно наличие полосы поглощения в диапазоне длин волн 9,0–9,5 мкм. В этом диапазоне проявляется поглощение в слое диоксида кремния [8; 14]. На длине волны 12,5 мкм наблюдаются колебания мостиковых групп Si—O—Si [14]. Во всех приведенных на рис. 3 спектрах пропускания можно увидеть провал в данном диапазоне. Однако наиболее заметно поглощение в районе 12,5 мкм в спектре поглощения структуры n^+ -Si/poly-Si/Si₃N₄/SiO₂/Si, приведенном на рис. 4. Полочки на длине волны 11,5 мкм в спектрах пропускания, представленных на рис. 2 и 3, могут быть связаны с валентными колебаниями связей Si—N в слое нитрида кремния [15].

Уменьшение коэффициента пропускания в структуре после отжига (n^+ -Si/poly-Si/Si₃N₄/SiO₂/Si) по сравнению со структурой до отжига, вероятно, можно объяснить появлением в поверхностном слое сильнопроводящего подслоя. Поскольку термический отжиг после ионной имплантации приводит к уменьшению слоевого сопротивления, а следовательно, к увеличению удельной проводимости, авторы настоящей статьи предполагают, что в окошечном поверхностном слое структур n^+ -Si/poly-Si/Si₃N₄/SiO₂/Si и n^+ -Si/poly-Si/Si₃N₄/SiO₂/Si/Al могут возникать плазменные колебания, которые в совокупности с поглощением на свободных носителях уменьшают уровень пропускания [2; 6; 8; 9; 16; 17]. Заметное уменьшение коэффициента пропускания структуры n^+ -Si/poly-Si/Si₃N₄/SiO₂/Si после осаждения слоя алюминия можно связать с отражением волн от этого слоя, как от зеркала [4; 5].

Поскольку размер окошек поверхностного слоя составляет 4 мкм, резкое уменьшение коэффициента пропускания на длине волны около 3–5 мкм для всех исследованных структур может быть связано с возникновением плазменных колебаний в этих окошках [6; 8]. Также на длине волны, равной периоду расположения окошек поверхностного слоя, у отожженных структур, в отличие от неотожженных, наблюдается небольшая полочка в кривой пропускания. В спектрах поглощения, приведенных на рис. 4, пик поглощения с наибольшей интенсивностью находится на длине волны 4,3 мкм для структуры после термического отжига и на длине волны 5 мкм для структуры до термического отжига. Этот пик, вероятнее всего, связан с возникновением плазменных колебаний в вытравленных окошках [6; 16]. Пик поглощения на длине волны 8 мкм, интенсивность которого в теоретическом спектре поглощения больше, чем в экспериментальном, также, по-видимому, связан с возникновением в окошечном поверхностном слое плазменных колебаний из-за периодичности структуры [8; 9; 15; 16].

Заключение

Таким образом, в работе были исследованы экспериментальные спектры пропускания, отражения и поглощения периодических структур Si/Si₃N₄/SiO₂/Si и Si/Si₃N₄/SiO₂/Si/Al с окошечным поверхностным слоем до и после термического отжига. Показано, что теоретические спектры пропускания, рассчитанные с помощью FDTD-метода, демонстрируют хорошую корреляцию с экспериментальными спектрами. После проведения термического отжига коэффициент пропускания структуры падает на 5–20 %, при этом поведение спектров пропускания изменяется несильно. Осаждение на обратную сторону структуры пленки алюминия не влияет на коэффициент пропускания неотожженной структуры и в то же время значительно (более чем на 20 %) уменьшает коэффициент пропускания отожженной структуры, что может быть связано с возникновением в поверхностном слое специфических плазменных колебаний. Отмечено, что интенсивность поглощения структуры n^+ -Si/poly-Si/Si₃N₄/SiO₂/Si/Al не опускается ниже 70 % в диапазоне шириной около 7 мкм (2,5–9,0 мкм), при этом интенсивность пика поглощения на длине волны 4,3 мкм составляет 87 %. Установлено, что появление в спектрах поглощения отожженной структуры пиков поглощения на длинах волн 4,3 и 8,0 мкм может быть связано с возникновением плазменных эффектов из-за периодичности структуры.

Библиографические ссылки

1. Chen Cheng, Liu Yanhua, Jiang Zhou-ying, Shen Chong, Zhang Ye, Zhong Fan, et al. Large-area long-wave infrared broadband all-dielectric metasurface absorber based on maskless laser direct writing lithography. *Optics Express*. 2022;30(8):13391–13403. DOI: 10.1364/OE.447783.
2. Wang Ben-Xin, Xu Chongyang, Duan Guiyuan, Xu Wei, Pi Fuwei. Review of broadband metamaterial absorbers: from principles, design strategies, and tunable properties to functional applications. *Advanced Functional Materials*. 2023;33(14):2213818. DOI: 10.1002/adfm.202213818.
3. Ogawa S, Kimata M. Metal-insulator-metal-based plasmonic metamaterial absorbers at visible and infrared wavelengths: a review. *Materials*. 2018;11(3):458. DOI: 10.3390/ma11030458.
4. Zhou Y, Qin Z, Liang Z, Meng D, Xu H, Smith DR, et al. Ultra-broadband metamaterial absorbers from long to very long infrared regime. *Light: Science and Applications*. 2021;10:138. DOI: 10.1038/s41377-021-00577-8.

5. Yu P, Besteiro LV, Huang Y, Wu J, Fu L, Tan HH, et al. Broadband metamaterial absorbers. *Advanced Optical Materials*. 2019; 7(3):1800995. DOI: 10.1002/adom.201800995.
6. Desouky M, Mahmoud AM, Swillam MA. Silicon based mid-IR super absorber using hyperbolic metamaterial. *Scientific Reports*. 2018;8:2036. DOI: 10.1038/s41598-017-18737-5.
7. Taliercio T, Biagioni P. Semiconductor infrared plasmonics. *Nanophotonics*. 2019;8(6):949–990. DOI: 10.1515/nanoph-2019-0077.
8. Мухаммад АИ, Гайдук ПИ. Влияние толщины *n*-Si подложки и уровня ее легирования на поглощающие свойства кремниевых плазмонных структур в инфракрасном диапазоне. *Журнал прикладной спектроскопии*. 2021;88(6):887–894. DOI: 10.47612/0514-7506-2021-88-6-887-894.
9. Mukhammad AI, Chizh KV, Plotnichenko VG, Yuryev VA, Gaiduk PI. Plasmonic-enhanced light absorption in periodic silicon structures: the effect of inter-island distance. *Semiconductors*. 2020;54(14):1889–1892. DOI: 10.1134/S1063782620140201.
10. Кошелев ИР, Мухаммад АИ, Гайдук ПИ. Моделирование плазмонного резонанса в периодических многослойных структурах на основе хрома с поверхностным островковым слоем. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика*. 2021;1:26–32. DOI: 10.33581/2520-2243-2021-1-26-32.
11. Palik ED, editor. *Handbook of optical constants of solids. Volume 2*. Boston: Academic Press; 1991. XX, 1096 p. (Academic Press handbook series).
12. Kischkat J, Peters S, Gruska B, Semtsiv M, Chashnikova M, Klinkmüller M, et al. Mid-infrared optical properties of thin films of aluminum oxide, titanium dioxide, silicon dioxide, aluminum nitride, and silicon nitride. *Applied Optics*. 2012;51(28):6789–6798. DOI: 10.1364/AO.51.006789.
13. Мейер Дж, Эрикссон Л, Дэвис Дж. *Ионное легирование полупроводников (кремний и германий)*. Гусев ВМ, редактор. Москва: Мир; 1973. 296 с.
14. Kitamura R, Pilon L, Jonasz M. Optical constants of silica glass from extreme ultraviolet to far infrared at near room temperature. *Applied Optics*. 2007;46(33):8118–8133. DOI: 10.1364/AO.46.008118.
15. Busca G, Lorenzelli V, Porcile G, Baraton MI, Quintard P, Marchand R. FT-IR study of the surface properties of silicon nitride. *Materials Chemistry and Physics*. 1986;14(2):123–140. DOI: 10.1016/0254-0584(86)90077-5.
16. Майер СА. *Плазмоника: теория и приложения*. Нечаева ТС, Колесниченко ЮВ, переводчики; Савинский СС, редактор. Москва: Регулярная и хаотическая динамика; 2011. 296 с.
17. Gorgulu K, Gok A, Yilmaz M, Topalli K, Biyikli N, Okyay AK. All-silicon ultra-broadband infrared light absorbers. *Scientific Reports*. 2016;6:38589. DOI: 10.1038/srep38589.

References

1. Chen Cheng, Liu Yanhua, Jiang Zhou-ying, Shen Chong, Zhang Ye, Zhong Fan, et al. Large-area long-wave infrared broadband all-dielectric metasurface absorber based on maskless laser direct writing lithography. *Optics Express*. 2022;30(8):13391–13403. DOI: 10.1364/OE.447783.
2. Wang Ben-Xin, Xu Chongyang, Duan Guiyuan, Xu Wei, Pi Fuwei. Review of broadband metamaterial absorbers: from principles, design strategies, and tunable properties to functional applications. *Advanced Functional Materials*. 2023;33(14):2213818. DOI: 10.1002/adfm.202213818.
3. Ogawa S, Kimata M. Metal-insulator-metal-based plasmonic metamaterial absorbers at visible and infrared wavelengths: a review. *Materials*. 2018;11(3):458. DOI: 10.3390/ma11030458.
4. Zhou Y, Qin Z, Liang Z, Meng D, Xu H, Smith DR, et al. Ultra-broadband metamaterial absorbers from long to very long infrared regime. *Light: Science and Applications*. 2021;10:138. DOI: 10.1038/s41377-021-00577-8.
5. Yu P, Besteiro LV, Huang Y, Wu J, Fu L, Tan HH, et al. Broadband metamaterial absorbers. *Advanced Optical Materials*. 2019; 7(3):1800995. DOI: 10.1002/adom.201800995.
6. Desouky M, Mahmoud AM, Swillam MA. Silicon based mid-IR super absorber using hyperbolic metamaterial. *Scientific Reports*. 2018;8:2036. DOI: 10.1038/s41598-017-18737-5.
7. Taliercio T, Biagioni P. Semiconductor infrared plasmonics. *Nanophotonics*. 2019;8(6):949–990. DOI: 10.1515/nanoph-2019-0077.
8. Mukhammad AI, Gaiduk PI. Influence of the thickness of the *n*-Si substrate and its doping level on the absorbing properties of silicon plasmon structures in the infrared range. *Zhurnal prikladnoy spektroskopii*. 2021;88(6):887–894. Russian. DOI: 10.47612/0514-7506-2021-88-6-887-894.
9. Mukhammad AI, Chizh KV, Plotnichenko VG, Yuryev VA, Gaiduk PI. Plasmonic-enhanced light absorption in periodic silicon structures: the effect of inter-island distance. *Semiconductors*. 2020;54(14):1889–1892. DOI: 10.1134/S1063782620140201.
10. Koshelev IR, Mukhammad AI, Gaiduk PI. Modeling of plasmon resonance in periodic multilayer structures based on chromium with a surface island layer. *Journal of the Belarusian State University. Physics*. 2021;1:26–32. Russian. DOI: 10.33581/2520-2243-2021-1-26-32.
11. Palik ED, editor. *Handbook of optical constants of solids. Volume 2*. Boston: Academic Press; 1991. XX, 1096 p. (Academic Press handbook series).
12. Kischkat J, Peters S, Gruska B, Semtsiv M, Chashnikova M, Klinkmüller M, et al. Mid-infrared optical properties of thin films of aluminum oxide, titanium dioxide, silicon dioxide, aluminum nitride, and silicon nitride. *Applied Optics*. 2012;51(28):6789–6798. DOI: 10.1364/AO.51.006789.
13. Mayer JW, Eriksson L, Davies JA. *Ion implantation in semiconductors: silicon and germanium*. New York: Academic Press; 1970. XIII, 280 p.
13. Russian edition: Mayer J, Eriksson L, Davies J. *Ионное легирование полупроводников (кремний и германий)*. Гусев ВМ, редактор. Москва: Мир; 1973. 296 p.
14. Kitamura R, Pilon L, Jonasz M. Optical constants of silica glass from extreme ultraviolet to far infrared at near room temperature. *Applied Optics*. 2007;46(33):8118–8133. DOI: 10.1364/AO.46.008118.
15. Busca G, Lorenzelli V, Porcile G, Baraton MI, Quintard P, Marchand R. FT-IR study of the surface properties of silicon nitride. *Materials Chemistry and Physics*. 1986;14(2):123–140. DOI: 10.1016/0254-0584(86)90077-5.
16. Maier SA. *Plasmonics: fundamentals and applications*. New York: Springer Science + Business Media; 2007. XXV, 223 p.
16. Russian edition: Maier SA. *Плазмоника: теория и приложения*. Нечаева ТС, Колесниченко ЮВ, переводчики; Савинский СС, редактор. Москва: R & C Dynamics; 2011. 296 p.
17. Gorgulu K, Gok A, Yilmaz M, Topalli K, Biyikli N, Okyay AK. All-silicon ultra-broadband infrared light absorbers. *Scientific Reports*. 2016;6:38589. DOI: 10.1038/srep38589.

Получена 23.10.2023 / исправлена 24.11.2023 / принята 29.11.2023.
Received 23.10.2023 / revised 24.11.2023 / accepted 29.11.2023.

ВОЗДЕЙСТВИЕ УЛЬТРАФИОЛЕТОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДИЭЛЕКТРИКОВ НА ОСНОВЕ КРЕМНИЯ

И. Н. ПАРХОМЕНКО¹⁾, Л. А. ВЛАСУКОВА¹⁾,
А. С. КАМЫШАН²⁾, Н. С. КОВАЛЬЧУК³⁾, С. А. ДЕМИДОВИЧ³⁾

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

²⁾Институт прикладных физических проблем им. А. Н. Севченко БГУ,
ул. Курчатова, 7, 220045, г. Минск, Беларусь

³⁾«Интеграл» – управляющая компания холдинга «Интеграл», ул. Казинца, 121а, 220108, г. Минск, Беларусь

Для оценки воздействия ультрафиолетовой части солнечного спектра в диапазоне длин волн 185–400 нм на оптические параметры диэлектрических слоев проанализировано изменение спектров отражения тонких (11–25 нм) нестехиометрических пленок нитрида (SiN_x), оксида (SiO_x) и оксинитрида (SiO_xN_y) кремния. Пленки наносились на кремниевые подложки методом химического осаждения из газовой фазы при активации индуктивно связанной плазмой. Установлено, что воздействие ультрафиолетового излучения с плотностью потока энергии, в 20 раз превышающей соответствующий параметр естественного солнечного излучения, в течение 6 ч приводит к увеличению показателя преломления пленок SiN_x и SiO_x , характеризующихся избыточным содержанием кремния, в среднем на $\Delta n = 0,03\text{--}0,09$, тогда как изменения показателя преломления пленки SiO_xN_y после ультрафиолетового облучения незначительны ($\Delta n < 0,01$). Как показал анализ инфракрасных спектров, химический состав пленок после ультрафиолетового воздействия не изменялся. Обсуждена природа влияния ультрафиолетового облучения на оптические свойства диэлектрических пленок на основе кремния различного элементного и структурного состава. Полученные результаты могут быть использованы при выборе диэлектриков для приборов, работающих в условиях открытого космоса на низких околоземных орбитах.

Ключевые слова: нитрид кремния; оксид кремния; оксинитрид кремния; ультрафиолетовое облучение; отражение.

Благодарность. Работа выполнена при финансовой поддержке государственной программы научных исследований «Конвергенция-2025» (задание 3.07.1.2, № гос. регистрации 20211910).

Образец цитирования:

Пархоменко И.Н., Власукова Л.А., Камышан А.С., Ковальчук Н.С., Демидович С.А. Воздействие ультрафиолетового излучения на оптические свойства диэлектриков на основе кремния. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика*. 2024;1:57–64.
EDN: VVPFEJ

For citation:

Parkhomenko I.N., Vlasukova L.A., Kamyshan A.S., Kovalchuk N.S., Demidovich S.A. Effect of ultraviolet exposure on the optical properties of silicon-based dielectrics. *Journal of the Belarusian State University. Physics*. 2024;1:57–64. Russian.
EDN: VVPFEJ

Авторы:

Ирина Николаевна Пархоменко – кандидат физико-математических наук; ведущий научный сотрудник научно-исследовательской лаборатории материалов и приборных структур микро- и нанoeлектроники факультета радиофизики и компьютерных технологий.

Людмила Александровна Власукова – кандидат физико-математических наук; заведующий научно-исследовательской лабораторией материалов и приборных структур микро- и нанoeлектроники факультета радиофизики и компьютерных технологий.

Александр Степанович Камышан – кандидат физико-математических наук; ведущий научный сотрудник лаборатории элионики.

Наталья Станиславовна Ковальчук – кандидат технических наук, доцент; заместитель генерального директора, главный инженер.

Сергей Александрович Демидович – ведущий инженер отраслевой лаборатории новых технологий и материалов.

Authors:

Irina N. Parkhomenko, PhD (physics and mathematics); leading researcher at the laboratory of materials and device structures for micro- and nanoelectronics, faculty of radiophysics and computer technologies.

parkhomenko@bsu.by

<https://orcid.org/0000-0003-0982-3938>

Liudmila A. Vlasukova, PhD (physics and mathematics); head of the laboratory of materials and device structures for micro- and nanoelectronics, faculty of radiophysics and computer technologies.

vlasukova@bsu.by

<https://orcid.org/0000-0001-8273-6908>

Alexander S. Kamyshan, PhD (physics and mathematics); leading researcher at the laboratory of elionics.

kamyshana@mail.ru

Natalya S. Kovalchuk, PhD (engineering), docent; deputy general director and chief engineer.

nkovalchuk@integral.by

Sergey A. Demidovich, leading engineer at the branch laboratory of new technologies and materials.

sdemidovich@integral.by

EFFECT OF ULTRAVIOLET EXPOSURE ON THE OPTICAL PROPERTIES OF SILICON-BASED DIELECTRICS

I. N. PARKHOMENKO^a, L. A. VLASUKOVA^a,
A. S. KAMYSHAN^b, N. S. KOVALCHUK^c, S. A. DEMIDOVICH^c

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

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

^c«Integral» – Holding Management Company, 121a Kazinka Street, Minsk 220108, Belarus

Corresponding author: L. A. Vlasukova (vlasukova@bsu.by)

The effect of ultraviolet range of solar spectrum (185–400 nm) exposure for 6 h with an energy flux density 20 times higher than the corresponding parameter of natural solar radiation on the optical properties of silicon-based dielectric layers on silicon was studied. Silicon nitride (SiN_x), oxide (SiO_x) and oxynitride (SiO_xN_y) films with thicknesses of 11–25 nm were deposited by inductively coupled plasma chemical vapor deposition method. The reflectance spectra of thin dielectric films were analysed before and after ultraviolet exposure. It has been shown that ultraviolet irradiation results in an increase of the refractive index of the silicon-rich SiN_x and SiO_x films by $\Delta n = 0.03$ – 0.09 , while the refractive index of the SiO_xN_y film remains almost unchanged ($\Delta n < 0.01$). Analysis of the infrared spectra did not reveal any changes in the chemical composition of the dielectric films after ultraviolet irradiation. The origin of the effect of ultraviolet exposure on the optical properties of silicon-based dielectric films of various elemental and structural compositions is discussed. The reported results can be used when choosing dielectrics for devices operating in outer space in low Earth orbits.

Keywords: silicon nitride; silicon oxide; silicon oxynitride; ultraviolet exposure; reflectance.

Acknowledgements. This work was supported by the state programme of scientific research «Convergence-2025» (project 3.07.1.2, state registration No. 20211910).

Введение

Важнейшую роль в обеспечении длительной безотказной работы космических аппаратов играет стойкость их конструкционных материалов и элементов бортового оборудования к воздействию окружающей космической среды. По оценкам экспертов, более половины отказов и сбоев в работе бортовой аппаратуры спутников обусловлены неблагоприятным влиянием факторов космического пространства [1]. В связи с этим интенсивно ведутся исследования воздействия факторов космического пространства как на микроэлектронные приборы и схемы, так и на функциональные материалы, в том числе оптические, для космических аппаратов [2–4]. Сегодня большинство спутников запускаются на низких околоземных орбитах (в пределах 200–800 км). Основными факторами среды на таких орбитах, оказывающими негативное влияние на материалы, являются атомарный кислород, ультрафиолетовое (УФ), ионизирующее и электромагнитное излучения, сверхвысокий вакуум, заряженные частицы, резкая смена температур (термоциклы), микрометеориты, искусственные обломки и орбитальный мусор [5]. Из-за длительности и сложности определения пригодности материалов к длительным срокам эксплуатации на космических аппаратах в реальном масштабе времени и натурных условиях полета возникает необходимость проведения ускоренных лабораторных имитационных исследований.

Настоящая работа посвящена изучению воздействия УФ-части солнечного спектра на аморфные пленки нитрида (SiN_x), оксида (SiO_x) и оксинитрида (SiO_xN_y) кремния. Данные материалы являются основными диэлектриками современной кремниевой технологии. Они используются во многих конструкциях зеркал, датчиков космических аппаратов, а также как антибликовые покрытия солнечных батарей [6–8]. В некоторых случаях такие пленки наносятся на поверхности, подвергающиеся воздействию орбитальной среды, в том числе УФ-облучению.

Материалы и методы исследования

Пленки нитрида, оксида и оксинитрида кремния были выращены на кремниевых подложках p -типа с ориентацией $\langle 111 \rangle$ методом химического осаждения из газовой фазы при активации индуктивно связанной плазмой (*inductively coupled plasma chemical vapour deposition*, ICP-CVD) на установке STE ICP200D (*SemiTEq*, Россия). Для очистки подложек предварительно проводилась их последовательная обработка в перекисно-сернокислотной и перекисно-аммиачной смесях. Температура осаждения во всех случаях была 300 °C, мощность высокочастотного разряда находилась в диапазоне

800–1000 Вт. Поток моносилана (100 % SiH_4) поддерживался на уровне 15 стандартных кубических сантиметров в минуту (далее – $\text{см}^3/\text{мин}$) при осаждении всех трех типов диэлектриков. В качестве реагентов для осаждения SiN_x и SiO_x применялись азот (N_2) и закись азота (N_2O), потоки которых составляли 8 и 5 $\text{см}^3/\text{мин}$ соответственно. В случае с SiO_xN_y использовались оба этих газа, смешанных в равных пропорциях ($[\text{N}_2\text{O}] = [\text{N}_2] = 10 \text{ см}^3/\text{мин}$). Газом-носителем являлась смесь $\text{Ar} + \text{He}$.

Для определения толщин пленок сколы пластин исследовались методом растровой электронной микроскопии (РЭМ) на микроскопе S-4800 (*Hitachi*, Япония). По данным РЭМ, толщины пленок SiN_x , SiO_x и SiO_xN_y составляли 24; 11 и 25 нм соответственно. Анализ химического состава пленок осуществлялся методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) на приборе MultiProbe XPS (*Omicron*, Германия).

Оценка воздействия УФ-части солнечного спектра (185–400 нм) проводилась на имитационной установке Института прикладных физических проблем имени А. Н. Севченко БГУ. Источником света служила ртутная лампа с полезной мощностью ~ 40 Вт, помещенная в вакуумную камеру ($6,67 \cdot 10^{-4}$ Па) вместе с образцами. Площадь равномерного облучения составляла $2 \times 2 \text{ см}^2$, время экспозиции – 6 ч. Плотность потока энергии на образце достигала $0,26 \text{ Вт}/\text{см}^2$. Для сравнения: плотность потока энергии солнечного излучения в диапазоне длин волн 200–400 нм составляет $\sim 0,013 \text{ Вт}/\text{см}^2$ [9]. Таким образом, УФ-облучение проводилось при плотности потока энергии, в 20 раз превышающей соответствующий параметр естественного солнечного излучения.

Спектры отражения в области длин волн 0,2–2,5 мкм регистрировались на спектрометре Lambda-1050 UV/Vis (*PerkinElmer*, США) с использованием приставки зеркального отражения (URA). Абсолютная погрешность спектральных коэффициентов зеркального отражения в исследуемом диапазоне составляет $\pm 0,1$ %. Спектры измерялись в трех различных точках образца. Разница интенсивности между спектрами не превышала допустимой погрешности измерений, что говорит об однородности осажденных пленок по толщине. Спектры отражения в среднем инфракрасном (ИК) диапазоне (2–25 мкм) регистрировались на ИК-фурье-спектрометре Spectrum-3 Optica (*PerkinElmer*). Для моделирования спектров отражения и дисперсии показателя преломления (n) использовалось программное обеспечение *RefFIT* [10], основанное на модели Друде – Лоренца и алгоритме Левенберга – Марквардта. Моделирование и подгонка экспериментальных спектров зеркального отражения осуществлялись с учетом толщин пленок, полученных методом РЭМ. Относительная погрешность определения показателя преломления составляет ~ 1 %.

Результаты и их обсуждение

Методом РФЭС установлено, что исходные пленки нитрида и оксида кремния характеризуются избыточным содержанием кремния. Подробный анализ структуры данных пленок методом РФЭС изложен в работе [11]. С учетом стехиометрического соотношения для нитрида кремния ($[\text{N}]/[\text{Si}] = 1,3$) и оксида кремния ($[\text{O}]/[\text{Si}] = 2$) избыток Si для исходных пленок SiN_x и SiO_x составляет 34 и 57 % соответственно. Для пленок оксинитрида кремния рассчитано соотношение $[\text{O}]/([\text{O}] + [\text{N}])$. Согласно работе [12] значение этого параметра ниже (выше) 0,4 указывает на нитридоподобную (оксидоподобную) структуру. В рассматриваемом случае осажденная пленка SiO_xN_y имеет коэффициент 0,6, т. е. обладает оксидоподобной структурой.

На рис. 1 представлены спектры отражения тонких пленок нитрида, оксида и оксинитрида кремния. Как видно из рис. 1, после УФ-облучения интенсивность спектров снижается для всех типов пленок на $\sim 0,5$ –1,0 %. Исключением является лишь УФ-область для оксида кремния (около 240 нм), где отражение увеличивается на $\sim 1,5$ %. Отметим, что регистрируемые изменения превышают допустимую погрешность измерений.

С учетом толщин пленок по данным РЭМ-измерений и экспериментальных спектров отражения с помощью программы *RefFIT* были смоделированы спектры показателя преломления диэлектрических слоев. Результаты моделирования приведены на рис. 2, а. Для большей наглядности на рис. 2, б, представлены разности спектров до и после УФ-облучения. Для пленок нитрида и оксида кремния увеличение показателя преломления в видимом и ближнем ИК-диапазонах характерно в большей степени, чем для пленки оксинитрида кремния. Изменение показателя преломления для нитрида кремния составляет $\Delta n = 0,03$ – $0,09$, для оксида кремния – $\Delta n = 0,05$ – $0,06$. В то же время для оксинитрида кремния изменение показателя преломления после УФ-воздействия находится в пределах погрешности ($\Delta n < 0,01$). Стоит отметить, что в диапазоне длин волн 0,2–0,3 мкм наблюдаются более интенсивное увеличение значений n для оксида кремния и, напротив, снижение значений n для нитрида и оксинитрида кремния. Для нитрида и оксинитрида кремния в данной области проявляется фундаментальное поглощение, для оксида кремния – поглощение посредством «хвостовых» состояний у края зоны. Следовательно, наблюдаемые изменения могут быть обусловлены изменением плотности «хвостовых» состояний у края зоны и смещением основной полосы поглощения.

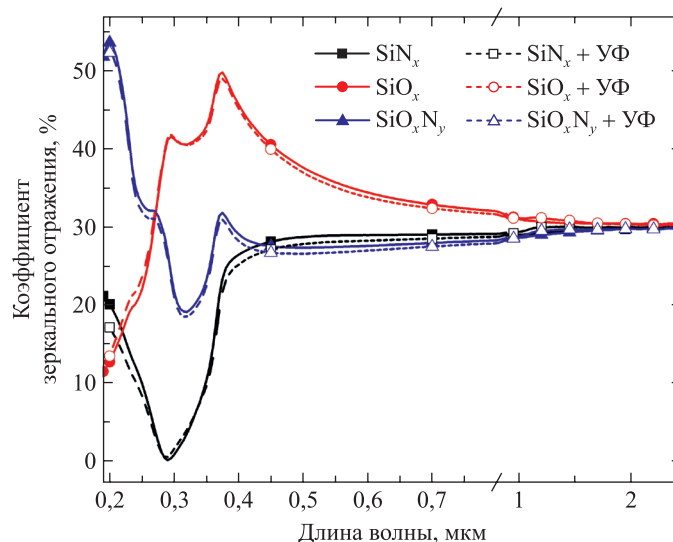


Рис. 1. Спектры зеркального отражения образцов SiN_x , SiO_x , SiO_xN_y до и после УФ-воздействия

Fig. 1. Specular reflectance spectra of SiN_x , SiO_x , SiO_xN_y samples before and after ultraviolet (UV) exposure

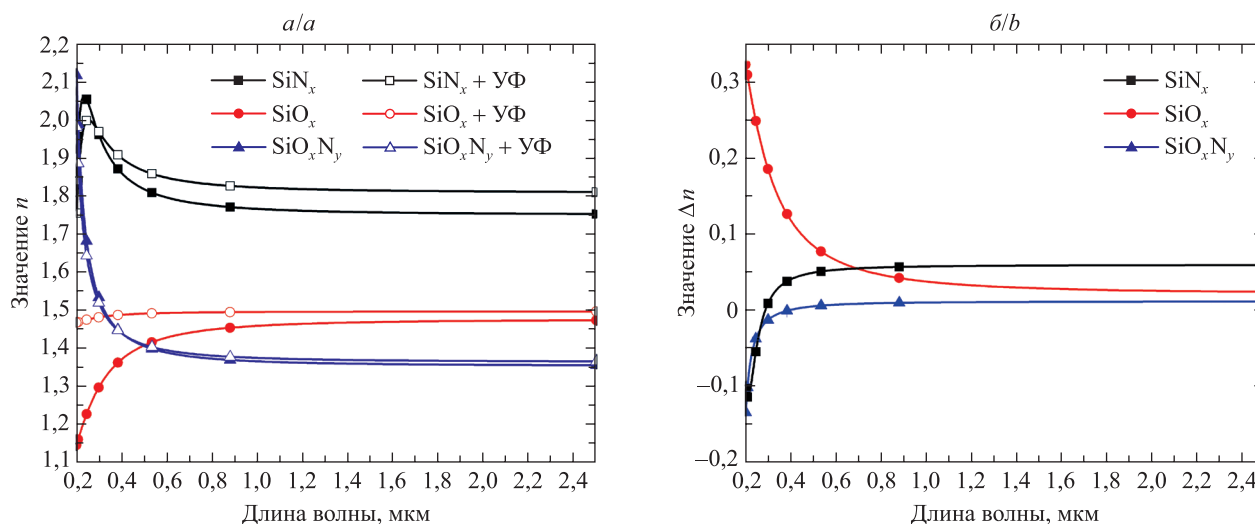


Рис. 2. Дисперсия показателя преломления (а) и разность спектров (б) образцов SiN_x , SiO_x , SiO_xN_y до и после УФ-воздействия

Fig. 2. Dispersion of the refractive index (a) and difference of the spectra (b) of SiN_x , SiO_x , SiO_xN_y samples before and after UV exposure

На рис. 3 представлены спектры ИК-отражения образцов SiN_x , SiO_x , SiO_xN_y до и после УФ-воздействия. В спектре исходного образца нитрида кремния проявились широкая полоса с максимумом при 830 см^{-1} , обусловленная валентными колебаниями связи $\text{Si}-\text{N}$ [13; 14], и плечо при 1100 см^{-1} , связанное с колебаниями связей $\text{Si}-\text{O}$ [14]. В случае с оксидом кремния в спектре также проявляются обе эти полосы, однако отношение интенсивностей полос $\text{Si}-\text{O}$ и $\text{Si}-\text{N}$ в 3 раза выше, чем для нитрида кремния. Сигнал от связи $\text{Si}-\text{N}$ в ИК-спектре оксидной пленки можно объяснить следующим образом. В качестве источника кислорода при ее осаждении используется закись азота. При разложении молекул N_2O образуется не только активный атомарный кислород, но и активные радикалы азота, которые взаимодействуют с продуктами разложения моносилана с формированием связей $\text{Si}-\text{N}$. Следует отметить, что интенсивность обсуждаемых полос для пленки оксида кремния меньше их интенсивности для пленки нитрида кремния. Это связано с меньшей толщиной оксидной пленки. В спектре оксинитридной пленки полоса $\text{Si}-\text{N}$ смещена в высокочастотную область (имеет максимум при 913 см^{-1}), что обусловлено увеличением концентрации кислорода в пленке. Воздействие УФ-облучения не приводит

к видимым изменениям в спектрах ИК-отражения, что свидетельствует о стабильности структурно-химического состава диэлектрических слоев. Отдельно отметим, что зарегистрировать сигнал от водорода или связей Si—H и N—H использованными методами не удалось, вероятнее всего, из-за слишком малой толщины пленок и (или) концентрации водорода ниже уровня обнаружения. Кроме того, выбранные параметры осаждения методом ICP-CVD (высокие значения температуры осаждения и мощности плазменного источника, применение в качестве прекурсора N_2 вместо NH_3) способствуют формированию пленок с низким содержанием водорода [15–17]. Тем не менее наблюдаемые изменения оптических параметров можно объяснить наличием связей Si—H в пленках и их трансформацией под действием УФ-облучения в более устойчивые связи Si—N, Si—O и Si—O—H, что сопровождается уменьшением отражательной способности пленок [18–20]. Рост показателя преломления при снижении концентрации водорода в пленках нитрида и оксида кремния продемонстрирован в работах [21–23]. Таким образом, увеличение показателя преломления под действием УФ-облучения в проведенном эксперименте можно связать с уменьшением концентрации связанного водорода в пленках.

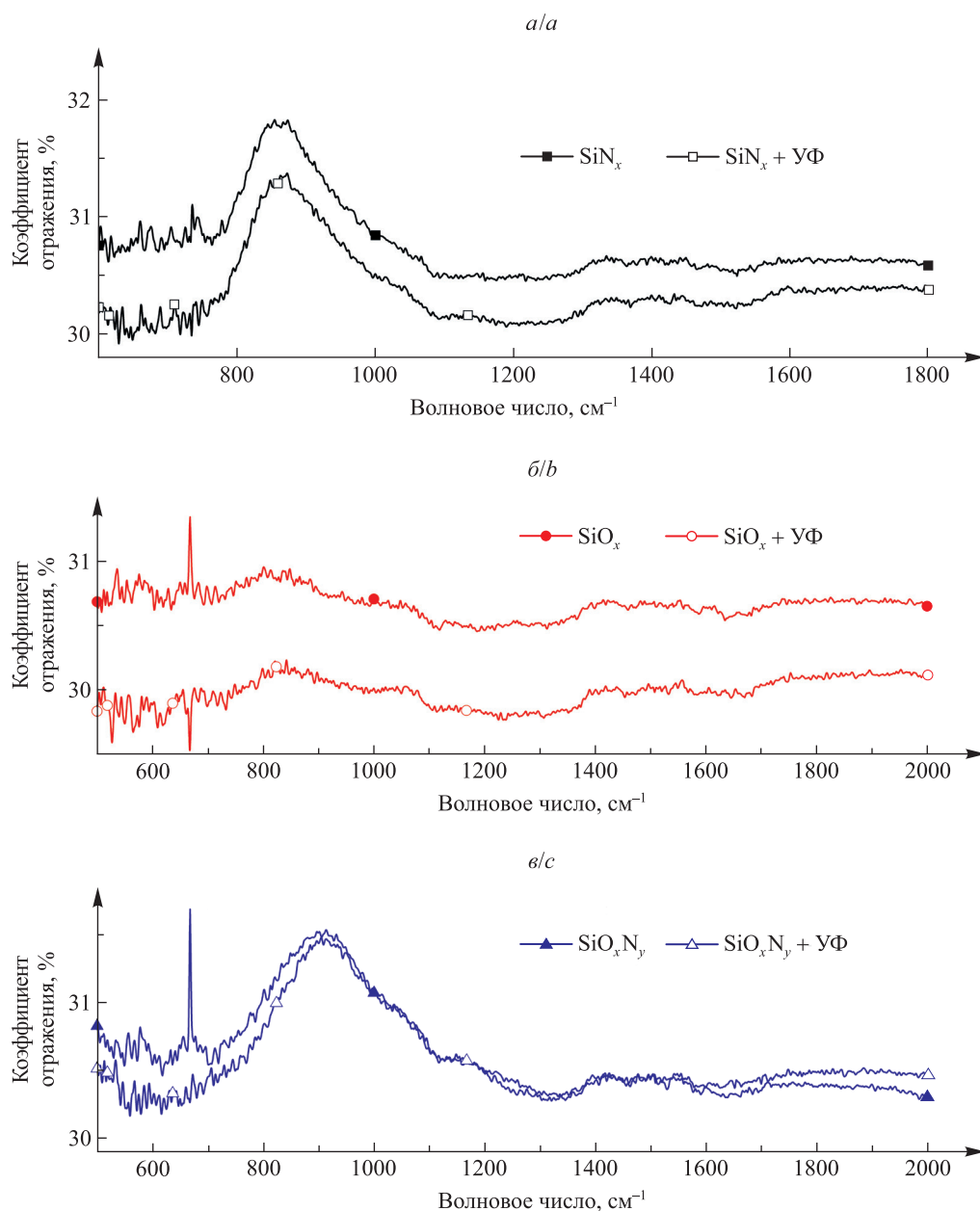


Рис. 3. Спектры ИК-отражения образцов SiN_x (а), SiO_x (б), SiO_xN_y (в) до и после УФ-воздействия

Fig. 3. Infrared reflectance spectra of SiN_x (a), SiO_x (b), SiO_xN_y (c) samples before and after UV exposure

Если принять во внимание вышеизложенное физическое описание воздействия УФ-излучения на оптические свойства диэлектрических слоев, становится понятно, почему для оксинитридной пленки эффект УФ-облучения проявился в меньшей степени. Источником кремния при ее осаждении был моносилан. Логично предположить, что в пленках с избыточным содержанием кремния (в рассматриваемом случае это SiN_x и SiO_x) концентрация связей $\text{Si}—\text{H}$ выше, чем в пленке SiO_xN_y . Этим можно объяснить больший эффект от УФ-воздействия для пленок SiN_x и SiO_x в сравнении с таковым для пленки SiO_xN_y , доля связей $\text{Si}—\text{H}$ в которой значительно меньше ввиду выбранных режимов осаждения. Усиление деградации оксидной пленки под действием УФ-излучения с увеличением избытка кремния также продемонстрировано в работе [24]. Таким образом, при необходимости минимизировать эффект УФ-облучения в диэлектрических пленках на основе кремния следует учитывать концентрацию водорода (которая, в свою очередь, часто коррелирует с избыточным содержанием кремния). Это особенно важно в случае использования пленок в качестве антибликовых покрытий, промежуточных отражателей [8; 19; 25]. Для применений, требующих более высоких значений показателя преломления (например, волноводы [26; 27]), можно порекомендовать дополнительную обработку УФ-излучением.

Заключение

Исследована деградация диэлектрических пленок SiN_x , SiO_x и SiO_xN_y , осажденных на кремниевые подложки методом ICP-CVD, под действием УФ-излучения. УФ-облучение проводилось при плотности потока энергии, в 20 раз превышающей соответствующий параметр естественного солнечного излучения, в течение 6 ч. Исходный элементный состав пленок SiN_x и SiO_x характеризуется избытком кремния, в отличие от элементного состава пленки SiO_xN_y , которая имеет оксидоподобную структуру. Анализ методом ИК-спектроскопии не выявил изменений структурно-фазового состава пленок при УФ-воздействии. Тем не менее после УФ-облучения наблюдается уменьшение отражательной способности диэлектрических слоев. С помощью моделирования спектров в программе *RefFIT* получены дисперсии показателя преломления диэлектрических слоев на кремнии. Установлено, что после УФ-воздействия показатель преломления пленок SiN_x и SiO_x увеличивается в среднем на $\Delta n = 0,03–0,09$, тогда как показатель преломления пленки SiO_xN_y практически не изменяется ($\Delta n < 0,01$). Стабильность пленки оксинитрида кремния, вероятнее всего, обусловлена меньшей концентрацией связей $\text{Si}—\text{H}$. Выявленные закономерности могут быть полезны при выборе диэлектриков на основе кремния для приборов, работающих в условиях открытого космоса.

Библиографические ссылки

1. Новиков ЛС. Настоящее и будущее космического материаловедения. *Вестник Московского университета. Серия 3, Физика. Астрономия*. 2010;4:25–32.
2. Дидык ПИ, Жуков АА. Радиационная стойкость микроэлектронных приборов при совместном воздействии дестабилизирующих факторов космического пространства на этапе конструирования. *Космические исследования*. 2023;61(3):242–247. DOI: 10.31857/S0023420622600209.
3. Xu Xu, He Wenyan, Wang Changjun, Wei Ming, Li Bincheng. SiN_x thickness dependence of spectral properties and durability of protected-silver mirrors. *Surface and Coatings Technology*. 2017;324:175–181. DOI: 10.1016/j.surfcoat.2017.05.078.
4. de O. C. Cintra MP, Santos AL, Silva P, Ueda M, Janke A, Jehnichen D, et al. Characterization of $\text{Si}_x\text{O}_y\text{N}_z$ coating on CF/PPS composites for space applications. *Surface and Coatings Technology*. 2018;335:159–165. DOI: 10.1016/j.surfcoat.2017.12.036.
5. de Rooij A. Corrosion in space. In: Blockley R, Shyy W, editors. *Encyclopedia of aerospace engineering. Volume 4, Materials technology* [Internet]. Chichester: John Wiley & Sons; 2010 [cited 2022 March 21]. p. 1–10. Available from: <https://sci-hub.se/10.1002/9780470686652.eae242>. DOI: 10.1002/9780470686652.eae242.
6. Garoli D, Rodriguez De Marcos LV, Larraquert JI, Corso AJ, Proietti Zaccaria R, Pelizzo MG. Mirrors for space telescopes: degradation issues. *Applied Sciences*. 2020;10(21):7538. DOI: 10.3390/app10217538.
7. Karanth SP, Sumesh MA, Shobha V, Sirisha J, Yadav DM, Vijay SB, et al. Electro-optical performance study of 4H-SiC/Pd Schottky UV photodetector array for space applications. *IEEE Transactions on Electron Devices*. 2020;67(8):3242–3249. DOI: 10.1109/TED.2020.3004306.
8. Sinha A, Qian J, Moffitt SL, Hurst K, Terwilliger K, Miller DC, et al. UV-induced degradation of high-efficiency silicon PV modules with different cell architectures. *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*. 2023;31(1):36–51. DOI: 10.1002/pip.3606.
9. Новиков ЛС. *Космическое материаловедение*. Москва: Макс-пресс; 2014. 448 с.
10. Kuzmenko AB. Kramers – Kronig constrained variational analysis of optical spectra. *Review of Scientific Instruments*. 2005;76(8):083108. DOI: 10.1063/1.1979470.
11. Parkhomenko I, Vlasukova L, Komarov F, Kovalchuk N, Demidovich S, Zhussupbekova A, et al. Effect of rapid thermal annealing on Si-based dielectric films grown by ICP-CVD. *ACS Omega*. 2023;8(33):30768–30775. DOI: 10.1021/acsomega.3c04997.
12. Chen Kunji, Lin Zewen, Zhang Pengzhan, Huang Rui, Dong Hengping, Huang Xinfan. Luminescence mechanism in amorphous silicon oxynitride films: band tail model or N—Si—O bond defects model. *Frontiers in Physics*. 2019;7:144. DOI: 10.3389/fphy.2019.00144.
13. Rudakov G, Reshetnikov I. IR spectra of ICPCVD SiN_x thin films for MEMS structures. *Journal of Physics: Conference Series*. 2015;643:012063. DOI: 10.1088/1742-6596/643/1/012063.
14. Liu F, Ward S, Gedvilas L, Keyes B, To B, Wang Q, et al. Amorphous silicon nitride deposited by hot-wire chemical vapor deposition. *Journal of Applied Physics*. 2004;96(5):2973–2979. DOI: 10.1063/1.1775046.

15. Zhou H, Elgaid K, Wilkinson C, Thayne I. Low-hydrogen-content silicon nitride deposited at room temperature by inductively coupled plasma deposition. *Japanese Journal of Applied Physics*. 2006;45(10S):8388. DOI: 10.1143/JJAP.45.8388.
16. Huang XD, Gan XF, Zhang F, Huang QA, Yang JZ. Improved electrochemical performance of silicon nitride film by hydrogen incorporation for lithium-ion battery anode. *Electrochimica Acta*. 2018;268:241–247. DOI: 10.1016/j.electacta.2018.02.117.
17. Han Sang-Soo, Jun Byung-Hyuk, No Kwangsoo, Bae Byeong-Soo. Preparation of a -SiN_x thin film with low hydrogen content by inductively coupled plasma enhanced chemical vapor deposition. *Journal of The Electrochemical Society*. 1998;145(2):652–658. DOI: 10.1149/1.1838318.
18. Левицкий ВС, Леньшин АС, Середин ПВ, Теруков ЕИ. Исследование процессов деградации оптических свойств мезо- и макропористого кремния при воздействии имитатором солнечного излучения. *Физика и техника полупроводников* [Интернет]. 2015 [протитировано 7 июня 2022 г.];49(11):1540–1545. Доступно по: <http://journals.ioffe.ru/articles/42457>.
19. Aouida S, Saadoun M, Boujmil MF, Ben Rabha M, Bessaïs B. Effect of UV irradiations on the structural and optical features of porous silicon: application in silicon solar cells. *Applied Surface Science*. 2004;238(1–4):193–198. DOI: 10.1016/j.apsusc.2004.05.209.
20. Guiheneuf V, Delaleux F, Pouliquen S, Riou O, Logerais P-O, Durastanti J-F. Effects of the irradiance intensity during UV accelerated aging test on unencapsulated silicon solar cells. *Solar Energy*. 2017;157:477–485. DOI: 10.1016/j.solener.2017.08.044.
21. Cai L, Rohatgi A, Yang D, El-Sayed MA. Effects of rapid thermal anneal on refractive index and hydrogen content of plasma-enhanced chemical vapor deposited silicon nitride films. *Journal of Applied Physics*. 1996;80(9):5384–5388. DOI: 10.1063/1.363480.
22. Perez AM, Santiago C, Renero-Carrillo F, Zuniga C. Optical properties of amorphous hydrogenated silicon nitride thin films. *Optical Engineering*. 2006;45(12):123802. DOI: 10.1117/1.2402493.
23. Putkonen M, Bosund M, Ylivaara OME, Puurunen RL, Kilpi L, Ronkainen H, et al. Thermal and plasma enhanced atomic layer deposition of SiO₂ using commercial silicon precursors. *Thin Solid Films*. 2014;558:93–98. DOI: 10.1016/j.tsf.2014.02.087.
24. Baek S, Ifthiqaq SM, Jang J, Lee S, Kim M, Jung J, et al. Effect of ultraviolet light exposure to boron doped hydrogenated amorphous silicon oxide thin film. *Applied Surface Science*. 2012;260:17–22. DOI: 10.1016/j.apsusc.2011.12.086.
25. Lambert A, Grundler T, Finger F. Hydrogenated amorphous silicon oxide containing a microcrystalline silicon phase and usage as an intermediate reflector in thin-film silicon solar cells. *Journal of Applied Physics*. 2011;109(11):113109. DOI: 10.1063/1.3592208.
26. Nejadriahi H, Friedman A, Sharma R, Pappert S, Fainman Y, Yu P. Thermo-optic properties of silicon-rich silicon nitride for on-chip applications. *Optics Express*. 2020;28(17):24951–24960. DOI: 10.1364/OE.396969.
27. Bucio TD, Lacava C, Clementi M, Faneca J, Skandalos I, Baldycheva A, et al. Silicon nitride photonics for the near-infrared. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*. 2020;26(2):8200613. DOI: 10.1109/JSTQE.2019.2934127.

References

1. Novikov LS. Space material science in the present and in future. *Vestnik Moskovskogo universiteta. Seriya 3, Fizika. Astronomiya*. 2010;4:25–32. Russian.
2. Didyk PI, Zhukov AA. [Radiation resistance of microelectronic devices under combined effect of destabilising factors of outer space at the design stage]. *Kosmicheskie issledovaniya*. 2023;61(3):242–247. Russian. DOI: 10.31857/S0023420622600209.
3. Xu Xu, He Wenyan, Wang Changjun, Wei Ming, Li Bincheng. SiN_x thickness dependence of spectral properties and durability of protected-silver mirrors. *Surface and Coatings Technology*. 2017;324:175–181. DOI: 10.1016/j.surfcoat.2017.05.078.
4. de O. C. Cintra MP, Santos AL, Silva P, Ueda M, Janke A, Jehnichen D, et al. Characterization of Si_xO_yN_z coating on CF/PPS composites for space applications. *Surface and Coatings Technology*. 2018;335:159–165. DOI: 10.1016/j.surfcoat.2017.12.036.
5. de Rooij A. Corrosion in space. In: Blockley R, Shyy W, editors. *Encyclopedia of aerospace engineering. Volume 4, Materials technology* [Internet]. Chichester: John Wiley & Sons; 2010 [cited 2022 March 21]. p. 1–10. Available from: <https://sci-hub.se/10.1002/9780470686652.eae242>. DOI: 10.1002/9780470686652.eae242.
6. Garoli D, Rodriguez De Marcos LV, Larruquert JI, Corso AJ, Proietti Zaccaria R, Pelizzo MG. Mirrors for space telescopes: degradation issues. *Applied Sciences*. 2020;10(21):7538. DOI: 10.3390/app10217538.
7. Karanth SP, Sumesh MA, Shobha V, Sirisha J, Yadav DM, Vijay SB, et al. Electro-optical performance study of 4H-SiC/Pd Schottky UV photodetector array for space applications. *IEEE Transactions on Electron Devices*. 2020;67(8):3242–3249. DOI: 10.1109/TED.2020.3004306.
8. Sinha A, Qian J, Moffitt SL, Hurst K, Terwilliger K, Miller DC, et al. UV-induced degradation of high-efficiency silicon PV modules with different cell architectures. *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*. 2023;31(1):36–51. DOI: 10.1002/pip.3606.
9. Novikov LS. *Kosmicheskoe materialovedenie* [Space material science]. Moscow: Maks-press; 2014. 448 p. Russian.
10. Kuzmenko AB. Kramers – Kronig constrained variational analysis of optical spectra. *Review of Scientific Instruments*. 2005;76(8):083108. DOI: 10.1063/1.1979470.
11. Parkhomenko I, Vlasukova L, Komarov F, Kovalchuk N, Demidovich S, Zhussupbekova A, et al. Effect of rapid thermal annealing on Si-based dielectric films grown by ICP-CVD. *ACS Omega*. 2023;8(33):30768–30775. DOI: 10.1021/acsomega.3c04997.
12. Chen Kunji, Lin Zewen, Zhang Pengzhan, Huang Rui, Dong Hengping, Huang Xinfan. Luminescence mechanism in amorphous silicon oxynitride films: band tail model or N—Si—O bond defects model. *Frontiers in Physics*. 2019;7:144. DOI: 10.3389/fphy.2019.00144.
13. Rudakov G, Reshetnikov I. IR spectra of ICPCVD SiN_x thin films for MEMS structures. *Journal of Physics: Conference Series*. 2015;643:012063. DOI: 10.1088/1742-6596/643/1/012063.
14. Liu F, Ward S, Gedvilas L, Keyes B, To B, Wang Q, et al. Amorphous silicon nitride deposited by hot-wire chemical vapor deposition. *Journal of Applied Physics*. 2004;96(5):2973–2979. DOI: 10.1063/1.1775046.
15. Zhou H, Elgaid K, Wilkinson C, Thayne I. Low-hydrogen-content silicon nitride deposited at room temperature by inductively coupled plasma deposition. *Japanese Journal of Applied Physics*. 2006;45(10S):8388. DOI: 10.1143/JJAP.45.8388.
16. Huang XD, Gan XF, Zhang F, Huang QA, Yang JZ. Improved electrochemical performance of silicon nitride film by hydrogen incorporation for lithium-ion battery anode. *Electrochimica Acta*. 2018;268:241–247. DOI: 10.1016/j.electacta.2018.02.117.
17. Han Sang-Soo, Jun Byung-Hyuk, No Kwangsoo, Bae Byeong-Soo. Preparation of a -SiN_x thin film with low hydrogen content by inductively coupled plasma enhanced chemical vapor deposition. *Journal of The Electrochemical Society*. 1998;145(2):652–658. DOI: 10.1149/1.1838318.

18. Levitskii VS, Lenshin AS, Seredin PV, Terukov EI. Investigation of degradation of the optical properties of meso- and macro-porous silicon exposed to solar radiation simulator. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov* [Internet]. 2015 [cited 2022 June 7];49(11):1540–1545. Available from: <http://journals.ioffe.ru/articles/42457>. Russian.
19. Aouida S, Saadoun M, Boujmil MF, Ben Rabha M, Bessaïs B. Effect of UV irradiations on the structural and optical features of porous silicon: application in silicon solar cells. *Applied Surface Science*. 2004;238(1–4):193–198. DOI: 10.1016/j.apsusc.2004.05.209.
20. Guiheneuf V, Delaleux F, Pouliquen S, Riou O, Logerais P-O, Durastanti J-F. Effects of the irradiance intensity during UV accelerated aging test on unencapsulated silicon solar cells. *Solar Energy*. 2017;157:477–485. DOI: 10.1016/j.solener.2017.08.044.
21. Cai L, Rohatgi A, Yang D, El-Sayed MA. Effects of rapid thermal anneal on refractive index and hydrogen content of plasma-enhanced chemical vapor deposited silicon nitride films. *Journal of Applied Physics*. 1996;80(9):5384–5388. DOI: 10.1063/1.363480.
22. Perez AM, Santiago C, Renero-Carrillo F, Zuniga C. Optical properties of amorphous hydrogenated silicon nitride thin films. *Optical Engineering*. 2006;45(12):123802. DOI: 10.1117/1.2402493.
23. Putkonen M, Bosund M, Ylivaara OME, Puurunen RL, Kilpi L, Ronkainen H, et al. Thermal and plasma enhanced atomic layer deposition of SiO₂ using commercial silicon precursors. *Thin Solid Films*. 2014;558:93–98. DOI: 10.1016/j.tsf.2014.02.087.
24. Baek S, Iftiqar SM, Jang J, Lee S, Kim M, Jung J, et al. Effect of ultraviolet light exposure to boron doped hydrogenated amorphous silicon oxide thin film. *Applied Surface Science*. 2012;260:17–22. DOI: 10.1016/j.apsusc.2011.12.086.
25. Lambert A, Grundler T, Finger F. Hydrogenated amorphous silicon oxide containing a microcrystalline silicon phase and usage as an intermediate reflector in thin-film silicon solar cells. *Journal of Applied Physics*. 2011;109(11):113109. DOI: 10.1063/1.3592208.
26. Nejadriahi H, Friedman A, Sharma R, Pappert S, Fainman Y, Yu P. Thermo-optic properties of silicon-rich silicon nitride for on-chip applications. *Optics Express*. 2020;28(17):24951–24960. DOI: 10.1364/OE.396969.
27. Bucio TD, Lacava C, Clementi M, Faneca J, Skandalos I, Baldycheva A, et al. Silicon nitride photonics for the near-infrared. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*. 2020;26(2):8200613. DOI: 10.1109/JSTQE.2019.2934127.

Получена 18.10.2023 / исправлена 14.11.2023 / принята 15.11.2023.
Received 18.10.2023 / revised 14.11.2023 / accepted 15.11.2023.

УДК 539.216; 539.22; 538.91

МИКРОСТРУКТУРА И МИКРОТВЕРДОСТЬ СПЛАВА Al – Si, ЛЕГИРОВАННОГО Mg, Mn, Fe, Ni, Cu, ПРИ ВЫСОКОСКОРОСТНОМ ЗАТВЕРДЕВАНИИ

О. В. ГУСАКОВА¹⁾, В. Г. ШЕПЕЛЕВИЧ²⁾

¹⁾Международный государственный экологический институт им. А. Д. Сахарова БГУ,
ул. Долгобродская, 23/1, 220070, г. Минск, Беларусь

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

Исследовано влияние высокоскоростного затвердевания на микроструктуру, зеренную структуру, текстуру и микротвердость сплавов системы Al – Si, легированных металлами. Показано, что при постоянстве элементного состава по толщине фольга имеет слоистую микроструктуру, которая формируется в результате различных условий затвердевания. Установлено, что в слое, прилегающем к кристаллизатору, затвердевание протекает с образованием наноразмерных частиц двух видов: глобулярных частиц кремния, средний размер которых составляет 110 нм, и неглобулярных частиц, содержащих металлы и имеющих размер до 30 нм. Проанализированы причины повышения микротвердости сплава за счет дополнительного торможения скользящих дислокаций на некогерентных частицах по механизму Орована в зависимости от объемной доли кремния. Отмечена возможность увеличения микротвердости силумина, легированного металлами, до 2 ГПа, что в 4 раза превышает микротвердость литого силумина, полученного при квазиравновесном затвердевании. Разработанные сплавы являются перспективным исходным материалом для порошковой металлургии при изготовлении изделий прессованием.

Ключевые слова: силумины; легирование металлами; высокоскоростное затвердевание; микроструктура; микротвердость.

MICROSTRUCTURE AND MICROHARDNESS OF Al – Si ALLOY DOPED BY Mg, Mn, Fe, Ni, Cu AT HIGH-SPEED SOLIDIFICATION

O. V. GUSAKOVA^a, V. G. SHEPELEVICH^b

^aInternational Sakharov Environmental Institute, Belarusian State University,
23/1 Dawgabrodskaja Street, Minsk 220070, Belarus

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

Corresponding author: O. V. Gusakova (ol.gusakova@gmail.com)

The influence of high-speed solidification on the microstructure, grain structure, texture and microhardness of Al – Si system alloys doped by metals has been studied. It is shown that, with a constant elemental composition in thickness, the foil has a layered microstructure, which is formed as a result of various solidification conditions. It has been established

Образец цитирования:

Гусакова ОВ, Шепелевич ВГ. Микроструктура и микротвердость сплава Al – Si, легированного Mg, Mn, Fe, Ni, Cu, при высокоскоростном затвердевании. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2024;1:65–74.
EDN: RSTXUW

For citation:

Gusakova OV, Shepelevich VG. Microstructure and microhardness of Al – Si alloy doped by Mg, Mn, Fe, Ni, Cu at high-speed solidification. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2024;1:65–74. Russian.
EDN: RSTXUW

Авторы:

Ольга Вадимовна Гусакова – кандидат физико-математических наук, доцент; доцент кафедры ядерной и радиационной безопасности факультета мониторинга окружающей среды.
Василий Григорьевич Шепелевич – доктор физико-математических наук, профессор; профессор кафедры физики твердого тела и нанотехнологий физического факультета.

Authors:

Olga V. Gusakova, PhD (physics and mathematics), docent; associate professor at the department of nuclear and radiation safety, faculty of environmental monitoring.
ol.gusakova@gmail.com
<https://orcid.org/0000-0002-9796-4476>
Vasily G. Shepelevich, doctor of science (physics and mathematics), full professor; professor at the department of solid state physics and nanotechnologies, faculty of physics.
shepelevich@bsu.by
<https://orcid.org/0000-0002-5899-1690>

that in the foil layer adjacent to the crystalliser, solidification proceeds with the formation of nanosized particles of two types: globular silicon particles with an average size of 110 nm and non-globular particles containing metals with a size of up to 30 nm. The reasons of increasing the microhardness of the alloy due to additional braking of gliding dislocations on incoherent particles according to the Orowan mechanism are analysed depending on the volume fraction of silicon. The possibility of increasing the microhardness of silumin alloyed with metals to 2 GPa has been noted, which is 4 times higher than the microhardness of cast silumin obtained during quasi-equilibrium solidification. The developed alloys are promising starting materials for powder metallurgy in the manufacture of pressed products.

Keywords: silumins; alloying with metals; high-speed solidification; microstructure; microhardness.

Введение

Сплавы на основе алюминия, в том числе силумины (Al – Si), широко используются в силу хороших функциональных свойств. При низких значениях удельной плотности и коэффициента линейного расширения они обладают высокой растекаемостью, прочностью и коррозионной стойкостью [1; 2]. Твердость силуминов растет с увеличением концентрации кремния. Однако при равновесной кристаллизации кремний затвердевает в виде крупных пластин, которые становятся концентраторами напряжений при деформации, что приводит к растрескиванию. По этой причине улучшение функциональных характеристик силуминов в первую очередь связано с уменьшением размеров и изменением формы частиц кремния с пластинчатой на равноосную или разветвленную [3; 4]. В настоящее время разрабатываются два основных способа модификации кремния: введение в расплав модифицирующих добавок [5; 6] и использование технологии высокоскоростного затвердевания. Затвердевание при высоких скоростях охлаждения расплава (до 10^3 K/c) реализуется при литье под давлением, литье в охлаждаемые формы [7; 8]. Установлено, что при таких скоростях охлаждения расплава многие легирующие элементы оказывают как положительное, так и отрицательное влияние на функциональные свойства сплавов [9; 10]. Очень эффективным способом измельчения структурных составляющих является использование более высоких скоростей охлаждения расплава (до 10^6 K/c), которые достигаются при обработке поверхности высокоэнергетическими потоками плазмы и электронов, а также при сверхбыстрой закалке из расплава [11–13]. В настоящее время показано, что метод сверхбыстрой закалки из расплава обеспечивает измельчение микроструктуры и улучшение механических свойств доэвтектических и заэвтектических силуминов, в том числе содержащих отдельные легирующие элементы [14–19]. Менее изученными остаются силумины эвтектического и околоэвтектического составов. В данной статье представлены результаты исследования влияния комплексного легирования металлами на микроструктуру и механические свойства сплава Al – Si доэвтектического и эвтектического составов.

Материалы и методы исследования

В ходе работы исследовались микроструктура, элементный состав, зеренная структура, текстура и микротвердость промышленного сплава АК12оч (сплав № 1) и полученных на его основе сплавов Al – Si – (Mg, Mn, Fe, Ni, Cu) (сплавы № 2–4). Концентрация элементов в данных сплавах приведена в табл. 1.

Таблица 1

Состав исследуемых сплавов

Table 1

Composition of the studied alloys

Номер сплава	Концентрация элементов, мас. %						
	Al	Si	Mg	Mn	Fe	Ni	Cu
1	87,6	12,2	–	–	0,2	–	–
2	83,0	12,5	0,8	0,4	0,7	0,9	1,7
3	84,8	11,1	0,6	0,4	0,6	0,8	1,7
4	88,6	7,7	0,4	0,3	0,9	0,3	1,8

Сначала осуществлялось приготовление сплавов АК12оч – Mg, АК12оч – Mn, АК12оч – Fe, АК12оч – Ni, АК12оч – Cu путем легирования сплава АК12оч элементом соответствующей массы (например, 98 г АК12оч + 2 г Cu). Затем они сплавлялись в равных долях при температуре выше температуры эвтектики. Для изменения концентрации кремния добавлялся алюминий марки А995 или порошок монокристаллического кремния. Окончательный состав сплава определялся экспериментально методом рентгеноспектрального микроанализа.

Для изготовления фольги использовался массивный образец, полученный при охлаждении расплава на воздухе в графитовой изложнице размером $15 \times 5 \times 3$ мм. С применением метода сверхбыстрой заковки из расплава кусочек образца расплавлялся и выливался на внутреннюю полированную поверхность вращающегося медного барабана – кристаллизатора. Внутренний радиус барабана составлял 20 мм, линейная скорость вращения равнялась 15 м/с. При попадании на кристаллизатор расплав разделялся на отдельные капли, каждая из которых растекалась тонким слоем и затвердевала в виде фольги. Толщина фольги зависела от объема капли и находилась в пределах от 30 до 180 мкм. В работе представлены результаты исследования фольги толщиной 100 мкм. Средняя скорость охлаждения расплава при такой толщине фольги оценивается равной 10^5 К/с [19].

Для исследования микроструктуры применялся сканирующий электронный микроскоп LEO-1455VP (*Carl Zeiss*, Германия). Шлифы продольного (параллельно поверхности) и поперечного сечений фольги изготавливались на полировальной установке TegraPol-25 (*Struers*, Дания) с использованием реактивов и методики полировки алюминиевых сплавов фирмы-производителя. Элементный состав и распределение элементов изучались методом рентгеноспектрального микроанализа с помощью энергодисперсионного спектрометра Aztec Energy Advanced X-Max 80 (*Oxford Instruments*, Великобритания). Зеренная структура исследовалась методом дифракции обратноотраженных электронов с применением дифракционной приставки фазового анализа.

Измерения микротвердости проводились на микротвердомере 735MVA (*Shenzhen Pride Instrument*, Китай) после предварительной полировки образцов. Величина нагрузки составляла 50 г. Исследования выполнялись на трех образцах каждого сплава: на поверхности фольги, прилегающей к кристаллизатору (поверхность *A*), свободно затвердевающей поверхности (поверхность *B*), а также поверхности поперечного сечения. На каждом образце было получено по 10 отпечатков. Максимальная погрешность при определении величины микротвердости не превышает 9 %.

Результаты и их обсуждение

На рис. 1 представлено изображение микроструктуры фольги сплавов № 2–4 в поперечном сечении. Установлено, что быстрозатвердевшая фольга сплавов системы Al – Si имеет слоистую микроструктуру, которая обусловлена изменением термодинамических условий на границе раздела фаз твердое тело – расплав, при этом состав фольги по толщине не изменяется [20; 21].

Микроструктура слоев отличается. Слой *A*, прилегающий к поверхности *A*, формируется в условиях наиболее глубокого переохлаждения и при максимальной скорости теплоотвода. Он состоит из дисперсных включений в матрице алюминия. В сплаве № 1 присутствуют однородно распределенные дисперсные включения кремния [22]. На рис. 2, б, представлен участок микроструктуры слоя *A* сплава № 2, рассмотренный после глубокого травления, направленного на удаление матрицы алюминия. Выявлены два типа включений: глобулярные включения кремния, средний размер которых составляет 110 нм, и неглобулярные включения, размер которых не превышает 30 нм (показаны стрелками). Эти включения, по-видимому, содержат легирующие элементы.

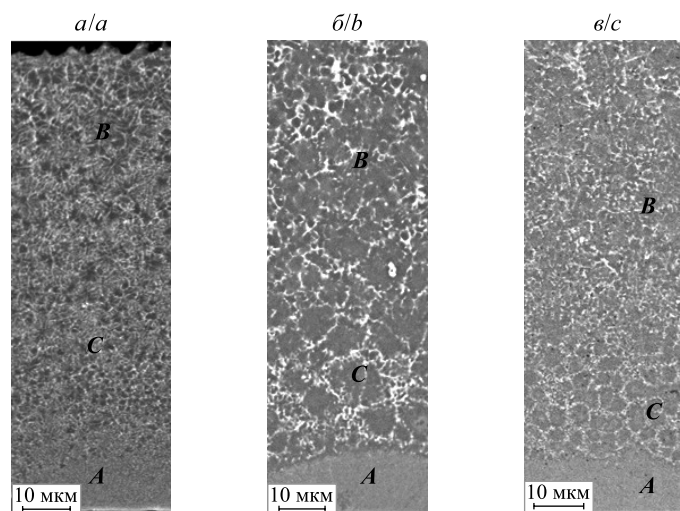


Рис. 1. Микроструктура поперечного сечения фольги исследуемых сплавов:
а – сплав № 4; б – сплав № 3; в – сплав № 2

Fig. 1. Microstructure of the cross section of the foil of the studied alloys:
a – alloy No. 4; b – alloy No. 3; c – alloy No. 2

По мере выделения скрытой теплоты кристаллизации уменьшается переохлаждение расплава. Кроме того, ухудшается теплоотвод, поскольку он осуществляется через затвердевший слой фольги. Это приводит к снижению скорости затвердевания и образованию характерных для аномальной эвтектики системы Al – Si первичных дендритов α -Al и смеси алюминия и кремния в междендритном пространстве. Слой *C* является переходным слоем от слоя *A* к слою *B*, прилегающему к поверхности *B*, и обладает особенностями микроструктуры в зависимости от концентрации кремния. При низкой концентрации кремния в доэвтектических силуминах он имеет ячеистую микроструктуру [21], при концентрации кремния, близкой к эвтектике, – дендритно-ячеистую [22; 23]. Типичные микроструктуры слоев *A* и *B* и карта распределения кремния для сплава № 2 приведены на рис. 2. В микроструктуре слоя *B* выявляются первичные дендриты алюминия (показаны стрелкой), светлые включения на границах ветвей дендритов соответствуют интерметаллическим соединениям.

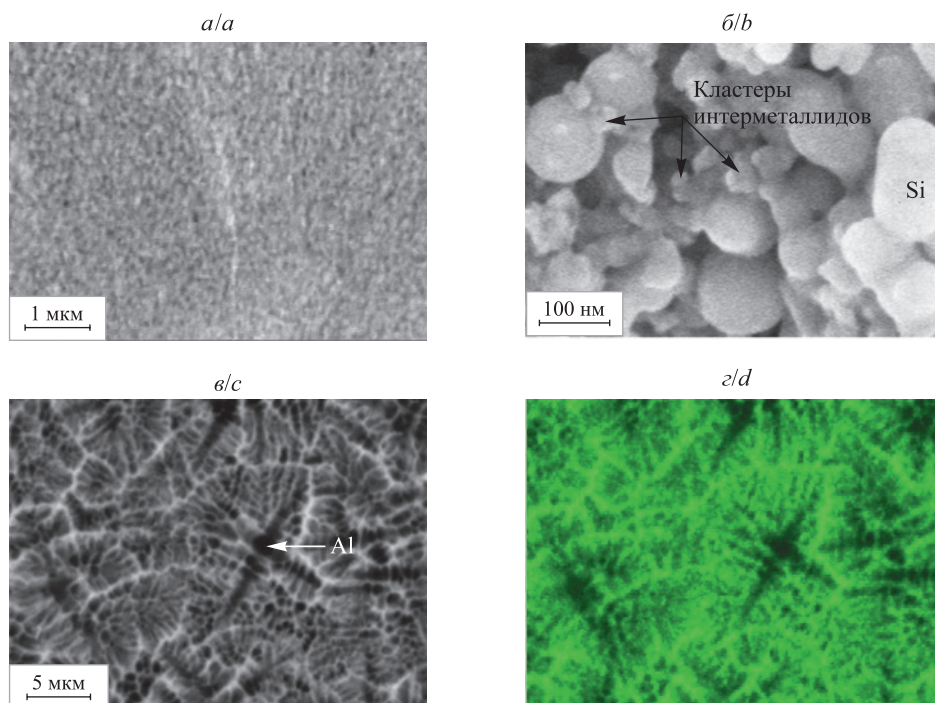


Рис. 2. Микроструктура и карта распределения кремния в слоях фольги сплава № 2:
a, *b* – микроструктура слоя *A* при различном увеличении; *c* – микроструктура слоя *B*;
d – распределение кремния в слое *B*

Fig. 2. Microstructure and map of silicon distribution in the foil layers of alloy No. 2:
a, *b* – microstructure of layer *A* at different magnifications; *c* – microstructure of layer *B*;
d – silicon distribution in layer *B*

В исследуемых сплавах основным элементом является алюминий. Его концентрация составляет от 83,0 до 88,6 мас. %. Из присутствующих в сплавах фаз (алюминий, кремний и интерметаллические соединения) именно алюминий обладает наименьшей твердостью и наибольшей пластичностью. По этой причине деформация, обусловленная движением дислокаций, должна начинаться и развиваться в фазе алюминия. В связи с этим интерес представляют исследование зеренной структуры алюминия и определение ориентации зерен. На рис. 3 приведены карты зеренной структуры алюминия, полученные с поверхностей *A* и *B* фольги сплава № 1. Схема окраски зерен представлена на рис. 3, б.

Полученные данные свидетельствуют о микрокристаллической зеренной структуре. Средние значения параметров зеренной структуры (размеров зерен, числа соседних зерен и отношения длины к ширине) на поверхностях *A* и *B* фольги сплавов № 1–4 приведены в табл. 2.

Для поликристаллов существенное влияние на микротвердость может оказать наличие преимущественной ориентации и взаимной разориентации зерен в фольге. На рис. 4 приведены данные о разориентации соседних и случайно выбранных зерен поверхностей *A* и *B* сплава № 1. Полученные данные говорят об отсутствии корреляции в ориентации случайно выбранных зерен (пунктирная линия соответствует расчетной кривой разориентации некоррелирующих зерен). Наличие максимума доли соседних зерен в низкоугловой области свидетельствует о повышенной плотности малоугловых границ на поверхности *A*.

Таблица 2

Параметры зеренной структуры фольги исследуемых сплавов

Table 2

Parameters of the grain structure of the foil of the studied alloys

Номер сплава	Размеры зерен, мкм		Число соседних зерен		Отношение длины к ширине	
	Поверхность А	Поверхность В	Поверхность А	Поверхность В	Поверхность А	Поверхность В
1	6,2	4,2	5,0	5,2	2,0	1,7
2	3,4	3,8	4,9	4,8	1,6	1,5
3	3,3	4,0	5,0	4,9	1,7	1,6
4	3,3	3,9	4,9	5,0	1,6	1,7

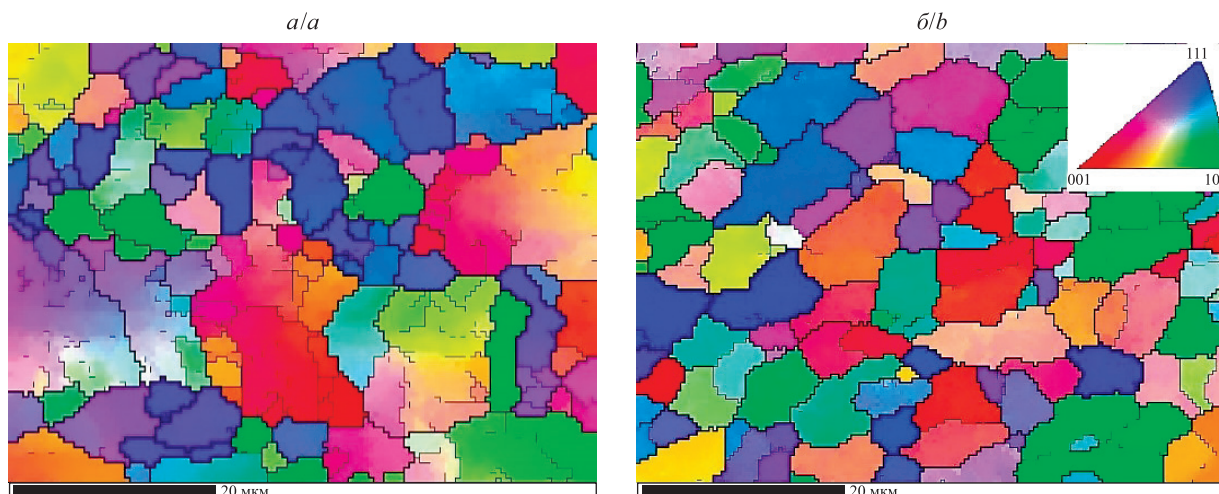


Рис. 3. Зеренная структура фольги сплава № 1:
а – поверхность А; б – поверхность В

Fig. 3. Grain structure of the foil of alloy No. 1:
a – surface A; b – surface B

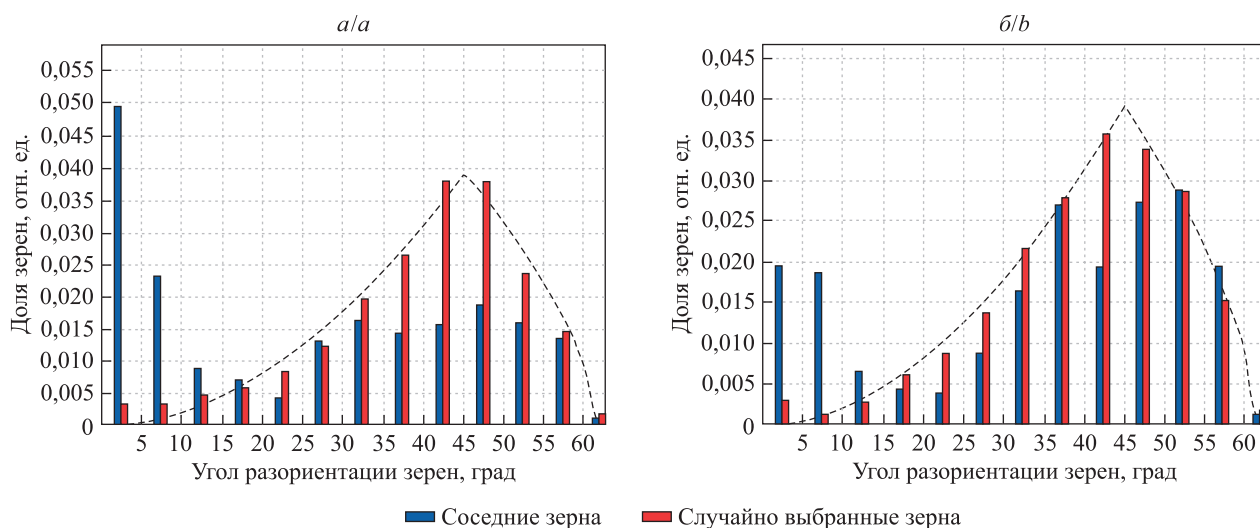


Рис. 4. Разориентация зерен в фольге сплава № 1:
а – поверхность А; б – поверхность В

Fig. 4. Misorientation of grains in the foil of alloy No. 1:
a – surface A; b – surface B

Анализ текстуры зерен, проведенный с использованием метода дифракции обратноотраженных электронов, позволяет утверждать, что в исследуемых сплавах отсутствует как текстура зарождения, так и текстура роста. На рис. 5 приведены полюсные фигуры, построенные для проекции плоскости (111), являющейся плоскостью легкого скольжения алюминия, на плоскости поверхностей *A* и *B* фольги сплава № 3. В фольге сплавов № 1, 2 и 4 преимущественной ориентации зерен также не обнаружено.

На рис. 6 приведены значения микротвердости в слоях *A*, *C* и *B* фольги сплавов № 1–4.

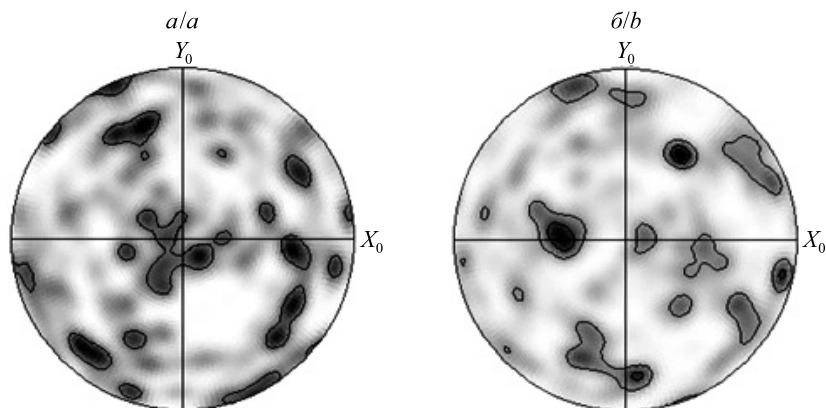


Рис. 5. Полюсные плотности проекции плоскости (111) на плоскости поверхностей *A* и *B* фольги сплава № 3

Fig. 5. Pole densities of the projection of the plane (111) on the planes of surface *A* and *B* of the foil of alloy No. 3

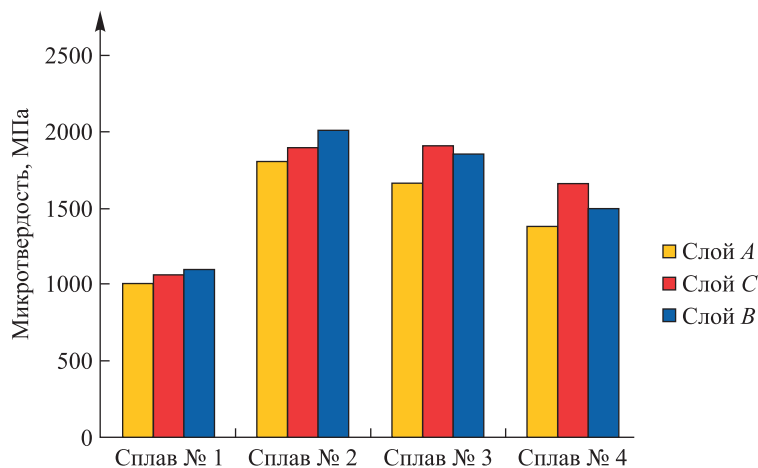


Рис. 6. Микротвердость исследуемых сплавов

Fig. 6. Microhardness of the studied alloys

Микротвердость фольги сплава № 1 в 2 раза превышает микротвердость литого образца, полученного в квазиравновесных условиях (490 МПа), а дополнительное многокомпонентное легирование приводит к увеличению микротвердости в 3–4 раза.

Микротвердость сплава определяется по размеру отпечатка и характеризует упругие и пластические свойства материала. В структуре отпечатка не обнаружено трещин. Это позволяет утверждать, что он получен в результате пластической деформации материала. Поскольку фольги имеют слоистую микроструктуру, то микротвердость должна анализироваться с учетом структурно-фазового состояния каждого слоя.

В слое *A* сплава № 1, кроме сопротивления решетки, дополнительным препятствием для движения скользящих дислокаций являются сформировавшиеся в объеме зерна глобулярные некогерентные матрице недеформируемые включения кремния. Реализуются различные механизмы взаимодействия сдвигающих дислокаций с включениями, приводящие к образованию сетки неподвижных дислокаций, что обеспечивает деформационное упрочнение материала. При небольших деформациях преимущественный вклад в упрочнение вносят призматические дислокационные петли, которые образуются при

вдавливании частиц и неровностей поверхности. При взаимодействии с глобулярными включениями кремния скользящие дислокации огибают их, оставляя за собой кольца Орована [24]. Дополнительное напряжение, необходимое для преодоления дислокацией глобулярной частицы (напряжение Орована), в общем случае при небольшом размере частиц определяется выражением

$$\tau_{Or} = \frac{Gb}{\lambda},$$

где G – модуль сдвига матрицы; b – вектор Бюргерса; λ – расстояние между частицами.

При достаточно крупных частицах необходимо учитывать их объемную долю (ϕ) и размеры. Экспериментально установленные размеры частиц кремния слабо зависят от концентрации кремния в исследованных сплавах и находятся в пределах 110–120 нм (средний радиус $\delta = 55$ нм). Однако снижение концентрации кремния приводит к увеличению среднего расстояния между частицами (λ_{Si}). Значение λ_{Si} определяется по формуле

$$\lambda_{Si} = R_s - 0,5\pi\delta,$$

где $R_s = \delta \sqrt{\frac{2\pi}{3\phi}}$ – среднее расстояние между центрами частиц, зависящее от объемной доли частиц и их размеров [24].

Рассчитанные для сплавов № 1–4 значения λ_{Si} составляют 144; 145; 153 и 214 нм соответственно. Увеличение λ_{Si} с уменьшением концентрации кремния означает снижение вклада частиц кремния в деформационное упрочнение материала по механизму Орована.

Дислокационные кольца Орована накапливаются. После образования петель Орована скользящая дислокация тормозится на включении, размер которого увеличивается на размер окружающих его дислокационных петель. При достижении критической плотности дислокаций могут образовываться дислокационные диполи – две краевые дислокации разных знаков. Они располагаются в соседних плоскостях и представляют собой устойчивую систему, эффективно препятствующую движению скользящих дислокаций.

Помимо глобулярных включений кремния, в сплавах № 2–4 присутствуют наноразмерные включения, в состав которых входят легирующие металлы. Объемную долю таких включений трудно оценить практически, так как они рентгеноаморфны и к тому же часть металлов растворяется в кремнии. Кроме того, для определения пространственного расположения наноразмерных включений необходимо проводить дополнительные исследования. Однако очевидно, что при прочих равных параметрах сплава № 1 и легированных сплавов (близкие значения размеров зерен, включений кремния, однородный характер распределения включений) присутствие наноразмерных частиц, содержащих металлы, и растворенных элементов приводит к существенному увеличению микротвердости как за счет твердорастворного механизма торможения скользящих дислокаций, так и за счет наличия дополнительных препятствий в виде наноразмерных частиц. Вместе с тем некогерентные матрице наноразмерные частицы являются эффективным источником для образования призматических петель [24], а также колец Орована.

Величина критической плотности дислокаций ($\rho_{кр}$) зависит от соотношения среднего радиуса частиц кремния и расстояния между ними [25]:

$$\rho_{кр} = \frac{60}{\lambda_{Si}^2 - \frac{\pi\delta^2}{4}}.$$

Результаты измерений геометрических параметров микроструктурных составляющих и расчетов критической плотности дислокаций приведены в табл. 3.

Таблица 3

Геометрические параметры микроструктурных составляющих
и критическая плотность дислокаций Орована

Table 3

Geometric parameters of microstructural components
and critical Orowan dislocation density

Номер сплава	Объемная доля частиц кремния, отн. ед.	Средний радиус частиц кремния, нм	Среднее расстояние между частицами кремния, нм	Критическая плотность дислокаций Орована, 10^{12} м^{-2}
1	0,12	55	144	3,3
2	0,11	55	153	3,1
3	0,70	55	214	1,4

Полученные оценочные результаты показывают, что при комнатной температуре увеличение расстояния между частицами приводит к снижению плотности дислокаций.

Препятствием для движения дислокаций являются также границы зерен. При накоплении скользящих дислокаций у границы зерна создается напряжение, которое приводит к движению скользящих дислокаций в соседнем зерне. При встрече скользящей дислокации с малоугловой границей зерна возможен непосредственный прорыв дислокации через границу. Стоит отметить, что в слое *A* на границах зерен не выявлено скопления выделений кремния и интерметаллических соединений.

Экспериментально установлено, что для всех сплавов наблюдается небольшое повышение микротвердости в слое *C*. Отличительной особенностью микроструктуры слоя *C* является как присутствие дисперсных частиц в объеме, так и их выделение на границах ячеек и зерен. Включения частиц на границах зерен являются эффективным препятствием для передачи напряжения из деформированного зерна в соседнее зерно, снижают подвижность границ зерен, затрудняют развитие деформаций по границам, тем самым повышая микротвердость сплава.

Слой *B* содержит небольшую долю первичных дендритов алюминия. Основной объем занимает смесь тонких разветвленных пластин эвтектического кремния и алюминия в междендритном пространстве. Пластины кремния являются эффективным упрочняющим фактором. Как показали результаты рентгеноструктурного микроанализа, до 70 % легирующих металлов локализованы в объеме фазы алюминия в виде твердого раствора и наноразмерных частиц интерметаллических соединений [22], что приводит к дополнительному (по сравнению со сплавом № 1) торможению скользящих дислокаций. Кроме того, на границах дендритных зерен образуются сравнительно крупные интерметаллические включения, являющиеся непреодолимым препятствием для скользящих дислокаций.

Заключение

Таким образом, установлено, что получение сплава Al – Si методом сверхбыстрой закалки из расплава приводит к увеличению микротвердости фольги сплава АК12оч в 2 раза по сравнению с микротвердостью массивного образца за счет измельчения фазы кремния, уменьшения размера зерен и образования глобулярных наноразмерных частиц.

В сплавах, легированных Mg, Mn, Fe, Ni и Cu, рост концентрации кремния в фольге с 7 до 12 мас. % способствует увеличению микротвердости на 15–20 %.

Дополнительное легирование металлами повышает микротвердость фольги по сравнению с микротвердостью массивного нелегированного силумина в 3–4 раза, а по сравнению с микротвердостью фольги сплава АК12оч в 2 раза, что обусловлено формированием твердого раствора на основе алюминия, образованием наноразмерных частиц, содержащих металлы, присутствием частиц в объеме и на границах ячеек, а также наличием включений интерметаллических соединений на границах зерен.

Библиографические ссылки

1. Ye Haizhi. An overview of the development of Al – Si alloy based material for engine applications. *Journal of Materials Engineering and Performance*. 2003;12(3):288–297. DOI: 10.1361/105994903770343132.
2. Peeru Naik M, Balaram Padal KT. A review on friction and wear performance of Al – Si alloy / steel tribopair. *Materials Today: Proceedings*. 2019;18(part 7):5502–5506. DOI: 10.1016/j.matpr.2019.07.581.
3. Barrirero J. *Eutectic modification of Al – Si casting alloys* [dissertation]. Linköping: LiU-Tryck; 2019. XXVIII, 82 p. (Linköping studies in science and technology; number 2014).
4. Chen Jiqiang, Liu Chao, Wen Feng, Zhou Qiongyu, Zhao Hongjin, Guan Renguo. Effect of microalloying and tensile deformation on the internal structures of eutectic Si phase in Al – Si alloy. *Journal of Materials Research and Technology*. 2020;9(3):4682–4691. DOI: 10.1016/j.jmrt.2020.02.096.
5. Марукович ЕИ, Стеценко ВЮ. Технологические проблемы модифицирования структуры отливок из силуминов. Пути решения. *Литье и металлургия*. 2019;2:19–22. DOI: 10.21122/1683-6065-2019-2-19-22.
6. Liang SS, Wen SP, Xu J, Wu XL, Gao KY, Huang H, et al. The influence of Sc – Si clusters on aging hardening behavior of dilute Al – Sc – (Zr) – (Si) alloy. *Journal of Alloys and Compounds*. 2020;842:155826. DOI: 10.1016/j.jallcom.2020.155826.
7. Стеценко ВЮ, Радько СЛ, Харьков СА, Ли Джонг Хун, Чой Ки Йонг. Повышение эффективности охлаждения отливок из силуминов при литье закалочным затвердеванием. *Литье и металлургия*. 2006;2(1):128–129.
8. Chen Rui, Shi Yu-feng, Xu Qing-yan, Liu Bai-cheng. Effect of cooling rate on solidification parameters and microstructure of Al – 7Si – 0.3Mg – 0.15Fe alloy. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*. 2014;24(6):1645–1652. DOI: 10.1016/S1003-6326(14)63236-2.
9. Скоробагатко ЮП. Модифицирование заэвтектических алюминиевых сплавов с применением активных добавок. *Металл и литье Украины*. 2009;9:19–28.
10. Fortini A, Merlin M, Fabbri E, Pirlotti S, Garagnani GL. On the influence of Mn and Mg additions on tensile properties, microstructure and quality index of the A356 aluminum foundry alloy. *Procedia Structural Integrity*. 2016;2:2238–2245. DOI: 10.1016/j.prostr.2016.06.280.

11. Kimura T, Nakamoto T, Mizuno M, Araki H. Effect of silicon content on densification, mechanical and thermal properties of Al – xSi binary alloys fabricated using selective laser melting. *Materials Science and Engineering: A*. 2017;682:593–602. DOI: 10.1016/j.msea.2016.11.059.
12. Zaguliaev D, Konovalov S, Ivanov Yu, Gromov V, Petrikova E. Microstructure and mechanical properties of doped and electron-beam treated surface of hypereutectic Al – 11.1 % Si alloy. *Journal of Materials Research and Technology*. 2019;8(5):3835–3842. DOI: 10.1016/j.jmrt.2019.06.045.
13. Shimanski VI, Jevdokimovs A, Cherenda NN, Astashynski VM, Petrikova EA. Structure and phase composition of hypereutectic silumin alloy Al – 20Si after compression plasma flows impact. *Journal of the Belarusian State University. Physics*. 2021;2:25–33. DOI: 10.33581/2520-2243-2021-2-25-33.
14. Xu CL, Wang HY, Qiu F, Yang YF, Jiang QC. Cooling rate and microstructure of rapidly solidified Al – 20 wt. % Si alloy. *Materials Science and Engineering: A*. 2006;417(1–2):275–280. DOI: 10.1016/j.msea.2005.10.040.
15. Uzun O, Karaaslan T, Gogebakan M, Keskin M. Hardness and microstructural characteristics of rapidly solidified Al – 8–16 wt. % Si alloys. *Journal of Alloys and Compounds*. 2004;376(1–2):149–157. DOI: 10.1016/j.jallcom.2004.01.017.
16. Li Yong, Jiang Tao, Wei Bowen, Xu Boyue, Xu Guangming, Wang Zhaodong. Microcharacterization and mechanical performance of an Al – 50Si alloy prepared using the sub-rapid solidification technique. *Materials Letters*. 2020;263:127287. DOI: 10.1016/j.matlet.2019.127287.
17. Pramod SL, Ravikirana, Prasada Rao AK, Murty BS, Bakshi SR. Effect of Sc addition and T6 aging treatment on the microstructure modification and mechanical properties of A356 alloy. *Materials Science and Engineering: A*. 2016;674:438–450. DOI: 10.1016/j.msea.2016.08.022.
18. Шепелевич ВГ, Гусакова ОВ, Александров ДВ, Стародумов ИО. Фазовый состав заэвтектического силумина при высокоскоростном затвердевании. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика*. 2019;2:96–104. DOI: 10.33581/2520-2243-2019-2-96-104.
19. Лысенко АБ, Борисова ГВ, Кравец ОЛ. Расчет скорости охлаждения при закалке сплавов из жидкого состояния. *Физика и техника высоких давлений* [Интернет]. 2004 [процитировано 18 марта 2023 г.];14(1):44–53. Доступно по: <http://dspace.nbuv.gov.ua/handle/123456789/168045>.
20. Liu Q, Liu M, Xu C, Xiao W, Yamagata H, Xie S, et al. Effects of Sr, Ce and P on the microstructure and mechanical properties of rapidly solidified Al – 7Si alloys. *Materials Characterization*. 2018;140:290–298. DOI: 10.1016/j.matchar.2018.04.018.
21. Гусакова ОВ, Шепелевич ВГ, Александров ДВ, Стародумов ИО. Особенности формирования структуры сплавов Al – 12.2Si – 0.2Fe при сверхбыстрой закалке из расплава. *Расплавы*. 2020;2:138–148. DOI: 10.31857/S0235010620020048.
22. Gusakova OV, Shepelevich VG, Alexandrov DV, Starodumov IO. Formation of the microstructure of rapidly solidified hypereutectic Al – Si alloy. *The European Physical Journal Special Topics*. 2020;229(2–3):417–425. DOI: 10.1140/epjst/e2019-900136-9.
23. Гусакова ОВ, Гусакова СВ, Шепелевич ВГ. Влияние скорости охлаждения расплава на микроструктуру сплава Al – Si, легированного Mg, Mn, Fe, Ni и Cu. *Физика металлов и металловедение*. 2022;123(5):533–540. EDN: CWPZNN.
24. Эшби ИФ. О напряжении Орована. В: Мехед ГН, переводчик; Гордиенко ЛК, редактор. *Физика прочности и пластичности*. Москва: Металлургия; 1972. с. 88–107.
25. Данейко ОИ, Ковалевская ТА, Шалыгина ТА, Симоненко ВГ. Влияние некогерентных наноразмерных частиц на аннигиляцию дислокаций в гетерофазных алюмоматричных кристаллических сплавах. *Известия высших учебных заведений. Физика*. 2021;64(10):98–103. DOI: 10.17223/00213411/64/10/98.

References

1. Ye Haizhi. An overview of the development of Al – Si alloy based material for engine applications. *Journal of Materials Engineering and Performance*. 2003;12(3):288–297. DOI: 10.1361/105994903770343132.
2. Peeru Naik M, Balaram Padal KT. A review on friction and wear performance of Al – Si alloy / steel tribopair. *Materials Today: Proceedings*. 2019;18(part 7):5502–5506. DOI: 10.1016/j.matpr.2019.07.581.
3. Barrirero J. *Eutectic modification of Al – Si casting alloys* [dissertation]. Linköping: LiU-Tryck; 2019. XXVIII, 82 p. (Linköping studies in science and technology; number 2014).
4. Chen Jiqiang, Liu Chao, Wen Feng, Zhou Qiongyu, Zhao Hongjin, Guan Renguo. Effect of microalloying and tensile deformation on the internal structures of eutectic Si phase in Al – Si alloy. *Journal of Materials Research and Technology*. 2020;9(3):4682–4691. DOI: 10.1016/j.jmrt.2020.02.096.
5. Marukovich EI, Stetsenko VYu. Technological problems of modifying of structure of silumin castings. Solutions. *Foundry Production and Metallurgy*. 2019;2:19–22. Russian. DOI: 10.21122/1683-6065-2019-2-19-22.
6. Liang SS, Wen SP, Xu J, Wu XL, Gao KY, Huang H, et al. The influence of Sc – Si clusters on aging hardening behavior of dilute Al – Sc – (Zr) – (Si) alloy. *Journal of Alloys and Compounds*. 2020;842:155826. DOI: 10.1016/j.jallcom.2020.155826.
7. Stetsenko VYu, Radjko SL, Harkov SA, Li Jong Hun, Choj Ki Long. [Increasing the cooling efficiency of silumin castings when casting by quenching solidification]. *Foundry Production and Metallurgy*. 2006;2(1):128–129. Russian.
8. Chen Rui, Shi Yu-feng, Xu Qing-yan, Liu Bai-cheng. Effect of cooling rate on solidification parameters and microstructure of Al – 7Si – 0.3Mg – 0.15Fe alloy. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*. 2014;24(6):1645–1652. DOI: 10.1016/S1003-6326(14)62336-2.
9. Skorobagatko YuP. Modifying of hypereutectic aluminium alloys with the use of active additions. *Metall i lit'e Ukrainy*. 2009;9:19–28. Russian.
10. Fortini A, Merlin M, Fabbri E, Pirletti S, Garagnani GL. On the influence of Mn and Mg additions on tensile properties, microstructure and quality index of the A356 aluminum foundry alloy. *Procedia Structural Integrity*. 2016;2:2238–2245. DOI: 10.1016/j.prostr.2016.06.280.
11. Kimura T, Nakamoto T, Mizuno M, Araki H. Effect of silicon content on densification, mechanical and thermal properties of Al – xSi binary alloys fabricated using selective laser melting. *Materials Science and Engineering: A*. 2017;682:593–602. DOI: 10.1016/j.msea.2016.11.059.

12. Zaguliaev D, Konovalov S, Ivanov Yu, Gromov V, Petrikova E. Microstructure and mechanical properties of doped and electron-beam treated surface of hypereutectic Al – 11.1 % Si alloy. *Journal of Materials Research and Technology*. 2019;8(5):3835–3842. DOI: 10.1016/j.jmrt.2019.06.045.
13. Shimanski VI, Jevdokimovs A, Cherenda NN, Astashynski VM, Petrikova EA. Structure and phase composition of hypereutectic silumin alloy Al – 20Si after compression plasma flows impact. *Journal of the Belarusian State University. Physics*. 2021;2:25–33. DOI: 10.33581/2520-2243-2021-2-25-33.
14. Xu CL, Wang HY, Qiu F, Yang YF, Jiang QC. Cooling rate and microstructure of rapidly solidified Al – 20 wt. % Si alloy. *Materials Science and Engineering: A*. 2006;417(1–2):275–280. DOI: 10.1016/j.msea.2005.10.040.
15. Uzun O, Karaaslan T, Gogebakan M, Keskin M. Hardness and microstructural characteristics of rapidly solidified Al – 8–16 wt. % Si alloys. *Journal of Alloys and Compounds*. 2004;376(1–2):149–157. DOI: 10.1016/j.jallcom.2004.01.017.
16. Li Yong, Jiang Tao, Wei Bowen, Xu Boyue, Xu Guangming, Wang Zhaodong. Microcharacterization and mechanical performance of an Al – 50Si alloy prepared using the sub-rapid solidification technique. *Materials Letters*. 2020;263:127287. DOI: 10.1016/j.matlet.2019.127287.
17. Pramod SL, Ravikirana, Prasada Rao AK, Murty BS, Bakshi SR. Effect of Sc addition and T6 aging treatment on the microstructure modification and mechanical properties of A356 alloy. *Materials Science and Engineering: A*. 2016;674:438–450. DOI: 10.1016/j.msea.2016.08.022.
18. Shepelevich VG, Gusakova OV, Alexandrov DV, Starodumov IO. Phase composition of hypereutectic silumin at rapid solidification. *Journal of the Belarusian State University. Physics*. 2019;2:96–104. Russian. DOI: 10.33581/2520-2243-2019-2-96-104.
19. Lysenko AB, Borisova GV, Kravets OL. Calculation of the cooling rate under quenching of alloys from liquid state. *Fizika i tekhnika vysokikh davlenii* [Internet]. 2004 [cited 2023 March 18];14(1):44–53. Available from: <http://dspace.nbuv.gov.ua/handle/123456789/168045>. Russian.
20. Liu Q, Liu M, Xu C, Xiao W, Yamagata H, Xie S, et al. Effects of Sr, Ce and P on the microstructure and mechanical properties of rapidly solidified Al – 7Si alloys. *Materials Characterization*. 2018;140:290–298. DOI: 10.1016/j.matchar.2018.04.018.
21. Gusakova OV, Shepelevich VG, Alexandrov DV, Starodumov IO. Features of the structure formation in Al – 12.2Si – 0.2Fe alloys under rapid solidification from a melt. *Metally*. 2020;2:138–148. Russian. DOI: 10.31857/S0235010620020048.
22. Gusakova OV, Shepelevich VG, Alexandrov DV, Starodumov IO. Formation of the microstructure of rapidly solidified hypoeutectic Al – Si alloy. *The European Physical Journal Special Topics*. 2020;229(2–3):417–425. DOI: 10.1140/epjst/e2019-900136-9.
23. Gusakova OV, Gusakova SV, Shepelevich VG. [Melt cooling rate effect on the microstructure of Al – Si alloy doped with Mg, Mn, Fe, Ni and Cu]. *Fizika metallov i metallovedenie*. 2022;123(5):533–540. Russian. EDN: CWPZNN.
24. Eshbi IF. [About Orowan voltage]. In: Mekhed GN, translator; Gordienko LK, editor. *Fizika prochnosti i plastichnosti* [Physics of strength and plasticity]. Moscow: Metallurgiya; 1972. p. 88–107. Russian.
25. Daneyko OI, Kovalevskaya TA, Shalygina TA, Simonenko VG. Influence of incoherent nanosized particles on the annihilation of dislocations in heterophase aluminum-matrix crystalline alloys. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedenii. Fizika*. 2021;64(10):98–103. Russian. DOI: 10.17223/00213411/64/10/98.

Получена 20.09.2023 / исправлена 12.10.2023 / принята 18.10.2023.
Received 20.09.2023 / revised 12.10.2023 / accepted 18.10.2023.

УДК 530.1; 514.84

ОДНОМЕРНАЯ ОБОБЩЕННАЯ КУЛОНОВСКАЯ ЗАДАЧА

А. Н. ЛАВРЁНОВ¹⁾, И. А. ЛАВРЁНОВ²⁾

¹⁾Белорусский государственный педагогический университет им. Максима Танка,
ул. Советская, 18, 220030, г. Минск, Беларусь

²⁾Октонион технолоджи, ул. Янки Купалы, 25, 220030, г. Минск, Беларусь

Рассмотрена квантово-механическая кулоновская задача, усложненная в двух направлениях. Первое обобщение связано с переходом из евклидова пространства нулевой кривизны в одномерные геометрии Кэли – Клейна, а второе – с добавлением к кулоновскому потенциалу сингулярного члена $\frac{g}{x^2}$. Его можно рассматривать как потенциал Калоджеро – Сазерленда, который обычно используется для описания анионов, магнитных монополей, дионов и т. д. Помимо методологического аспекта, представленная задача будет полезна как частный случай так называемой модели с координатно-зависимой массой при описании наноструктур в квантовых точках или на плоскости, а также метаматериалов и астрономических объектов в сильных магнитных полях. На положительной координатной полуоси она превращается в обобщение модели с потенциалом Кратцера, который традиционно используется для описания молекулярной энергии и структуры, взаимодействий между различными молекулами и несвязанными атомами. С помощью метода факторизации найдены спектр энергии и волновые функции стационарных состояний, имеющие кривизну пространства в качестве параметра. Формула для уровней энергии содержит два слагаемых. Первое слагаемое дает спектр энергии обычной одномерной кулоновской задачи, а второе слагаемое в явном виде зависит от наличия кривизны и отвечает за спектр частицы на окружности $S_1(j)$. Константа

Образец цитирования:

Лаврёнов АН, Лаврёнов ИА. Одномерная обобщенная кулоновская задача. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика*. 2024;1:75–82.
EDN: YXMHNE

For citation:

Lavrenov AN, Lavrenov IA. One-dimensional generalised Coulomb problem. *Journal of the Belarusian State University. Physics*. 2024;1:75–82. Russian.
EDN: YXMHNE

Авторы:

Александр Николаевич Лаврёнов – кандидат физико-математических наук, доцент; доцент кафедры информатики и методики преподавания информатики физико-математического факультета.
Иван Александрович Лаврёнов – ведущий специалист.

Authors:

Alexandre N. Lavrenov, PhD (physics and mathematics), doцент; associate professor at the department of informatics and methods of teaching informatics, faculty of physics and mathematics.
lanin0777@mail.ru
<https://orcid.org/0001-7384-3621>
Ivan A. Lavrenov, leading specialist.
lanin99@mail.ru
<https://orcid.org/0000-0002-3650-8987>

связи g , характеризующая потенциал Калоджеро – Сазерленда, входит в оба слагаемых нелинейно через величину β_0 ($g^2 = \beta_0(\beta_0 - 1)$), представляющую собой аддитивную поправку к порядковому номеру энергетического уровня. В частном случае чисто кулоновского поля полученные результаты совпадают с ранее опубликованными результатами.

Ключевые слова: обобщенная кулоновская задача; кривизна; пространство постоянной кривизны; геометрии Кэли – Клейна; метод факторизации; одномерное пространство.

ONE-DIMENSIONAL GENERALISED COULOMB PROBLEM

A. N. LAVRENOV^a, I. A. LAVRENOV^b

^aBelarusian State Pedagogical University named after Maxim Tank,
18 Savieckaja Street, Minsk 220030, Belarus

^bOctonion Technology, 25 Janki Kupaly Street, Minsk 220030, Belarus
Corresponding author: A. N. Lavrenov (lanin0777@mail.ru)

The quantum-mechanical Coulomb problem, complicated in two directions, is considered in this article. The first generalisation is associated with the transition from Euclidean space to one-dimensional Cayley – Klein geometries, and the second one is connected with the addition of a singular term $\frac{g}{x^2}$ to the Coulomb potential. It can be considered as a Calogero – Sutherland potential, which is used to describe anyons, magnetic monopoles, dyons, etc. In addition to the methodological aspect, the problem under consideration will also be useful as a special case of the so-called coordinate-dependent mass model when describing nanostructures in quantum dots or on a plane, metamaterials and astronomical objects in strong magnetic fields. On the positive coordinate semiaxis, it turns into a certain generalisation of the model with the Kratzer potential, which is used to describe molecular energy and structure, interactions between molecules and non-bounded atoms. Using the factorisation method, the energy spectrum and wave functions of stationary states are found, having the curvature of space as a parameter. The formula for energy levels contains two terms. The first term gives the energy spectrum of the one-dimensional Coulomb problem, and the second term explicitly depends on the presence of curvature and is responsible for the spectrum of the particle on the circle $S_1(j)$. The coupling constant g of Calogero – Sutherland potential is non-linearly contained in both terms through a variable β_0 ($g^2 = \beta_0(\beta_0 - 1)$) representing an additive correction to the number of the energy level. In the special case of a purely Coulomb field, the results obtained coincide with the results published earlier.

Keywords: generalised Coulomb problem; curvature; space of constant curvature; Cayley – Klein geometries; factorisation method; one-dimensional space.

Введение

Поиск точно решаемых моделей – одна из наиболее актуальных задач в области теоретической физики, однако получение точных решений возможно не во всех случаях, представляющих исследовательский интерес. Для этой цели часто используют метод факторизации [1], сводящий динамическое уравнение исходной системы к простому уравнению, с которым легче работать.

В рамках нерелятивистской квантовой механики уравнение Шрёдингера точно описывает динамику замкнутой квантовой системы, обеспечивая всю информацию о ее свойствах. В этом контексте приведем только два ярких примера точно решаемых моделей – модель гармонического осциллятора и кулоновскую задачу. Они имеют ряд физических приложений и компонент концепции скрытой (динамической) симметрии. Для проблемы Кеплера существуют различные обобщения. Помимо очевидного поиска многомерных аналогов, в работах [2; 3] кулоновский центр системы был заменен дираковским дионом (электрически заряженным монополем Дирака) с добавлением к кулоновскому потенциалу специфического центробежного и сингулярного члена $\frac{g}{x^2}$. Согласно статье [4] подобные системы естественным образом возникают в гранулированной квантовой материи.

При переходе в уравнении Шрёдингера в искривленное пространство получаем возможность изучения топологических дефектов, в частности, в рамках гравитации (космические струны, доменные границы и др.) [5] и физики конденсированного состояния (дислокации, вихри в сверхпроводниках и т. д.) [6; 7].

Недавний прогресс в области нанотехнологий и исследований материалов сделал (квази)одномерные системы важной частью современной физики [8]. Помимо методологического аспекта (как нулевое приближение для целого ряда двумерных и трехмерных задач, например, с потенциалом Кратцера для описания молекулярной энергии и структуры, взаимодействий между различными молекулами и несвязанными атомами), они представляют большой интерес для ученых в связи с постоянно растущим количеством физических приложений, включая «кулоновское» взаимодействие при описании наноструктур в квантовых точках или на плоскости, а также метаматериалов и астрономических объектов в сильных магнитных полях [9–13].

Таким образом, целью настоящей работы является решение обобщенной кулоновской задачи (ОКЗ) сразу для трех одномерных геометрий Кэли – Клейна $S_1(j)$ с помощью метода факторизации, который не был до конца реализован в статье [14]. Здесь ОКЗ понимается как квантово-механическая задача с потенциалом, представляющим собой сумму кулоновского потенциала и потенциала Калоджеро – Сазерленда. С учетом поиска ее решения только в одномерном пространстве разной топологии далее будем использовать термин «одномерная ОКЗ» (ООКЗ).

В работах [15; 16] был предложен другой, универсальный, подход к точно решаемым задачам на пространствах постоянной кривизны, но начиная с двумерного случая. Для полноты библиографического описания текущего состояния анализируемой проблемы отметим еще только работы [17–19], где на S_1 и H_1 кулоновская задача в явном виде решена аналитическим способом.

Далее подчеркнем, что в историческом аспекте по данной тематике обычно принято вначале вспоминать работы Э. Шрёдингера 1940 г. [20] и Л. Инфельда с А. Шильдом 1945 г. [21], а затем работы П. У. Хиггса 1979 г. [22]. Они рассмотрели атом водорода в трехмерном пространстве постоянной положительной и отрицательной кривизны, а также скрытую симметрию для кулоновской и осцилляторной задач в пространстве постоянной кривизны произвольной размерности $N > 2$ соответственно. В последнем случае автор нашел аналоги вектора Рунге – Ленца (кулоновский потенциал) и тензора Фрадкина (потенциал гармонического осциллятора) плоского пространства. Следует отметить, что в 1979 г. были опубликованы работы и других авторов по данной тематике [23; 24].

Модель ООКЗ в геометриях Кэли – Клейна

Для удобства сравнения полученных результатов и с учетом статьи [14] будем рассматривать сразу три одномерные геометрии Кэли – Клейна $S_1(j)$, которые реализуются на полуокружности

$$S_1(j) = \{u_0^2 + j^2 u_1^2 = R^2, u_0 > 0\},$$

где $j = 1, i, \epsilon$, а ϵ есть нильпотентная единица такая, что $\epsilon \neq 0$, но $\epsilon^2 = 0$. Значение $j = 1$ соответствует эллиптической геометрии $S_1(1) \equiv S_1$ на прямой с постоянной положительной кривизной, при $j = i$ имеем гиперболическую прямую $S_1(i) \equiv H_1$ с постоянной отрицательной кривизной, а в пределе $R \rightarrow \infty$ или при $j = \epsilon$ получаем обычную евклидову прямую $S_1(\epsilon) \equiv E_1$ с нулевой кривизной.

Исходя из результатов работы [14], при вводе безразмерных величин

$$\xi = \alpha x, \rho = \alpha R, Q^2 = \alpha q^2, \alpha = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar}$$

будем иметь следующий вид оператора Шрёдингера для кулоновского потенциала, дополненного сингулярным членом $\frac{g}{x^2}$ на $S_1(j)$:

$$H(\xi; j) = \frac{\hbar\omega}{2} \left[- \left(1 + j^2 \frac{\xi^2}{\rho^2} \right) \frac{d}{d\xi} \left(1 + j^2 \frac{\xi^2}{\rho^2} \right) \frac{d}{d\xi} - \frac{Q^2}{|\xi|} + \frac{g}{\xi^2} \right]. \quad (1)$$

Для нахождения его собственных значений используем метод факторизации. С этой целью выразим оператор (1) через оператор рождения $a^+(j)$ и оператор уничтожения $a^-(j)$:

$$H(\xi; j) = \frac{\hbar\omega}{2} [2a^+(j)a^-(j) + \lambda], \quad (2)$$

где

$$\begin{aligned} a^+(j) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(- \left(1 + j^2 \frac{\xi^2}{\rho^2} \right) \frac{d}{d\xi} + \gamma(j) - \frac{\beta(j)}{\xi} \right), \\ a^-(j) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left(1 + j^2 \frac{\xi^2}{\rho^2} \right) \frac{d}{d\xi} + \gamma(j) - \frac{\beta(j)}{\xi} \right). \end{aligned} \quad (3)$$

Подстановка формул (3) в выражение (2) и сравнение с оператором (1) дает следующие условия на g , β и λ :

$$g^2 = \beta(j)(\beta(j) - 1), \quad 2\beta\gamma = Q^2 \operatorname{sgn}(\gamma), \quad \lambda(j) = -\gamma^2(j) + \beta(j) \frac{j^2}{\rho^2}.$$

Основное состояние в рассматриваемой задаче для модели ООКЗ найдем из условия

$$a^-(j) \Psi_0(\xi; j) = 0,$$

т. е.

$$\left(\left(1 + j^2 \frac{\xi^2}{\rho^2} \right) \frac{d}{d\xi} + \gamma - \frac{\beta}{\xi} \right) \Psi_0(\xi; j) = 0. \quad (4)$$

Решение уравнения (4) имеет следующий вид:

$$\Psi_0(\xi; j) = C_0(j) \xi^{\beta(j)} \left(1 + j^2 \frac{\xi^2}{\rho^2} \right)^{-\frac{\beta(j)}{2}} \exp \left[-\frac{\gamma\rho}{j} \operatorname{arctg} \left(\frac{j}{\rho} \xi \right) \right]. \quad (5)$$

При учете сшивания решений уравнения (5) на положительной и отрицательной областях числовой оси получим четные и нечетные решения, что в чисто кулоновском поле приводит к двукратной вырожденности уровней энергии.

Далее строим цепочку операторов Шрёдингера

$$H_{n+1}(j) = \frac{\hbar\omega}{2} [2a_n^-(j)a_n^+(j) + \lambda_n(j)] = \frac{\hbar\omega}{2} [2a_{n+1}^+(j)a_{n+1}^-(j) + \lambda_{n+1}(j)], \quad (6)$$

где операторы рождения и уничтожения выражаются следующим образом:

$$\begin{aligned} a_n^+(j) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(- \left(1 + j^2 \frac{\xi^2}{\rho^2} \right) \frac{d}{d\xi} + \gamma_n(j) - \frac{\beta_n(j)}{\xi} \right), \\ a_n^-(j) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left(1 + j^2 \frac{\xi^2}{\rho^2} \right) \frac{d}{d\xi} + \gamma_n(j) - \frac{\beta_n(j)}{\xi} \right). \end{aligned}$$

Их произведения имеют вид

$$\begin{aligned} 2a_n^-(j)a_n^+(j) &= \left[- \left(1 + j^2 \frac{\xi^2}{\rho^2} \right) \left[\frac{d}{d\xi} \left(1 + j^2 \frac{\xi^2}{\rho^2} \right) \frac{d}{d\xi} - \frac{\beta_n(j)}{\xi^2} \right] + \left(\gamma_n(j) - \frac{\beta_n(j)}{\xi} \right)^2 \right], \\ 2a_{n+1}^+(j)a_{n+1}^-(j) &= \left[- \left(1 + j^2 \frac{\xi^2}{\rho^2} \right) \left[\frac{d}{d\xi} \left(1 + j^2 \frac{\xi^2}{\rho^2} \right) \frac{d}{d\xi} + \frac{\beta_{n+1}(j)}{\xi^2} \right] + \left(\gamma_{n+1}(j)\xi - \frac{\beta_{n+1}(j)}{\xi} \right)^2 \right]. \end{aligned}$$

Из цепочки операторов Шрёдингера (6) получаем систему уравнений

$$\begin{cases} [\beta_{n-1}(j) + \beta_n(j)][\beta_n(j) - \beta_{n-1}(j) - 1] = 0, \\ \gamma_n(j) = \frac{\beta_{n-1}(j)}{\beta_n(j)} \gamma_{n-1}(j), \\ \lambda_n - \lambda_{n-1} = \gamma_{n-1}^2(j) - \gamma_n^2(j) + \frac{j^2}{\rho^2} [\beta_{n-1}(j) + \beta_n(j)]. \end{cases}$$

Ее решения представляются следующим образом:

$$\begin{cases} \beta_n(j) = \beta_0(j) + n, \\ \gamma_n(j) = \frac{\beta_0(j)}{\beta_0(j) + n} \gamma_0(j), \\ \lambda_n = \lambda_0 + \gamma_0^2(j) - \frac{\beta_0^2(j) \gamma_0^2(j)}{(\beta_0(j) + n)^2} + \frac{j^2}{\rho^2} [(\beta_0(j) + n)^2 - \beta_0^2(j)], \end{cases}$$

где нулевые параметры определяются формулами

$$g^2 = \beta_0(\beta_0 - 1), \quad 4\beta_0^2(j) \gamma_0^2(j) = Q^4, \quad \lambda_0 = -\gamma_0^2 + \beta_0 \frac{j^2}{\rho^2}.$$

Таким образом, имеем следующую унифицированную формулу для уровней энергии $E_n(j) = \frac{\hbar\omega}{2} \lambda_n(j)$ модели ООКЗ на геометриях Кэли – Клейна $S_1(j)$ в размерных величинах:

$$E_n(j) = -\frac{mq^4}{2\hbar^2(\beta_0 + n)^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{j^2}{R^2} [(\beta_0 + n)^2 - \beta_0(\beta_0 - 1)].$$

Здесь при $\beta_0 = 1$ воспроизводим результат работы [14], следовательно, первое слагаемое дает спектр энергии обычной одномерной кулоновской задачи, а второе слагаемое в явном виде зависит от наличия кривизны и отвечает за спектр частицы на окружности $S_1(j)$.

Предполагая увеличение уровней энергии с ростом n ($E = E_0 < E_1 < E_2 < \dots < E_n$), получаем условие

$$E_n - E_{n-1} = (2\beta_0 + 2n + 1) \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \frac{j^2}{R^2} + \frac{mQ^4}{2\hbar^2(\beta_0 + n + 1)^2(\beta_0 + n)^2} \right\} > 0.$$

Оно дает ограниченность дискретного энергетического спектра на гиперболической прямой, где $j = i$. Таким образом, на гиперболической прямой максимальное число ($n_{\max}$) дискретных уровней будет определяться целочисленными значениями неравенства

$$2n_{\max} < -1 - 2\beta_0 + \sqrt{1 + \frac{4m^2\omega^2 R^4}{\hbar^2}}.$$

Единственное связанное состояние получим при $mRq^2 = \beta_0(\beta_0 + 1)\hbar^2$ с энергией

$$E_0 = -\frac{q^2(\beta_0^2 + 2\beta_0 + 2)}{2R\beta_0(\beta_0 + 1)} \equiv -\frac{mq^4(\beta_0^2 + 2\beta_0 + 2)}{2\hbar^2\beta_0^2(\beta_0 + 1)^2}.$$

Другими словами, энергетический спектр для модели ООКЗ будет различным в зависимости от наличия кривизны.

Из цепочки операторов Шрёдингера (6) следуют сплетающие соотношения для операторов H_n

$$a_n^-(j) H_n(j) = H_{n+1}(j) a_n^-(j),$$

$$H_n(j) a_n^+(j) = a_n^+(j) H_{n+1}(j).$$

Учитывая их, для собственной функции гамильтониана $H\Psi_n(\xi; j) = E_n(\xi; j)\Psi_n(\xi; j)$ легко получим

$$\Psi_n(\xi; j) = a_0^+(j) a_1^+(j) \dots a_{n-2}^+(j) a_{n-1}^+(j) \Psi_0^{(n)}(\xi; j).$$

Здесь волновая функция $\Psi_0^{(n)}(\xi; j)$ является собственной функцией гамильтониана $H_n(\xi; j)\Psi_0^{(n)}(\xi; j) = E_n(\xi; j)\Psi_0^{(n)}(\xi; j)$ и находится из условия

$$a_n^-(j) \Psi_0^{(n)}(\xi; j) = 0,$$

т. е.

$$\left(\left(1 + j^2 \frac{\xi^2}{\rho^2} \right) \frac{d}{d\xi} + \gamma_n - \frac{\beta_n}{\xi} \right) \Psi_0^{(n)}(\xi; j) = 0. \quad (7)$$

Решение уравнения (7) имеет следующий вид:

$$\Psi_0^{(n)}(\xi; j) = C_0^{(n)}(j) \xi^{\beta_n(j)} \left(1 + j^2 \frac{\xi^2}{\rho^2} \right)^{-\frac{\beta_n(j)}{2}} \exp \left[-\frac{\gamma_n(j)\rho}{j} \operatorname{arctg} \left(\frac{j}{\rho} \xi \right) \right].$$

В частности, для первого возбужденного уровня $n = 1$ получим

$$\Psi_1(\xi; j) = a_0^+(j) \Psi_0^{(1)}(\xi; j) = a_0^+(j) \xi^{\gamma_1(j)} \left(1 + j^2 \frac{\xi^2}{\rho^2} \right)^{-\frac{\gamma_1(j)}{2} - \beta_1(j) \frac{\rho^2}{j^2}}$$

или

$$\Psi_1(\xi; j) = C_1(j) \left(\xi \left[2\beta_0 + \frac{j^2}{\rho^2} \right] - \frac{[2\gamma_0 + 1]}{\xi} \right) \xi^{\gamma_1(j)} \left(1 + j^2 \frac{\xi^2}{\rho^2} \right)^{-\frac{\gamma_1(j)}{2} - \beta_1(j) \frac{\rho^2}{j^2}}.$$

Действуя аналогичным образом, можно найти волновые функции других возбужденных состояний.

Заключение

В статье рассмотрена квантово-механическая задача в одномерной геометрии Кэли – Клейна с результирующим потенциалом, представляющим собой сумму кулоновского потенциала и потенциала Калоджеро – Сазерленда в виде сингулярного члена $\frac{g}{x^2}$. Последний часто используется для теоретического описания анионов, магнитных монополей, дионов и т. д.

В методологическом плане предложенная задача является частным случаем так называемой модели с координатно-зависимой массой и может быть полезна при описании наноструктур в квантовых точках или на плоскости, метаматериалов и астрономических объектов в сильных магнитных полях, а также (на положительной координатной полуоси) для описания молекулярной энергии и структуры, взаимодействий между различными молекулами и несвязанными атомами.

Метод факторизации позволил найти энергетический спектр и волновые функции стационарных состояний рассматриваемой задачи. Полученная формула для уровней энергии имеет аддитивный вклад как от спектра энергии обычной одномерной кулоновской задачи, так и от спектра частицы на окружности $S_1(j)$ с явной зависимостью от кривизны. Также имеется аддитивная поправка к порядковому номеру энергетического уровня в виде величины β_0 , которая через соотношение $g^2 = \beta_0(\beta_0 - 1)$ определяет влияние константы связи g от потенциала Калоджеро – Сазерленда на искомый результат. Воспроизводятся ранее опубликованные результаты для чисто кулоновского поля.

Кратко обсудим дальнейшие возможные направления исследований для обобщения полученных результатов. Первое направление достаточно очевидно. Оно предполагает рассмотрение проблемы при увеличении размерности N операторного пространства или при любом ее значении. Второе направление можно связать с так называемой моделью Данкля – Кулона, где вместо обычной производной вводится производная Данкля, содержащая оператор отражения от соответствующей гиперплоскости.

Библиографические ссылки

1. Dong S-H. *Factorization method in quantum mechanics*. Dordrecht: Springer; 2007. XIX, 297 p. (Fundamental theories of physics; volume 150). DOI: 10.1007/978-1-4020-5796-0.
2. Zwanziger D. Exactly soluble nonrelativistic model of particles with both electric and magnetic charges. *Physical Review*. 1968; 176(5):1480–1488. DOI: 10.1103/PhysRev.176.1480.
3. McIntosh HV, Cisneros A. Degeneracy in the presence of a magnetic monopole. *Journal of Mathematical Physics*. 1970;11(3): 896–916. DOI: 10.1063/1.1665227.
4. Trugenberger CA. Magnetic monopoles, dyons and confinement in quantum matter. *Condensed Matter*. 2023;8(1):2. DOI: 10.3390/condmat8010002.
5. Bulygin II, Sazhin MV, Sazhina OS. Theory of gravitational lensing on a curved cosmic string. *The European Physical Journal C*. 2023;83:844. DOI: 10.1140/epjc/s10052-023-11994-x.

6. Борисов АБ, Киселев ВВ. *Двумерные и трехмерные топологические дефекты, солитоны и текстуры в магнетиках*. Москва: Физматлит; 2022. 455 с.
7. Клумов БА. Универсальные структурные свойства трехмерных и двумерных расплавов. *Успехи физических наук*. 2023; 193(3):305–330. DOI: 10.3367/UFNr.2022.09.039237.
8. Giamarchi T. One-dimensional physics in the 21st century. *Comptes Rendus Physique*. 2016;17(3–4):322–331. DOI: 10.1016/j.crhy.2015.11.009.
9. Mustafa O. Confined Klein – Gordon oscillators in Minkowski spacetime and a pseudo-Minkowski spacetime with a space-like dislocation: PDM KG-oscillators, isospectrality and invariance. *Annals of Physics*. 2022;446:169124. DOI: 10.1016/j.aop.2022.169124.
10. Pont FM, Osenda O, Serra P. Quasi-exact solvability and entropies of the one-dimensional regularised Calogero model. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*. 2018;51(19):195303. DOI: 10.1088/1751-8121/aab85e.
11. Hartmann RR, Portnoi ME. Pair states in one-dimensional Dirac systems. *Physical Review A*. 2017;95(6):062110. DOI: 10.1103/PhysRevA.95.062110.
12. Yao H, Pizzino L, Giamarchi T. Strongly-interacting bosons at 2D–1D dimensional crossover. *SciPost Physics*. 2023;15(2):050. DOI: 10.21468/SciPostPhys.15.2.050.
13. Cai Zhigang, Wang Yi-Xiang. Magnetic field driven Lifshitz transition and one-dimensional Weyl nodes in three-dimensional pentatellurides. *Physical Review B*. 2023;108(15):155202. DOI: 10.1103/PhysRevB.108.155202.
14. Громов НА, Куратов ВВ. Квантовая механика на одномерных геометриях Кэли – Клейна. *Известия Коми научного центра Уральского отделения Российской академии наук*. 2017;2:5–11.
15. Cariñena JF, Rañada MF, Santander M. The quantum free particle on spherical and hyperbolic spaces: a curvature dependent approach. *Journal of Mathematical Physics*. 2011;52(7):072104. DOI: 10.1063/1.3610674.
16. Cariñena JF, Rañada MF, Santander M. Central potentials on spaces of constant curvature: the Kepler problem on the two-dimensional sphere S^2 and the hyperbolic plane H^2 . *Journal of Mathematical Physics*. 2005;46(5):052702. DOI: 10.1063/1.1893214.
17. Мардоян ЛГ, Погосян ГС, Сисакян АН. Кулоновская задача на одномерном пространстве постоянной положительной кривизны. *Теоретическая и математическая физика*. 2003;135(3):427–433. DOI: 10.4213/tmf198.
18. Burdik Ć, Pogosyan GS. Two exactly-solvable problems in one-dimensional hyperbolic space. In: Doebner H-D, Dobrev VK, editors. *Lie theory and its applications in physics V. Proceedings of the Fifth International workshop; 2003 June 16–22; Varna, Bulgaria*. Singapore: World Scientific; 2004. p. 294–300. DOI: 10.1142/9789812702562_0018.
19. Nersessian A, Pogosyan G. Relation of the oscillator and Coulomb systems on spheres and pseudospheres. *Physical Review A*. 2001;63(2):020103(R). DOI: 10.1103/PhysRevA.63.020103.
20. Schrödinger E. A method of determining quantum-mechanical eigenvalues and eigenfunctions. *Proceedings of the Royal Irish Academy. Section A, Mathematical and Physical Sciences*. 1940;46:9–16.
21. Infeld L, Schild A. A note on the Kepler problem in a space of constant negative curvature. *Physical Review*. 1945;67(3–4):121–122. DOI: 10.1103/PhysRev.67.121.
22. Higgs PW. Dynamical symmetries in a spherical geometry. I. *Journal of Physics A: Mathematical and General*. 1979;12(3):309–323. DOI: 10.1088/0305-4470/12/3/006.
23. Курочкин ЮА, Отчик ВС. Аналог вектора Рунге – Ленца и спектр энергий в задаче Кеплера на трехмерной сфере. *Доклады Академии наук Белорусской ССР*. 1979;23(11):987–990.
24. Богуш АА, Курочкин ЮА, Отчик ВС. О квантово-механической задаче Кеплера в трехмерном пространстве Лобачевского. *Доклады Академии наук Белорусской ССР*. 1980;24(1):19–22.

References

1. Dong S-H. *Factorization method in quantum mechanics*. Dordrecht: Springer; 2007. XIX, 297 p. (Fundamental theories of physics; volume 150). DOI: 10.1007/978-1-4020-5796-0.
2. Zwanziger D. Exactly soluble nonrelativistic model of particles with both electric and magnetic charges. *Physical Review*. 1968; 176(5):1480–1488. DOI: 10.1103/PhysRev.176.1480.
3. McIntosh HV, Cisneros A. Degeneracy in the presence of a magnetic monopole. *Journal of Mathematical Physics*. 1970;11(3):896–916. DOI: 10.1063/1.1665227.
4. Trugenberger CA. Magnetic monopoles, dyons and confinement in quantum matter. *Condensed Matter*. 2023;8(1):2. DOI: 10.3390/condmat8010002.
5. Bulygin II, Sazhin MV, Sazhina OS. Theory of gravitational lensing on a curved cosmic string. *The European Physical Journal C*. 2023;83:844. DOI: 10.1140/epjc/s10052-023-11994-x.
6. Борисов АБ, Киселев ВВ. *Двумерные и трехмерные топологические дефекты, солитоны и текстуры в магнетиках* [Two-dimensional and three-dimensional topological defects, solitons and textures in magnets]. Moscow: Fizmatlit; 2022. 455 p. Russian.
7. Klumov BA. Universal structural properties of three-dimensional and two-dimensional melts. *Uspekhi fizicheskikh nauk*. 2023; 193(3):305–330. Russian. DOI: 10.3367/UFNr.2022.09.039237.
8. Giamarchi T. One-dimensional physics in the 21st century. *Comptes Rendus Physique*. 2016;17(3–4):322–331. DOI: 10.1016/j.crhy.2015.11.009.
9. Mustafa O. Confined Klein – Gordon oscillators in Minkowski spacetime and a pseudo-Minkowski spacetime with a space-like dislocation: PDM KG-oscillators, isospectrality and invariance. *Annals of Physics*. 2022;446:169124. DOI: 10.1016/j.aop.2022.169124.
10. Pont FM, Osenda O, Serra P. Quasi-exact solvability and entropies of the one-dimensional regularised Calogero model. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*. 2018;51(19):195303. DOI: 10.1088/1751-8121/aab85e.
11. Hartmann RR, Portnoi ME. Pair states in one-dimensional Dirac systems. *Physical Review A*. 2017;95(6):062110. DOI: 10.1103/PhysRevA.95.062110.
12. Yao H, Pizzino L, Giamarchi T. Strongly-interacting bosons at 2D–1D dimensional crossover. *SciPost Physics*. 2023;15(2):050. DOI: 10.21468/SciPostPhys.15.2.050.
13. Cai Zhigang, Wang Yi-Xiang. Magnetic field driven Lifshitz transition and one-dimensional Weyl nodes in three-dimensional pentatellurides. *Physical Review B*. 2023;108(15):155202. DOI: 10.1103/PhysRevB.108.155202.

14. Gromov NA, Kuratov VV. Quantum mechanics on one-dimensional Cayley – Klein geometries. *Proceedings of the Komi Science Centre, Ural Branch, Russian Academy of Sciences*. 2017;2:5–11. Russian.
15. Cariñena JF, Rañada MF, Santander M. The quantum free particle on spherical and hyperbolic spaces: a curvature dependent approach. *Journal of Mathematical Physics*. 2011;52(7):072104. DOI: 10.1063/1.3610674.
16. Cariñena JF, Rañada MF, Santander M. Central potentials on spaces of constant curvature: the Kepler problem on the two-dimensional sphere S^2 and the hyperbolic plane H^2 . *Journal of Mathematical Physics*. 2005;46(5):052702. DOI: 10.1063/1.1893214.
17. Mardoyan LG, Pogosyan GS, Sissakian AN. [Coulomb problem in a one-dimensional space with constant positive curvature]. *Teoreticheskaya i matematicheskaya fizika*. 2003;135(3):427–433. Russian. DOI: 10.4213/tmf198.
18. Burdik Ć, Pogosyan GS. Two exactly-solvable problems in one-dimensional hyperbolic space. In: Doebner H-D, Dobrev VK, editors. *Lie theory and its applications in physics V. Proceedings of the Fifth International workshop; 2003 June 16–22; Varna, Bulgaria*. Singapore: World Scientific; 2004. p. 294–300. DOI: 10.1142/9789812702562_0018.
19. Nersessian A, Pogosyan G. Relation of the oscillator and Coulomb systems on spheres and pseudospheres. *Physical Review A*. 2001;63(2):020103(R). DOI: 10.1103/PhysRevA.63.020103.
20. Schrödinger E. A method of determining quantum-mechanical eigenvalues and eigenfunctions. *Proceedings of the Royal Irish Academy. Section A, Mathematical and Physical Sciences*. 1940;46:9–16.
21. Infeld L, Schild A. A note on the Kepler problem in a space of constant negative curvature. *Physical Review*. 1945;67(3–4):121–122. DOI: 10.1103/PhysRev.67.121.
22. Higgs PW. Dynamical symmetries in a spherical geometry. I. *Journal of Physics A: Mathematical and General*. 1979;12(3):309–323. DOI: 10.1088/0305-4470/12/3/006.
23. Kurochkin YuA, Otchik VS. [Analog of the Runge – Lenz vector and energy spectrum in the Kepler problem on a three-dimensional sphere]. *Doklady Akademii nauk Belorusskoi SSR*. 1979;23(11):987–990. Russian.
24. Bogush AA, Kurochkin YuA, Otchik VS. [The quantum-mechanical Kepler problem in three-dimensional Lobachevsky space]. *Doklady Akademii nauk Belorusskoi SSR*. 1980;24(1):19–22. Russian.

Получена 03.11.2023 / исправлена 27.11.2023 / принята 29.11.2023.
Received 03.11.2023 / revised 27.11.2023 / accepted 29.11.2023.

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

УДК 539.19(075.8)

Молекулярная физика [Электронный ресурс] : электрон. учеб.-метод. комплекс для спец.: 7-07-0533-01 «Фундаментальная физика», 7-07-0533-02 «Ядерная физика и технологии», 6-05-0533-02 «Прикладная физика», 6-05-0533-04 «Компьютерная физика» / Н. В. Чертко [и др.] ; БГУ. Электрон. текстовые дан. Минск : БГУ, 2023. 334 с. : ил. Библиогр.: с. 332. Режим доступа: <https://elib.bsu.by/handle/123456789/303122>. Загл. с экрана. Деп. в БГУ 10.10.2023, № 008310102023.

Электронный учебно-методический комплекс (ЭУМК) «Молекулярная физика» подготовлен в целях учебно-методического обеспечения студентов первого курса физического факультета БГУ. Задачей ЭУМК является систематизация информации, необходимой для изучения данного курса студентами, а также помощь молодым преподавателям в организации практических и лабораторных занятий.

СОДЕРЖАНИЕ

ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ

<i>Яцков Н. Н., Апанасович В. В.</i> Разработка комплексного подхода, основанного на методах имитационного моделирования и интеллектуального анализа данных, для исследования систем прикладной флуоресцентной спектроскопии.....	4
<i>Привалов В. Е., Шеманин В. Г., Дьяченко В. В.</i> Моделирование лидарных измерений концентрации молекул галоидоводородов в атмосфере методом комбинационного рассеяния света.....	16

ЛАЗЕРНАЯ ФИЗИКА

<i>Орехова В. Е., Кисель В. Э., Орехов К. А.</i> Пространственные характеристики Nd:YAG-лазера импульсного дальномера в широком диапазоне температур окружающей среды	26
---	----

ФИЗИКА И ТЕХНИКА ПОЛУПРОВОДНИКОВ

<i>Пилипенко В. А., Ковальчук Н. С., Жигулин Д. В., Шестовский Д. В., Анищик В. М., Понарядов В. В.</i> Механизм взаимодействия алюминия с поликремнием при формировании омического контакта методами длительной и быстрой термообработок	42
---	----

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

<i>Мухаммад А. И., Наливайко О. Ю., Колос В. В., Гайдук П. И.</i> Плазмонное поглощение инфракрасного излучения в периодических структурах Si/Si ₃ N ₄ /SiO ₂ /Si/Al с окошечным поверхностным слоем	49
<i>Пархоменко И. Н., Власукова Л. А., Камышан А. С., Ковальчук Н. С., Демидович С. А.</i> Воздействие ультрафиолетового излучения на оптические свойства диэлектриков на основе кремния.....	57
<i>Гусакова О. В., Шепелевич В. Г.</i> Микроструктура и микротвердость сплава Al – Si, легированного Mg, Mn, Fe, Ni, Cu, при высокоскоростном затвердевании.....	65

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

<i>Лаврёнов А. Н., Лаврёнов И. А.</i> Одномерная обобщенная кулоновская задача	75
Аннотации депонированных в БГУ работ.....	83

CONTENTS

OPTICS AND SPECTROSCOPY

<i>Yatskou M. M., Apanasovich V. V.</i> Simulation modelling and data mining approach for the study of applied fluorescence spectroscopy systems	4
<i>Privalov V. E., Shemanin V. G., Dyachenko V. V.</i> Simulation of lidar measurements of the concentration of hydrogen halide molecules in the atmosphere using the Raman method	16

LASER PHYSICS

<i>Orekhova V. E., Kisel V. E., Orekhov K. A.</i> Spatial characteristics of a Nd:YAG laser for pulsed rangefinder over broad ambient temperature range	26
---	----

SEMICONDUCTOR PHYSICS AND ENGINEERING

<i>Pilipenka U. A., Kovalchuk N. S., Zhyhulin D. V., Shestovski D. V., Anishchik V. M., Ponariadov V. V.</i> Mechanism of interaction of aluminium with polysilicon when forming an ohmic contact by methods long and rapid heat treatments	42
---	----

CONDENSED STATE PHYSICS

<i>Mukhammad A. I., Nalivaiko O. Yu., Kolos V. V., Gaiduk P. I.</i> Plasmon absorption of infrared radiation in periodic structures Si/Si ₃ N ₄ /SiO ₂ /Si/Al with window surface layer.....	49
<i>Parkhomenko I. N., Vlasukova L. A., Kamyshan A. S., Kovalchuk N. S., Demidovich S. A.</i> Effect of ultraviolet exposure on the optical properties of silicon-based dielectrics	57
<i>Gusakova O. V., Shepelevich V. G.</i> Microstructure and microhardness of Al – Si alloy doped by Mg, Mn, Fe, Ni, Cu at high-speed solidification.....	65

THEORETICAL PHYSICS

<i>Lavrenov A. N., Lavrenov I. A.</i> One-dimensional generalised Coulomb problem	75
Indicative abstracts of the papers deposited in BSU	83

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

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

**Журнал Белорусского
государственного университета. Физика.
№ 1. 2024**

Учредитель:
Белорусский государственный университет

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

«Журнал Белорусского государственного
университета. Физика» издается с января 1969 г.
До 2017 г. выходил под названием «Вестник БГУ.
Серия 1, Физика. Математика. Информатика»
(ISSN 1561-834X).

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

Подписано в печать 31.01.2024.
Тираж 92 экз. Заказ 176.

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

© БГУ, 2024

**Journal
of the Belarusian State University. Physics.
No. 1. 2024**

Founder:
Belarusian State University

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

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

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

Signed print 31.01.2024.
Edition 92 copies. Order number 176.

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

© BSU, 2024