

ИЗВЕСТИЯ
НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК АРМЕНИИ

ՏԵՂԵԿԱԳԻՐ
ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԶԳԱՅԻՆ ԱԿԱԴԵՄԻԱՅԻ

PROCEEDINGS
OF NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF ARMENIA

ՀՁ 910

ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ՀԱՆՐԱՊԵՏՈՒԹՅԱՆ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԶԳԱՅԻՆ ԱԿԱԴԵՄԻԱ

ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ՀԱՆՐԱՊԵՏՈՒԹՅԱՆ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԶԳԱՅԻՆ ԱԿԱԴԵՄԻԱ

НАЦИОНАЛЬНАЯ АКАДЕМИЯ НАУК РЕСПУБЛИКИ АРМЕНИЯ

ՏԵՂԵԿԱԳԻՐ ИЗВЕСТИЯ
ՖԻԶԻԿԱ ФИЗИКА

ՀԱՏՈՐ ТОМ

53

№ 2



ՀՀ ԳԱՄ "ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆ" ՀՐԱՏԱԴԱՎՉՈՒԹՅՈՒՆ

ИЗДАТЕЛЬСТВО "ТИТУКЮН" НАН РА

ԵՂԵՎԱՆ

ЕРЕВАН

2018

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

В. М. Арутюнян, главный редактор
Э. Г. Шароян, зам. главного редактора
А. А. Ахумян
Э. М. Казарян
А. О. Меликян
А. Р. Мкртчян
Д. Г. Саркисян
А. М. Сирунян
Ю. С. Чилингарян
А. А. Мирзаханян, ответственный секретарь

ԽՄԲԱԳՐԱԿԱՆ ԿՈՒԵԳԻԱ

Վ. Ս. Հարությունյան, գլխավոր խմբագիր
Է. Գ. Շառոյան, գլխավոր խմբագրի տեղակալ
Ա. Ա. Հախումյան
Է. Ս. Ղազարյան
Ա. Հ. Մելիքյան
Ա. Ռ. Մկրտչյան
Դ. Հ. Սարգսյան
Ա. Ս. Սիրունյան
Յու. Ս. Չիլինգարյան
Ա. Ա. Միրզախանյան, պատասխանատու քարտուղար

EDITORIAL BOARD

V. M. Aroutiounian, editor-in-chief
E. G. Sharoyan, associate editor
A. A. Hakhumyan
E. M. Kazaryan
A. O. Melikyan
A. R. Mkrтчyan
D. H. Sarkisyan
A. M. Sirunyan
Yu. S. Chilingaryan
A. A. Mirzakhanyan, executive secretary

Адрес редакции: Республика Армения, 0019
Ереван, пр. Маршала Баграмяна, 24-г.

Խմբագրության հասցեն՝ Հայաստանի Հանրապետություն,
0019, Երևան, Մարշալ Բաղրամյան պող., 24-գ:

Editorial address: 24-g, Marshal Baghramyan Ave.,
Yerevan, 0019, Republic of Armenia.

УДК 530.145

ЛАЗЕРНЫЕ БЕГУЩИЕ ВОЛНЫ ДЛЯ ДИФРАКЦИИ КАПИЦЫ–ДИРАКА В АТОМНОМ ИНТЕРФЕРОМЕТРЕ

Г.А. МУРАДЯН, А.Ж. МУРАДЯН*

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

*e-mail: muradyan@ysu.am

(Поступила в редакцию 14 декабря 2017 г.)

Рассмотрена схема многоимпульсного атомного интерферометра на основе резонансной дифракции Капицы–Дирака. Сделано заключение, что плечи встречных волн, образующих стоячую волну, которая рассеивает атомы, должны иметь равные длины.

1. Введение

Когерентное расщепление атомарной волны материи стоячей волной оптического потенциала (резонансная дифракция Капицы–Дирака [1–4]) – простой и эффективный способ генерации набора равноотстоящих импульсных состояний. Поэтому метод представляется как прямой путь преодоления нехватки больших углов расщепления атомных пучков современных атомных интерферометров [5–13].

Атомные интерферометры стоячих волн можно разделить на две группы. В первой из них используется стационарная геометрия взаимодействия, когда атомный пучок из теплового источника падает перпендикулярно на стоячую волну и дифрагирует. Во второй, представляющей предмет интереса настоящей работы, лазерно-охлажденное атомарное облако находится в магнитооптической ловушке и рассеивается под воздействием двух лазерных импульсов, падающих на него с противоположных сторон (см., например, [14, 15]). Это так называемые светоимпульсные атомные интерферометры, в которых один из встречных импульсов приходит непосредственно из лазерного источника, а другой – после отражения от зеркала. Некоторые части бегущих волн не перекрываются в месте нахождения атомного образца, и стоячая волна не является единственной конструкцией, действующей на атомный образец. Ей предшествуют и следуют этапы бегущих волн, которые традиционно оставались вне рамок интерферометрических расчетов [16–18]. Это связано с тем, что атом как бы не дифрагирует на потенциале бегущей волны. Однако с последним утверждением следует быть

осторожным: интерференция между амплитудами населенностей основного и возбужденного уровней атома в поле бегущей волны, предшествующей [19] или последующей [20] стоячей волне, равноправно с процессом дифракции участвует в формировании конечного импульсного распределения на каждом из энергетических уровней. Поэтому полный расчет атомного интерферометра со многими импульсными состояниями следует провести с учетом всех этапов взаимодействия.

Целью настоящей работы является построение упрощенной теории атомного интерферометра со многими импульсными состояниями, учитывая при этом все этапы взаимодействия с лазерным полем встречных волн. Расчеты ограничены приближением Рамана–Ната, когда оператор кинетической энергии в гамильтониане системы пренебрегается по сравнению с потенциальной энергией взаимодействия. Это – приемлемое приближение для рассматриваемой системы, поскольку генерация многих импульсов предполагает интенсивные встречные волны и соответственно относительно большие потенциальные энергии, а кинетическая энергия лазерно-охлажденного атомарного образца предельно мала, по крайней мере до взаимодействия со стоячей волной. В результате получается вид эволюции атомного состояния и на ее основе обсуждается вопрос о важности этапов бегущих волн в формировании импульсного распределения интерферометра.

2. Двухуровневый атом в поле встречных лазерных импульсов

Рассмотрим двухуровневый атом с массой M , разностью энергий между уровнями $\hbar \omega_0$ и матричным элементом дипольного перехода d , который взаимодействует с полем встречных оптических импульсов $E_1(t - z/c)$ и $E_2(t + z/c)$, т. е.

$$E(z, t) = E_1\left(t - \frac{z}{c}\right) \exp(ikz - i\omega t) + E_2\left(t + \frac{z}{c}\right) \exp(-ikz - i\omega t) + \text{c. c.} \quad (1)$$

Началом координат ($z = 0$) названа точка, в которой встречаются передние фронты оптических импульсов, идущих с противоположных сторон на атомный образец (одномерная модель), ω – несущая частота волны и $k = \omega/c$. Движение атома в плоскости (x, y) свободное и не будет рассмотрено. Мы дополнительно предполагаем определенное начальное значение импульса атома p_0 и допускаем приближение Рамана–Ната, пренебрегающее перемещением атома вдоль стоячей волны за время взаимодействия. Тогда состояние атома описывается следующим уравнением Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(r; z, t) = \left(\hat{H}_0(r) - \hat{d} E(z, t) \right) \psi(r; z, t), \quad (2)$$

где \mathbf{r} – координатный вектор внутреннего движения атома и \hat{H}_0 – гамильтониан свободного атома.

Как обычно, функция состояния атома проецируется на базис основного и возбужденного внутренних состояний атома $\psi_g(\mathbf{r})$ и $\psi_e(\mathbf{r})$, т. е. собственных решений уравнения $H_0(r)\psi_{g,e}(r) = \varepsilon_{g,e}\psi_{g,e}(r)$:

$$\Psi(r; z, t) = g(z, t)\psi_g(r)\exp(-i\varepsilon_g t) + e(z, t)\psi_e(r)\exp(-i\varepsilon_e t - i\Delta t), \quad (3)$$

где $\varepsilon_e - \varepsilon_g = \hbar\omega_0$ и $\Delta = \omega - \omega_0$ – расстройка резонанса. Коэффициент-функции $g(z, t)$ и $e(z, t)$ служат волновыми функциями атомного поступательного движения в основном и возбужденном внутренних состояниях, соответственно.

Подставляя выражение (1) в уравнение (2) и проецируя на внутренние состояния, приходим к привычному виду пары связанных уравнений для волновых функций поступательного движения $g(z, t)$ и $e(z, t)$:

$$i\frac{d}{d\tau}g(\eta, \tau) = -(\zeta_1^*(\tau - \delta\eta)\exp(-i\eta) + \zeta_2^*(\tau + \delta\eta)\exp(i\eta))e(\eta, \tau), \quad (4)$$

$$\left(i\frac{d}{d\tau} + \text{sign}\Delta\right)e(\eta, \tau) = -(\zeta_1(\tau - \delta\eta)\exp(i\eta) + \zeta_2(\tau + \delta\eta)\exp(-i\eta))g(\eta, \tau). \quad (5)$$

Уравнения (4) и (5) записаны в безразмерных величинах, а именно: времени $\tau = |\Delta|t$, координаты $\eta = kz$, расстройки резонанса $\delta = |\Delta|/\omega$ и напряженности волн $\zeta_{1,2}(\tau \mp \delta\eta) = dE_{1,2}(t \mp z/c)/\hbar|\Delta|$.

Решения системы уравнений (4) и (5) ищем для встречных волн с прямоугольными огибающими (см. например, [21])

$$\begin{aligned} \zeta_1(\tau - \delta\eta) &= \zeta_1\theta(\tau - \delta\eta)\theta(\tau_1 - \tau + \delta\eta), \\ \zeta_2(\tau + \delta\eta) &= \zeta_2\theta(\tau + \delta\eta)\theta(\tau_2 - \tau - \delta\eta), \end{aligned} \quad (6)$$

и для общего ненулевого заселения обеих энергетических уровней. Здесь θ – единичная функция Хевисайда, τ_1 и τ_2 – длительности соответствующих оптических импульсов.

На плоскости (η, τ) двум противоположно бегущим волнам (6) соответствуют две пересекающиеся полосы, которые делят плоскость на три области разного рода, как схематично представлено на рис.1. Первая из них, вне полосок, состоит из четырех частей и принадлежит свободному движению атома. Полоски без центрального ромба пересечения представляют область взаимодействия атома с индивидуальными бегущими волнами. Центральный ромб пересечения полосок бегущих волн соответствует образованию стоячей волны. Заметим, что область простирающаяся пространственной волновой функции рассеиваемого «холодного» атома конечна и в стандартных лабораторных условиях составляет

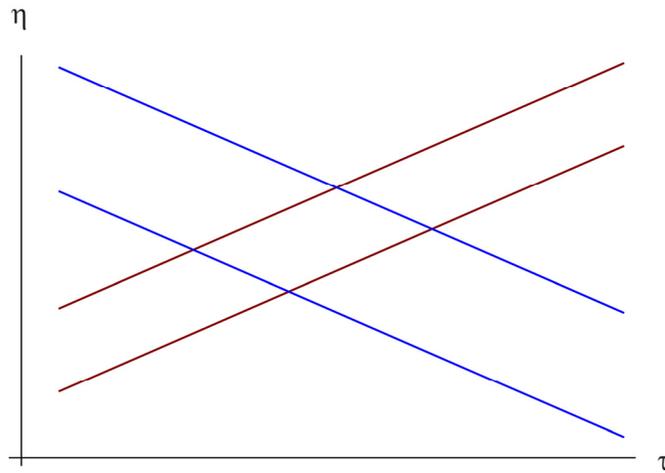


Рис.1. Геометрическое представление двух противоположно распространяющихся оптических импульсов прямоугольной формы на плоскости время–координата. Этапу дифрагирующей стоячей волны соответствует центральный ромб пересечения полосок бегущих волн. Местоположение атомной волновой функции на рисунке не конкретизировано.

доли миллиметра, т. е. несколько сот периодов модуляции стоячей волны.

Для проведения аналитических расчетов удобным оказалось деление плоскости рисунка параллельными к временной оси линиями, проходящими через четыре вершины ромба. Тогда плоскость делится на пять областей. Каждая из них (бесконечной длины вдоль оси абсцисс) в свою очередь состоит из пяти частей, нижняя и верхняя из которых, например, не содержат какой-либо части ромба (этап стоячей волны).

С целью представления скорее качественного аспекта проблемы, чем количественного, мы рассмотрим случай, когда протяженность атомарного образца превосходит длину стоячей волны. Тогда система уравнений (4) и (5) в каждой из полученных двадцати пяти областей имеет определенные постоянные коэффициенты и легко решается в элементарных функциях. Решения сшиваются на граничных точках в последовательности временного развития. В результате получается пространственно-временной вид волновых функций $g(\eta, \tau)$ и $e(\eta, \tau)$ атома после всех этапов взаимодействия, явный вид которых громоздкий и не будет здесь представлен. Следует заметить, что решения, строго говоря, не есть периодические функции пространственной координаты $\eta^{1/2}$ для любого момента времени τ . Рис.2 представляет это распределение вокруг центральной точки сто-

ячей волны на длине двух ее периодов. Параметры взаимодействия взяты из работы [14]. До взаимодействия атом находился на нижнем энергетическом уровне, а для разности пройденных путей встречных волн выбрано характерное значение $z = 5$ см. При этом напряженности встречных волн умеренные (по сравнению с внутриатомными полями).

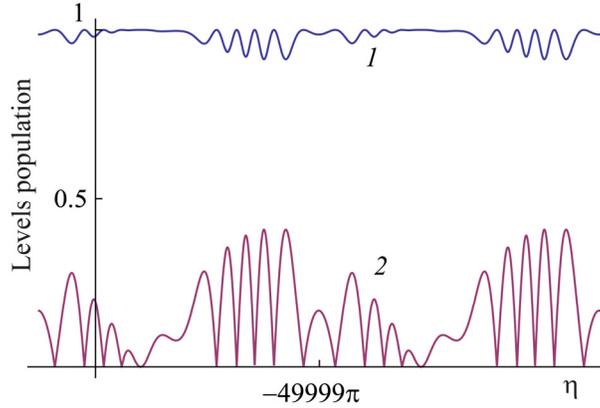


Рис.2. Модуль волновой функции поступательного движения атома на основном (1) и возбужденном (2) энергетических уровнях для спектральной линии 589 нм атома натрия с $d = 0.9 \times 10^{-17}$ CGSE при $\Delta = 2\pi \cdot 600$ МГц и $I = 1$ Вт/см², $t_{\text{pulse}} = 100$ нс [14].

Отсутствие строгой пространственной периодичности, согласно общим выводам Фурье-анализа, означает наличие некоторых ширин у генерированных импульсных состояний. Это прямое следствие пространственного ограничения области взаимодействия.

3. Импульсное распределение атома после рассеяния в поле встречных волн

Перейдем к расчету амплитуд импульсного распределения, образованного взаимодействием атома с полем встречных волн. Рассмотрим случай нулевой температуры атомарного газа $T = 0$, когда квантомеханическое среднее скорости каждого атома равно нулю. Тогда импульсное распределение может быть определено из формул Фурье-преобразования

$$a(p, \tau) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} a(\eta, \tau) e^{-ip\eta} d\eta, \quad b(p, \tau) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} b(\eta, \tau) e^{-ip\eta} d\eta, \quad (7)$$

записанных для основного и возбужденного состояний, соответственно. Результаты численных расчетов представлены на рис.3. Параметры взяты, как и для рис.2, из работы [14]. Характерной особенностью полученного спектра

состояний является его асимметрия. При этом использованное для этапа стоячей волны приближение Рамана–Ната, которое симметрично генерирует импульсные состояния, остается приемлемым: пространственное перемещение наиболее ускоренных атомов составляет не более пятой части периода дифрагирующей стоячей волны. Поэтому заключение однозначное: асимметрия рис.3 является следствием интерференции амплитуд населенностей основного и возбужденного состояний атома при наличии этапов бегущих световых волн. Кроме того, выбранная длина атомарного облака составляет 60 мкм.

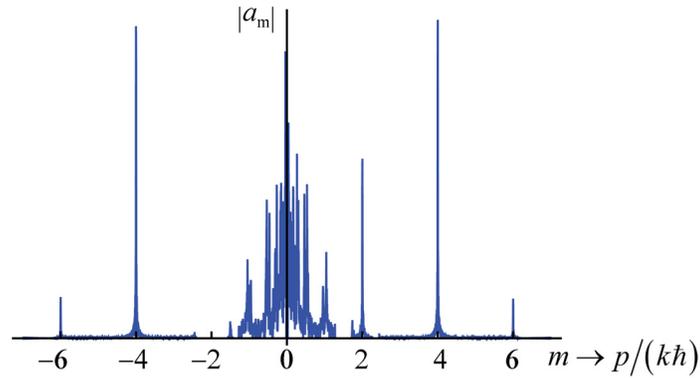


Рис.3. Импульсное распределение атома в основном состоянии в случае асимметричного помещения атомарного облака относительно противоположно распространяющихся оптических импульсов. Длина атомарного облака 60 мкм [14]. Другие параметры указаны на рис.2.

На наш взгляд интерферометр с заметной асимметрией и чувствительностью к параметрам системы теряет практическую привлекательность. Отсюда и вывод: многоимпульсные интерферометры на резонансном эффекте Капицы–Дирака следует конструировать со строго симметричным расположением плеч встречных волн, которые образуют стоячую волну и дифрагируют атом.

Следует также добавить, что при увеличении задержки одной бегущей волны относительно другой, симметричность импульсного распределения периодически повторяется. Для параметров, приведенных на рис.2 и 3, это время составляет примерно 0.15 нс (соответствующая разность плеч 4.5 см).

4. Заключение

Определенный класс светоимпульсных атомных интерферометров действует на базе лазерно-охлажденных атомных облаков, освещаемых интенсивными оптическими импульсами с двух противоположных сторон. Встречные

волны, как правило, проходят разные пути и достигают атомного облака не одновременно. В режиме равных длительностей встречных волн такая геометрия приводит к трем этапам взаимодействия: раноприходящей бегущей волны, стоячей волны и хвостовой бегущей волны обратного направления.

Этапы бегущих волн ранее не были включены в расчетные схемы интерферометров. Однако такой подход приемлем только при малых интенсивностях встречных волн, когда населенности энергетических уровней атома в ходе взаимодействия заметно не меняются. При умеренных и больших интенсивностях, то есть при функционировании интерферометров со многими импульсными состояниями, пренебрежение этапами бегущих волн, строго говоря, неправомерно. Картина дифракции может стать заметно асимметричной и потерять интерферометрический интерес. Выводы подтверждены количественными расчетами, проведенными для параметров оптической системы из работы [14]. Нами сделано однозначное заключение, что светоимпульсные атомные интерферометры со многими импульсными состояниями следует конструировать с обязательно равными плечами противоположно распространяющихся оптических импульсов.

Отметим, что экспериментально зарегистрированное в работе [14] распределение менее протяженное и асимметричное, чем нами полученное. Основной причиной этого является прямоугольная форма оптических импульсов, использованных в наших модельных вычислениях. Действительно, гладкое включение поля смещает характер взаимодействия в сторону адиабатического, снижая тем самым эффективность дифракции, заселения возбужденного состояния и интерференции между ними. Прямоугольная форма оптических импульсов в нашей модели может быть приемлемой в рассмотренных условиях взаимодействия, если фронтальная часть импульса ≤ 0.1 нс [13].

Аналитические формулы для амплитуды рассеяния показывают, что рассеяние может быть асимметричным и в случае симметрично распространяющихся, но неодинаково интенсивных встречных волн. Рассмотренный комплексный механизм взаимодействия лазерных встречных волн с резонансным атомом может быть причиной ярко выраженной асимметрии дифракционных картин, наблюдаемых в работе [22], в которой не приводятся определенные объяснения этого явления.

Работа выполнена при финансовой поддержке ГКН МОН Армении в рамках Лаборатории исследования и моделирования квантовых явлений, а также гранта UCER-02/07 NFSAT/CRDF.

ЛИТЕРАТУРА

1. **А.Ж. Мурадян.** Известия АН Арм. ССР, Физика, **10**, 361 (1975).
2. **R.J. Cook, A.F. Bernhardt.** Phys. Rev. A, **18**, 2533 (1978).
3. **A.F. Bernhardt, B.W. Shore.** Phys. Rev. A, **23**, 1290 (1981).

4. **P.J. Martin, P.L. Gould, B.G. Oldaker, A.H. Miklich, D.E. Pritchard.** Phys. Rev. A, **36**, 2495 (1987).
5. Atom Interferometry. P.R. Berman (Ed.), New York, Academic Press, 1997.
6. **A.D. Cronin, J. Schmiedmayer, D.E. Pritchard.** Rev. Mod. Phys., **81**, 1051 (2009).
7. **S.W. Chiow, T. Kovachy, H.C. Chien, M.A. Kasevich.** Phys. Rev. Lett., **107**, 130403 (2011).
8. **M. Weitz, T. Heupel, T.W. Hansch.** Phys. Rev. Lett., **77**, 2356 (1996).
9. **A.Zh. Muradyan, G.A. Muradyan, P.R. Berman.** Phys. Rev. A, **70**, 0656011 (2004).
10. **M. Edwards, B. Benton, J. Heward, Ch.W. Clark.** Phys. Rev. A, **82**, 063613 (2010).
11. **J. Chwedenczuk, F. Piazza, A. Smerzi.** Phys. Rev. A, **87**, 033607 (2013).
12. **M.G. Tarallo, N. Poli, F.Y. Wang, G.M. Tino.** Eur. Phys. J. Spec. Top., **217**, 207 (2013).
13. **G.A. Muradyan, A.Zh. Muradyan.** Phys. Scr., **90**, 115401 (2015).
14. **L. Deng, E.W. Hagley, J. Denschlag, J.E. Simsarian, M. Edwards, Ch.W. Clark, K. Helmerson, S.L. Rolston, W.D. Phillips.** Phys. Rev. Lett., **83**, 5407 (1999).
15. **W. Li, T. He, A. Smerzi.** Phys. Rev. Lett., **113**, 023003 (2014).
16. **W.S.B. Cahn, A. Kumarakrishnan, U. Shim, T. Sleator, P.R. Berman, B. Dubetsky.** Phys. Rev. Lett., **79**, 784 (1997).
17. **X. Yue, Y. Zhai, Zh. Wang, H. Xiong, X. Chen, X. Zhou.** Phys. Rev. A, **88**, 013603 (2013).
18. **W. Xiong, X. Zhou, X. Yue, Y. Zhai, X. Chen.** New J. Phys., **15**, 063025 (2013).
19. **В.И. Романенко, Л.П. Яценко.** Письма в ЖЭТФ, **63**, 920 (1996).
20. **A.Zh. Muradyan, H.L. Haroutyunyan.** Phys. Rev. A, **62**, 013401 (2000).
21. **B. Barrett, A. Carew, S. Beattie, A. Kumarakrishnan.** Phys. Rev. A, **87**, 033626 (2013).
22. **K. Li, L. Deng, E.W. Hagley, M. G. Payne, M. S. Zhan.** Phys. Rev. Lett., **101**, 250401 (2008).

ԼԱՋԵՐԱՅԻՆ ՎԱԶՈՂ ԱԼԻՔՆԵՐԸ ԿԱՊԻՑԱ-ԴԻՐԱԿԻ ԴԻՖՐԱԿՑԻԱՅԻ ՀԱՄԱՐ
ԱՏՈՄԱԿԱՆ ԻՆՏԵՐՖԵՐՈՄԵՏՐՈՒՄ

Գ.Ա. ՄՈՒՐԱԴՅԱՆ, Ա.Ճ. ՄՈՒՐԱԴՅԱՆ

Կապիցա-Դիրակի ռեզոնանսային դիֆրակցիայի հենքով բազմաիմպուլս ատոմական ինտերֆերոմետրի խնդրի մանրամասն ուսումնասիրության արդյունքում եզրահանգված է, որ ատոմները ցրող կանգուն ալիքը ձևավորող հանդիպակաց ալիքների բազուկները պետք է լինեն հավասար:

LASER RUNNING WAVES FOR THE KAPITZA-DIRAC DIFFRACTION
IN THE ATOM INTERFEROMETER

G.A. MURADYAN, A.Zh. MURADYAN

The scheme of multi-momentum atom interferometer based on the resonant Kapitza-Dirac diffraction is considered. It is made inference that the arms of counter propagating waves, forming the standing wave which scatters atoms, should be equal.

УДК 530.145

ВЫСОКОТОЧНОЕ РАССМОТРЕНИЕ ТУННЕЛЬНОЙ ИОНИЗАЦИИ, ИНДУЦИРОВАННОЙ ПОСТОЯННЫМ ЭЛЕКТРИЧЕСКИМ ПОЛЕМ, ИЗ СТЕПЕННОГО СИНГУЛЯРНОГО ПОТЕНЦИАЛА

Т.А. ИШХАНИЯН^{1,2,3}, А.А. АРУТЮНЯН³, В.А. МАНУКЯН³,
А.М. ИШХАНИЯН^{3,4*}

¹Université de Bourgogne Franche-Comté, Dijon, France

²Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия

³Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак, Армения

⁴Российско-Армянский университет, Ереван, Армения

* e-mail: aishkhanyan@gmail.com

(Поступила в редакцию 12 марта 2018 г.)

Проанализирована индуцированная слабым электростатическим полем туннельная ионизация частицы, находящейся в связанном состоянии в поле притяжения одномерного сингулярного потенциала, который изменяется в пространстве по степенному закону. Предложено высокоточное приближение, применимое для общего случая недробного показателя степени.

1. Введение

Туннелирование через барьер является базовым неклассическим явлением, обсуждаемым с первых дней зарождения квантовой механики [1–10]. В настоящее время оно воспринимается как общий физический феномен, который проявляется во многих областях фундаментальной и прикладной науки, таких как квантовая биология, физика полупроводников и сверхпроводимости, аттосекундная физика, физика ядерного синтеза в звездах и даже ранняя космология Вселенной [11]. Это явление имеет важные применения в современных технологиях, таких как сканирующая туннельная микроскопия [12], квантовые компьютеры [13], флэш-память [14], джозефсоновские переходы [15] и туннельные диоды [16].

Туннельная ионизация является частным примером туннелирования, широко изученного многими авторами как теоретически, так и экспериментально. Это процесс, когда электрон атома (молекулы) преодолевает потенциальный барьер и покидает атом (молекулу). В упрощенном полуклассическом представлении скорость ионизации задается как полный ток вероятности через внешнюю

классическую точку поворота потенциала. Первое рассмотрение такого рода было проведено Оппенгеймером и Ланцосом, которые изучили ионизацию атома водорода в электростатическом поле [3,4]. Впоследствии был рассмотрен ряд иных видов как связующих, так и ионизирующих потенциалов, при этом заслуживающей быть названной в первую очередь является плодотворная работа Келдыша [17], в которой обсуждается возможность ионизации переменным электрическим полем, сходным с излучением оптического лазера.

В настоящей работе мы вновь рассматриваем туннельную ионизацию, индуцированную слабым электростатическим полем с потенциалом $V_e = -Fx$, $F > 0$, частицы, связанной в одномерном сингулярном степенном потенциале $V_b = -V_0 / x^{1/k}$, $V_0 > 0$. Электрическое поле деформирует связующий потенциал и делает туннельную ионизацию возможной. Для изучения проблемы при $k < 1$ используется традиционный полуклассический инструментарий, и для скорости ионизации получается компактная формула в квадратурах (см., например, [18]). Однако для кулоновского потенциала с $k = 1$ формула расходится. Следовательно, для рассмотрения этого случая требуется более совершенный подход [18]. Ситуация становится еще более сложной при $k > 1$. Для этого случая известны только два примера строгого рассмотрения проблемы. Это – случаи потенциала обратного квадратного корня $-V_0 / x^{1/2}$ и логарифмического потенциала $V_0 \ln x$ (данный потенциал можно рассматривать как особый предельный случай V_b при $k \rightarrow \infty$). Для этих двух потенциалов скорости туннельной ионизации были рассчитаны как для постоянного, так и для низкочастотного электрического поля, путем разложения присутствующего в итоговой формуле определенного интеграла в ряд по гипергеометрическим функциям [18]. Для рассмотрения туннельной ионизации в общем случае $k > 1$ в настоящей работе мы следуем подходу [18], делая акцент на потенциале $-V_0 / x^{1/3}$, который может быть применен для моделирования взаимодействия в физике элементарных частиц. Мы представляем простое параболическое приближение, которое обеспечивает высокоточный результат для всех k .

2. Общий подход

Рассмотрим потенциальный барьер (рис.1)

$$V(x) = -\frac{V_0}{x^{1/k}} - Fx, \quad V_0, F > 0. \quad (1)$$

ВКБ результат для полуклассической скорости туннельной ионизации, вычисленный как общая вероятность тока через внешнюю классическую точку поворота потенциала, задается как

$$w \sim e^{\frac{2\pi I}{h}}, \quad (2)$$

где \hbar – редуцированная постоянная Планка и I – определенный интеграл

$$I_{1/k} = -2 \int_{x_L}^{x_R} \sqrt{2m(V(x) - E_n)} dx. \quad (3)$$

Здесь E_n и m – энергия и масса частицы, а x_L, x_R – классические внутренняя (левая) и внешняя (правая) точки поворота (см. рис.1).

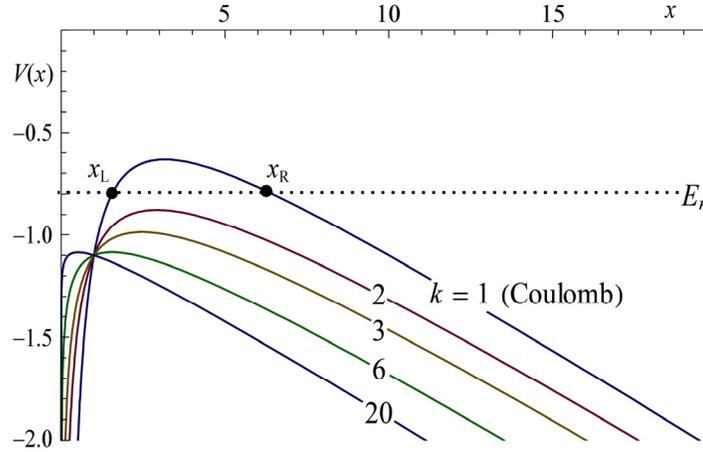


Рис.1. Потенциал (1) при $k = 1, 2, 3, 6, 20$ ($V_0 = 1, F = 0.1$).

Для вычисления интеграла (3) для потенциала (1) сперва применим преобразование $x = (-V_0 / E_n)^k z^k$, что приведет интеграл к стандартной форме:

$$I_{1/k} = a \int_{z_L}^{z_R} \sqrt{z^{2k-3} (z - 1 - \varepsilon z^{k+1})} dz, \quad (4)$$

где

$$a = -2k \sqrt{-2mE_n} (-V_0 / E_n)^k, \quad \varepsilon = (-F / E_n) (-V_0 / E_n)^k. \quad (5)$$

Далее для целого k факторизуем полином под квадратным корнем в подынтегральной функции:

$$z^{2k-3} (z - 1 - \varepsilon z^{k+1}) = -\varepsilon z^{2k-3} (z - z_1)(z - z_2) \dots (z - z_k)(z - z_{k+1}). \quad (6)$$

Пусть z_1 и z_2 – соответственно левая и правая точки поворота. Последующее линейное преобразование (сдвиг и масштабирование) переменного $z = z_1 + (z_2 - z_1)t$ приводит интеграл в уравнении (4) к определенному интегралу с пределами 0 и 1:

$$I_{1/k} = A \int_0^1 \sqrt{t(1-t)(1-y_0 t)^{2k-3} (1-y_3 t) \dots (1-y_k t)(1-y_{k+1} t)} dt, \quad (7)$$

где $y_0 = 1 - z_2 / z_1$,

$$y_i = \frac{z_1 - z_2}{z_1 - z_i}, \quad i = 3, 4, \dots, k, k + 1, \quad (8)$$

$$A = -\frac{k\sqrt{m}}{F} (2\varepsilon|E_n|)^{3/2} z_1^{\frac{2k-3}{2}} (z_2 - z_1)^2 \prod_{i=3}^{k+1} \sqrt{(z_1 - z_i)}. \quad (9)$$

В общем случае этот интеграл не выражается через элементарные или известные специальные функции. Полезным наблюдением, способным обеспечить дальнейшее продвижение, является то, что для $y_3 = y_4 = \dots = y_k = y_{k+1} = 0$ (заметим, что это случай кулоновского потенциала) интеграл выражается в гипергеометрических функциях Гаусса. Это непосредственно видно из интегрального представления [19]

$${}_2F_1(a, b; c; y_0) = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(b)\Gamma(c-b)} \int_0^1 t^{b-1} (1-t)^{c-b-1} (1-y_0t)^{-a} dt. \quad (10)$$

Это наблюдение позволяет построить разложение интеграла (7) через гипергеометрические функции Гаусса. Это достигается применением ряда Тейлора

$$\sqrt{(1-y_3t)\dots(1-y_kt)(1-y_{k+1}t)} = \sum_{n=0}^{\infty} c_n (t-t_0)^n \quad (11)$$

с $t_0 = 0, 1, 1/y_0$. Например, взяв $t_0 = 0$, мы немедленно приходим к разложению

$$I_{1/k} = A \sum_{n=0}^{\infty} c_n \int_0^1 t^n \sqrt{t(1-t)(1-y_0t)^{2k-3}} dt = A \sum_{n=0}^{\infty} c_n {}_2F_1\left(\frac{3}{2} - k, \frac{3}{2} + n, 3 + n; y_0\right). \quad (12)$$

Это – сходящийся ряд, следовательно, взяв нужное количество членов, можно вычислить интеграл с любой заданной точностью. Отметим, что параметры системы «барьер–частица», кроме k , не входят в параметры вовлеченных гипергеометрических функций Гаусса ${}_2F_1$, как это имеет место для большинства стандартных кванто-механических задач, а входят в аргумент этих функций: $y_0 = y_0(m, k, V_0, F, E_n)$.

Технически задача теперь сводится к построению разложения (11). Соответствующее наблюдение здесь состоит в том, что для достижения хорошего приближения нужно быть осторожным с точностью определения аргумента y_0 . Понятно, что это эквивалентно точному приближению для левой и правой поворотных точек. Заметим, что точки поворота определяются как корни функции в скобках в уравнении (4), то есть функции $f = z - 1 - \varepsilon z^{k+1}$. Это – известный математический объект – трехчлен Ламберта [20, 21], корни которого изучались многими авторами. Для целого k один из корней всегда можно записать в терминах обобщенных гипергеометрических функций (см., например, [22–26]). Для малых

$\varepsilon \ll 1$ имеют место разложения

$$z_1 = 1 + \varepsilon + O(\varepsilon^2), \quad z_2 = \frac{1}{\varepsilon^{1/k}} - \frac{1}{k} - \frac{k+1}{2k^2} \varepsilon^{1/k} + O(\varepsilon^{2/k}). \quad (13)$$

Так как для правой поворотной точки разложение задается в степенях $\varepsilon^{1/k}$, то понятно, что это довольно медленно сходящийся ряд. Чтобы добиться отклонения порядка ε , нужно брать более, чем k членов.

Еще одним фактором, влияющим на точность, является то, что скорость сходимости гипергеометрического ряда для $I_{1/k}$ достаточно чувствительна к выбору точки разложения t_0 , поэтому эта точка также требует отдельного рассмотрения. В уравнении (12) мы положили $t_0 = 0$ для простоты. Однако это не лучший выбор. Это можно понять с помощью следующего рассуждения. Выбор $t_0 = 0$ соответствует разложению в окрестности левой поворотной точки. Однако в этой пространственной области электрическое поле (то есть то, что вызывает ионизацию) слишком слабо, чтобы оказать заметное влияние на поведение частицы. Следовательно, для того, чтобы в разумной степени учитывать влияние электрического поля, следует взять много членов разложения. Напротив, можно ожидать гораздо более быстро сходящегося результата, если применить разложение в окрестности правой точки поворота. Здесь электрическое поле достаточно сильное, чтобы проявиться уже в первых членах разложения. Следовательно, интуитивно правая точка поворота, то есть точка $t_0 = 1$, более целесообразна для применения ряда Тейлора. Мы проверили, что если учитывать только два члена разложения, то при этом выборе точность результата увеличивается на один–два порядка по сравнению с выбором $t_0 = 0$. Отклонение полученного приближения от точного результата в этом случае составляет порядка одной десятой доли процента. Примечательно, что существует еще более продвинутый подход. Идея состоит в том, чтобы аппроксимировать левую часть уравнения (11) параболой, которая точно воспроизводит значение этого выражения в трех точках. Такое приближение ещё больше уменьшает погрешность до одной сотой процента. Мы обсуждаем этот подход для потенциала $-V_0/x^{1/3}$.

3. Потенциал $-V_0/x^{1/3}$

Рассмотрим связующий потенциал $V_b = -V_0/x^{1/3}$. Рассчитываемый интеграл есть

$$I_{1/3} = -\frac{6\sqrt{2mV_0^3}}{|E_n|^{5/2}} \int_{z_L}^{z_R} \sqrt{z^3(z-1-\varepsilon z^4)} dz, \quad (14)$$

где $\varepsilon = FV_0^3 / |E_n|^4$ и в качестве E_n мы берем, пренебрегая квадратичным штарковским сдвигом для слабого ионизирующего поля, квазиклассический

энергетический спектр для невозмущенного потенциала V_b [27, 28]:

$$E_n = -\left(\frac{mV_0^6}{\hbar^2}\right)^{1/5} \frac{3^{2/5}}{2^{7/5}(n-1/5)^{2/5}}. \quad (15)$$

Пусть $z_{1,2,3,4}$ – четыре корня многочлена четвертой степени, входящего в интеграл (14), так что

$$z - 1 - \varepsilon z^4 = -\varepsilon(z - z_1)(z - z_2)(z - z_3)(z - z_4). \quad (16)$$

Характер корней определяется знаком дискриминанта [19]

$$\Delta = \varepsilon^2(256\varepsilon - 27). \quad (17)$$

Для $\varepsilon < 27 / 256 \approx 0.1$ дискриминант отрицателен, следовательно, имеются два вещественных корня и два комплексно-сопряженных корня. Можно показать, что два вещественных корня всегда положительны и больше единицы. Для малых $\varepsilon \ll 1$ эти корни аппроксимируются как

$$z_1 = 1 + \varepsilon + 4\varepsilon^2 + \dots, \quad z_2 = \frac{1}{\varepsilon^{1/3}} - \frac{1}{3} - \frac{2\varepsilon^{1/3}}{9} - \frac{20\varepsilon^{2/3}}{81} - \frac{\varepsilon}{3} - \frac{364\varepsilon^{4/3}}{729} + \dots \quad (18)$$

Так как $1 < z_1 < z_2$, то левая точка поворота есть $z_L = z_1$, а правая - $z_R = z_2$. При этом и линейном преобразовании $z = z_1 + (z_2 - z_1)t$ интеграл (14) сводится к

$$I_{1/3} = A \int_0^1 \sqrt{t(1-t)(1-y_0t)^3(1-y_3t)(1-y_4t)} dt, \quad (19)$$

где

$$A = -3 \frac{(2\varepsilon|E_n|)^{3/2}}{F} (z_2 - z_1)^2 z_1^{3/2} \sqrt{(z_1 - z_3)(z_1 - z_4)}, \quad (20)$$

$$y_0 = 1 - \frac{z_2}{z_1}, \quad y_3 = \frac{z_1 - z_2}{z_1 - z_3}, \quad y_4 = \frac{z_1 - z_2}{z_1 - z_4}. \quad (21)$$

Применяя ряд Тейлора вблизи левой точки поворота:

$$\sqrt{(1-y_3t)(1-y_4t)} = \sum_{n=0}^{\infty} c_n t^n, \quad (22)$$

получим (см. уравнение (12))

$$I_{1/3} = \frac{A\pi}{8} \left({}_2F_1\left(-\frac{3}{2}, \frac{3}{2}, 3, y_0\right) - \frac{y_3 + y_4}{4} {}_2F_1\left(-\frac{3}{2}, \frac{5}{2}, 4, y_0\right) - \frac{5(y_3 - y_4)^2}{64} {}_2F_1\left(-\frac{3}{2}, \frac{7}{2}, 5, y_0\right) + \dots \right). \quad (23)$$

Далее рассмотрим ряд Тейлора вблизи правой точки поворота:

$$\sqrt{(1-y_3t)(1-y_4t)} = \sum_{n=0}^{\infty} c_n (t-1)^n . \quad (24)$$

Результат имеет вид

$$I_{1/3} = \frac{A\pi\sqrt{(1-y_3)(1-y_4)}}{8} \times \left({}_2F_1\left(-\frac{3}{2}, \frac{3}{2}, 3, y_0\right) - \frac{y_3 - 2y_3y_4 + y_4}{4(1-y_3)(1-y_4)} {}_2F_1\left(-\frac{3}{2}, \frac{3}{2}, 4, y_0\right) + \dots \right). \quad (25)$$

С помощью прямого численного моделирования легко проверить, что точность, обеспечиваемая первыми двумя членами этого разложения, составляет порядка одной десятой процента. Этот результат в десять раз точнее, чем тот, который дают первые три члена разложения (23).

Более точное приближение получается простым параболическим приближением

$$\sqrt{(1-y_3t)(1-y_4t)} \approx \alpha_0 + \alpha_1 t + \alpha_2 t^2 \equiv F(t) \quad (26)$$

с тремя константами $\alpha_{0,1,2}$, которые подбираются так, чтобы точно воспроизвести значения корня в концевых точках $t=0,1$ и в одной внутренней точке. Последняя точка может быть выбрана таким образом, чтобы минимизировать максимальную относительную ошибку на отрезке $t \in [0,1]$, или по какому-нибудь другому критерию оптимизации. Однако средняя точка отрезка $t=1/2$ оказывается достаточно хорошей, чтобы обеспечить относительную ошибку порядка сотых долей процента. Результат имеет вид

$$F(t) = 1 - \left(3 - 2\sqrt{(y_3-2)(y_4-2)} + \sqrt{(y_3-1)(y_4-1)} \right) t + 2 \left(1 - \sqrt{(y_3-2)(y_4-2)} + \sqrt{(y_3-1)(y_4-1)} \right) t^2. \quad (27)$$

Таким образом, высокоточное приближение интеграла (19) дается как

$$I_{1/3} = A \int_0^1 \sqrt{t(1-t)(1-y_0t)^3} F(t) dt . \quad (28)$$

Очевидно, что интегрирование приводит к сумме трех гипергеометрических функций Гаусса. В заключение отметим, что, хотя мы изначально обсуждали только случай целых k , конечная разработка, то есть параболическое приближение, одинаково применима и для нецелого k . Следовательно, это общий подход для всех $k > 1$.

4. Заключение

Таким образом, анализируя туннельную ионизацию, слабым электростатическим полем $-Fx$ частицы, связанной притягивающим одномерным сингулярным потенциалом $-V_0/x^{1/k}$, мы предложили довольно точное приближение для общего случая $k > 1$. Основные пункты применяемой техники следующие. Во-первых, мы показываем, что интеграл, присутствующий в квазиклассической скорости туннельной ионизации, в случае дробно-степенного потенциала может быть разложен в бесконечный ряд по гипергеометрическим функциям Гаусса. Это разложение строится путем применения некоторого вспомогательного ряда Тейлора, пригодного для окрестности правой поворотной точки. Аргумент гипергеометрических функций, вовлеченных в разложение, зависит от физических характеристик потенциала связи и внешнего поля. Следует применить высокоточное приближение для левой и правой классических поворотных точек (нужно вычислить только два реальных положительных корня соответствующего трехчлена Ламберта). Далее мы показываем, что высокоточное приближение, включающее только три гипергеометрические функции Гаусса, может быть построено параболическим приближением определенного квадратного корня, присутствующего в интеграле в показателе скорости ионизации. Это – общий подход, применимый не только для целого k , но и для всех $k > 1$. Нужно подгонять параметры вспомогательного квадратичного многочлена таким образом, чтобы этот многочлен точно воспроизводил значения рассматриваемого корня в трех пространственных точках.

Работа выполнена в рамках армяно-французской международной ассоциированной лаборатории IRMAS (CNRS-France и SCS-Armenia). Исследование поддержано ГК МОН Армении (грант №18RF-139) и Армянским национальным фондом науки и образования (грант ANSEF №PS-4986). Т. Ишханян благодарит SPIE за стипендию в области оптики и фотоники (SPIE International Scholarship in Optics and Photonics 2017), посольство Франции в Армении за докторский грант, а также университетское агентство «Франкофония» за совместный с ГК МОН Армении грант «Научная мобильность».

ЛИТЕРАТУРА

1. **F. Hund.** Z. Phys., **40**, 742 (1927).
2. **L. Nordheim.** Z. Phys., **46**, 833 (1927).
3. **J.R. Oppenheimer.** Phys. Rev., **31**, 66 (1928).
4. **C. Lanczos.** Z. Phys., **68**, 204 (1931).
5. **R.H. Fowler, L. Nordheim.** Proc. R. Soc. London A, **119**, 173 (1928).
6. **O.K. Rice.** Phys. Rev., **35**, 1538 (1930).
7. **G. Gamow.** Z. Phys., **51**, 204 (1928).
8. **R.W. Gurney, E.U. Condon.** Phys. Rev., **33**, 127 (1929).

9. **J. Frenkel.** Wave Mechanics, Elementary Theory. Clarendon Press, Oxford, 1932.
10. **E. Merzbacher.** Physics Today, **55**, 44 (2002).
11. **M. Razavy.** Quantum Theory of Tunneling. World Scientific, Singapore, 2003.
12. **G. Binnig, H. Rohrer.** IBM J. Research and Development, **30**, 355 (1986).
13. **M.W. Johnson et al.,** Nature, **473**, 194 (2011).
14. Flash Memories. P. Cappelletti, C. Golla, P. Olivo, E. Zanoni (Eds.). Kluwer, Boston, 1999.
15. **B.D. Josephson.** Phys. Lett., **1**, 251 (1962).
16. **L. Esaki.** Phys. Rev., **109**, 603 (1958).
17. **L.V. Keldysh.** Soviet Phys. JETP, **20**, 1307 (1965).
18. **A. Ishkhanyan, V. Krainov.** Laser Phys. Lett., **14**, 076001 (2017).
19. NIST Handbook of Mathematical Functions. F.W.J. Olver, D.W. Lozier, R.F. Boisvert, C.W. Clark (Eds.). Cambridge University Press, New York, 2010.
20. **J.H. Lambert.** Acta Helvetica, **3**, 128 (1758).
21. **L. Euler.** Acta Acad. Scient. Petropol., **2**, 29 (1783).
22. **C. Hermite.** Annali di Math. Pura ed Appl., **1**, 256 (1858).
23. **J. Cockle.** Phil. Mag., **20**, 145 (1860).
24. **R. Harley.** Quart. J. Pure Appl. Math, **5**, 337 (1862).
25. **F. Klein.** Lectures on the Icosahedron and the Solution of Equations of the Fifth Degree. New York, Dover, 1956.
26. **R. Birkeland.** Mathematische Zeitschrift, **26**, 566 (1927).
27. **C. Quigg, J.L. Rosner.** Phys. Rep., **56**, 167 (1979).
28. **A. Ishkhanyan, V. Krainov.** JETP Lett., **105**, 43 (2017).

ԱՍՏԻՃԱՆԱՅԻՆ ՕՐԵՆՔՈՎ ՏՐՎՈՂ ՍԻՆԳՈՒԼԱՐ ՊՈՏԵՆՑԻԱԼԻ ԴԱՇՏՈՒՄ՝
ԹՈՒԻՅԼ ԷԼԵԿՏՐՈՍՏԱՏԻԿ ԿՈՆՏԱՆՏ ԿՈՂՄԻՑ ՀԱՐՈՒՑՎԱԾ ԹՈՒՆԵԼԱՅԻՆ
ԻՈՆԻԶԱՅԻԱՅԻ՝ ԲԱՐՁՐ ՃՇՊՐՏՈՒԹՅԱՆ ԴԻՏԱՐԿՈՒՄ

Տ.Ա. ԻՇԽԱՆՅԱՆ, Ա.Հ. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ, Վ.Ա. ՄԱՆՈՒԿՅԱՆ, Ա.Մ. ԻՇԽԱՆՅԱՆ

Վերլուծված է միաչափ, աստիճանային օրենքով փոփոխվող, սինգուլյար ձգողական պոտենցիալի դաշտում կապված մասնիկի՝ թույլ էլեկտրաստատիկ դաշտի կողմից հարուցված թունելային իոնիզացիան: Առաջարկված է բարձր ճշգրտության մոտարկում, որը կիրառելի է աստիճանի ընդհանուր ոչ կոտորակային դեպքում:

ACCURATE TREATMENT OF TUNNEL IONIZATION, INDUCED BY A
CONSTANT ELECTRIC FIELD, FROM A POWER-LAW SINGULAR POTENTIAL

T.A. ISHKHANYAN, A.H. HARUTYUNYAN, V.A. MANUKYAN, A.M. ISHKHANYAN

The tunnel ionization, induced by a weak electrostatic field, of a particle bound in an attractive one-dimensional power-law singular potential is analysed. An accurate approximation applicable for the general case of non-fractional power exponent is suggested.

УДК 537.311

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЧИРПА СУБПИКОСЕКУНДНОГО ЛАЗЕРНОГО
ИМПУЛЬСА В СРЕДНЕМ ИК ДИАПАЗОНЕ
НА ОСНОВЕ НЕКОЛЛИНЕАРНОЙ ГЕНЕРАЦИИ
ЧЕТВЕРТОЙ ГАРМОНИКИ**

Д.Л. ОГАНЕСЯН^{1*}, А.О. ВАРДАНЯН¹, Г.Д. ОГАНЕСЯН²

¹Национальный институт метрологии, Ереван, Армения

²Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

*e-mail: davidhl@ysu.am

(Поступила в редакцию 7 декабря 2017 г.)

Предложен новый метод определения чирпа субпикосекундного лазерного импульса в среднем ИК диапазоне на центральной длине волны 10 мкм, основанный на генерации импульсов второй гармоники спектрально-ограниченным и частотно-модулированным субпикосекундными импульсами и последующей неколлинеарной генерации излучения четвертой гармоники соответствующими импульсами второй гармоники. Приведены временные зависимости мгновенной частоты частотно-модулированного импульса второй гармоники на центральной длине волны 5 мкм, генерируемого в поле частотно-модулированного субпикосекундного ИК импульса, распространяющегося в отрицательном одноосном кристалле AgGaS₂ вдоль направления, составляющего 61°36' с оптической осью. Представленные результаты могут быть использованы при разработке нелинейно-оптического фазового коррелятора для определения фазы и временного профиля субпикосекундного лазерного импульса в среднем ИК диапазоне.

1. Введение

Прогресс в области генерации и измерений параметров субпикосекундных лазерных импульсов в среднем ИК диапазоне определяется применением нелинейно-оптических методов [1–9]. Для субпикосекундных лазерных импульсов излучения в среднем ИК диапазоне создание нелинейно-оптических методов определения чирпа субпикосекундного лазерного импульса имеет весьма важное практическое значение в фундаментальных и прикладных задачах нестационарной ИК спектроскопии и диагностики пучков заряженных частиц [10, 11].

В настоящей работе предлагается метод определения чирпа субпикосекундного лазерного импульса в среднем ИК диапазоне, основанный на генерации

импульсов второй гармоники спектрально-ограниченным и частотно-модулированным субпикосекундными импульсами и последующей неколлинеарной генерации излучения четвертой гармоники (ЧГ) соответствующими импульсами второй гармоники (ВГ). В качестве нелинейного кристалла предлагается использовать AgGaS_2 (тиогаллат серебра) – отрицательный одноосный кристалл точечной группы симметрии $\bar{4}2m$ с диапазоном прозрачности от 0.5 до 13 мкм.

2. Схема нелинейно-оптического коррелятора для определения чирпа субпикосекундного лазерного импульса в среднем ИК диапазоне

На рис.1 показана схема предлагаемого нелинейно-оптического коррелятора для определения чирпа субпикосекундного лазерного импульса в среднем ИК диапазоне. В качестве источника импульсов (MIR PS) можно использовать параметрический преобразователь частоты на основе одномерной фотонной структуры с последующей компрессией импульса излучения разностной частоты, сформированной на выходе структуры с помощью фазового жидкокристаллического транспаранта [12]. Изменение центральной частоты импульса в среднем ИК диапазоне можно осуществить путем изменения периода фотонной структуры, а формирование симметричного гауссовского временного профиля импульса – с помощью частотно-пространственной фильтрации импульса жидкокристаллическим транспарантом.

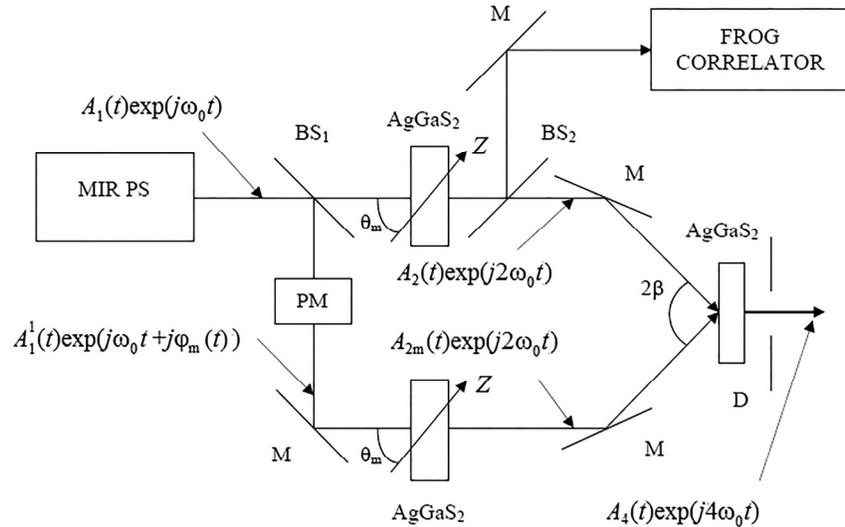


Рис.1. Схема предлагаемого нелинейно-оптического коррелятора: MIR PS – источник импульсов ИК диапазона, BS₁ – расщепитель пучка с коэффициентом деления 50%, PM – фазовый модулятор, M – зеркало, BS₂ – расщепитель пучка с коэффициентом пропускания 70%, D – диафрагма и FROG CORRELATOR – нелинейно-оптический коррелятор.

В качестве источника можно использовать также нелинейно-оптический перестраиваемый параметрический генератор узкополосного излучения разностной частоты в диапазоне 10–15 мкм, основанный на нелинейном взаимодействии chirпированных импульсов в ближнем ИК диапазоне и позволяющий формировать импульсы в указанном диапазоне с амплитудой электрического поля до 190 В/мкм [13]. Изменение центральной частоты импульса в этом случае можно осуществить путем изменения временной задержки между взаимодействующими chirпированными импульсами в ближнем ИК диапазоне.

ИК импульс $A_1(t)\exp(j\omega_0 t)$, где $A_1(t)$ – комплексная амплитуда импульса, $\omega_0 = 2\pi c/\lambda_0$ – центральная частота, λ_0 – центральная длина волны и c – скорость света в вакууме, из MIR PS направляется на расщепитель пучка BS₁. Часть импульса, прошедшая через расщепитель и равная $0.5 \times A_1(t)$, направляется на нелинейный кристалл AgGaS₂, в котором в результате нелинейного взаимодействия импульса с кристаллом формируется импульс ВГ $A_2(t)\exp(j2\omega_0 t)$, где $A_2(t)$ – комплексная амплитуда импульса ВГ. Часть импульса ВГ, отраженная от BS₂, направляется на нелинейно-оптический FROG коррелятор, с помощью которого определяется фаза и временной профиль симметричного по времени импульса ВГ $A_2(t)\exp(j2\omega_0 t)$. Вторая часть исходного импульса, отраженная от BS₁ и равная $0.5 \times A_1(t)$, направляется на фазовый модулятор РМ. Для задач нестационарной ИК спектроскопии в качестве РМ, в частности, может быть рассмотрена прозрачная среда с неизвестной дисперсионной характеристикой. В этом случае информация о дисперсионной характеристике исследуемого объекта, например, электро-оптически управляемого нематического жидкого кристалла содержится в фазовой модуляции импульса [12].

На выходе РМ формируется импульс $A_1^1(t)\exp(j\omega_0 t + j\varphi_m(t))$, где $A_1^1(t) = 0.5 \times A_1(t)$ – комплексная амплитуда ИК импульса, прошедшего через фазовый модулятор, $\varphi_m(t)$ – фаза частотно-модулированного ИК импульса. Если в рассматриваемом диапазоне длин волн РМ прозрачный и если глубина фазовой модуляции недостаточно велика, чтобы вызвать изменение огибающей ИК импульса, то можно допустить что $A_1^1(t) = 0.5 \times A_1(t)$. Далее модулированный ИК импульс, отражаясь от зеркала М, направляется на нелинейный кристалл AgGaS₂, где в результате нелинейного взаимодействия импульса с кристаллом формируется импульс ВГ $A_{2m}(t)\exp(j2\omega_0 t)$, где $A_{2m}(t)$ – комплексная амплитуда частотно-модулированного импульса ВГ. В случае, когда толщина нелинейного кристалла меньше как нелинейной L_{NL} , так и дисперсионной L_D длины, а удвоение частоты ИК импульса происходит в квазистатическом режиме, фаза частотно-модулированного импульса $A_{2m}(t)$ равна $2\varphi_m(t)$ [14, 15]. В общем случае соотношение между $\varphi_m(t)$ и фазой импульса ВГ зависит от толщины нелинейного кристалла,

соотношения L_{NL}/L_D и выполнения условий фазового и группового синхронизмов. Результаты исследования временной зависимости фазы импульса $A_{2m}(t)$ для случая, когда временная зависимость $\varphi_m(t)$ определяется как квадратичная функция времени Ct^2 , где C – постоянная, описывающая линейный чирп импульса в среднем ИК диапазоне на выходе РМ, приводятся в следующем разделе. Далее для определения фазы импульса ВГ $A_{2m}(t)$ импульсы $A_2(t)\exp(j2\omega_0 t)$ и $A_{2m}(t)\exp(j2\omega_0 t)$ направляются на нелинейный кристалл AgGaS_2 под углом 2β , обеспечивающим выполнение условия фазового синхронизма для неколлинеарной генерации ЧГ импульса в среднем ИК диапазоне. В поперечном распределении энергии ЧГ, соответствующем динамической спектрограмме импульса $A_{2m}(t)\exp(j2\omega_0 t)$, содержится информация о фазе импульса ВГ $A_{2m}(t)$. При известном импульсе $A_2(t)\exp(j2\omega_0 t)$ из регистрируемого поперечного распределения энергии ЧГ можно восстановить фазу импульса ВГ $A_{2m}(t)$ [16], что, в свою очередь, позволит определить фазу $\varphi_m(t)$, содержащую информацию о процессе фазовой модуляции импульса в РМ.

3. Коллинеарная генерация ВГ частотно-модулированным субпикосекундным лазерным импульсом в среднем ИК диапазоне

Рассмотрим линейно-поляризованный ИК импульс с плоским волновым фронтом, длительностью $18 \times \tau_0$ ($\tau_0 = \lambda_0/c$ – период колебаний) и с компонентой электрического поля E_Y^ω , распространяющийся вдоль оси Z , совпадающей с нормалью к поверхности кристалла и составляющей угол θ_m с оптической осью одноосного отрицательного кристалла AgGaS_2 . На рис.2 показана взаимная ориентация кристаллографической (XYZ) и лабораторной (xuz) координатных систем. В поле ИК импульса E_Y^ω с поляризацией, соответствующей обыкновенной волне, распространяющегося в нелинейном кристалле вдоль оси z , будет генерироваться импульс ВГ $E_Z^{2\omega}$ с поляризацией, соответствующей необыкновенной волне, распространяющийся вдоль оси z . Угол $\theta_m = 61^\circ 36'$ определяется точкой пересечения сферы, соответствующей поверхности показателей преломления обыкновенного луча $n_o(\omega_0)$ на частоте ω_0 с эллипсоидом показателей преломления необыкновенного луча $n_e(2\omega_0)$ на частоте $2\omega_0$ [17]. Дифракционным расплыванием ИК импульса, т. е. импульса накачки $A_1(t)$, можно пренебречь, если длина рассматриваемого нелинейного кристалла меньше параметра $\pi\sigma_0^2/2\lambda_0$, где σ_0 – диаметр пучка импульса накачки. Например, при $\sigma_0 = 3$ мм параметр $\pi\sigma_0^2/2\lambda_0 = 1.41$ м, что много больше рассматриваемой в данной работе толщины нелинейного кристалла. Угол между волновым вектором и вектором Пойнтинга излучения ВГ, обусловленный явлением двулучепреломления, согласно [18], определяется как $\Delta\theta = a \tan(n_o^2(2\omega_0) \tan(\theta_m)/n_e^2(2\omega_0)) - \theta_m$ и составляет $64.44'$.

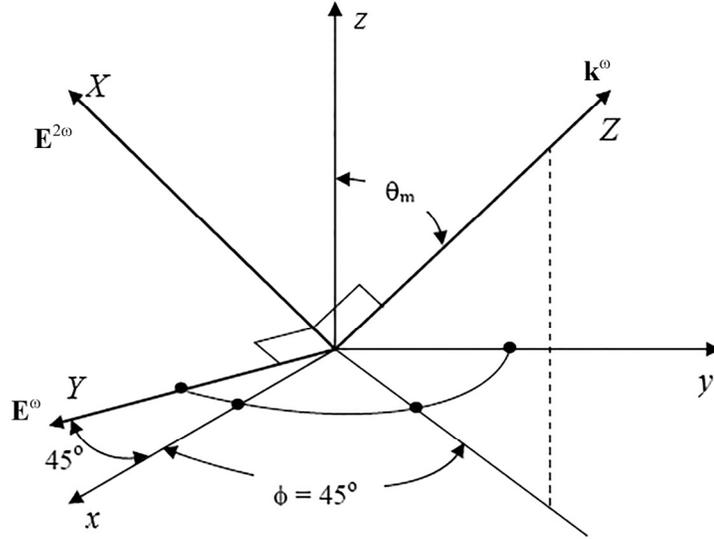


Рис.2. Взаимная ориентация кристаллографической (XYZ) и лабораторной (xyz) координатных систем: E^ω – электрическое поле импульса накачки с поляризацией, соответствующей обыкновенной волне, k^ω – волновой вектор импульса накачки, $E^{2\omega}$ – электрическое поле импульса ВГ с поляризацией, соответствующей необыкновенной волне.

Пространственный снос излучения ВГ на выходе из нелинейного кристалла, обусловленный двулучепреломлением $L \times \tan(\Delta\theta)$ (L – толщина кристалла), при $L \approx 1000$ мкм составит ~ 18.76 мкм. Следовательно, при $\sigma_0 = 3$ мм указанным пространственным сдвигом, вызванным двулучепреломлением, можно пренебречь.

В кристалле $AgGaS_2$, когда поляризация ИК импульса накачки соответствует волне с обыкновенной поляризацией, импульс ВГ, соответствующий волне с необыкновенной поляризацией, имеет лишь Z -компоненту $P_z = 2d_{36} E_x^\omega E_y^\omega \sin \theta_m$ и достигает максимума при $E_x^\omega = E_y^\omega = E_v^\omega / \sqrt{2}$, когда азимутальный угол для $E_v^\omega = \pi/4$ [19], где d_{36} – отличная от нуля нелинейная восприимчивость кристалла $AgGaS_2$. С учетом линейных дисперсионных членов высшего порядка, инерционности нелинейной связи первого порядка и без учета явления двулучепреломления система уравнений, описывающая данный процесс в приближении медленно-меняющихся амплитуд, может быть представлена в виде [13]

$$\begin{aligned} \frac{\partial A_1}{\partial z} + \beta_1(\omega_0) \frac{\partial A_1}{\partial t} + \sum_{l=2}^{10} i^{l-1} \frac{\beta_l(\omega_0)}{l!} \frac{\partial^l A_1}{\partial t^l} \\ = -i\gamma_1 A_2 A_1^* \exp(i\Delta kz) - \frac{\gamma_1}{\omega_0} \frac{\partial (A_2 A_1^*)}{\partial t} \exp(i\Delta kz), \end{aligned} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial A_2}{\partial z} + \beta_1(2\omega_0) \frac{\partial A_2}{\partial t} + \sum_{l=2}^{10} i^{l-1} \frac{\beta_l(2\omega_0)}{l!} \frac{\partial^l A_2}{\partial t^l} \\ & = -i\gamma_2 A_1^2 \exp(-i\Delta kz) - \frac{\gamma_2}{2\omega_0} \frac{\partial(A_1^2)}{\partial t} \exp(-i\Delta kz), \end{aligned} \quad (2)$$

где A_1 и A_2 – комплексные амплитуды у-поляризованного ИК импульса и х-поляризованного импульса ВГ, соответственно, $\beta_l(\omega_0) = (\partial^l k(\omega)/\partial \omega^l)|_{\omega=\omega_0}$, $\beta_l(2\omega_0) = (\partial^l k(\omega)/\partial \omega^l)|_{\omega=2\omega_0}$, $k(\omega)$ – волновой вектор, $\gamma_1 = (2\pi d_{14}(\omega_0)\omega_0^2)/k(\omega_0)c^2$ и $\gamma_2 = (2\pi d_{36}(2\omega_0)(2\omega_0)^2)/k(2\omega_0)c^2$ – коэффициенты нелинейной связи волн, $d_{36}(5 \text{ мкм}) = 11.1 \pm 2.2 \text{ пм/В}$ и $d_{14}(10 \text{ мкм}) = 10.6 \pm 1.2 \text{ пм/В}$ – нелинейные восприимчивости кристалла AgGaS_2 , $1/\beta_1(\omega_0)$ и $1/\beta_1(2\omega_0)$ – групповые скорости основного импульса и импульса ВГ и $\Delta k = 2k(\omega_0) - k(2\omega_0)$ – расстройка волновых векторов. Дисперсия групповой скорости для импульса накачки $\beta_2(\omega_0) = -1.9694 \text{ фс}^2/\text{мкм}$, а для импульса ВГ $\beta_2(2\omega_0) = -0.1478 \text{ фс}^2/\text{мкм}$. Коэффициенты нелинейной связи $\gamma_1 \approx \gamma_2 = 1.7789 \times 10^{-5} \text{ 1/В}$.

Начальные условия для численного решения системы нелинейных уравнений (1) и (2) выбираются в виде

$$A_1(t, z=0) = A_0 \exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right) \exp\left(-i\frac{C}{\tau^2}t^2\right), \quad A_2(t, z=0) = 0, \quad (3)$$

где A_0 – амплитуда начального ИК импульса, $2 \times \tau = 18 \times \lambda_0/c = 600 \text{ фс}$ – длительность ИК импульса, $\lambda_0 = 10 \text{ мкм}$ – центральная длина волны и C – безразмерная постоянная, описывающая линейный чирп импульса в среднем ИК диапазоне. Длина нелинейного кристалла выбирается равной $L = 997 \text{ мкм}$. При расчете импульса ВГ $A_2(t)$ значение постоянной C принимается равным нулю, а при расчете импульса ВГ $A_{2m}(t)$ постоянная C принимает значения ± 0.4 , ± 0.8 и ± 1.2 . Численное решение системы уравнений (1) и (2) получено Фурье-методом с расщеплением по физическим факторам с пространственным шагом 49.85 нм [20]. Согласно вышеизложенному, при распространении начального ИК импульса и импульса ВГ вдоль оси Z , составляющей угол $\theta_m = 61^\circ 36'$ с оптической осью, выполняется условие фазового синхронизма и, следовательно, $\Delta k = 2k(\omega_0) - k(2\omega_0) = 0$. Условие фазового синхронизма выполняется только для центральной длины волны $\lambda_0 = 2\pi c/\omega_0$, а невыполнение условия фазового синхронизма для области частотного спектра в окрестности ω_0 ведет к снижению коэффициента преобразования энергии начального импульса в энергию ВГ. При этом снижение коэффициента преобразования может быть существенно скомпенсировано при

выполнении условия, когда толщина нелинейного кристалла удовлетворяет неравенству $L \leq L_C = \frac{0.2\lambda_0}{\Delta\lambda} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial n_e}{\partial \lambda} \right) \Big|_{\lambda=\lambda_0/2} - \left(\frac{\partial n_o}{\partial \lambda} \right) \Big|_{\lambda=\lambda_0} \right]^{-1}$, где $\Delta\lambda$ – ширина полосы

начального импульса (3) с центральной длиной волны λ_0 , n_o и n_e – коэффициенты преломления для обыкновенной и необыкновенной волн [15]. Толщина $L_C = 1019.21$ мкм при $C = 0$, а при $C = 0.4, 0.8$ и 1.2 составляет 946.29, 795.79 и 652.33 мкм, соответственно.

Система уравнений (1) и (2) описывает также реакцию импульса ВГ на изменение амплитуды и фазы импульса в результате нелинейного взаимодействия с кристаллом. Групповое запаздывание, возникающее за счет расстройки групповых скоростей импульсов накачки и ВГ, решающим образом определяет процесс нелинейного взаимодействия волн. Влияние групповой расстройки $\Delta u^{-1} = (1/u_{1o} - 1/u_{2e})$, где u_{1o} и u_{2e} – групповые скорости взаимодействующих импульсов, на эффективность генерации ВГ зависит от соотношения между длиной взаимодействия и длиной группового запаздывания $L_g = (|\Delta u^{-1}| \Delta \omega_1)^{-1}$, где $\Delta \omega_1 = \sqrt{2(1+C^2)}/\tau$ – ширина спектра импульса накачки [14]. При длине кристалла $L < L_g$ удвоение частоты происходит в режиме группового синхронизма, а при $L > L_g$ – режим удвоения частоты существенно нестационарный. При $C = 0, 0.4, 0.8$ и 1.2 длина группового запаздывания L_g составляет 704.98, 654.56, 550.49 и 451.32 мкм, соответственно. При $C = 0$ длина дисперсионного расплывания импульса накачки $L_D = \tau^2 / (2|\beta_2(\omega_0)|)$ составляет 21.87 мм, что приблизительно в 22 раза больше длины рассматриваемого нами нелинейного кристалла $L = 997$ мкм. Согласно результатам численных расчетов, из-за дисперсионного расплывания при $C = 0$ во втором приближении теории дисперсии длительность импульса на выходе кристалла увеличится на 0.1%, при $C = -1.2$ увеличится на 5.5%, а при $C = 1.2$ уменьшится на 5.3%. Следовательно, для выбранного типа кристалла длиной 997 мкм дисперсионным расплыванием как спектрально-ограниченного, так и частотно-модулированного начального импульса (3), приводящим к уменьшению коэффициента преобразования, можно пренебречь. При $\Delta k = 0$ и $C = 0$ зависимость интенсивности ВГ $(2\hbar\omega_0)I_2$ от длины пути z , пройденного в кристалле, является монотонно-возрастающей функцией, пропорциональной z^2 и достигающей значения интенсивности импульса накачки $(\hbar\omega_0)I_1(z=0)$ при $z = L_{NL}$, где $L_{NL} = 1/(\gamma_2 A_0)$. Фазовая модуляция импульса накачки (3) $A_1(t, z=0)$ препятствует полной перекачке основного излучения во ВГ, и за счет фазовых соотношений между взаимодействующими волнами имеет

место осциллирующая зависимость эффективности преобразования от длины взаимодействия [14]. Численное решение системы уравнений (1) и (2) с учетом начальных условий (3) определяется при значениях амплитуды A_0 импульса накачки равном 70.71, 106.06 и 141.42 В/мкм, которые при $C = 0$ соответствуют значениям расстояния L_{NL} равном 795, 530.10 и 397.57 мкм, соответственно. При выбранных значениях амплитуды A_0 импульса накачки L_{NL} меньше длины рассматриваемого кристалла $L = 997$ мкм, что будет способствовать эффективному энергообмену между взаимодействующими импульсами.

На рис.3 приведены временные профили огибающей импульса накачки $A_1(t)$ в разные моменты времени, соответствующие разным сечениям вдоль длины кристалла, взятые с шагом вдоль оси $\Delta z = z_i - z_{(i-1)}$ равным 49.85 мкм, для

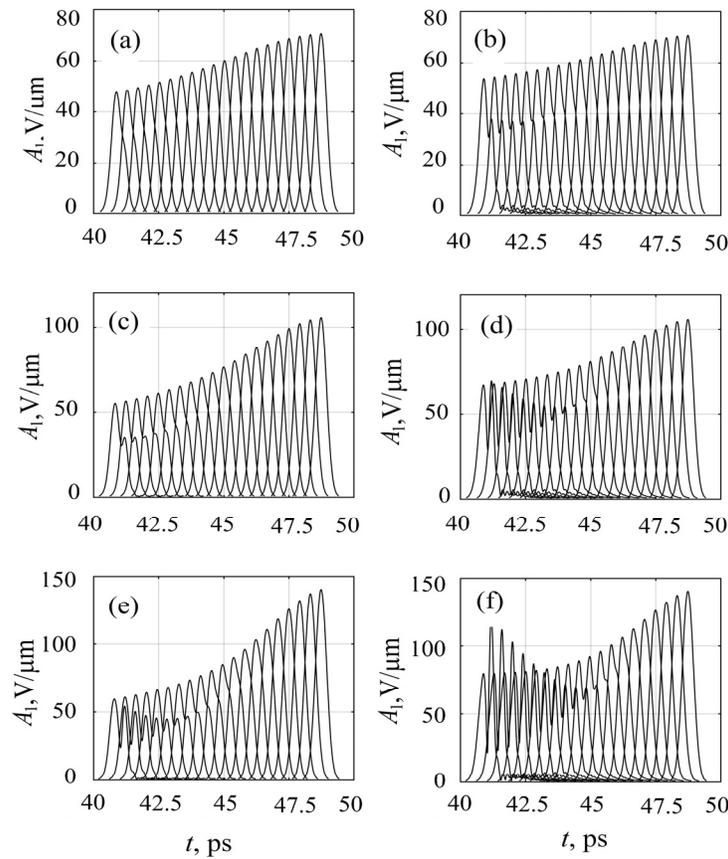


Рис.3. Временные профили огибающей импульса накачки $A_1(t)$ в разные моменты времени, соответствующие разным расстояниям вдоль длины кристалла, взятые с шагом вдоль оси $\Delta z = z_i - z_{(i-1)}$ равным 49.85 мкм, для случаев: (a) $C = 0.4$, $A_0 = 70.71$ В/мкм, (b) $C = 1.2$, $A_0 = 70.71$ В/мкм, (c) $C = 0.4$, $A_0 = 106.06$ В/мкм, (d) $C = 1.2$, $A_0 = 106.06$ В/мкм, (e) $C = 0.4$, $A_0 = 141.42$ В/мкм и (f) $C = 1.2$, $A_0 = 141.42$ В/мкм.

случаев: (a) $C = 0.4$, $A_0 = 70.71$ В/мкм, (b) $C = 1.2$, $A_0 = 70.71$ В/мкм, (c) $C = 0.4$, $A_0 = 106.06$ В/мкм, (d) $C = 1.2$, $A_0 = 106.06$ В/мкм, (e) $C = 0.4$, $A_0 = 141.42$ В/мкм и (f) $C = 1.2$, $A_0 = 141.42$ В/мкм. Как видно из рис.3, при $A_0 = 70.71$ В/мкм увеличение C от 0.4 до 1.2 приводит к искажению временного профиля $A_1(t)$.

На рис.4 приведены рассчитанные для временного интервала, удовлетворяющего условию $|A_1|^2/|A_2|^2 \geq 0.5$, временные зависимости мгновенной частоты импульса накачки $A_1(t)$ в разные моменты времени, соответствующие разным сечениям вдоль длины кристалла для рассмотренных на рис.3а–f случаев. Как видно из рис.4 по мере распространения импульса накачки линейная по времени зависимость мгновенной частоты становится нелинейной. В частности, при $A_0 = 70.71$ В/мкм и $C = 0.4$ и 1.2 расстояние z_{NL} , при котором начинает проявляться нелинейность составляет 798 и 698 мкм. При $A_0 = 106.06$ В/мкм и $C = 0.4$ и 1.2

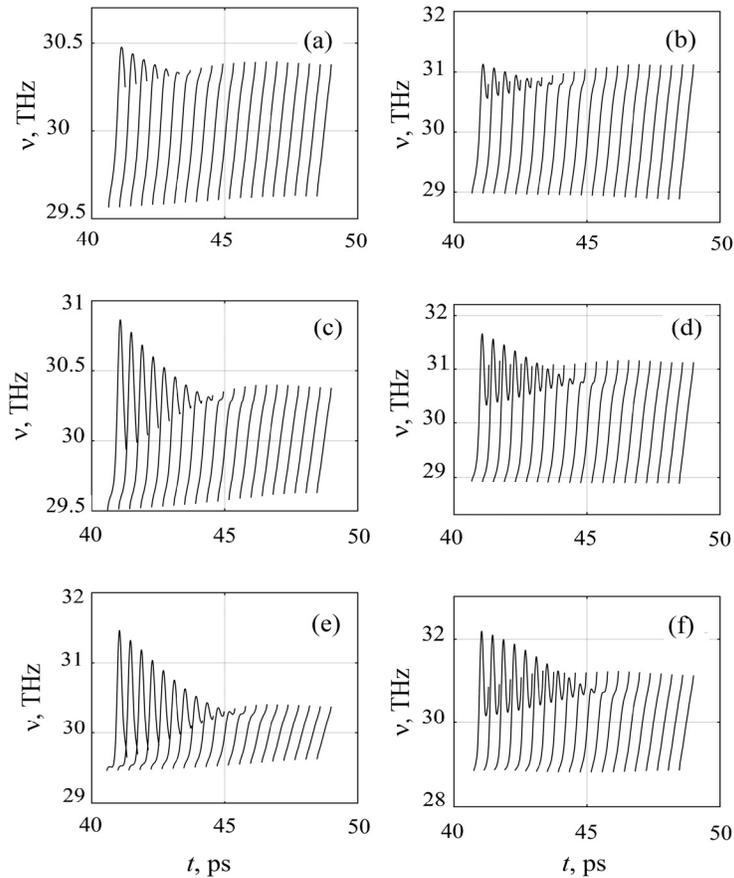


Рис.4. Временные зависимости мгновенной частоты импульса накачки $A_1(t)$ в разные моменты времени и соответствующие разным расстояниям вдоль длины кристалла для рассмотренных на рис.3а–f случаев, рассчитанные для временного интервала, удовлетворяющего условию $|A_1|^2/|A_{1max}|^2 \leq 0.5$.

расстояние z_{NL} составляет 598 и 498 мкм, а при $A_0 = 141.42$ В/мкм и $C = 0.4$ и 1.2 оно составляет 449 и 349 мкм.

При $A_0 = 70.71$ В/мкм и $C = 0.4$ расстояние $z_{NL} = 798$ мкм удовлетворяет неравенству $L_g (C = 0.4) < z_{NL} (C = 0.4) < L_C (C = 0.4)$, а при $C = 1.2$ расстояние $z_{NL} = 698$ мкм удовлетворяет неравенству $L_g (C = 1.2) < L_C (C = 1.2) < z_{NL} (C = 1.2)$. Иначе говоря, при $C = 0.4$ режим удвоения частоты нестационарный ($z_{NL} > L_g$), а снижением коэффициента преобразования можно пренебречь, так как $z_{NL} < L_C$. Однако при $C = 1.2$ имеет место также некоторое снижение коэффициента преобразования, т. к. $L_C (C = 1.2) < z_{NL} (C = 1.2)$.

При $A_0 = 106.06$ В/мкм и $C = 0.4$ расстояние $z_{NL} = 598$ мкм удовлетворяет неравенству $z_{NL} (C = 0.4) < L_g (C = 0.4) < L_C (C = 0.4)$, а при $C = 1.2$ расстояние $z_{NL} = 498$ мкм удовлетворяет неравенству $L_g (C = 1.2) < z_{NL} (C = 1.2) < L_C (C = 1.2)$. При $C = 0.4$ режим удвоения частоты стационарный ($z_{NL} < L_g$) и снижением коэффициента преобразования можно пренебречь, так как $z_{NL} < L_C$. Однако при $C = 1.2$

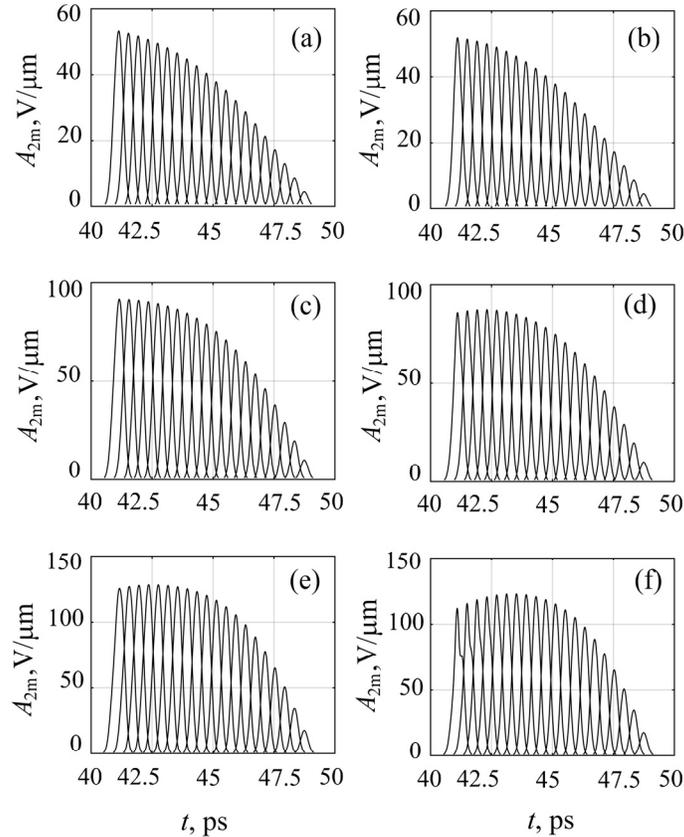


Рис.5. Временные профили огибающей импульса ВГ $A_{2m}(t, z_i)$ в разные моменты времени и соответствующие разным расстояниям вдоль длины кристалла, взятые с шагом $\Delta z = 49.85$ мкм, для рассмотренных на рис.3а–f случаев.

режим удвоения частоты нестационарный ($z_{NL} > L_g$), а снижением коэффициента преобразования можно пренебречь, так как $L_g (C=1.2) < z_{NL} (C=1.2) < L_C (C=1.2)$.

При $A_0 = 141.42$ В/мкм и $C = 0.4$ расстояние $z_{NL} = 449$ мкм удовлетворяет неравенству $z_{NL} (C = 0.4) < L_g (C = 0.4) < L_C (C = 0.4)$, а при $C = 1.2$ расстояние $z_{NL} = 349$ мкм удовлетворяет неравенству $z_{NL} (C = 1.2) < L_g (C = 1.2) < L_C (C = 1.2)$. Таким образом, при $A_0 = 141.42$ В/мкм и $C = 0.4$ и 1.2 режим удвоения частоты стационарный ($z_{NL} < L_g$) и снижением коэффициента преобразования можно пренебречь, т. к. $z_{NL} < L_C$.

На рис.5 приведены временные профили огибающей импульса ВГ $A_{2m}(t, z_i)$ в разные моменты времени, соответствующие разным расстояниям вдоль длины кристалла, взятым с шагом вдоль оси $\Delta z = z_i - z_{(i-1)} = 49.85$ мкм, для рассмотренных на рис.3 случаев. Согласно рис.5, при $A_0 = 70.71$ и $A_0 = 106.06$ В/мкм и при

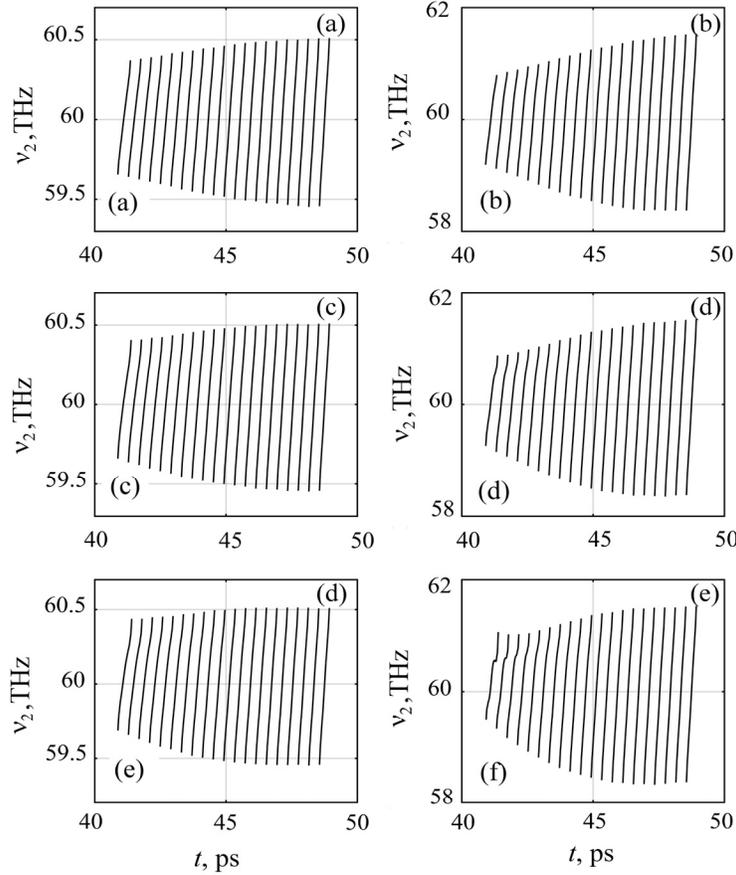


Рис.6. Временные зависимости мгновенной частоты импульса ВГ $A_{2m}(t)$ в разные моменты времени и соответствующие разным сечениям вдоль длины кристалла для рассмотренных на рис.3а–f случаев, рассчитанные для временного интервала, удовлетворяющего условию $|A_2|^2/|A_{2m \max}|^2 \geq 0.5$.

$C = 0.4$ и 1.2 профили огибающей импульса ВГ $A_{2m}(t, z_i)$ в разные моменты времени имеют гауссовскую форму. При $A_0 = 141.42$ В/мкм и $C = 0.4$ огибающая временного профиля $A_{2m}(t, z_i)$ в разные моменты времени остается гауссовской. Для $A_0 = 141.42$ В/мкм и $C = 1.2$ огибающая $A_{2m}(t, z_i)$ искажается, начиная с $z = 797.6$ мкм.

На рис.6 приведены рассчитанные для временного интервала, удовлетворяющего условию $|A_{2m}|^2 / |A_{2m\max}|^2 \geq 0.5$, временные зависимости мгновенной частоты импульса ВГ $A_{2m}(t)$ в разные моменты времени и соответствующие разным сечениям вдоль длины кристалла для рассмотренных на рис.3а–f случаев. Как видно из результатов расчетов и из рис.6, по мере распространения импульса накачки линейная по времени зависимость мгновенной частоты импульса ВГ $A_{2m}(t)$ становится нелинейной, а расстояния, при которых начинает проявляться нелинейность, совпадают с соответствующими значениями расстояний z_{NL} , при

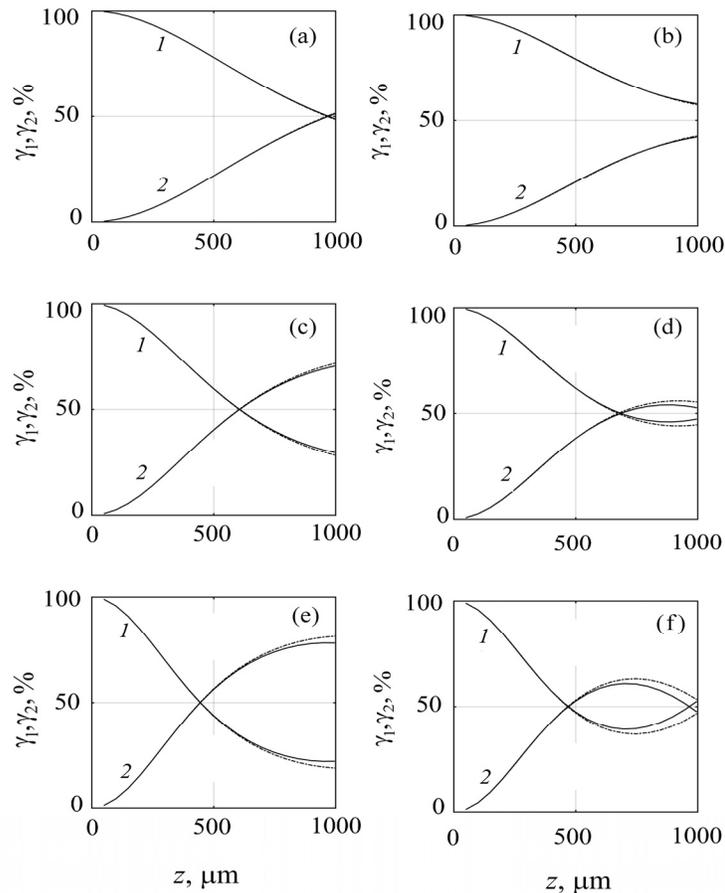


Рис.7. Зависимости коэффициентов преобразования энергии γ_1 (1) и γ_2 (2) от длины пройденного в кристалле пути z для рассмотренных на рис.3а–f случаев.

которых начинает проявляться нелинейность временной зависимости мгновенной частоты импульса накачки $A_1(t)$.

На рис.7 приведены зависимости коэффициентов преобразования энергии

$$\gamma_1 = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} |A_1(t, z_i)|^2 dt}{\int_{-\infty}^{\infty} |A_1(t, z=0)|^2 dt} \times 100\% , \quad (4)$$

$$\gamma_2 = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} |A_{2m}(t, z_i)|^2 dt}{\int_{-\infty}^{\infty} |A_1(t, z=0)|^2 dt} \times 100\% \quad (5)$$

от длины пройденного в кристалле пути z .

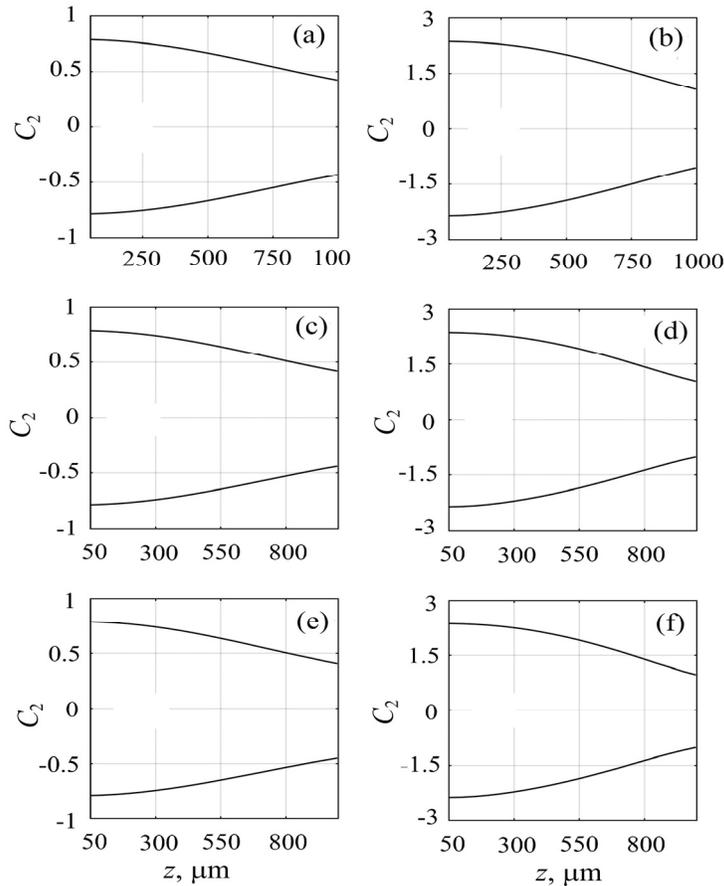


Рис.8. Зависимости линейных чирпов C_2 и $-C_2$ импульса ВГ $A_{2m}(t)$ от длины пройденного в кристалле пути z для рассмотренных на рис.3а–f случаев, которые рассчитаны для временного интервала, удовлетворяющего условию $|A_2|^2/|A_{2m \max}|^2 \geq 0.5$.

Согласно рис.7, при $A_0 = 70.71$ В/мкм и $C = \pm 0.4$ по мере увеличения длины пройденного в кристалле пути z энергия импульса накачки уменьшается, а энергия импульса ВГ увеличивается. При $z = 947$ мкм энергии взаимодействующих импульсов одинаковы. В случае $C = \pm 1.2$ на выходе из кристалла коэффициент преобразования энергии для импульса накачки γ_1 составляет 57.3%, а для импульса ВГ $\gamma_2 - 42.7\%$. Зависимости коэффициентов преобразования энергии для импульсов накачки с положительным и отрицательным чирпами совпадают.

Все вышеприведенные расчетные значения эффективностей γ_1 и γ_2 относятся к удвоению частоты плоских волн. Очевидно, что учет пространственной ограниченности взаимодействующих импульсов приведет к несколько заниженным значениям эффективностей.

На рис.8 приведены рассчитанные для временного интервала, удовлетворяющего условию $|A_{2m}|^2 / |A_{2m\max}|^2 \geq 0.5$, зависимости линейного чирпа C_2 импульса ВГ $A_{2m}(t)$ от длины пройденного в кристалле пути z для случаев (а) $C = \pm 0.4, A_0 = 70.71$ В/мкм, (б) $C = \pm 1.2, A_0 = 70.71$ В/мкм, (с) $C = \pm 0.4, A_0 = 106.06$ В/мкм, (д) $C = \pm 1.2, A_0 = 106.06$ В/мкм, (е) $C = \pm 0.4, A_0 = 141.42$ В/мкм и (ф) $C = \pm 1.2, A_0 = 141.42$ В/мкм.

Согласно рис.9, при $z = 50$ мкм величина линейного чирпа C_2 импульса

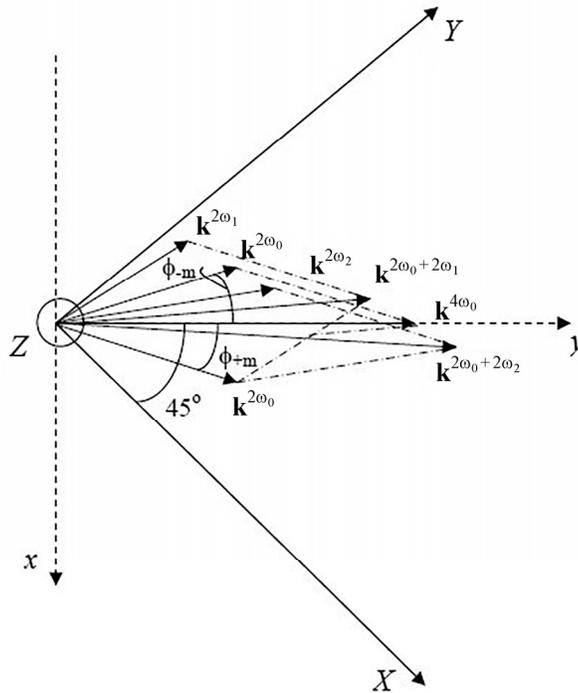


Рис.9. Геометрия неколлинеарного синхронизма оос.

ВГ $A_{2m}(t)$, полученного в результате численного интегрирования системы уравнений (1) и (2) с начальным условием (3) при $A_0 = 70.71, 106.06$ и 141.42 В/мкм и $C = \pm 0.4$ и ± 1.2 составляет ± 0.78 и ± 2.36 , соответственно. По мере увеличения z C_2 убывает и на выходе из кристалла при тех же значениях A_0 и C составляет $+0.41$ (-0.44) и ± 1.00 , соответственно. Согласно результатам расчетов и как видно из рис.8, при $A_0 = 70.71$ В/мкм, $C = \pm 0.4$ и ± 1.2 и расстояниях $z_{NL} = 798$ и 698 мкм чирп C_2 равен ± 0.52 и ± 1.65 . При $A_0 = 106.06$ В/мкм, $C = \pm 0.4$ и ± 1.2 и расстояниях $z_{NL} = 598$ и 498 мкм чирп C_2 равен ± 0.61 и ± 2.00 , а при $A_0 = 141.42$ В/мкм, $C = \pm 0.4$ и ± 1.2 и расстояниях $z_{NL} = 449$ и 349 мкм чирп C_2 равен ± 0.68 и ± 2.2 , соответственно.

Согласно результатам расчетов, уменьшение C_2 по мере увеличения z обусловлено уменьшением чирпа C импульса накачки (3) в процессе распространения в нелинейном кристалле с хроматической дисперсией и дисперсией нелинейной связи первого порядка.

4. Неколлинеарная генерация ЧГ спектрально-ограниченным и частотно-модулированным субпикосекундными лазерными импульсами в среднем ИК диапазоне

С целью измерения линейного чирпа C_2 импульса ВГ $A_{2m}(t)$ импульсы $A_2(t)$ и $A_{2m}(t)$ направляются на нелинейный кристалл AgGaS_2 под углом β к нормали, обеспечивающим выполнение условия фазового синхронизма для неколлинеарной генерации ЧГ импульса в среднем ИК диапазоне. На рис.9 показана взаимная ориентация кристаллографической (XYZ) и лабораторной (xyz) координатных систем. На рис.1 оптическая ось кристалла AgGaS_2 , предназначенная для генерации ЧГ, перпендикулярна плоскости рисунка, импульсы $A_2(t)$ и $A_{2m}(t)$ с векторами поляризации, соответствующими волнам с обыкновенной поляризацией и находящимися в плоскости рисунка, направляются на нелинейный кристалл под углом $\beta - a \sin(n_{o_{002}} \sin(\phi_{\pm m})) = 12^\circ 16'$ к нормали, где $\phi_{\pm m} = \pm a \cos(|k_{e4}| / (2|k_{o2}|)) = 10^\circ 10'$, ϕ_{+m} , ϕ_{-m} – углы между обыкновенно-поляризованными импульсами $A_2(t)$ и $A_{2m}(t)$ и направлением распространения импульса ЧГ внутри нелинейного кристалла, k_{e4} – волновой вектор необыкновенно поляризованного импульса ЧГ, $|k_{o2}|$ – волновой вектор обыкновенно поляризованного импульса ВГ (рис.9). Импульс ЧГ распространяется вдоль оси y , составляющей угол 45° с кристаллографической осью X и угол $\theta_m = 90^\circ$ с оптической осью одноосного отрицательного кристалла AgGaS_2 , а условие фазового синхронизма $k_{e4} - k_{o2} \cos(\phi_{+m}) - k_{o2} \cos(\phi_{-m}) = 0$ выполняется для центральных длин волн $\lambda_0/2$ и $\lambda_0/4$. В кристалле AgGaS_2 , когда поляризация импульсов $A_2(t)$ и

$A_{2m}(t)$ соответствует волнам с обыкновенной поляризацией, поляризация импульса ЧГ имеет лишь Z -компоненту $P_Z = 2d_{36}E_X^\omega E_Y^\omega$ [21].

В спектре частотно-модулированного импульса $A_{2m}(t)$ содержатся длинноволновые $\lambda_1/2$ и коротковолновые $\lambda_2/2$ спектральные компоненты, волновые векторы $\mathbf{k}^{2\omega_1}$ и $\mathbf{k}^{2\omega_2}$ которых в нелинейном кристалле пространственно разнесены относительно волнового вектора $\mathbf{k}^{2\omega_0}$ (рис.9). В процессе нелинейного неколлинеарного взаимодействия спектральных компонент $2\omega_1$ и $2\omega_2$ с компонентой $2\omega_0$ в кристалле генерируются компоненты излучения на суммарных частотах $\omega_{\text{SFR}} = 2\omega_1 + 2\omega_0$ и $\omega_{\text{SFR}} = 2\omega_2 + 2\omega_0$, которые пространственно разнесены вдоль оси x . Таким образом, угловое расхождение излучения суммарной частоты определяется шириной спектра частотно-модулированного импульса $A_{2m}(t)$. Как было показано в работе [22], нелинейный кристалл служит анализатором спектра импульса $A_{2m}(t)$ с аппаратной функцией $\sin c \left\{ \frac{L_x}{2} \left[a(\omega_{\text{SFR}} - 4\omega_0) - \frac{\omega_{\text{SFR}}}{c} \sin(\phi(\omega_{\text{SFR}})) \right] \right\}$, где L_x – длина кристалла вдоль оси x , $a = \sin(\phi_m)/u$, u – групповая скорость импульсов ВГ, $\phi(\omega_{\text{SFR}})$ – угол между волновым вектором $k_{\text{SFR}} = \omega_{\text{SFR}}/c$ и $k^{4\omega_0}$. Пространственное разрешение анализатора обратно пропорционально L_x , а спектрально-угловое разрешение определяется как $d\phi(\omega_{\text{SFR}})/d\omega_{\text{SFR}}$, где $\phi(\omega_{\text{SFR}}) = a \sin(\sin(\beta)/n_o(\omega_{\text{SFR}}))$. В частности, в соответствии с рис.6 частота импульса ВГ ν_2 при $A_0 = 141.42$ В/мкм, $z = 349$ мкм и $C = 1.2$ во времени меняется от $\nu_{\text{SFR1}} = 59.54$ до $\nu_{\text{SFR2}} = 61.06$ ТГц и при толщине кристалла AgGaS_2 , равной 120 мкм, указанные спектральные компоненты излучения суммарной частоты на выходе из кристалла будут разнесены вдоль оси x на величину $\delta x = L_x (d\phi(\omega_{\text{SFR}})/d\omega_{\text{SFR}}) \Delta\omega_{\text{SFR}} = 8.27$ мкм, где $\Delta\omega_{\text{SFR}} = 2\pi(\nu_{\text{SFR2}} - \nu_{\text{SFR1}}) = 9.55$ ТГц. При $L_x = 5$ мм ($1/L_x = 0.2 \times 10^{-3}$ мкм $^{-1}$) диапазону от $\mathbf{k}^{2\omega_0+2\omega_1} = 2\pi\nu_{\text{SFR1}}/c = 1.247$ мкм $^{-1}$ до $\mathbf{k}^{2\omega_0+2\omega_2} = 2\pi\nu_{\text{SFR2}}/c = 1.279$ мкм $^{-1}$ (см. рис.9) соответствует ~ 160 пространственно-разрешенных волновых векторов излучения суммарной частоты. Очевидно, что с учетом дифракции количество пространственно-разрешенных волновых векторов будет меньше. Согласно результатам расчетов, при толщине 997 мкм кристалла AgGaS_2 , предназначенного для генерации ВГ спектрально-ограниченного импульса накачки (рис.1), длительность импульса $A_2(t)$ на выходе из кристалла составляет 460 фс, а ширина спектра импульса – 3.2×10^{-3} мкм $^{-1}$, что на порядок меньше ширины спектра $A_{2m}(t)$, которая составляет 0.032 мкм $^{-1}$.

Поперечное распределение энергии излучения ЧГ вдоль оси x при определенных условиях соответствует кросс-корреляционной функции (ККФ) профилей интенсивности взаимодействующих импульсов $A_{2m}(t)$ и $A_2(t)$. Определим

такие условия генерации импульса ЧГ, чтобы регистрируемое двумерное распределение энергии импульса ЧГ адекватно соответствовало динамической спектрограмме импульса $A_{2m}(t)$.

Процесс генерации ЧГ должен быть реализован в ненасыщенном режиме, т. е. энергия излучения ЧГ W_3 на выходе из нелинейного кристалла должна удовлетворять условию $W_3 \ll W_1, W_2$, где W_1 и W_2 – энергии импульсов $A_2(t)$ и $A_{2m}(t)$, соответственно. При этом важно уменьшить влияние дисперсионных эффектов, влияние эффекта группового разбегания импульсов ВГ и ЧГ и дисперсии групповых скоростей, а также диафрагменно-апертурного эффекта, обусловленного угловым сносом необыкновенной волны, соответствующей импульсу ЧГ. Рассматриваемые условия неколлинеарной генерации ЧГ соответствуют режиму генерации при заданных полях импульсов накачки ВГ. При рассматриваемом 90° -синхронизме пространственный снос необыкновенной волны отсутствует. Таким образом, толщина кристалла L_4 AgGaS₂, предназначенная как для генерации ЧГ, так и для генерации ВГ в FROG корреляторе выбирается, исходя из вышеизложенного, и составляет 120 мкм. Другим важным аспектом является точность юстировки угла фазового синхронизма. Оптимальная юстировка достигается при соблюдении условия $(k_{e4} - k_{o2} \cos(\phi_{+m}) - k_{o2} \cos(\phi_{-m}))L_4/2 \ll 1$ в пределах ширины спектра как импульса $A_2(t)$, так и импульса $A_{2m}(t)$. При выполнении указанных требований измеряемая зависимость распределения энергии излучения суммарной частоты от временной задержки $\tau = x \sin(\phi_m)/u$ пропорциональна ККФ интенсивностей взаимодействующих импульсов [23]

$$W_3(\tau) \propto \int_{-\infty}^{\infty} |A_2(t - \tau)|^2 |A_{2m}(t + \tau)|^2 dt, \quad (6)$$

где $\gamma_4 = (2\pi d_{36}(4\omega_0)(4\omega_0)^2)/k_e(4\omega_0)c^2$ и $\sin(\phi_m)/u = 1.429$ фс/мкм – коэффициент пространственно-временной развертки.

Эффективность преобразования энергии излучения импульса ВГ $A_{2m}(t)$ в энергию излучения импульса ЧГ в рассмотренном выше приближении определяется как

$$\sigma_4 = \frac{|A_{4e}|^2}{|A_{2m}|^2} = \left((2\pi d_{36}(4\omega_0)(4\omega_0)^2)/k_e(4\omega_0)c^2 \right)^2 L_4^2 |A_{20}(y=0)|^2, \quad (7)$$

где $d_{36}(2.53 \text{ мкм}) = 13.7 \pm 2.2$ пм/В – нелинейная восприимчивость кристалла AgGaS₂ на длине волны 2.53 мкм и $A_{20}(y=0)$ – амплитуда импульса ВГ на входе нелинейного кристалла.

Таким образом, если регистрируемое излучение ЧГ направить на спектрограф с щелью вдоль оси x , то на выходе спектрографа будем иметь динамическую спектрограмму частотно-модулированного импульса $A_{2m}(t)$, которая содержит информацию о зависимости несущей частоты импульса A_{2m} от времени t

$$I(\tau, \nu) \propto \left| \int A_2(t - \tau) A_{2m}(t) \exp(j2\pi\nu t) dt \right|^2, \quad (8)$$

где, согласно вышесказанному, временной профиль интенсивности $|A_2(t)|^2$ определяется отдельным FROG кросс-коррелятором. В качестве спектрографа, помещенного на выходе нелинейного кристалла, рассматривается дифракционная решетка с постоянной 600 шт/мм с щелями, направленными вдоль оси x , и установленная на некотором расстоянии L_S от нелинейного кристалла. Данное расстояние следует выбирать таким образом, чтобы дифракцией излучения ЧГ можно было бы пренебречь. В случае, когда излучение ЧГ падает на дифракционную решетку под углом 45° к нормали, спектральные компоненты излучения ЧГ $\nu_{4SFR1} = 119.08$ ТГц и $\nu_{4SFR2} = 122.12$ ТГц на расстоянии $L_S = 0.1$ м будут разнесены вдоль оси x (см. рис.9) на величину $\delta x = L_S (d\phi(\omega_{4SFR})/d\omega_{4SFR}) \Delta\omega_{4SFR} = 6.35$ мм, где $\Delta\omega_{4SFR} = 2\pi(\nu_{SFR2} - \nu_{SFR1}) = 19.09$ ТГц. Регистрацию динамической спектрограммы $I(\tau, \nu)$ можно реализовать с помощью CCD камеры. Из зарегистрированной динамической спектрограммы определяются амплитуда и фаза импульса излучения ВГ – $A_{2m}(t)$, а чирп C_{2R} определяется из временной зависимости фазы импульса излучения ВГ – $A_{2m}(t)$ [16, 22, 23]. Относительная погрешность определения чирпа импульса ВГ $(C_2 - C_{2R}) \times 100\% / C_2$, где C_2 – величина чирпа, полученная расчетным путем (рис.8), не более 4%.

При экспериментальной реализации предлагаемого метода толщину нелинейных кристаллов, предназначенных как для коллинеарной генерации частотно-модулированного импульса ВГ $A_{2m}(t)$, так и спектрально-чистого импульса ВГ $A_2(t)$, при заданной амплитуде импульса накачки A_0 следует выбирать равной характерной нелинейной длине $L_{NL} = 1/(\gamma_2 A_0)$, соответствующей спектрально-ограниченному импульсу накачки ($C = 0$), которая при значениях амплитуды A_0 70.71, 106.06 и 141.42 В/мкм составляет 795.14, 530.10 и 397.57 мкм, соответственно. Для обеспечения равенства амплитуд импульсов накачек на входе обоих нелинейных кристаллов расщепитель пучка BS₁ (рис.1) должен иметь коэффициент деления 50%.

Таким образом, при заданных значениях амплитуды импульса накачки A_0 , толщине нелинейного кристалла $L = L_{NL}$, величины и знака чирпа C_{2R} , восстановленного из динамической спектрограммы, и зависимостей линейного чирпа C_2

импульса ВГ $A_{2m}(t)$ от длины пройденного в кристалле пути z для разных значений амплитуды импульса накачки A_0 (рис.8), полученных в результате численного интегрирования системы уравнений (1) и (2) при начальном условии (3), можно определить чирп субпикосекундного лазерного импульса в среднем ИК диапазоне.

5. Заключение

Приведены результаты теоретического исследования и численного моделирования процесса коллинеарной генерации импульса ВГ как спектрально-ограниченным, так и частотно-модулированным субпикосекундными импульсами в среднем ИК диапазоне в режиме больших КПД преобразования энергии импульса накачки в энергию импульса ВГ в нелинейном кристалле AgGaS_2 . Приводятся результаты численного решения системы уравнений, полученных в приближении медленно-меняющихся амплитуд и описывающих процесс генерации ВГ частотно-модулированным импульсом накачки в среднем ИК диапазоне с длительностью 600 фс, на центральной длине волны 10 мкм, амплитудой электрического поля 70.71, 106.06 и 141.42 В/мкм и линейным чирпом 0.4 и 1.2. Приведены временные профили огибающей и временные зависимости мгновенной частоты импульса накачки в разные моменты времени, соответствующие разным сечениям вдоль длины кристалла. Получены зависимости линейного чирпа C_2 импульса ВГ $A_{2m}(t)$ от длины пройденного в кристалле пути z .

Решена задача неколлинеарной генерации импульса ЧГ спектрально-ограниченным и частотно-модулированным импульсами ВГ в нелинейном кристалле AgGaS_2 в приближении заданного поля импульсов ВГ. Показано, что регистрируя пространственное распределение энергии излучения ЧГ, которое соответствует динамической спектрограмме частотно-модулированного импульса ВГ, можно определить фазу модулированного импульса ВГ, что, в свою очередь, позволяет определить чирп субпикосекундного лазерного импульса в среднем ИК диапазоне.

При экспериментальной реализации предлагаемого нового метода определения чирпа субпикосекундного лазерного импульса в среднем ИК диапазоне толщину нелинейных кристаллов, предназначенных как для коллинеарной генерации частотно-модулированного импульса ВГ $A_{2m}(t)$, так и спектрально-чистого импульса ВГ $A_2(t)$, при заданной амплитуде импульса накачки A_0 следует выбирать равной характерной нелинейной длине $L_{\text{NL}} = 1/(\gamma_2 A_0)$, соответствующей спектрально-чистому импульсу накачки.

Представленные в работе результаты могут быть использованы для разработки нелинейно-оптического фазового коррелятора для определения фазы субпикосекундного лазерного импульса в среднем ИК диапазоне.

ЛИТЕРАТУРА

1. **W. Shi, Y. J. Ding, X. Mu, N. Fernelius.** Appl. Phys. Lett., **80**, 3889 (2002).
2. **K. Finsterbusch, A. Bayer, H. Zacharias.** Appl. Phys. B, **79**, 457 (2004).
3. **W. Shi, Y. J. Ding.** Appl. Phys. Lett., **84**, 1635 (2004).
4. **T. Tanabe, K. Suto, J. Nishizawa, T. Sasaki.** J. Phys. D: Appl. Phys., **37**, 155 (2004).
5. **G.D. Hovhannisyán.** Optical Memory and Neural Networks (Information Optics), **22**, 135 (2013).
6. **А.А. Ахумян, Э.М. Лазиев, А.С. Никогосян, Д.Л. Оганесян, Г.Д. Оганесян.** Изв. НАН Армении, Физика, **45**, 28 (2010).
7. **А.А. Ахумян, Г.Д. Оганесян.** Изв. НАН Армении, Физика, **50**, 476 (2015).
8. **D.L. Hovhannisyán, A.A. Nakhoumian, R.M. Martirosyan, A.S. Nikoghosyan, E.M. Laziev, G.D. Hovhannisyán.** J. Modern Optics, **57**, 1228 (2010).
9. **А.А. Ахумян, Р.М. Мартиросян, Д.Л. Оганесян, Г.Д. Оганесян.** Физические основы приборостроения, **5**, 20 (2016).
10. **А.О. Варданян, Э.М. Лазиев, А.О. Меликян, Д.Л. Оганесян, В.О. Чалтыкян.** Изв. НАН Армении, Физика, **44**, 373 (2009).
11. **V.O. Chaltikyan, D.L. Hovhannisyán, E.M. Laziev, A.O. Melikyan, A.O. Vardanyan.** J. Modern Optics, **53**, 919 (2006).
12. **Д.Л. Оганесян, А.О. Варданян, Г.Д. Оганесян.** Изв. НАН Армении, Физика, **52**, 457 (2017).
13. **A. Cartella, T.F. Nova, A. Oriana, G. Cerulli, M. Forst, C. Manzoni.** Optics Letters, **42**, 663 (2017).
14. **С.А. Ахманов В.А. Выслоух, А.С. Чиркин.** Оптика фемтосекундных лазерных импульсов. Москва, Наука, 1988.
15. **J.-C. Diels, W. Rudolph.** Ultrashort Laser Pulse Phenomena. Oxford UK, Academic Press, 2006.
16. **R. Trebino.** Frequency-Resolved Optical Gating: The Measurement of Ultrashort Laser Pulses. New York, Springer Science+Business Media, 2002.
17. **А. Ярив, П. Юх.** Оптические волны в кристаллах. Москва, Мир, 1987.
18. **B. Alonso, J.R. Vazquez de Aldana, L. Roso.** Opt. Pura Apl., **42**, 61 (2009).
19. **D.N. Nikogosyan.** Nonlinear Optical Crystals: A Complete Survey. New York, Springer, 2005.
20. **M.S. Wartak.** Computational Photonics an Introduction with MATLAB. Cambridge University Press, 2013.
21. **K. Yang, S. Tripathy, J. Kumar.** Mol. Cryst. Liq. Cryst. B: Nonlinear Opt., **19**, 31(1998).
22. **Р.А. Авакян, А.О. Варданян, Д.Л. Оганесян.** Квантовая электроника, **21**, 75 (1994).
23. **А.О. Варданян, Д.Л. Оганесян.** ДАН АрмССР, **90**, 81 (1990).

ՄԻՋԻՆ ԻՆՖՐԱԿԱՐՄԻՐ ՏԻՐՈՒՅԹՈՒՄ ՍՈՒԲՊԻԿՈՎԱՅՐԿՅԱՆԱՅԻՆ
ԼԱԶԵՐԱՅԻՆ ԻՄՊՈՒԼՍԻ ՉԻՐՊԻ ՈՐՈՇՈՒՄԸ ՉՈՐՈՐԴ ՀԱՐՄՈՆԻԿԻ
ՈՉ ԿՈԼԼԻՆԵԱՐ ԳԵՆԵՐԱՅԻՆՄԱՅԻ ՄԻՋՈՑՈՎ

Դ.Լ. ՀՈՎՀԱՆՆԻՍՅԱՆ, Ա.Հ. ՎԱՐԴԱՆՅԱՆ, Գ.Դ. ՀՈՎՀԱՆՆԻՍՅԱՆ

Ներկայացված է 10 մկմ կենտրոնական ալիքի երկարությամբ միջին ինֆրակարմիր տիրույթում սուբպիկոսեկոնդայրկյանային լազերային իմպուլսի չիրպի որոշման նոր եղանակ, որը հիմնված է սահմանափակ սպեկտրով և հաճախային մոդուլյացիայով սուբպիկոսեկոնդայրկյանային իմպուլսների երկրորդ հարմոնիկների գեներացիայի և այդ հարմոնիկներին համապատասխան հաջորդական չորրորդ հարմոնիկների ոչ կոլինեար գեներացիայի հիման վրա: Աշխատանքում ներկայացված են՝ բացասական միաառանցք AgGaS_2 բյուրեղում օպտիկական առանցքի նկատմամբ $61^\circ 36'$ շեղում ունեցող ուղղությամբ հաճախային մոդուլյացիայով սուբպիկոսեկոնդայրկյանային ինֆրակարմիր իմպուլսի տարածման միջոցով գեներացված 5 մկմ կենտրոնական ալիքի երկարությամբ հաճախային մոդուլյացիայով երկրորդ հարմոնիկի ակնթաթթային հաճախության կախվածությունները ժամանակից: Աշխատանքում ներկայացված արդյունքները կարող են օգտագործվել ոչ գծային օպտիկական փուլային կորեկցիաների նախագծման համար, որը կարելի է կիրառել միջին ինֆրակարմիր տիրույթում սուբպիկոսեկոնդայրկյանային լազերային իմպուլսի փուլային և ժամանակային տեսքը որոշելու համար:

DETERMINATION OF THE SUBPICOSECOND LASER PULSE CHIRP
IN THE MIDDLE IR RANGE BASED ON THE FOURTH HARMONIC
NONCOLLINEAR GENERATION

D.L. HOVHANNISYAN, A.H. VARDANYAN, G.D. HOVHANNISYAN

A new method is proposed for determination of a subpicosecond laser pulse chirp in the mid-IR range at a central wavelength of 10 μm , based on the generation of second-harmonic pulses by both the spectrally-limited and frequency-modulated subpicosecond pulses and subsequent noncollinear generation of the fourth-harmonic radiation by the corresponding second-harmonic pulses. The time dependences of the instantaneous frequency of the frequency-modulated second-harmonic pulse at a central wavelength of 5 μm , generated in the field of a frequency-modulated subpicosecond IR pulse, propagating in a negative uniaxial AgGaS_2 crystal, along the direction of $61^\circ 36'$ relative to the optical axis are presented. The presented results can be used to design a nonlinear optical phase correlator for determining the phase and time profile of the subpicosecond laser pulse in the mid IR range.

УДК 621.373

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ФОРМИРОВАНИЯ СПЕКТРОНА: ФАЗОВЫЕ ОСОБЕННОСТИ

Н. КАРАПЕТЯН^{1,2}, Г. ТОНЕЯН^{1,2*}, А. КУТУЗЯН¹, М. СУКИАСЯН^{1,2},
В. АВЕТИСЯН¹, Д. ГУЛКАНЯН¹, К. АПРЕСЯН¹, Л. МУРАДЯН^{1,2}

¹Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

²Институт синхротронных исследований КЕНДЛ, Ереван, Армения

*e-mail: h.toneyan@gmail.com

(Поступила в редакцию 14 декабря 2017 г.)

Исследованы фазовые особенности спектра с точки зрения дисперсионного Фурье-преобразования. Проведенный численный анализ для разных исходных импульсов с разными начальными спектральными фазами показал, что при формировании спектра может иметь место перенос информации из спектральной области во временную не только для амплитуды, но и для фазы поля излучения.

1. Введение

Спектроном называют импульс, временная огибающая интенсивности которого повторяет спектральный профиль. Спектрон формируется при распространении импульса в достаточно длинной дисперсионной среде [1,2] по временной аналогии с дифракцией в дальней зоне (фраунгоферовская дифракция). Формирование спектра исследовано в рамках метода дисперсионного Фурье-преобразования (ДФП) [2–5] или Фурье-преобразования в реальном времени [6–8]. Метод ДФП использует дисперсионный элемент и однопиксельный фотодиод для спектральных измерений в режиме реального времени, устраняя ограничения быстродействия традиционных спектрометров [8]. Этот метод имеет множество применений, таких как спектроскопия в реальном времени, быстрая оптическая визуализация, лазерное сканирование и т. п. Хотя процесс формирования спектра хорошо известен, фазовые особенности спектра подробно не изучены. Исследования фазовых особенностей спектра интересны, в частности, для определения спектральной фазы и последующей полной характеристики фемтосекундных импульсов. Информация о спектральной фазе вместе со спектральной амплитудой (спектром) позволяют восстановить комплексное поле излучения, т. е. временную интенсивность и фазу, методами спектральной

интерферометрии [9–12] и интерферометрии спектрального сдвига [9, 13].

Настоящая работа позволяет в качестве альтернативы к технически сложным методам [9–13] предложить определение фазы спектра на основе генерации суммарной частоты [14]. Целью настоящей работы является исследование фазовых особенностей спектра, в частности, поиск условий, при которых временная фаза спектра повторяет спектральную фазу.

2. Численные исследования

Комплексная медленно меняющаяся амплитуда импульса, удлиненного в «дальней зоне дисперсии» ($\zeta = z / L_D \gg 1$), математически описывается формулой

$$\Psi(\tau, \zeta) \approx \frac{1}{(i2\pi\zeta)^{1/2}} \exp\left(-\frac{i\tau^2}{2\zeta}\right) \tilde{\Psi}(\Omega, 0) \Big|_{\Omega=\tau/\zeta}, \quad (1)$$

где Ψ – медленно меняющаяся нормированная комплексная амплитуда и $\tilde{\Psi}$ – ее Фурье-образ, $\tau = (t - z / v_g) / \Delta t_0$ и Ω – безразмерное бегущее время и частота, соответственно, v_g – групповая скорость, $L_D = \Delta\tau^2 / k_2$ – характерная дисперсионная длина, $\Delta\tau_0$ – длительность начального спектрально-ограниченного импульса, z – длина среды и $\zeta = z / L_D$ ее нормированное значение [1, 2]. Асимптотическое уравнение (1) описывает временную амплитуду и фазу спектра:

$$|\Psi(\tau, \zeta)| \propto |\tilde{\Psi}(\Omega, 0)|_{\Omega=\tau/\zeta}, \quad (2)$$

$$\phi(\tau, \zeta) \approx \left[\varphi(\Omega, 0) - \Omega^2 \zeta / 2 \right]_{\Omega=\tau/\zeta}. \quad (3)$$

Таким образом, согласно уравнениям (2) и (3), временная огибающая интенсивности повторяет спектральную, а временная фаза – начальную спектральную фазу с точностью до параболической фазы, наведенной дисперсией: $\Omega^2 \zeta / 2 = \tau^2 (2\zeta)^{-1}$. На практике в качестве дисперсионной среды используются дисперсионные линии задержки на основе пары дисперсионных призм или дифракционных решеток [1], или же волоконные световоды при малых интенсивностях излучения, когда нелинейное самовоздействие импульса пренебрежимо мало.

Нами проведены численные исследования процесса формирования спектра для разных начальных импульсов. Численно решалось дисперсионное уравнение во втором приближении теории дисперсии (параболическое уравнение) с применением быстрого Фурье-преобразования [1]. Были сформированы двухпиковые и трехпиковые начальные импульсы посредством наложения гауссовских импульсов с разными амплитудами и временными задержками друг относительно друга. Результаты численного анализа соответствуют теоретическим предсказаниям: при $\zeta \gg 1$ временная огибающая интенсивности воспроизводит

спектральное распределение в соответствии с уравнением (2); условие формирования спектра, при этом, зависит от начальной формы спектра. Так, если из гауссовского и секанс-гиперболического импульсов спектры формируются на длинах дисперсионной среды $\zeta \sim 10$ (удлиняясь в ~ 10 раз), то из супер-гауссовского импульса 4-го порядка спектр формируется только на длинах $\zeta \sim 20$. Усложнение формы начального импульса сопровождается сужением энергонесущей части спектра и, таким образом, удлинением дисперсионной среды, требуемым для формирования спектра. Для двухпикового импульса с соотношением пиков 1:2 и временной задержкой между ними, равной двойной длительности составляющих гауссовских импульсов, спектр формируется на длине дисперсионной среды $\zeta = 60$ (рис.1).

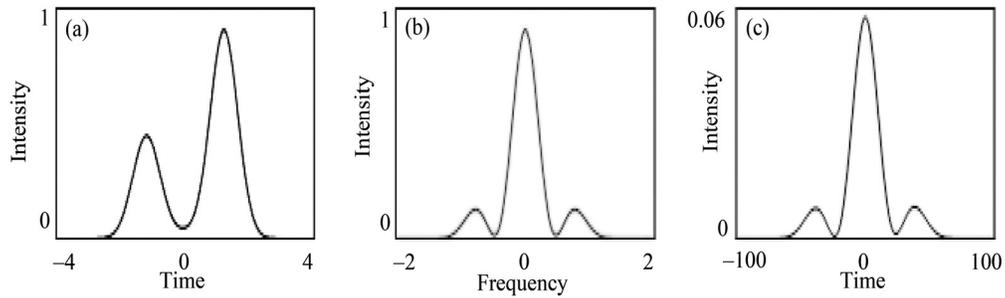


Рис.1. Спектр, сформированный из двухпикового импульса: (а) начальный импульс, (б) спектр и (с) спектр, сформированный на длине дисперсионной среды $\zeta = 60$.

Как показывает рис.2, для трехпикового импульса, состоящего из трех гауссовских импульсов с соотношением между пиками 1:2:4 и временной задержкой между ними, равной двойной длительности составляющих гауссовских импульсов, формирование спектра происходит на длине $\zeta = 100$.

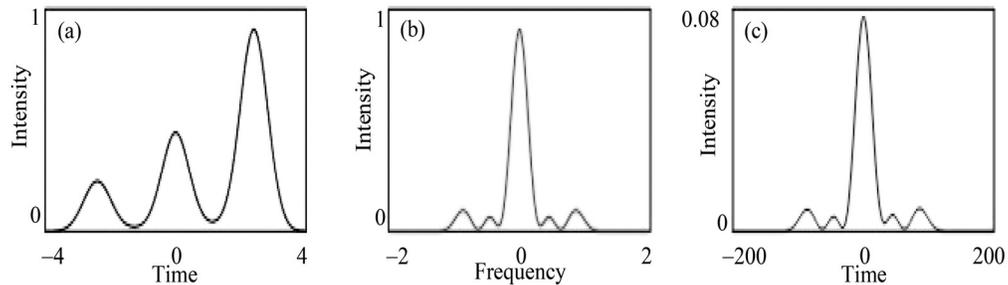


Рис.2. Спектр, сформированный из трехпикового импульса: (а) начальный импульс, (б) спектр и (с) спектр, сформированный на длине дисперсионной среды $\zeta = 100$.

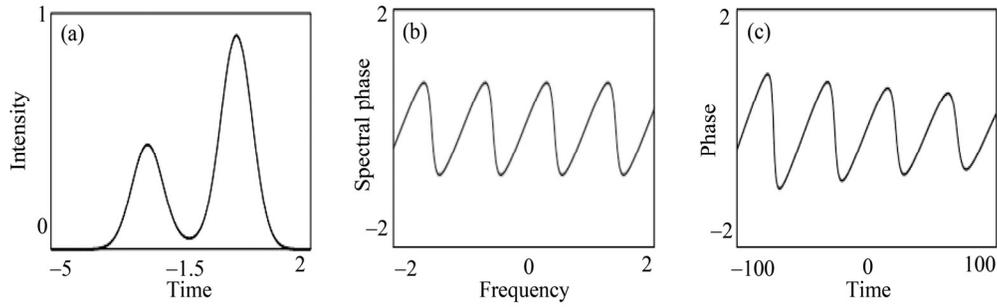


Рис.3. Фаза спектра для двухпикового импульса: (а) начальный импульс, (б) спектральная фаза и (с) временная фаза спектра, сформированного на длине дисперсионной среды $\zeta = 60$.

Далее, были численно исследованы условия, необходимые для воспроизведения спектральной фазы фазой спектра. Для наглядности сравнения спектральных фаз начальных импульсов с временными фазами спектров параболическая компонента фазы (уравнение (3)) удалена. На рис.3 и 4 показаны спектральные фазы двухпиковых и трехпиковых импульсов в сравнении с временными фазами спектров, сформированных из них на длинах дисперсионной среды $\zeta = 60$ и $\zeta = 100$. Результаты численного анализа показывают, что при формировании спектра не только импульс повторяет форму начального спектра, но также временная фаза (рис. 3с и рис.4с) повторяет форму начальной спектральной фазы (рис. 3б и рис.4б).

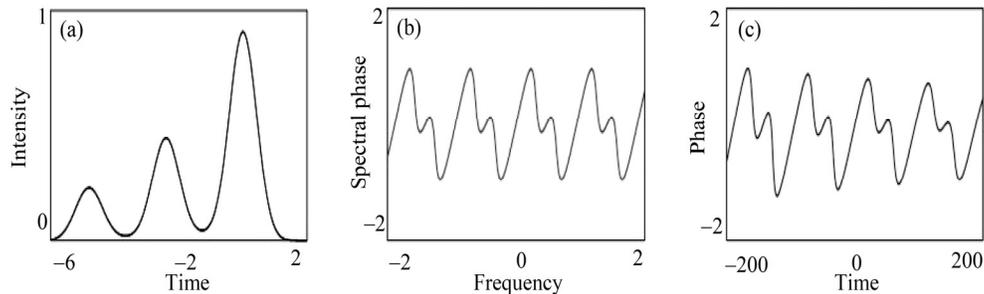


Рис.4. Фаза спектра для трехпикового импульса: (а) начальный импульс, (б) спектральная фаза и (с) временная фаза спектра, сформированного на длине дисперсионной среды $\zeta = 100$.

Были исследованы также особенности формирования спектра из импульсов с синусоидальной амплитудной модуляцией (АМ) и фазовой модуляцией (ФМ) спектра. Мы применяли синусоидальные АМ и ФМ к спектру гауссовского импульса по отдельности. АМ спектра с амплитудой σ_{amp} и периодом T задавалась уравнением

$$|\tilde{\Psi}(\Omega, 0)| = |\tilde{\Psi}_0(\Omega)| [1 + \sigma_{\text{amp}} \cos(T\Omega)],$$

а ФМ с амплитудой σ_{ph} и периодом T задавалась уравнением

$$\tilde{\Psi}(\Omega, 0) = \tilde{\Psi}_0(\Omega) \exp[i\sigma_{ph} \cos(T\Omega)].$$

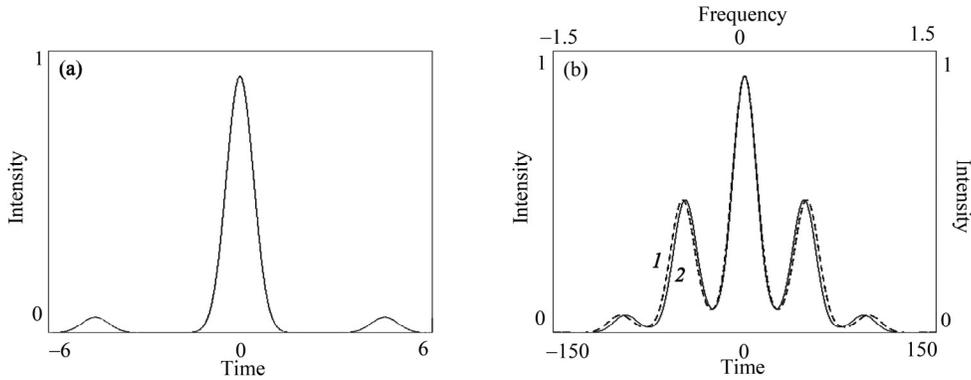


Рис.5. Формирование спектра из гауссовского импульса с синусоидальной АМ спектра: (а) начальный импульс, (б) спектр (1) на длине $\zeta_{amp} = 250$ и спектр (2).

На рис.5 представлен спектр гауссовского импульса с АМ, в сравнении с

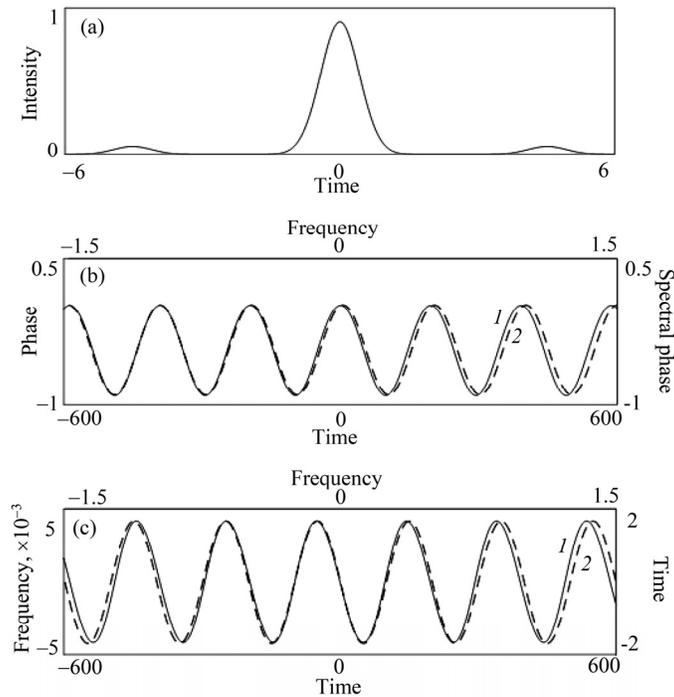


Рис.6. Формирование спектра из гауссовского импульса с синусоидальной ФМ спектра: (а) начальный импульс, (б) временная фаза спектра, сформированного на $\zeta_{ph} = 400$ (1) и начальная спектральная фаза (2), (с) чирп спектра (1) и производная исходной спектральной фазы (2).

сформированным из него спектром. Начальный импульс показан на рис.5а. Наименьшее значение ζ , требуемое для повторения амплитуды спектра, обозначено как ζ_{amp} . Кривая 1 на рис.5b относятся к спектру, сформированному из начального импульса с АМ ($\sigma_{\text{amp}} = 0.5$ и $T = 4\pi/\Delta\Omega$, $\Delta\Omega$ – ширина спектра), на длине $\zeta_{\text{amp}} = 250$. Кривая 2 на рис.5b отображает спектр с АМ.

Рис.6 иллюстрирует формирование спектра из гауссовского импульса с синусоидальной ФМ спектра. На рис.6b показана синусоидальная спектральная фаза (кривая 2) и временная фаза спектра (кривая 1), а также их производные (рис.6с). Наименьшее значение ζ , требуемое для повторения фазы спектра, обозначено через ζ_{ph} . Для сравнения ζ_{ph} с ζ_{amp} амплитуда и частота ФМ и АМ выбраны равными: $\sigma_{\text{ph}} = \sigma_{\text{amp}} = 0.5$ и $T = 4\pi/\Delta\Omega$. Согласно численным исследованиям, $\zeta_{\text{ph}} = 400$ для данных σ_{ph} и T . Таким образом, для повторения фаз требуются большие длины дисперсионной среды: $\zeta_{\text{ph}} > \zeta_{\text{amp}}$.

На рис.7а представлена зависимость ζ_{amp} от параметра σ_{amp} , а на рис.7b приведена зависимость ζ_{ph} от σ_{ph} . Как видно из рисунков, обе зависимости параболические и значения ζ_{ph} превосходят ζ_{amp} .

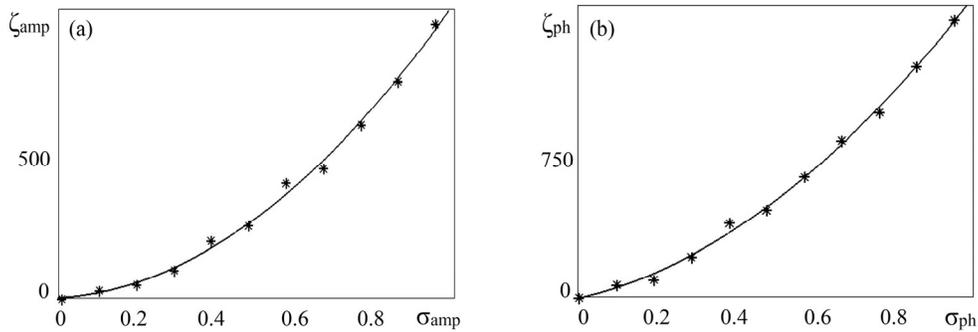


Рис.7. Зависимости минимальной длины дисперсионной среды ζ , необходимой для частотно-временного отображения, от (а) амплитуды спектральной модуляции σ_{amp} и (б) амплитуды фазовой модуляции σ_{ph} .

Было исследовано также формирование спектра из двухпикового импульса с фазовой самомодуляцией (ФСМ) при отношении пиков 1:10 и временной задержке $2.5\Delta t_0$. Численное моделирование процесса самовоздействия такого импульса в световоде проводилось на основе методики решения нелинейного уравнения Шрёдингера со следующими параметрами счета: $\zeta = 0.5$ и $R = 8$, где $R = L_D / L_{\text{NL}}$ – параметр нелинейности и L_{NL} – характерная длина нелинейного самовоздействия [1]. Форма импульса на выходе из световода изображена на рис.8а. При таких условиях ($\zeta = 0.5$ и $R = 8$) спектр расширяется в два раза. Световод выбран коротким во избежание дисперсионного расплывания импульса, а длина последующей дисперсионной среды ζ выбрана достаточно большой в соответствии с требованиями дальней зоны дисперсии. На рис.8b

изображен спектр (кривая 2), сформированный из ФСМ-импульса в дисперсионной среде длиной $\zeta = 70$, в сравнении со спектром (кривая 1). Фаза и чирп спектра (рис.8с,d кривые 1) сравниваются с начальной спектральной фазой и её производной (рис.8с,d кривые 2). Фаза содержит дополнительную параболическую составляющую из-за «побочной» дисперсии в световоде. Результаты численного эксперимента свидетельствуют о частотно-временном отображении спектра не только для амплитуды, но и для фазы импульса.

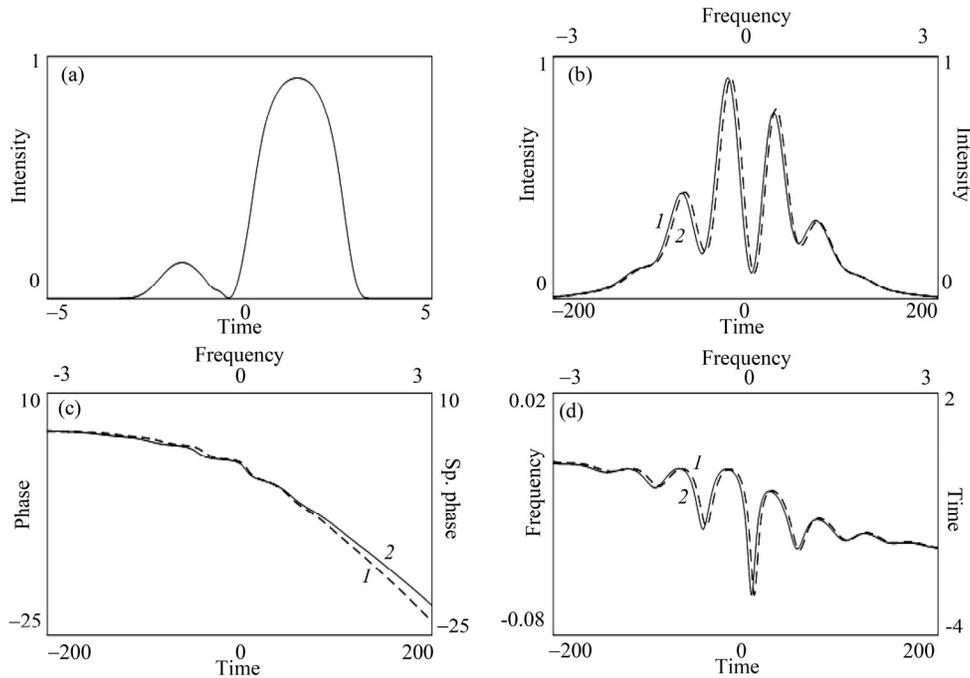


Рис.8. Формирование спектра из импульсов с ФСМ: (а) начальный импульс, (б) спектр (1) и спектр (2), сформированный на длине дисперсионной среды $\zeta = 70$, (с) начальная спектральная фаза (1) и временная фаза спектра (2), (д) производная начальной спектральной фазы (1) и чирп спектра (2).

3. Заключение

Исследовано формирование спектра из различных начальных импульсов с точки зрения фазовых особенностей процесса. Исследуя двухпиковые и трехпиковые импульсы, а также импульсы с начальной синусоидальной спектральной фазой и начальной ФСМ, мы показали, что при определенных условиях временная фаза спектра повторяет начальную фазу спектра. Для импульсов с синусоидальной АМ или ФМ спектров длина дисперсионной среды, необходимая для повторения фаз, больше, чем требуется для формирования спектра.

ЛИТЕРАТУРА

1. С.А. Ахманов, В.А. Выслоух, А.С. Чиркин. Оптика фемтосекундных лазерных импульсов. Москва, Наука, 1988.
2. L. Mouradian, A. Barthelemy. Shaping Light in Nonlinear Optical Fibers, Chapter 6. New York, Wiley, 2017.
3. P.V. Kelkar, F. Coppinger, A.S. Bhushan, B. Jalali. Electron. Lett., **35**, 1661 (1999).
4. K. Goda, D.R. Solli, K.K. Tsia, B. Jalali. Phys. Rev. A, **80**, 043821 (2009).
5. D.R. Solli, J. Chou, B. Jalali. Nature Photon., **2**, 48 (2008).
6. J. Anaza, L.R. Chen, M.A. Muriel, P.W.E. Smith. Electron. Lett., **35**, 2223 (1999).
7. J. Azana, M.A. Muriel. IEEE J. Quant. Electron., **36**, 517 (2000).
8. K. Goda, B. Jalali. Nature Photon., **7**, 102 (2013).
9. C. Iaconis, I.A. Walmsey. Opt. Lett., **23**, 792 (1998).
10. V. Messenger, F. Louradour, C. Froehly, A. Barthelemy. Opt. Lett., **28**, 743 (2003).
11. J. Piasecki, B. Colombeau, M. Vampouille, C. Froehly, J.A. Arnaud. Appl. Opt., **19**, 3749 (1980).
12. A. Zeytunyan, A. Muradyan, G. Yesayan, L. Mouradian, F. Louradour, A. Barthélémy. Opt. Commun., **284**, 3742 (2011).
13. A. Mahjoubfar, D.V. Churkin, S. Barland, N. Broderick, S.K. Turitsyn, B. Jalali. Nature Photon., **11**, 341 (2017).
14. A.S. Zeytunyan, A. Muradyan, G.L. Yesayan, L.Kh. Mouradian. Laser Physics, **20**, 1729 (2010).

ՄՊԵԿՏՐՈՆԻ ԶԵՎԱԿՈՐՄԱՆ ՊՐՈՑԵՍԻ ԹՎԱՅԻՆ ՀԵՏԱԶՈՏՈՒԹՅՈՒՆ.
ՓՈՒԼԱՅԻՆ ԱՌԱՆՁՆԱՀԱՏԿՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԸ

Ն.ԿԱՐԱՊԵՏՅԱՆ, Հ.ՏՈՆԵՅԱՆ, Ա.ԿՈՒՏՈՒԶՅԱՆ, Մ.ՍՈՒՔԻԱՍՅԱՆ,
Վ.ԱՎԵՏԻՍՅԱՆ, Դ.ԳՈՒԼԳԱՆՅԱՆ, Կ.ԱՊՐԵՍՅԱՆ, Լ.ՄՈՒՐԱԴՅԱՆ

Դիսպերսիոն ֆուրյե ձևափոխության տեսանկյունից ուսումնասիրվել են սպեկտրոնի փուլային հասկոությունները: Մեր թվային հետազոտությունները, կատարված տարբեր սկզբնական սպեկտրալ փուլերով իմպուլսների համար, ցույց են տվել, որ սպեկտրոնի ձևավորման ժամանակ կարող է տեղի ունենալ ինֆորմացիայի տեղափոխում սպեկտրալ տիրույթից դեպի ժամանակային՝ ոչ միայն ամպլիտուդի, այլ նաև ճառագայթման դաշտի փուլի համար:

NUMERICAL STUDY OF SPECTRON SHAPING PROCESS: PHASE PECULIARITIES

N. KARAPETYAN, H. TONEYAN, A. KUTUZYAN, M. SUKIASYAN,
V. AVETISYAN, D. GULQANYAN, K. APRESYAN, L. MOURADIAN

The phase peculiarities of spectron in view of the dispersive Fourier transformation are studied. The numerical study for different initial pulses with various initial spectral phases has shown that along with the shaping of the spectron, not only the amplitude information can be transferred from the frequency domain to the time domain, but also the phase information.

УДК 53.083.62; 621.384.6

ВИБРИРУЮЩАЯ СТРУНА ДЛЯ ИЗМЕРЕНИЯ ПРОФИЛЯ ТОНКИХ ПУЧКОВ В УСКОРИТЕЛЯХ: ПРЕДВАРИТЕЛЬНЫЕ ТЕСТЫ НА ЛАЗЕРНОМ ПУЧКЕ

Э.Г. ЛАЗАРЕВА

Национальная научная лаборатория им. А.И. Алиханяна, Ереван, Армения

e-mail: ella.lazareva@yerphi.am

(Поступила в редакцию 7 февраля 2018 г.)

Изучена возможность использования вибрирующей струны в качестве мишени в методе сканирования поперечных профилей тонких пучков в ускорителях. В случае, когда поперечные размеры пучка сравнимы с амплитудой колебаний струны, вибрирующая струна может использоваться для быстрого измерения поперечного профиля пучка без перемещения датчика. Процедура сканирования заменяется использованием движения струны в процессе ее механических колебаний. Метод опробован на сфокусированном пучке полупроводникового лазера с размером пятна в фокусе ~ 0.1 мм. Восстановление поперечного профиля производится на основе измерений фотонов, отраженных от вибрирующей струны датчика, с помощью быстрых фотодиодов.

1. Введение

Датчики на основе вибрирующей струны широко используются во многих областях физики. Свойство изменения частоты колебаний струны в зависимости от ее натяжения положено в основу ряда датчиков, измеряющих давление газов, напряжения конструкций, вязкости газов, прецизионной термометрии [1].

Для измерения поперечных профилей пучков широко используются струнные датчики, в которых производится измерение потока вторичных частиц или фотонов, образующихся в процессе рассеяния пучка на материале струны. Такой метод измерения требует наличия движущейся мишени в виде струны и системы измерения вторичных частиц/фотонов. Кроме того, в поле зрения системы измерения помимо потока вторичных частиц или фотонов, образующихся в процессе рассеяния пучка на струне, попадает большое количество фоновых сигналов, искажающих результаты измерений и уменьшающих их точность.

Разработанные в Ереванском физическом институте датчики вибрирующей струны (ДВС) обладают беспрецедентной точностью и большим динамическим диапазоном измерений (почти шесть порядков) [2–4]. В их числе и

многострунные датчики, позволяющие оценивать профиль пучка по нескольким точкам без применения сложных сканирующих механизмов [5, 6]. Разработаны специальные датчики для измерения нейтронных пучков, в которых вибрирующая струна покрывается слоем гадолиния [7]. Создана модификация датчика – сканера, в котором в качестве мишени предложено использовать вибрирующую струну и синхронно с измерениями частоты колебаний струны измерять образующиеся при взаимодействии пучка со струной вторичные частицы/фотоны. Тестовые эксперименты такой установки были проведены на фотонных пучках [8].

Задача измерения и управления размерами малого пучка ($\ll 1$ мм) актуальна в линейных ускорителях, в том числе основных линейных ускорителей линейных коллайдеров и линиях передач [9]. Для обеспечения наибольшей светимости необходимо добиться максимальной плотности пучков в месте их встречи. Поэтому одной из главных задач при проектировании коллайдеров является фокусировка пучков в месте их встречи в пятно порядка нескольких микрометров в диаметре [10]. С учетом достижений в разработке новых методов фокусировки пучков (мульти-поворотные ахроматические ячейки магнитной структуры, поворотные магниты с продольным градиентом [11]) появилась возможность проектирования источников излучения четвертого поколения синхротронного типа, конкурирующих с проектами лазеров на свободных электронах [12]. Предполагается оперирование пучками с размерами в несколько микрометров. Высокое качество электронных пучков, в том числе малые поперечные размеры пучков (< 100 мкм), требуются для дифракционных экспериментов с временным разрешением. В качестве примера такой установки приведем REGAE (The Relativistic Electron Gun for Atomic Exploration) [13, 14]. Получение, а следовательно, и измерение пучков с малыми эмиттансами и малыми поперечными размерами с помощью диагностических средств с большим динамическим диапазоном весьма актуальны.

Целью настоящей работы является исследование процесса измерения профиля тонких пучков на примере сфокусированного лазерного пучка. Предполагается, что для профилирования пучков заряженных частиц будут измеряться фотоны или другие вторичные частицы, возникающие при рассеянии пучка на струне.

2. Методика эксперимента

В настоящей работе для измерения профиля лазерного пучка предложено использовать непрерывное измерение отраженных от вибрирующей струны фотонов с помощью быстрого фотодиода. В случае, когда поперечные размеры пучка сравнимы с амплитудой колебаний струны, метод может использоваться

для быстрого измерения поперечного профиля пучка без движения самого датчика. Сканирование осуществляется движением струны в процессе ее колебаний. Предлагаемый метод может быть использован для измерения профилей тонких пучков заряженных частиц.

Принцип действия ДВС основан на измерении изменения частоты вибрирующей струны с закрепленными концами при взаимодействии с пучком (подробное описание см. в работах [8, 15]). Колебания струны генерируются на первой гармонике. Средняя область струны при этом остается свободной для сканирования пучка. В правильно собранном ДВС колебания струны происходят в одной плоскости, ортогональной магнитному полю. В электронной схеме предусмотрен блок прецизионной стабилизации амплитуды колебаний струны. Стабилизация механических колебаний особенно важна в нашем случае, когда струна используется как естественный сканер. В качестве источника информации о локальной плотности пучка используются возникающие от взаимодействия пучка со струной фотоны, измеряемые быстрым фотодиодом. Скорость сканирования определяется амплитудой и частотой колебаний струны и может достигать величин порядка нескольких м/с. Частота поперечных колебаний струны F определяется зависимостью [7]

$$F = \frac{1}{2L} \sqrt{\frac{\sigma}{\rho}}, \quad (1)$$

где L – длина струны, σ – механическое напряжение в струне и ρ – плотность материала струны.

Следует отметить, что из-за неидеальности магнитного поля датчика реальные колебания струны происходят не в одной плоскости, причем, собственные колебания частоты в направлении, поперечном к данной плоскости, не совпадают. Фактически струна совершает сложные колебания, определяющиеся наложением двух частот, соответствующих двум поперечным степеням свободы колебаний струны. Поэтому измерение движения вибрирующей струны «на лету» полезно для изучения ее реальной траектории, в частности, для проверки качества ДВС, в котором выходным сигналом струны является изменение ее частоты. Точность таких датчиков достигает значений 0.001 Гц и соответствует изменению температуры струны < 1 мК.

На рис. 1 представлена схема эксперимента. ДВС расположен таким образом, чтобы сфокусированный короткофокусной линзой лазерный пучок попадал в центр струны. В эксперименте использовался непрерывный полупроводниковый лазер (Laser Pointer JD-850) с длиной волны 532 нм и мощностью 100 мВт.

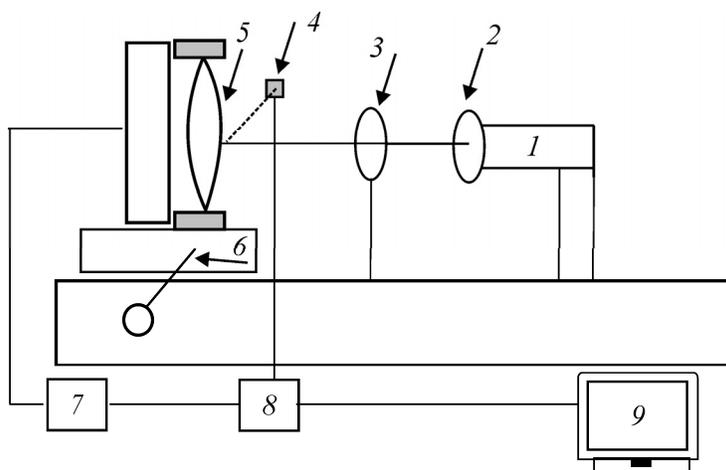


Рис.1. Схема эксперимента: 1 – лазер, 2 – коллиматор, 3 – короткофокусная линза, 4 – быстрый фотодиод, 5 – вибрирующая струна, 6 – поворотный столик с микровинтом, 7 – система генерации колебаний струны, 8 – система измерения фотонов, попадающих на фотодиод и 9 – компьютер.

Лазер прикрыт коллиматором для уменьшения мощности. ДВС и быстрый фотодиод, измеряющий отраженные от струны фотоны, расположены на поворотном столике с микровинтом. Вибрирующая струна датчика ортогональна плоскости столика. Вращение поворотного столика приводило к перемещению вибрирующей струны в пятне сфокусированного лазерного пучка и в результате менялся угол между направлением фотодиода и оптической осью системы.

Для измерения отраженного от струны лазерного излучения использовалась электронная схема, разработанная для резонансного метода с использованием вибрирующей струны в качестве мишени (подробное описание см. в работах [4, 8]). Процесс измерения синхронизируется с частотой колебаний струны или с внутренним генератором частоты измерительной системы и запускается положительным или отрицательным фронтами частотного сигнала. В случае использования сигнала с вибрирующей струны форма сигнала трансформировалась из синусоидальной в прямоугольную специальным конвертором. После старта процесса производилось N_m измерений (пачка). Число N_m могло задаваться в пределах от 1 до 254 (короткие пачки) либо 255×32 (длинная пачка). После окончания данной пачки измерений (короткой или длинной) процесс повторяется с новым фронтом частотного сигнала. Количество пачек задается отдельным параметром и определяется емкостью памяти измерительного канала. Время одного измерения фотодиодом составляло 12.45 мкс.

3. Результаты и обсуждение

3.1. Предварительные эксперименты

До основного эксперимента, целью которого является измерение профиля сфокусированного лазерного пучка при помощи ДВС, был осуществлен ряд экспериментов для выявления эффектов, которые могут дать вклад в процесс измерения профиля пучка.

Как отмечалось, вибрирующую струну предполагается использовать в качестве естественного сканера. Важно при этом, чтобы колебания струны были по возможности стабильными, в том числе в случае падения на струну лазерного излучения. С этой целью предварительно был проведен эксперимент по проверке стабильности частоты используемого в эксперименте ДВС, облучаемого сфокусированным лазерным излучением с различной мощностью.

На рис.2 представлена зависимость частоты ДВС от выходной мощности лазера, регулируемой изменением напряжения блока питания лазера в диапазоне 2.53–2.68 В.

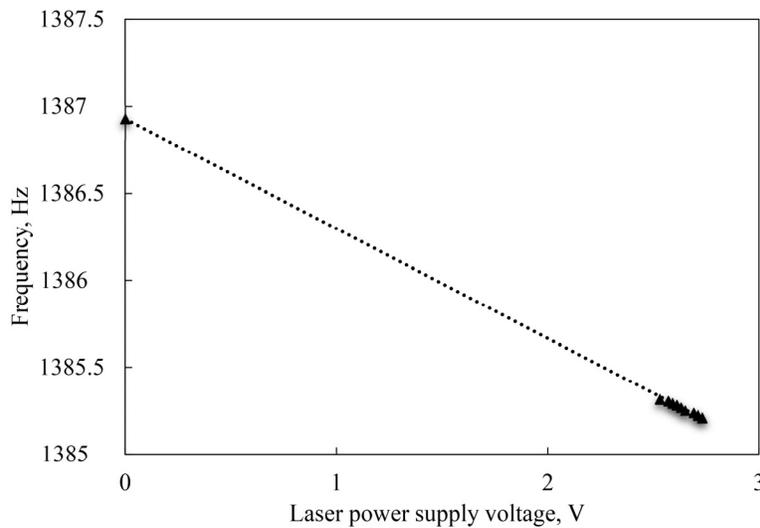


Рис.2. Зависимость частоты ДВС от напряжения блока питания лазера. Эксперимент и линейная интерполяция (пунктирная линия).

При попадании на струну фотонов струна нагревается, что приводит к уменьшению ее натяжения и падению частоты. Эксперимент показал, что стабильность частоты оставалась на уровне 0.01 Гц как без облучения струны лазером, так и при облучении струны лазером с различной мощностью. Формула (1) позволяет оценить, что 0.1 мВт мощности лазера, преобразованной в нагрев струны, приводит к падению частоты на 1.5 Гц [15].

Измерения по проверке сигнала измерительной системы проводились моделированием сигнала от фотодиода эквивалентной сборкой делителя из резисторов при двух вариантах питания измерительной системы – сетевом и аккумуляторном. Результаты измерения показали наличие в сигнале шумов с частотой 50 Гц при питании схемы от сети, а также по каналу передачи информации.

Проводились также измерения стабильного источника излучения (солнечного освещения) фотодиодом. При этом эффект шумов с частотой 50 Гц усиливался из-за дополнительных проводов от электронной платы к фотодиоду.

Следующий предварительный эксперимент был проведен с целью проверки стабильности лазера путем измерения фотонов, отраженных от невибрирующей струны. Результат эксперимента, который показывает нестабильность лазера, представлен на рис.3. В сигнале на фоне шумов с частотой 50 Гц обнаружилось колебание измерений лазерного пучка с частотой ~ 480 Гц.

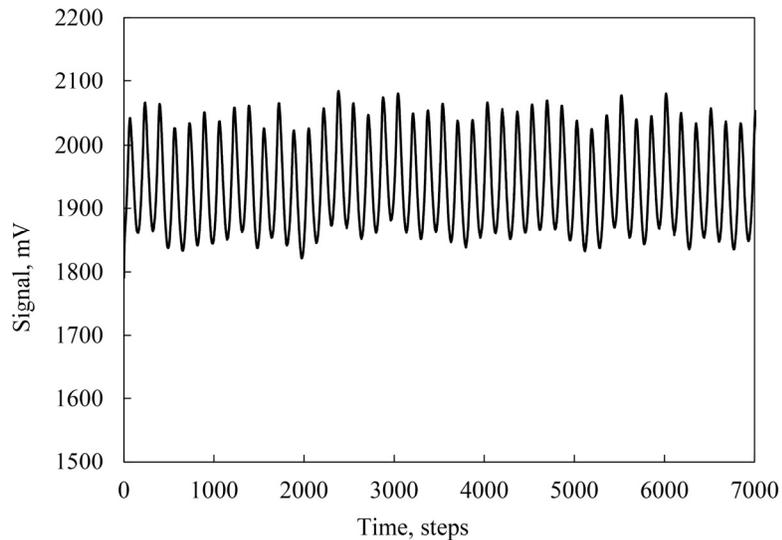


Рис.3. Зависимость интенсивности лазерного пучка от времени.

Важную роль в предлагаемом методе измерения играет быстродействие измерительной системы. Для определения этого параметра был задействован алгоритм измерения коротких пачек сигнала ($N_m = 254$). Постоянный сигнал с фотодиода моделировался эквивалентной сборкой делителя из резисторов и аккумуляторным питанием измерительной системы. На рис.4 представлена зависимость сигнала измерительной системы от времени в режиме коротких пачек. Из рисунка видно, что каждая пачка измерений, после паузы в несколько сот микросекунд, начинается с нарастания сигнала, характеризующего быстродействие

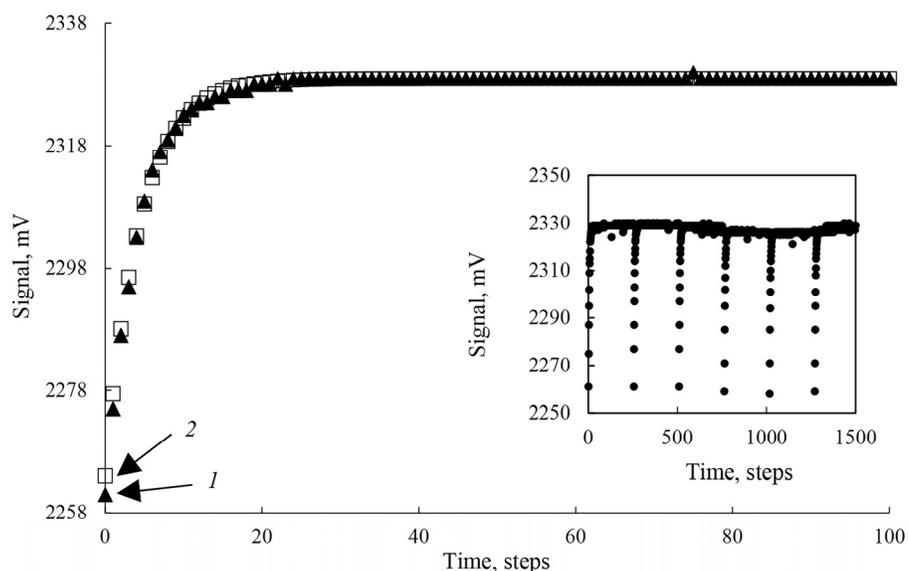


Рис.4. Зависимость сигнала измерительной системы от времени: 1 – эксперимент и 2 – интерполяция. На вставке представлен общий вид сигнала, содержащий несколько пачек измерений.

измерительной системы. Интерполяция измерений производилась функцией вида

$$g(t) = g_0(1 - \exp(-(t - t_0) / \tau)),$$

где $g_0 = 2329$ мВ – значение функции при выходе на установившийся режим и $t_0 = -15.5$ – постоянная времени измерительной системы в безразмерных единицах номеров измерений. Параметр $\tau = 4.33$, что соответствует выходу измерительной системы на 60% устанавливающегося значения за 55 мкс.

3.2. Основной эксперимент

На рис.5 показаны зависимости сигналов с фотодиода для двух положений ДВС – в позициях 8 и 32. Номера позиций струны отсчитаны от условного нулевого значения, соответствующего положению струны за пределами пучка. По первому каналу измерительной системы измерялись показания фотодиода, по второму каналу – усиленный сигнал частоты колебаний вибрирующей струны. Кроме того, проводились измерения отраженных фотонов от неподвижной струны в том же положении ДВС. Как видно из рис.5а частота сигнала с фотодиода совпадает с частотой колебаний струны. На положительном фронте сигнала видно появление характерного плеча, указывающего на попадание центра измеряемого пучка в область заметания вибрирующей струны. Как будет показано

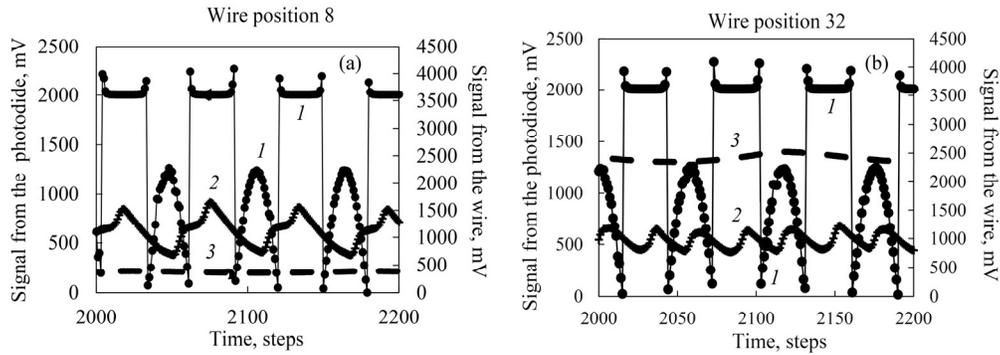


Рис.5. Зависимости от времени электрического сигнала с вибрирующей струны (1), с фотодиода от вибрирующей (2) и невибрирующей (3) струны в двух положениях ДВС: в (а) 8 и (б) 32 позициях.

ниже, образование плеча только на одном склоне сигнала связано с ограниченным быстродействием системы измерений. При приближении центра измеряемого пучка к центру области заметания вибрирующей струны наблюдается характерное удвоение частоты. Окончательная симметризация пиков двойной частоты (рис.5б) показывает, что центр измеряемого пучка практически совпадает с равновесным положением вибрирующей струны (подробнее см. ниже).

3.3. Обработка экспериментальных результатов и восстановление профиля

Алгоритм восстановления профиля по экспериментальным результатам измерения отраженных от вибрирующей струны фотонов должен учитывать ограниченное быстродействие измерительной схемы. Такой алгоритм описывается на примере модельного профиля пучка, сосредоточенного на отрезке $[-2, 2]$ по оси x :

$$N(x) = \begin{cases} 100 \times (x + 2)(x_p + 2), & -2 < x < x_p \\ 100 \times (2 - x) / (2 - x_p), & x_p < x < 2, \end{cases} \quad (2)$$

где параметр x_p определяет положение максимума распределения фотонов в пучке. Асимметричность модельного профиля введена как для описания возможной асимметрии профиля измеряемого пучка, так и для описания искажения профиля в процессе измерения, обусловленного зависимостью количества отраженных фотонов от геометрии расположения фотодиода по отношению к пучку в процессе колебания струны. Все величины здесь и далее для простоты приняты безразмерными.

Движение центра вибрирующей струны описывается синусоидальной функцией с амплитудой 0.5:

$$x(t) = x_c - 0.5 \times \cos(2\pi t / P), \quad (3)$$

где x_c – положение центра вибрирующей струны и P – период колебаний струны.

Количество фотонов, падающих на струну в определенном положении и достигающих фотодиода, описывается функцией

$$f(t) = N(x(t)). \quad (4)$$

Приняв, что измерительная схема является датчиком первого порядка [16] (по причине отсутствия в структуре свето- и фотодиодов колеблющихся частей), измеряемая величина $g(t)$ определяется из уравнения

$$\tau \frac{dg(t)}{dt} + g(t) = f(t), \quad (5)$$

где τ – характерный параметр отклика измерительной системы. Значения функции $g(t)$ являются экспериментальными результатами измерений. Отметим, что для периодического процесса $f(t)$ функция $g(t)$ через время $\sim \tau$ выходит на колебательный режим с той же частотой, но со сдвигом по фазе и искажением формы сигнала. Параметр τ называется постоянной времени датчика и является мерой инерционности измерительной системы [16].

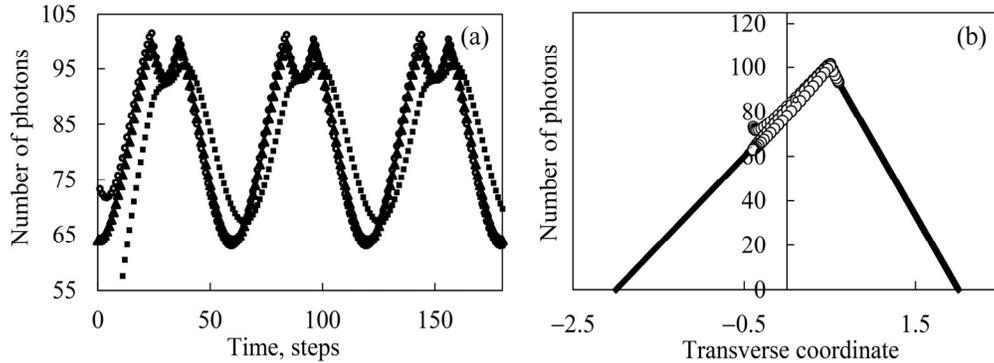


Рис.6. (а) Зависимость количества фотонов от времени: 1 – исходная функция процесса $f(t)$, 2 – отклик измерительной системы $g(t)$ и 3 – реконструированная по функции $g(t)$ функция процесса $f_{rec}(t)$. (б) Зависимость количества фотонов от координаты: 4 – модельный профиль и 5 – профиль, восстановленный по реконструированной функции процесса $f_{rec}(t)$ при положении центра вибрирующей струны $x_c = 0.1$.

Для восстановления измеряемого профиля следует по измерительной системе восстановить функцию процесса $f(t)$ и по ней, с учетом уравнения движения струны, восстановить искомый профиль. Описанный численный процесс моделировался следующими соотношениями:

$$g^{i+1} = g^i + (f^{i+1} - g^i) / \tau, \quad (6)$$

$$f_{\text{rec}}^{i+1} = g^{i+1} + \tau(g^{i+1} - g^i).$$

На рис.6а и 7а приведены результаты моделирования для параметров: $x_p = 100$, $x_c = 0.1$ и 0.5 , $\tau = 7$, где $g(t)$ – отклик измерительной системы, $f(t)$ – исходная функция процесса и $f_{\text{rec}}(t)$ – функция процесса, реконструированная по функции $g(t)$. Результат восстановления модельного профиля по реконструированной функции процесса $f_{\text{rec}}(t)$ представлен на рис.6б и 7б. Как видно из рис.6а и 7а функция $g(t)$ выходит на периодический режим с некоторым запаздыванием (порядка одного периода колебаний струны). Характерный «хвостик» (рис.6б и 7б), не соприкасающийся с модельным профилем, определяется именно этим начальным процессом измерений.

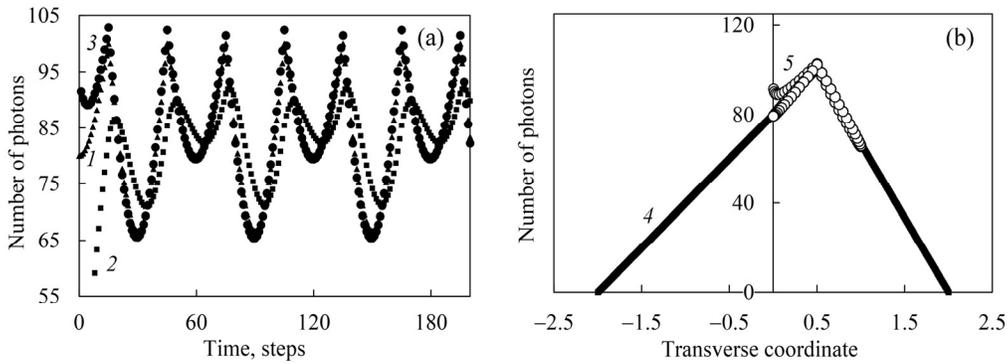


Рис.7. (а) Зависимость количества фотонов от времени: 1 – исходная функция процесса $f(t)$, 2 – отклик измерительной системы $g(t)$ и 3 – реконструированная по функции $g(t)$ функция процесса $f_{\text{rec}}(t)$. (б) Зависимость количества фотонов от координаты: 4 – модельный профиль и 5 – профиль, восстановленный по реконструированной функции процесса $f_{\text{rec}}(t)$ при положении центра вибрирующей струны $x_c = 0.5$.

В качестве примера восстановления профиля по измеренным данным фотодиода приведем эту процедуру для позиции ДВС, равной 32 (рис.5б), когда центр сфокусированного пятна лазерного излучения попадает в центр пучности колебаний струны. В сигнале фотодиода при этом появляется двойная частота колебаний вибрирующей струны, указывающая на то, что при каждом полупериоде колебаний происходит сканирование пучка, проходящее через его центр.

На рис.8а представлены экспериментальные данные с фотодиода, положение центра вибрирующей струны в процессе ее колебаний и реконструированная по измеренным значениям функция процесса, то есть рассеяние лазерного излучения на струне. По полученным результатам восстановлен усредненный профиль пучка по 1000 точкам измерений с шагом 12.45 мкс, изображенный на

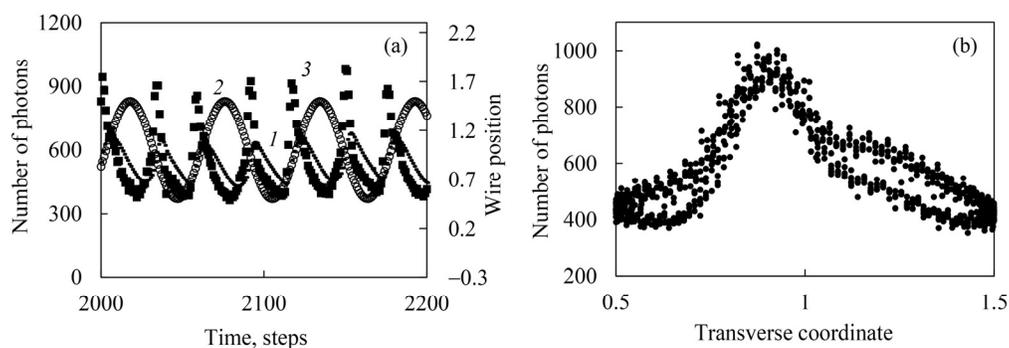


Рис.8. (а) Зависимость количества фотонов от времени: 1 – сигнал с фотодиода, 2 – положение центра струны в процессе ее колебаний и 3 – рассеяние лазерного излучения на струне. (б) Зависимость количества фотонов от координаты – профиль сфокусированного лазерного пучка.

рис.8б. В восстановленном по экспериментальным данным профиле присутствуют неточности, обусловленные шумами с частотой 50 Гц, а также нестабильностью лазерного излучения.

4. Заключение

Продемонстрирована возможность быстрого измерения профиля сфокусированного лазерного пучка без перемещения датчика с использованием механического движения вибрирующей струны. Разработан математический алгоритм для восстановления профиля пучка по многократным измерениям с помощью измерительной системы с ограниченным быстродействием.

Для усовершенствования метода предполагается улучшить измерительную систему для исключения воздействия помех, уменьшить инерционность измерительной системы и использовать более быстрые фотодиоды. Это даст возможность измерять профиль пучка практически за один период колебаний вибрирующей струны и наблюдать динамику изменения профиля с временем разрешения мс и меньше.

Метод можно использовать также для изучения поперечных колебаний струны с учетом двух поперечных степеней свободы.

На базе предлагаемого метода, с учетом наработок на лазерных пучках, проектируется разработка диагностических инструментов для ускорителей с ультратонкими пучками.

Автор выражает благодарность С.Г. Арутюняну за постановку задачи и А.В. Маргаряну за помощь в проведении эксперимента. Автор благодарен также М. Chung за постоянную поддержку.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Ж. Аш, П. Андре, Ж. Бофрон, П. Дегут, К. Жувено, У. Зельбштейн, Б. Кретинон, П. Ливрозе, А. Мазеран, Ж. Меригу, П. Пейро, А. Пике, Ж.-К. Прижан, М. Сюньяш, Ж. Такюсель, Ж. Фулетье, Ж. Шарне, Ж.-П. Шон.** Датчики измерительных систем. Москва, Мир, 1992.
2. **S.G. Arutunian.** Vibrating Wires Scanner for Beam Profile Monitoring. Proc. Part. Acc. Conf., 1991, New York, pp. 2105–2107.
3. **S.G. Arutunian, N.M. Dobrovolski, M.R. Mailian, I.G. Sinenko, I.E. Vasiniuk.** Phys. Rev. Special Topics – Accelerators and Beams, **2** 122801 (1999).
4. **С.Г. Арутюнян, Г.С. Арутюнян, Д. Чое, М. Chung, Э.Г. Лазарева, А.В. Маргарян.** Изв. НАН Армении, Физика, **52**, 496 (2017).
5. **G. Decker, S. Arutunian, M. Mailian, I. Vasiniuk.** Hard X-ray Synchrotron Measurements at the APS with Vibrating Wire Monitor, Beam Instrumentation Workshop, BIW08, May 4–8, 2008, Lake Tahoe, USA, pp. 36–40.
6. **S.G. Arutunian.** Vibrating Wire Sensors for Beam Instrumentation. Beam Instrumentation Workshop, BIW08, May 4–8, 2008, Lake Tahoe, USA, pp. 1–7.
7. **S.G. Arutunian, J. Bergoz, M. Chung, G.S. Harutyunyan, E.G. Lazareva.** NIM A, **797**, 37 (2015).
8. **S.G. Arutunian, M. Chung, G.S. Harutyunyan, A.V. Margaryan, E.G. Lazareva, L.M. Lazarev, L.A. Shahinyan.** RSI, **87**, 023108 (2016).
9. <http://www-linac.kek.jp/seminar/chehab-lecturenot-transparencies/BeamDiagnostics.pdf>
10. **В.Н. Забаев.** Применение ускорителей в науке и промышленности. Томск, ТПУ, 2008.
11. **D. Einfeld.** SRN, **27**, 6 (2014).
12. **E. Levitchev.** Beam Dynamics Newsletter, **71**, 16 (2017).
13. **D. Hashemi.** Diagnostics at REGAE Facility, Ultrafast Beams and Applications Workshop, July 4–7, 2017, Yerevan, RA, pp. 19–22.
14. **K. Floettmann.** The Relativistic Electron Gun for Atomic Exploration, Ultrafast Beams and Applications Workshop, July 4–7, 2017, Yerevan, RA, pp. 8–9.
15. **М.А. Агинян, С.Г. Арутюнян, Д. Чое, М. Chung, Г.С. Арутюнян, S.-Y. Kim, Э.Г. Лазарева, А.В. Маргарян.** Изв. НАН Армении, Физика, **52**, 151 (2017).
16. **В.М. Кашин, В.Г. Новиков.** Основы теории и практики моделирования динамических систем. Коломна, КИ (ф) МГОУ, 2011.

VIBRATING WIRE FOR PROFILE MEASURING OF THIN BEAMS IN ACCELERATORS: PRELIMINARY TESTS ON A LASER BEAM

E.G. LAZAREVA

The possibility to use a vibrating wire as a target in the method of scanning of transverse profiles of thin beams in accelerators has been studied. In the case where the transverse dimensions of the beam are comparable to the amplitude of oscillations of the wire, the vibrating wire can be used for a fast measurement of the transverse beam profile without moving the sensor. The scanning procedure is replaced by the use of the wire movement during its mechanical oscillations. The method is tested on a focused beam of a semiconductor laser with a spot size at the focus of ~0.1 mm. The reconstruction of the transverse profile is performed on the basis of the measurements of the photons reflected from the vibrating wire by using fast photodiodes.

УДК 53.083.2

МИКРОВОЛНОВЫЕ ФРАКТАЛЬНЫЕ ПОЛОСОВЫЕ ФИЛЬТРЫ, ОСНОВАННЫЕ НА МОДИФИЦИРОВАННЫХ КРИВЫХ ГИЛЬБЕРТА ПЕРВОГО И ВТОРОГО ПОРЯДКОВ

Г. ПАРСАМЯН^{1*}, А. БАБАДЖАНИЯН¹, К. LEE²

¹Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

²Sogang University, Seoul, Republic of Korea

*e-mail: henrik.parsamyan@ysumail.am

(Поступила в редакцию 12 февраля 2018 г.)

Экспериментально и численно проанализированы микроволновые фрактальные полосовые фильтры, основанные на модифицированных кривых Гильберта первого и второго фрактальных порядков. В качестве подложки была использована керамика Al_2O_3 , поверхность которой покрыта слоем серебра толщиной 50 мкм. При создании структур фильтров использовалась техника лазерной гравировки. Фильтр, основанный на кривой Гильберта первого порядка имеет резонансную частоту ~ 4.01 ГГц, а фильтр, основанный на кривой Гильберта второго порядка имеет резонансные частоты ~ 3.09 и ~ 6.34 ГГц. Значение нагруженной добротности фильтра на основе кривой Гильберта первого порядка было оценено ~ 94 . Распределение электромагнитного поля того же фильтра было визуализировано методом отображения близких полей с использованием термупругой оптической индикаторной микроскопии.

1. Введение

Разработка и оптимизация миниатюрных устройств в диапазоне высоких частот (ВЧ) и сверхвысоких частот (СВЧ) до сих пор остается актуальной задачей [1–3]. В современных системах связи, где нужно совмещать высокую производительность, надежность и точность с высокой плотностью интегрирования компонент системы, фракталы могут играть важную роль. С конца 19-ого века Гильберт, Пеано, Минковский, Серпинский и другие предлагали разные типы самоповторяющихся и пространственно-заполняющих кривых и структур чисто математического характера. Спустя несколько десятилетий, когда стремление к миниатюризации устройств в СВЧ диапазоне поставило задачу разработать новые типы структур, фракталы нашли широкое применение в микроволновой инженерии и фотонике благодаря своим интересным особенностям, а именно, они являются пространственно-заполняющимися структурами, которые повторяют друг друга. На их основе были предложены широкополосные антенны [4–6],

фильтры [7–9], резонаторы [10, 11] и даже микрометрические фрактальные структуры на основе фрактальных кривых Гильберта (КГ) высоких порядков в оптической области [12].

В настоящей работе представлены фрактальные полосовые фильтры на основе модифицированных КГ первого и второго порядков. Фрактальные КГ, впервые предложенные Гильбертом, являются пространственно-заполняющими, непрерывными, непересекающимися и незамкнутыми кривыми [13]. КГ первого и второго порядков были модифицированы в замкнутые непрерывные кривые, на основе которых были смоделированы фрактальные фильтры. Дизайн фильтров был оптимизирован с помощью численного анализа программой COMSOL Multiphysics на основе метода конечных элементов. Параметры рассеяния (S -параметры) фильтров были получены экспериментальными и численными методами. Отметим, что результаты экспериментов и моделирования довольно близки и соответствуют друг другу.

2. Материалы и методы исследования

Дизайн фрактальных фильтров, основанных на модифицированных КГ первого и второго порядков с размерами элементарных ячеек s_1 и s_2 , показан на рис.1, где h – ширина полосовых линий, d – дистанция между граничными линиями и КГ, a – ширина граничных линий и w – ширина кривых (для обоих

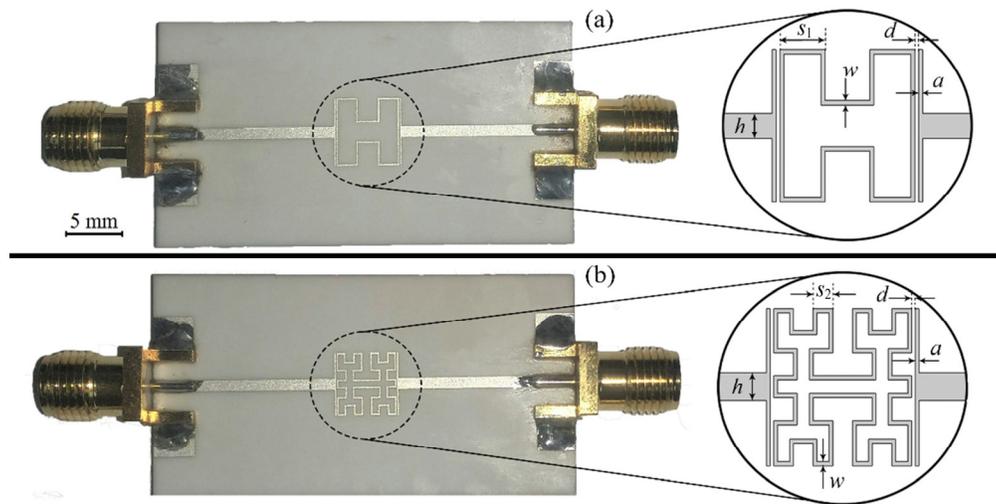


Рис.1. Изображения фильтров с увеличенной схемой структур на основе модифицированных КГ (а) первого и (б) второго порядков: s_1 и s_2 – размеры элементарных ячеек модифицированных КГ первого и второго порядков, соответственно. Для обоих фильтров были выбраны одинаковые значения h , a , w и d .

фильтров были выбраны одинаковые значения h , d , w и a). В качестве подложки была выбрана керамика оксида алюминия (Al_2O_3) с размерами $20 \times 40 \times 1 \text{ мм}^3$ и диэлектрической проницаемостью 9.2 в ГГц-овой области. Структуры фильтров были изготовлены путем лазерной гравировки слоя серебра толщиной 50 мкм на керамической подложке. После лазерной гравировки образцы отжигались в печи при температуре $\sim 800^\circ\text{C}$ для обеспечения конечного проводящего состояния металла.

До создания фильтров структуры были оптимизированы с помощью численного моделирования на основе уравнений Максвелла, чтобы получить наилучшую связь между входным и выходным портами. Оптимизация была реализована путем изменения размеров элементарной ячейки и ширины линий. Другим способом улучшения связи является добавление граничных линий слева и справа. Чтобы избежать перегрузки сетки в узких областях структуры в модели [14] и приблизить ее к реальному образцу, металлические части были реализованы с использованием так называемого граничного условия перехода (Transition Boundary Condition) программы COMSOL Multiphysics.

Комплексная диэлектрическая проницаемость металла определяется уравнением

$$\varepsilon = \varepsilon_r - \frac{j\sigma}{\omega\varepsilon_0}, \quad (1)$$

где ε_r – относительная диэлектрическая проницаемость, σ – проводимость, $\varepsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12} \text{ Ф/м}$ – диэлектрическая проницаемость вакуума, $\omega = 2\pi f$ – угловая частота, а f – рабочая частота. При моделировании для относительной диэлектрической проницаемости и проводимости серебра были использованы значения $\varepsilon_r = 1$ и $\sigma = 6.16 \times 10^7 \text{ С/м}$, соответственно. Для обратной стороны подложки было использовано граничное условие идеального электрического проводника Perfect Electric Conductor программы COMSOL Multiphysics. В результате оптимизации значения $s_1 = 2$ и $s_2 = 0.8 \text{ мм}$ были выбраны для фильтров, основанных на модифицированных КГ первого и второго порядков, соответственно. Для h было использовано значение 1 мм, а для w , a и d – одинаковое значение 0.1 мм. S -параметры фильтров измерялись сетевым векторным анализатором Agilent 8753ES.

Распределения электрического и магнитного полей структуры, основанной на КГ первого порядка, были визуализированы с использованием термоупругой оптической индикаторной микроскопии (ТУОИМ) [15]. Эта техника использует измерения распределения теплового напряжения на поверхности оптического индикатора (ОИ), вызванные электромагнитным нагревом, что является результатом взаимодействия между ОИ и излучаемым от тестируемого устройства электромагнитным или инфракрасным полем. Важно отметить, что

для измерений электрических и магнитных полей в ТУОИМ используются разные индикаторы. Для измерения электрического поля индикатор боросиликатного стекла был покрыт тонкой пленкой из полиметилметакрилата с внедренными наночастицами алюминия, тогда как для измерения магнитного поля то же боросиликатное стекло было покрыто пленкой платины толщиной 200 нм.

3. Результаты и их обсуждение

S -параметры фрактальных фильтров на основе модифицированных КГ первого и второго порядков, полученные в результате экспериментов и моделирования, показаны на рис.2а и рис.2б, соответственно. Видно, что результаты экспериментов и моделирования довольно точно соответствуют друг другу. Для фильтра на основе КГ первого порядка эксперимент и моделирование показывают ту же резонансную частоту ~ 4.01 ГГц. Для первого резонансного пика фильтра на основе КГ второго порядка эксперимент и моделирование также показывают одинаковый резонанс на ~ 3.09 ГГц, тогда как вторая резонансная частота, полученная с помощью моделирования, на 0.2 ГГц меньше экспериментального резонанса на 6.34 ГГц.

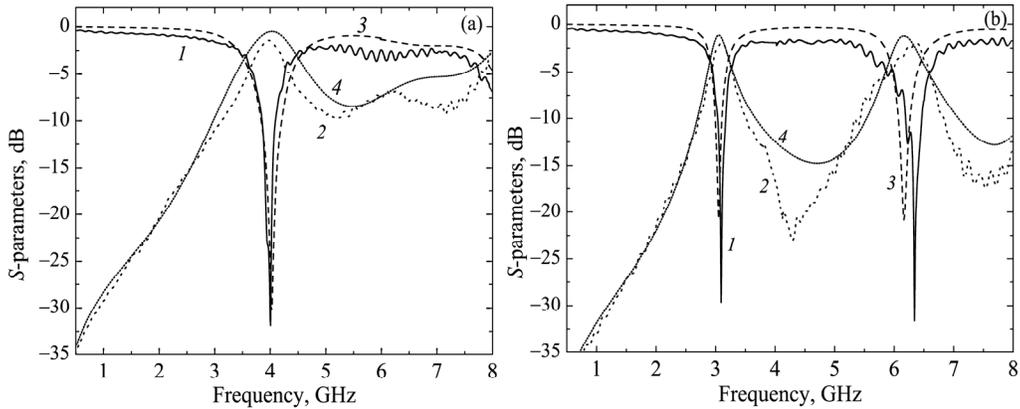


Рис.2. Экспериментальные S_{11} (1), S_{21} (2) и моделированные S_{11} (3), S_{21} (4) параметры рассеяния фильтра на основе модифицированной КГ (а) первого и (б) второго фрактального порядков.

Нагруженная добротность фильтра на основе КГ первого порядка была оценена согласно уравнению

$$Q \approx \frac{f_0}{BW_{-3dB}}, \quad (2)$$

где f_0 – резонансная частота фильтра, а BW_{-3dB} – ширина резонансной кривой на

уровне -3 dB от минимума. Таким образом, для фильтра на основе КГ первого порядка нагруженная добротность составила ~ 94 .

На рис.3а и рис.3б показаны зависимости параметра S_{11} КГ первого и второго порядков от частоты для разных размеров элементарной ячейки s_1 и s_2 , соответственно. Моделирование проводилось при значениях 1.8, 1.9, 2, 2.1 и 2.2 мм для s_1 и 0.7, 0.8 и 0.9 мм для s_2 . У обоих прототипов резонансные частоты уменьшаются при увеличении размера элементарной ячейки КГ и наоборот. Для понимания этого поведения на вставке рис.3а представлена эквивалентная LC -схема фильтра, основанного на КГ первого порядка. Конденсаторы C_0 представляют ёмкости между КГ и граничными линиями. Конденсатор C_1 представляет собой емкость между идеальным электрическим проводником на обратной стороне подложки и полосовыми линиями на верхней стороне подложки. Емкость между КГ и проводником на обратной стороне подложки незначительна из-за очень малой ширины КГ по сравнению с шириной полосовых линий. С другой стороны, сопротивлением структуры также можно пренебречь из-за высокой проводимости металла. Напомним, что в качестве металла мы использовали серебро. L_0 представляет индуктивность КГ.

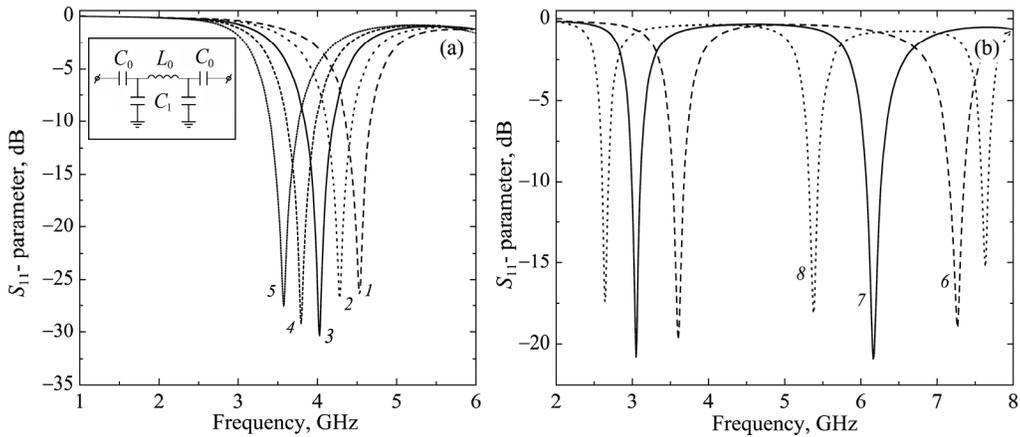


Рис.3. Зависимость параметра S_{11} КГ от частоты для разных размеров элементарной ячейки s фильтра на основе (а) первого ($s_1 = 1.8$ (1), 1.9 (2), 2 (3), 2.1 (4) и 2.2 (5) мм) и (б) второго ($s_2 = 0.7$ (6), 0.8 (7) и 0.9 (8) мм) фрактальных порядков. Вставка изображает эквивалентную LC -схему фильтра на основе КГ первого фрактального порядка.

Резонансная частота схемы определяется уравнением

$$f_0 = \frac{1}{2\pi\sqrt{L_e C_e}}, \quad (3)$$

где L_e и C_e – общая индуктивность и емкость эквивалентной LC -схемы фильтра

на основе КГ первого порядка. При изменении размера элементарной ячейки КГ изменяются емкость C_0 и индуктивность L_0 . Основное значение в структуре имеет емкость между КГ и граничными линиями C_0 и индуктивность КГ L_0 . С увеличением размера элементарной ячейки КГ емкости C_0 растут из-за увеличения поверхности «пластин конденсатора» (расстояние между «пластинами» фиксированное), что приводит к уменьшению резонансной частоты согласно уравнению (3). Такое же влияние на резонансную частоту имеет индуктивность L_0 , которая увеличивается за счет увеличения длины КГ. Для объяснения этого явления мы выбрали фильтр, основанный на КГ первого порядка из-за простоты конструкции, которая дает возможность легко представить структуру через LC -цепь в отличие от фильтра на основе КГ второго порядка, структура которого сложнее, а эквивалентная схема представляет собой линию с многими LC -ответвлениями. Тем не менее, влияние изменения размера элементарной ячейки фильтра на основе КГ второго порядка такое же, как в случае фильтра на основе КГ первого порядка, что также связано с изменением емкости между граничными линиями и индуктивностью КГ. Таким образом, зависимость резонансной частоты от размеров элементарной ячейки КГ открывает возможность регулировки резонансной частоты полосовых фильтров в соответствующих частотных диапазонах.

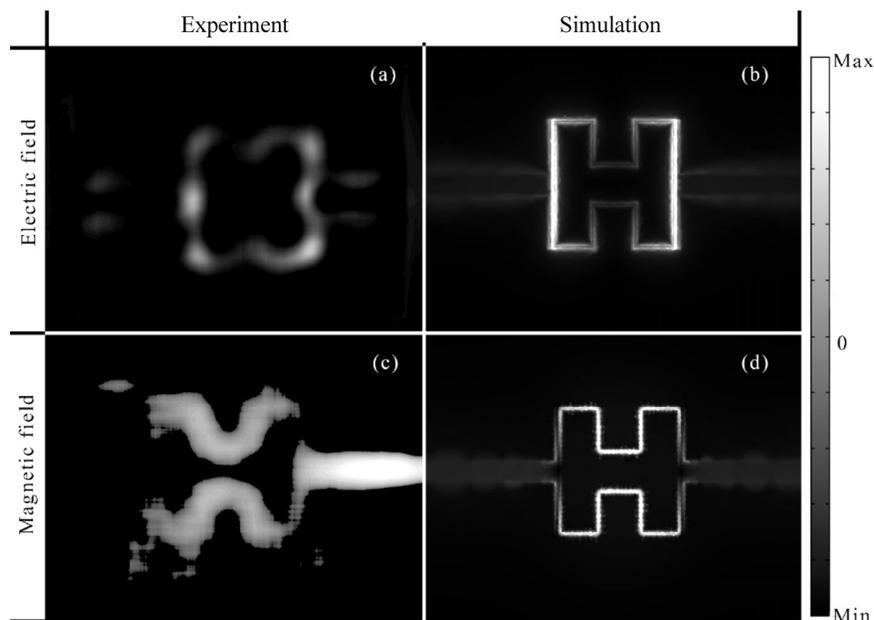


Рис.4. Экспериментальные и моделированные результаты для визуализации ближних электромагнитных полей фильтра на основе КГ первого порядка. Распределение электрического и магнитного полей согласно (а, с) эксперименту и (b, d) моделированию.

Моделированные и экспериментальные результаты распределения электромагнитного поля КГ первого порядка приведены на рис.4. В случае визуализации распределения магнитного поля фильтр был покрыт тонкой диэлектрической пленкой толщиной ~60 мкм, чтобы избежать контактов между структурой металла и слоем поглотителя магнитного поля индикатора. Нужно отметить, что диэлектрическая пленка не вызывает каких-либо изменений резонансной частоты фильтра. Поскольку в случае магнитного поля ТУОИМ дает результат для продольной (in-plane) компоненты, в качестве результата моделирования было выбрано распределение $H_{\text{in-plane}}$, определяемое уравнением

$$H_{\text{in-plane}} = \sqrt{|H_x|^2 + |H_y|^2}. \quad (4)$$

Видно, что сильное электрическое поле сконцентрировано между граничными линиями и КГ (рис.4а, b), тогда как сильное магнитное поле сконцентрировано вдоль нижней и верхней сторон КГ (рис.4с, d). Из-за того, что в ТУОИМ поля визуализируются через соответствующие распределения температуры, визуализированные электрические и магнитные поля распределяются не только вдоль КГ, но также и вблизи структуры (рис.4а, с).

4. Заключение

Предложен новый вид компактных полосовых фильтров на основе модифицированных кривых Гильберта первого и второго фрактальных порядков с экспериментальным и численным анализом. Фильтр, основанный на кривой Гильберта первого порядка, имеет резонанс на ~4.01 ГГц, а фильтр на основе кривой Гильберта второго порядка имеет резонансы на ~3.09 и ~6.34 ГГц. Зависимость резонансных частот от размера элементарной ячейки КГ открывает возможность корректировки рабочих частот фильтров. Распределения электрической и продольной составляющей магнитного поля структуры были визуализированы с использованием термоупругой оптической индикаторной микроскопии.

Прототипы были подготовлены и экспериментальные результаты были получены в Microwave Photonics Laboratory, Sogang University (Seoul, Republic of Korea). Авторы благодарят В. Мхитаряна за модифицирование кривых Гильберта, А. Макаряна и Ш. Аракеяна за ценные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. **P. Jarry, J.N. Beneat.** Wiley Encyclopedia of Electrical and Electronics Engineering, Hoboken, John Wiley&Sons, 2012, pp. 1–18.
2. **P. Jarry, J.N. Beneat.** Microwave Amplifier and Active Circuit Design Using the Real Frequency Technique., Hoboken, John Wiley&Sons, 2016.

3. **J. Anguera, C. Puente, C. Borja, J. Soler.** *Encycl. RF Microw. Eng.*, Hoboken, John Wiley&Sons, 2005.
4. **K.J. Vinoy, K.A. Jose, V.K. Varadan, V.V. Varadan.** *Hilbert Curve Fractal Antennas with Reconfigurable Characteristics*, IEEE MTT-S International Microwave Symposium Digest, 2001, pp. 381–384.
5. **J. Li, T. Jiang, C. Cheng, C. Wang.** *IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul.*, **20**, 2017 (2013).
6. **J. Anguera, C. Puente, E. Martínez, E. Rozan.** *Microw. Opt. Technol. Lett.*, **36**, 102 (2003).
7. **W.-L. Chen, G.-M. Wang.** *IEEE Microw. Wirel. Components Lett.*, **19**, 74 (2009).
8. **M. Barra, C. Collado, J. Mateu, J.M. O’Callaghan.** *IEEE Trans. Appiled Supercond.*, **15**, 3841 (2005).
9. **S. Kirihara, M.W. Takeda, K. Sakoda, K. Honda, Y. Miyamoto.** *J. Eur. Ceram. Soc.*, **26**, 1861 (2006).
10. **S. Dhar, K. Patra, R. Ghatak, B. Gupta, D.R. Poddar.** *IEEE Trans. Antennas Propag.*, **63**, 1521 (2015).
11. **C.-S. Ye, Y.-K. Su, M.-H. Weng, H.-W. Wu.** *Microw. Opt. Technol. Lett.*, **51**, 1358 (2009).
12. **S.De Zuani, T. Reindl, M. Rommel, B. Gompf, A. Berrier, M. Dressel.** *ACS Photonics*, **2**, 1719 (2015).
13. **D. Hilbert.** *Math. Ann.*, **38**, 459 (1891).
14. **K. Ho-Le.** *Comput. Des.*, **20**, 27 (1988).
15. **H. Lee, S. Arakelyan, B. Friedman, K. Lee.** *Sci. Rep.*, **6**, 39696 (2016).

MICROWAVE FRACTAL BANDPASS FILTERS BASED ON
MODIFIED HILBERT CURVES OF THE FIRST AND SECOND ORDERS

H. PARSAMYAN, A. BABAJANYAN, K. LEE

The microwave fractal bandpass filters based on modified Hilbert shaped curves of the first and second fractal orders are experimentally and numerically analyzed. As a substrate Al₂O₃ ceramic covered by the thin silver layer with thickness of 50 μm was used. The laser patterning technique was used to design the structures of filters. The filter based on the Hilbert curve of the first order has resonance at ~4.01 GHz, while the filter based on the second order Hilbert curve has resonances at ~3.09 and ~6.34 GHz. The estimated loaded *Q*-factor of the filter based on the first order Hilbert curve was ~94. The electromagnetic field distribution of the filter was visualized by using the thermo-elastic optical indicator microscopy.

УДК 536.413

ОЦЕНКА КОЭФФИЦИЕНТОВ ТЕПЛОВОГО РАСШИРЕНИЯ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ГРАНАТОВ В ШИРОКОМ ИНТЕРВАЛЕ ТЕМПЕРАТУР

А.В. ЕГАНИЯН^{1,2*}, Э.П. КОКАНЯН^{1,2}, К.Л. ОВАНЕСЯН²,
Т.И. БУТАЕВА², Л.Э. ОВСЕПЯН¹

¹Армянский государственный педагогический университет им. Х. Абовяна,
Ереван, Армения

²Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак, Армения

*e-mail: aveganyan@gmail.com

(Поступила в редакцию 7 марта 2018 г.)

Получены простые выражения для коэффициентов теплового расширения редкоземельных гранатов, которые позволили оценить их величину в широкой области температур в случаях, когда известны либо значение параметра элементарной ячейки кристаллической решетки, либо плотность вещества при 300 К. Получено также выражение, устанавливающее взаимосвязь между коэффициентами теплового расширения и теплопроводности редкоземельных гранатов. Показано, что для гранатов различного состава расчетные значения, полученные с использованием данных выражений, находятся в хорошем соответствии с экспериментальными результатами.

1. Введение

Редкоземельные гранаты описываются общей химической формулой $\{RE_3\}[A_2](D_3)O_{12}$, принадлежат к пространственной группе $Ia\bar{3}d - O_h^{10}$ [1], имеют кубическую элементарную ячейку, содержащую 160 ионов, где редкоземельные ионы (RE) и иттрий преимущественно занимают додекаэдрические, A = Al, Ga, Sc занимают преимущественно октаэдрические а D = Al, Ga... – тетраэдрические позиции. Благодаря своим уникальным физическим свойствам и возможности широкого и успешного использования в различных научных и технических приложениях (лазерная физика [2], физика высоких энергий [3] и др.) эти соединения уже на протяжении многих лет находятся в центре постоянного внимания исследователей.

Вследствие того, что при изменении температуры меняется параметр элементарной ячейки, что в свою очередь влияет практически на все физические величины и характеристики соединения, изучение теплофизических свойств в широком интервале температур представляется важной задачей с точки зрения

выявления возможностей и свойств соединений, в частности, кристаллов со структурой граната.

Целью настоящей работы было получение выражений для определения коэффициентов теплового расширения и установления взаимосвязи между коэффициентами теплового расширения и теплопроводности редкоземельных гранатов.

2. Оценка коэффициента теплового расширения и его связь с коэффициентом теплопроводности

Как показано в работе [4], в соответствии с концепцией Френкеля для твердых тел с молярным объемом V' имеет место выражение

$$\alpha E \cong \frac{R}{2V'} = \text{const}, \quad (1)$$

где E – модуль Юнга, R – газовая постоянная и α – линейный коэффициент теплового расширения.

Известно, что в случае твердотельных кристаллических диэлектриков выполняется так называемое правило Баркера [5]

$$\alpha^2 E = \text{const}. \quad (2)$$

С другой стороны авторами работы [6] было показано, что α можно представить в виде

$$\alpha = c \frac{M}{m\rho}, \quad (3)$$

где c – постоянная величина, M – молекулярная масса данного соединения, m – число ионов в формульной единице граната. Величина $\omega = M/(m\rho)$ называется параметром структурной рыхлости.

Если преобразовать выражение (3) с учетом того, что в структурной формуле гранатов число ионов $m = 20$, а также использовать известное выражение для определения рентгеновской плотности гранатов

$$\rho = \frac{8M}{VN_A}, \quad (4)$$

то получим

$$\alpha = c_1 V. \quad (5)$$

Здесь c_1 – постоянная величина и объем элементарной ячейки $V = a^3$, где a – параметр элементарной ячейки.

Проведя для определения константы c_1 из выражения (5) преобразование в соответствии с моделью Френкеля (т. е. заменяя молярный объем объемом элементарной ячейки), получим

$$\frac{\alpha}{V} = \frac{2}{R\sqrt[3]{N_A}} c', \quad (6)$$

где N_A – число Авогадро.

Характеризующую вещество новую постоянную c' из выражения (6), которая, согласно работе [7], связана с параметром Грюнайзена, можно представить следующим образом:

$$c' = \frac{v_L}{v_s} = \sqrt{\frac{2(1-\mu)}{(1-2\mu)}}, \quad (7)$$

где v_L и v_s – скорости распространения продольной и поперечной акустических волн, соответственно, а μ – коэффициент Пуассона. Проведенный в работах [8–10] подробный анализ многочисленных данных по исследованию редкоземельных гранатов различного состава показывает, что среднее значение $\langle c' \rangle = \left\langle \frac{v_L}{v_s} \right\rangle \cong 1.75$. Соответственно выражение (6) можно представить в виде

$$\alpha \cong \frac{2}{R\sqrt[3]{N_A}} \frac{v_L}{v_s} V \cong 5 \times 10^{-9} V, \quad (8)$$

где V имеет размерность \AA^3 , а численный коэффициент, равный 5×10^{-9} , имеет размерность $\text{\AA}^{-3} \text{K}^{-1}$.

Следовательно, при температурах, близких к температуре Дебая α можно представить в виде

$$\alpha \cong 5 \times 10^{-9} V (T/\vartheta), \quad (9)$$

где ϑ – температура Дебая.

Таким образом, правило Баркера для гранатов приобретает вид

$$\alpha^2 E \cong 22 \text{ Па К}^{-2}. \quad (10)$$

Выражение (10) устанавливает для гранатов связь между двумя важными термомеханическими характеристиками вещества и дает возможность при заданной температуре, зная величину модуля Юнга, оценить коэффициент теплового расширения, и наоборот.

В работе [11] было показано, что коэффициент теплопроводности гранатов можно оценить, используя выражения

$$k \cong 4 \times 10^{-14} \text{ Ма}^5 \vartheta^2, \quad (11)$$

$$k \cong 4 \times 10^{-14} \text{ Ма}^5 \frac{\vartheta^3}{T}. \quad (12)$$

Используя формулы (8) и (11), можно получить выражение, устанавливающее

связь между коэффициентами теплового расширения α и теплопроводности k

$$\frac{k}{\alpha M \vartheta^2 a^2} \cong 8 \times 10^{-6}. \quad (13)$$

В выражении (13) коэффициент теплопроводности k измеряется в Вт/мК, коэффициент теплового расширения α измеряется в K^{-1} , молекулярная масса соединения M в г/моль, температура Дебая ϑ в К, а постоянная элементарной ячейки a в Å .

Выражение (13) устанавливает для соединений со структурой граната взаимосвязь между двумя важными термофизическими характеристиками вещества – коэффициентами теплового расширения и теплопроводности, и делает возможным определение их значений при температуре Дебая в случае, если известны химический состав граната и значение параметра элементарной ячейки его кристаллической решетки.

Проведем оценку значений коэффициента теплового расширения с использованием выражения (8) и сравним их со значениями, полученными в результате экспериментальных измерений. В работе [1] приведены значения параметров элементарных ячеек a для ряда гранатов: $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ (12.004 Å), $\text{Er}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ (11.982 Å), $\text{Lu}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ (11.909 Å). Подставляя значения объемов элементарных ячеек ($V = a^3$) этих гранатов в выражение (8), получим их расчетные средние значения коэффициентов теплового линейного расширения α при температурах близких к температуре Дебая, которые равны $8.7 \times 10^{-6} \text{K}^{-1}$, $8.6 \times 10^{-6} \text{K}^{-1}$ и $8.5 \times 10^{-6} \text{K}^{-1}$ для $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$, $\text{Er}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ и $\text{Lu}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$, соответственно. Сравнение полученных значений с результатами измерений α , проведенных в работе [8] для $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ ($8.9 \times 10^{-6} \text{K}^{-1}$), $\text{Er}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ ($9 \times 10^{-6} \text{K}^{-1}$) и $\text{Lu}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ ($8.8 \times 10^{-6} \text{K}^{-1}$) с точностью $\pm 0.3 \times 10^{-6} \text{K}^{-1}$, показало, что для этих трех редкоземельных алюминиевых гранатов значения, рассчитанные с использованием выражения (8), находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными.

Исходя из вышеприведенных рассуждений можно сделать вывод, что зависимость параметра элементарной ячейки редкоземельных гранатов от температуры в области $270 \text{ K} \leq T \leq 1600 \text{ K}$ может быть описана следующим приближенным выражением:

$$a \cong 6 \times 10^{-5} T + a_0, \quad (14)$$

где a_0 и a параметры элементарной ячейки при $T = 300 \text{ K}$ и при заданной температуре T , соответственно. В выражении (14) параметр ячейки измеряется в Å , а температура – в К.

В работе [9] приводятся измеренные при 300 К параметры элементарных ячеек для гранатов $\text{Y}_3\text{Ga}_5\text{O}_{12}$, $\text{Sm}_3\text{Ga}_5\text{O}_{12}$, $\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ и $\text{Gd}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$, имеющие значения 12.29, 12.44, 12.34 и 12.48 Å , соответственно. Расчет по формуле (8) дает для

них следующие значения линейного коэффициента теплового расширения α : $9.28 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ ($\text{Y}_3\text{Ga}_5\text{O}_{12}$), $9.63 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ ($\text{Sm}_3\text{Ga}_5\text{O}_{12}$), $9.4 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ ($\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$) и $9.72 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ ($\text{Gd}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$). Однако в указанной работе нет экспериментальных данных по линейным коэффициентам теплового расширения этих гранатов.

Измерения зависимости параметра элементарной ячейки от температуры для некоторых редкоземельных галлиевых, железистых и алюминиевых гранатов были проведены в работе [12] с точностью измерений температуры $\pm 5 \text{ K}$ и параметра решетки $\pm 0.003 \text{ \AA}$. В табл. 1 приведены значения параметров элементарных ячеек (a_{exp}), температуры измерений, а также рассчитанные по формуле (14) параметры ячеек (a_{cal}) для этих же температур.

Табл. 1. Экспериментальные и рассчитанные параметры элементарных ячеек для некоторых редкоземельных гранатов

Соединение	Температура, К	a_{exp} , \AA [12]	a_{cal} , \AA	$\Delta a = a_{\text{exp}} - a_{\text{cal}}$, \AA
$\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$	901	12.454	12.430	0.024
$\text{Gd}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$	817	12.537	12.520	0.017
$\text{Gd}_3\text{Ga}_5\text{O}_{12}$	900	12.44	12.429	0.011
$\text{Y}_3\text{Ga}_5\text{O}_{12}$	935	12.339	12.330	0.009
$\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$	873	12.065	12.060	0.005

Как видно из таблицы, для всех гранатов рассчитанные значения параметров элементарных ячеек меньше, чем измеренные, однако для алюминиевых гранатов эта разница минимальна. Наибольший разброс между измеренными и рассчитанными значениями параметров элементарных ячеек наблюдается для $\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$. Причина может заключаться в том, что величина параметра элементарной ячейки существенно зависит от величины радиуса иона в октаэдрическом кислородном окружении. Например, согласно работе [13], для кристаллов $\text{Y}_3\text{Ga}_5\text{O}_{12}:\text{Yb}$ зависимость плотности от температуры в области $0\text{--}500^\circ\text{C}$ имеет вид

$$\rho_T = 5.9586 - 6.77 \times 10^{-5} T. \quad (15)$$

Так как зависимость между плотностью и параметром элементарной ячейки гранатов определяется формулой (4), то для галлиевых гранатов численный коэффициент в выражении (14) будет несколько больше, чем в случае алюминиевых гранатов, и зависимость параметра элементарной ячейки от температуры в этом случае будет иметь вид

$$a \cong 6.77 \times 10^{-5} T + a_0. \quad (16)$$

Для гранатов данного химического состава использование выражения (14) позволяет определять постоянную решетки либо объем элементарной ячейки при любом произвольном значении температуры в вышеуказанной температурной области. Последующая подстановка этих значений в формулу (8) дает возможность оценить коэффициент теплового расширения при этой же температуре. Полученные в результате данного исследования выражения позволяют простым способом быстро оценить определенные теплофизические величины для гранатов, что может быть полезным при прогнозировании возможности практического использования этих материалов для решения конкретных научных либо технических задач.

3. Заключение

Получено простое выражение для оценки коэффициентов теплового расширения редкоземельных гранатов в широком интервале температур ($270 \text{ K} \leq T \leq 1600 \text{ K}$), дающее возможность определения величины этих коэффициентов по параметру элементарной ячейки граната соответствующего состава или рентгеновской плотности этого соединения при комнатной температуре.

Для редкоземельных гранатов определен вид правила Баркера, а также выражение, устанавливающее связь между коэффициентами теплового расширения и теплопроводности в температурной области, близкой к температуре Дебая. Получены выражения для определения температурных зависимостей параметров элементарной ячейки редкоземельных гранатов в температурной области $270 \text{ K} \leq T \leq 1600 \text{ K}$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ю.П. Воробьев, А.Н. Мень, В.Б. Фетисов. Расчет и прогнозирование свойств оксидов. Москва, Наука, 1983.
2. A. Brenier, Y. Guyot, H. Canibano, C. Boulon, A. Rodenas, D. Jaque, A. Eganyan, A. Petrosyan. *J. Opt. Soc. Am. B*, **23**, 676 (2006).
3. A.G. Petrosyan, H.R. Asatryan, K.L. Hovhannesyan, A.V. Yeganyan, M.V. Derdzyan, S.P. Feofilov, R.S. Sargsyan. *Materials Chem. Phys. C*, **185**, 39 (2017).
4. Я.И. Френкель. Введение в теорию металлов. Ленинград, Москва, ОГИЗ, 1948.
5. R.E. Barker. *J. Appl. Phys.*, **34**, 107 (1963).
6. В.В. Зуев, Л.Н. Поцелуева, Ю.Д. Гончаров. Кристаллоэнергетика как основа оценки свойств твердотельных материалов. Санкт-Петербург, Наука, 2006.
7. Д.С. Сандитов, Б.С. Садыков. *ФТТ*, **56**, 970 (2014).
8. К.Л. Ованесян, А.Г. Петросян, Г.О. Ширинян, А.А. Аветисян. *Неорг. матер.* **17**, 459 (1981).
9. V.F. Kitaeva, E.V. Zharikov, I.L. Chisty. *Phys. Stat. Sol. (a)*, **92**, 475 (1985).

10. **Е.В. Жариков, В.Ф. Китаева, В.Ю. Федорович.** ФТТ, **31**, 217 (1989).
11. **А.В. Еганян, Т.И. Бутаева, Э.П. Коканян.** Изв. НАН Армении, Физика, **52**, 522 (2017).
12. **S. Geller, G.P. Espinosa, P.B. Cradall.** J. Appl. Cryst., **2**, 86 (1969).
13. **H. Yu, K. Wu, B. Yao, H. Zhang, Z. Wang, J. Wang, Y. Zhang, Z. Wei, Z. Zhang, X. Zhang, M. Jiang.** IEEE J. Quantum Electron., **46**, 1689 (2010).

ՀԱԶՎԱԳՅՈՒՏ ՀՈՂԱՅԻՆ ՆՌՆԱՔԱՐԵՐԻ ՋԵՐՄԱՅԻՆ ԸՆԴԱՐՃԱԿՄԱՆ ԸՆԴԱՐՃԱԿՄԱՆ ԳՈՐԾԱԿԻՑՆԵՐԻ ԳՆԱՀԱՏՈՒՄԸ ԼԱՅՆ ՋԵՐՄԱՍՏԻՃԱՆԱՅԻՆ ՏԻՐՈՒՅԹՈՒՄ

Ա.Վ. ԵԳԱՆՅԱՆ, Է.Պ. ԿՈՎԱՆՅԱՆ, Կ.Լ. ՀՈՎՀԱՆՆԵՍՅԱՆ,
Տ.Ի. ԲՈՒՏԱԵՎԱ, Լ.Է. ՀՈՎՍԵՓՅԱՆ

Հազվագյուտ հողային նոնաքարերի ջերմային ընդարձակման գործակցի որոշման համար ստացվել է պարզ արտահայտություն, ինչը հնարավորություն է տալիս լայն ջերմաստիճանային տիրույթում գնահատելու այդ մեծությունը, եթե հայտնի է բյուրեղական ցանցի տարրական բջջի հաստատունի արժեքը կամ նյութի խտությունը $T = 300$ K ջերմաստիճանում: Ստացվել է նաև հազվագյուտ հողային նոնաքարերի ջերմային ընդարձակման և ջերմահաղորդականության գործակիցների միջև կապը բնութագրող արտահայտություն: Ցույց է տրված, որ տարբեր կազմությամբ նոնաքարերի համար ստացված արտահայտություններով հաշվարկները լավ համապատասխանության մեջ են չափումների արդյունքների հետ:

ESTIMATION OF HEAT EXPANSION COEFFICIENTS OF RARE-EARTH GARNETS IN A WIDE TEMPERATURE RANGE

A.V. YEGANYAN, E.P. KOKANYAN, K.L. HOVHANNESYAN,
T.I. BUTAEVA, L.E. HOVSEPYAN

Simple expressions were obtained for expansion coefficients of the rare-earth garnets which allow to estimate their values in a wide temperature range in cases, when the lattice unit cell parameter or the density of the material are known at 300 K. The expression giving relationship between thermal expansion and thermal conductivity coefficients for the rare-earth garnets have also been obtained. It is shown that the calculated values using these expressions are in good agreement with available experimental data for garnets of different composition.

УДК 538.975

ПОЛУЧЕНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ W/CeB₆/W ДЛЯ ЧУВСТВИТЕЛЬНОГО ЭЛЕМЕНТА ОДНОФОТОННОГО ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ДЕТЕКТОРА

С.И. ПЕТРОСЯН*, А.А. КУЗАНЯН, Г.Р. БАДАЛЯН, А.С. КУЗАНЯН

¹Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак, Армения

*e-mail: spetrosyan8@gmail.com

(Поступила в редакцию 13 декабря 2017 г.)

Исследована возможность получения гетероструктур W/CeB₆/W на подложках Al₂O₃, AlN, Si и W методом электронно-лучевого напыления. Определены условия получения тонких пленок W на диэлектрических подложках и пленках CeB₆, а также стехиометрических пленок CeB₆ на пленках W, диэлектрических и вольфрамовых подложках. Приведены спектры отражения пленок W, результаты рентгеновской дифрактометрии, рентгеновского микроанализа и электронной микроскопии пленок W и CeB₆. Созданы гетероструктуры W/CeB₆/W различной конфигурации и размеров. Методом компьютерного моделирования показано, что детектор с чувствительным элементом на основе гетероструктуры W/CeB₆/W может обеспечить сигнал на уровне микровольт и терагерцовую скорость счета при регистрации фотонов с энергией 6–50 эВ. Полученные результаты служат основой для создания прототипа чувствительного элемента термоэлектрического однофотонного детектора.

1. Введение

Гетероструктуры металл/редкоземельный гексаборид/металл могут найти широкое применение в низкотемпературных термоэлектрических устройствах нового поколения. В частности, гетероструктуры вольфрам/гексаборид церия/вольфрам (W/CeB₆/W) являются чувствительным элементом однофотонных термоэлектрических детекторов [1–5]. В этой гетероструктуре вольфрам, как тяжелый металл, используется в качестве поглотителя фотонов и его применение обусловлено рядом причин: W – прочный, термостойкий металл, обладающий к тому же самым низким среди переходных металлов удельным сопротивлением и высоким коэффициентом поглощения фотонов в широкой области электромагнитного спектра [6–10]. В большинстве работ пленки вольфрама осаждают методом магнетронного распыления [8, 10] и электронно-лучевым испарением в вакууме [7, 9], хотя это сопряжено с определенными трудностями. Проблема в

том, что вольфрам обладает одновременно высокой теплопроводностью и очень высокой температурой плавления, что усложняет его напыление электронно-лучевым методом. Напылению CeB_6 разными методами посвящено немного работ [11–13]. Трудность напыления пленок CeB_6 электронно-лучевым методом заключается в получении пленок стехиометрического состава [14].

В настоящей работе исследуются условия получения методом электронно-лучевого напыления пленок W и CeB_6 , гетероструктур W/ CeB_6 /W, а также приводятся результаты исследований их микроструктуры, оптических и электрических свойств. Методом компьютерного моделирования процессов распространения тепла исследуются характеристики однофотонного детектора с чувствительным элементом на основе гетероструктуры W/ CeB_6 /W.

2. Эксперимент

Напыление пленок проводилось на вакуумной установке ВУ-1А, оснащенной электронной пушкой с энергией электронов 6 кэВ. Начальный вакуум в камере был $\sim 10^{-5}$ торр. Подложки располагались на расстоянии 18 см от мишени и нагревались вольфрамовой печкой, расположенной над держателем подложек. Температура подложек в процессе напыления фиксировалась с помощью платина–платинородиевой термопары, закрепленной на держателе подложек, в котором помещались одновременно 12 подложек. Использовались подложки из сапфира (Al_2O_3), кремния (Si), нитрида алюминия (AlN) и вольфрама (W) с площадью 10×10 мм².

С целью увеличения скорости напыления держатель подложек с вольфрамовой печкой устанавливались на кварцевом цилиндре диаметром 12 мм, что уменьшало рабочую зону напыления. Некоторые процессы напыления проводились без кварцевого цилиндра, что позволяло использовать в начале процесса заслонку, препятствующую попаданию на подложки испаряющегося с поверхности мишени возможно загрязненного материала. Получение пленок нужных размеров, конфигурации и местоположения обеспечивалось применением масок из нержавеющей стали толщиной 0.1 мм.

Толщина пленок после напыления измерялась с помощью профилометра Ambios Technology XP-1. Вертикальное разрешение профилометра для перепада измеряемых высот до 10 мкм составляло 0.1 нм. Толщина пленки на разных участках одного образца отличалась из-за различия локальных температур подложки, расстояния от данного участка до мишени и различия углового распределения скорости массопереноса распыляемого вещества. В результате, толщина пленок определялась по нескольким измерениям с последующим усреднением. Максимальное отклонение от среднего значения толщины пленок не превышало $\pm 5\%$.

Поверхность и элементный состав пленок исследовались сканирующим электронным микроскопом (СЭМ) VEGA TS5130MM, оснащенным системой энергодисперсионного рентгеновского микроанализа INCA Energy 300. Оптические спектры отражения пленок регистрировались спектрофотометром СФ-8 с приставкой зеркального отражения. Сопротивление пленок измерялось четырехзондовым методом на частоте 1 кГц. Рентгенодифракционный анализ проводился на дифрактометре ДРОН-2 с использованием излучения $\text{CuK}\alpha$.

3. Результаты и их обсуждение

3.1. Получение пленок и исследование их свойств

В табл. 1 приведены номер и параметры процесса напыления пленок CeB_6 и W: температура подложки в процессе напыления (T), ток эмиссии (I), длительность (t) и скорость напыления (V). В последних трех столбцах приведены толщина пленок (d), отношение атомов бора и церия (B/Ce) и концентрация неконтролируемой примеси кислорода в пленках.

Табл. 1. Параметры напыления пленок CeB_6 и W

Процесс напыления	T , °C	I , mA	t , мин	V , нм/мин	d , нм	B/Ce	O, ат%
Пленки CeB_6							
1	800–820	50	15	19.1	285	5.23	9.17
2	900–930	82	15	26	390	3.9	4.12
3	800–820	82	15	16.7	250	6.2	3.58
4	900–910	80	15	20	300	5.42	7.75
5	800–810	80	15	35.3	530	5.48	6.45
6	900	80	15	11.1	165	4.32	14.16
7	700–710	80	15	32.4	485	5.4	4.56
9	750–760	60	15	35	525	5.36	4.32
10	940	60	25	16	400	6.18	2.69
11	940	60	25	22	550	5.33	1.23
12	940	60	25	30	730	5.18	3.97
14	930	60	25	20.2	505	5.17	6
Пленки W							
15	510–590	220	15	8.7	130		3.8
16	510–670	210	25	4.6	115		9.7
17	510–590	300	15	15.6	235		3.7

Напыление пленок CeB_6 проводилось с использованием керамических мишеней на предварительно нагретые до температуры 700°C и выше подложки, ток эмиссии электронной пушки варьировался в пределах $50\text{--}80$ мА. Скорость напыления пленок CeB_6 , обусловленная, в основном, током эмиссии и температурой подложки, изменялась в пределах $11\text{--}35$ нм/мин.

Результаты измерений концентрации химических элементов, полученные с помощью микроаналитической системы INCA Energy 300, для структуры $\text{CeB}_6/\text{W}/\text{Al}_2\text{O}_3$, обрабатывались программой StrataGem для пленочных образцов. Концентрации вольфрама и кислорода в верхнем слое структуры $\text{W}/\text{CeB}_6/\text{W}/\text{Al}_2\text{O}_3$ получены непосредственно на анализаторе без дополнительной обработки. Посторонних примесей (кроме кислорода) в пленках обнаружено не было, однако следует иметь в виду, что максимальная чувствительность аналитической системы составляет 0.1 вес%. Максимальные статистические ошибки измерения концентрации элементов в атомных процентах составляли в верхнем слое для $\text{W} \pm 0.09$, $\text{O} \pm 1$ и в структуре $\text{CeB}_6/\text{W}/\text{Al}_2\text{O}_3$ для $\text{B} \pm 1.5$, $\text{O} \pm 0.33$, $\text{Ce} \pm 0.09$, $\text{W} \pm 0.05$ и $\text{Al} \pm 0.07$.

По результатам 14 процессов напыления найдены наиболее благоприятные условия, обеспечивающие получение стехиометричных пленок CeB_6 : температура подложек $930\text{--}940^\circ\text{C}$, ток эмиссии 60 мА, скорость напыления ~ 16 нм/мин. Отметим, что в процессах напыления 3–6 использовались предварительно отожженные в атмосфере водорода мишени, а в процессах 5 и 6 применялась заслонка. Эти технологические отличия не привели к существенному изменению как отношения Ce/B , так и содержания в пленках неконтролируемой примеси кислорода. Однако в пленках, полученных в процессе напыления 6, наблюдается максимальная концентрация кислорода и значительное отклонение от стехиометрии отношения Ce/B , что приводит к заключению о целесообразности использования в процессах напыления кварцевого цилиндра, создающего благоприятную среду в близлежащем к образцам пространстве.

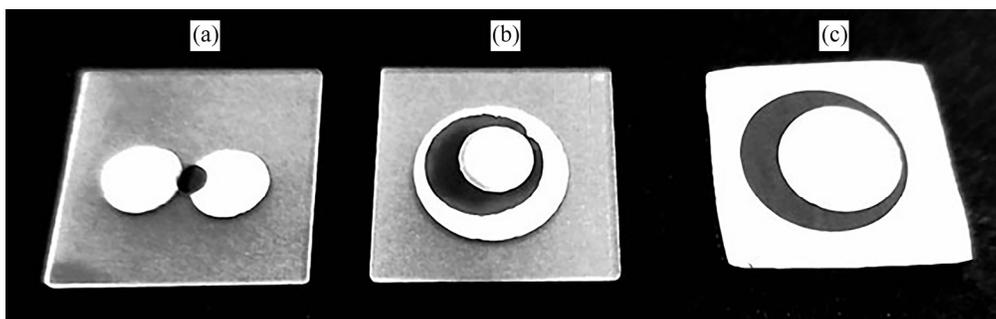


Рис.1. Изображения трех типов чувствительных элементов термоэлектрического детектора, напыленных на квадратные подложки со стороной 1 см: (а) однослойный, (б) трехслойный и (с) двухслойный.

Трудности при напылении пленок W были преодолены посредством использования многослойной мишени, составленной из 12 пластин W толщиной 1 мм каждая. Для напыления пленок W оптимальными являются следующие параметры: температура подложек 550°C, ток эмиссии 300 мА, скорость напыления ~15.6 нм/мин. Как видно из табл.1 в пленках, полученных в процессе напыления 16, содержится 9.7 ат% кислорода. Однако после двух последовательных напылений пленок CeB₆ и W на эти образцы кислорода в них не было обнаружено.

С помощью пленок W процессов 16, 17 и CeB₆ процесса 14, напыленных последовательно в различных сочетаниях, были получены гетероструктуры различных конфигураций для трех типов чувствительного элемента термоэлектрического детектора (рис.1). На рис.1а изображен однослойный чувствительный элемент, состоящий из двух W пленок, соединенных перемычкой из пленки CeB₆. Однослойный чувствительный элемент напылен на сапфировую подложку. На рис.1b представлен трехслойный чувствительный элемент – результат последовательного напыления W на сапфировую подложку, CeB₆ на пленку W и пленки W на пленку CeB₆. На рис.1c расположен двухслойный вариант чувствительного элемента, полученный напылением CeB₆ (процесс 14) на подложку W и последующим напылением пленки W (процесс 17) на пленку CeB₆.

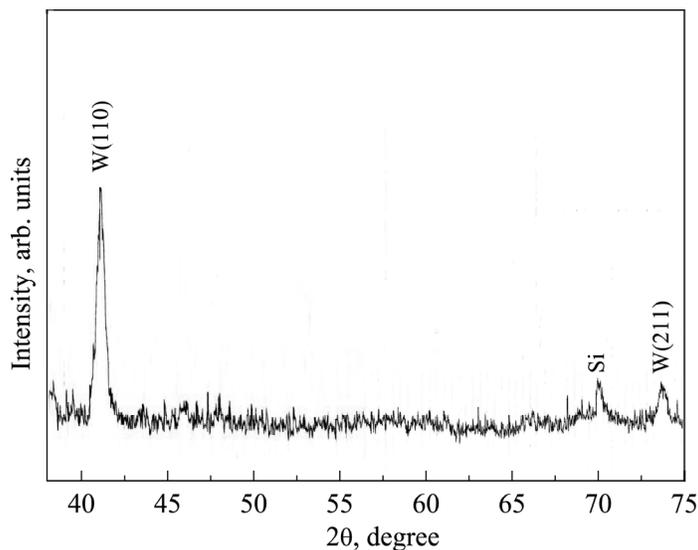


Рис.2. Рентгеновская дифрактограмма пленки W на подложке из Si.

На рис.2 представлена рентгенограмма пленки W толщиной 234 нм, из которой видно, что получена α-фаза вольфрама с кубической объемноцентрированной решеткой.

Пленки CeB₆ имели характерную для всех гексаборидов объемноцентрированную кубическую кристаллическую структуру типа CsCl (пространственная

группа $Pm\bar{3}m - O_h^h$). На рентгеновских дифрактограммах пленок CeB_6 присутствовал только пик (100). Преимущественная ориентация пленок имела место независимо от материала подложки, температуры и скорости напыления [14].

В табл.2 представлены значения удельного сопротивления пленок W различной толщины, напыленных на разные подложки. Как видно из таблицы, удельное сопротивление значительно падает с увеличением толщины пленки и практически не зависит от материала подложки. Удельное сопротивление объемных поликристаллических образцов W составляет 5.5 мкОм см [15], что на порядок меньше сопротивления полученных пленок. Однако, как видно из таблицы, их сопротивление сравнимо с сопротивлением пленок W, полученных при напылении на холодные подложки [7]. По данным этой же работы, пленки, напыленные на нагретые до 550°C подложки или подвергнутые дополнительной термообработке, имеют более низкое сопротивление. Отличие сопротивлений пленок, напыленных на нагретые подложки в нашем случае и в работе [7], можно объяснить тем, что в камере напылительной установки в последнем случае достигался вакуум на два порядка выше.

Табл.2. Удельное сопротивление пленок W при 20°C

Подложка	Толщина, нм	Удельное сопротивление, мкОм см
Al_2O_3	130	80.6
	235	55
Si	110	154
	235	67.8
AlN	235	58.5
Al_2O_3 [7]	200–400	7–8 (550°C)
		40–50 (20°C)

Пленки W, полученные в процессах напыления 15–17, имеют гладкую поверхность с металлическим блеском. По данным электронной микроскопии они обладают гранулярной структурой с размером гранул ~200 нм. На рис.3 представлены СЭМ-изображения поверхности слоев гетероструктуры W/ CeB_6 /W/ Al_2O_3 , фотография которой приведена на рис.1b. Микроструктура прилегающего к подложке слоя W (рис.3a) определяет как микроструктуру пленки CeB_6 (рис.3b), так и верхнего слоя W (рис.3c). Размеры гранул всех трех пленок (W процесс 16, CeB_6 процесс 14 и W процесс 17) ~200 нм. Пленка CeB_6 , нанесенная непосредственно на подложку Al_2O_3 (процесс 12), при одинаковых с

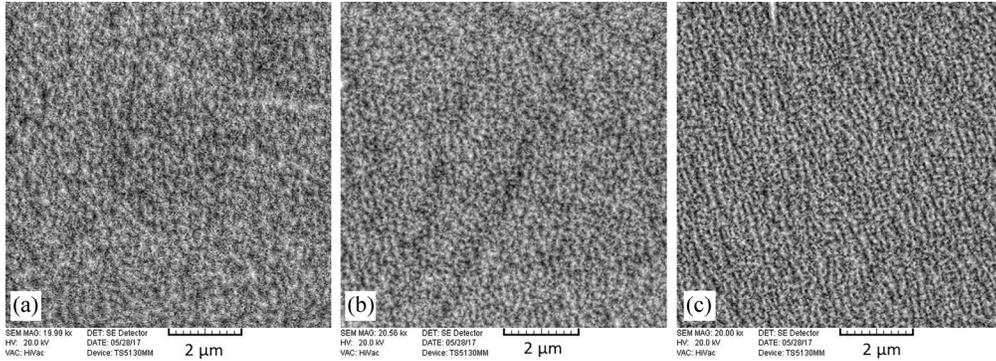


Рис.3. СЭМ-изображения компонент гетероструктуры W/CeB₆/W/Al₂O₃: (a) пленка W на подложке Al₂O₃, (b) пленка CeB₆ и (c) пленка W – верхний слой.

процессом 14 условиях получения, имела более мелкозернистую структуру с меньшим на порядок размером гранул.

Для выявления области длин волн, в которой такой детектор будет эффективным, исследовали спектры отражения пленок W разной толщины (рис.4). Видно, что в исследованной области спектра отражение пленок W не сильно зависит от толщины пленок и материала подложек. Отражение более 50% наблюдается на всех образцах для длин волн от 400 до 2000 нм. Полученные результаты находятся в хорошем соответствии со спектрами объемных образцов W [16]. Можно утверждать, что в исследованной области спектра пленки W не могут

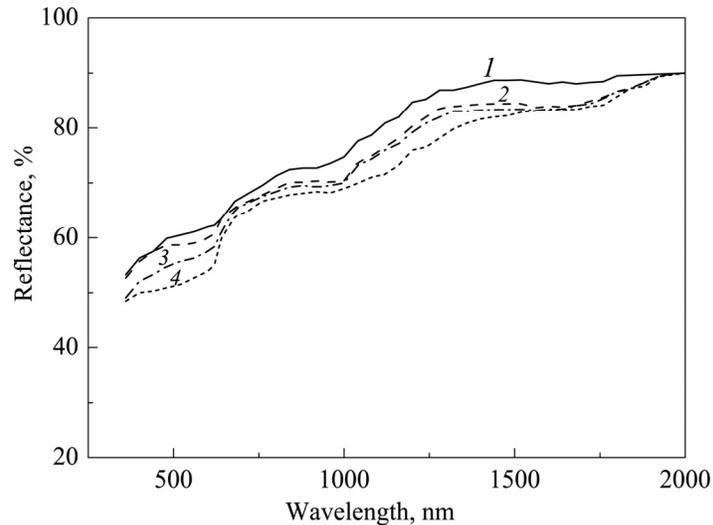


Рис.4. Спектры отражения пленок W различной толщины на разных подложках: 1 – 234 нм, 2 – 130 нм, 3 и 4 – 114 нм; 1 и 3 – подложки из Al₂O₃, 2 и 4 – подложки из Si.

быть эффективными поглотителями фотонов. Термоэлектрический детектор с вольфрамовым поглотителем будет эффективным для фотонов с энергией больше 6 эВ, т. е. для электромагнитного излучения дальнего УФ диапазона.

3.2. Определение параметров термоэлектрического однофотонного детектора

Рассмотрим теперь какими параметрами будет обладать термоэлектрический однофотонный детектор, чувствительный элемент которого состоит из полученных в данной работе материалов. Важнейшим параметром чувствительного элемента является вероятность, с которой попавший на него фотон будет поглощен. Рассмотрим область электромагнитного спектра с энергиями фотонов больше 6 эВ, в которой отражение от вольфрамового поглотителя не будет высоким. На вопрос какова вероятность поглощения фотона в данном материале заданной толщины, можно ответить, воспользовавшись законом Бугера–Ламберта и значениями коэффициента поглощения W [17]. На рис.5 представлены зависимости вероятности поглощения фотонов с различной энергией в пленках W с толщинами 130 и 230 нм. Можно видеть, что в области энергий 6–50 эВ (24.8–206 нм) вероятность поглощения фотонов близка к единице для обеих толщин. Для пленки толщиной 130 нм наблюдается небольшое окно прозрачности в области энергии 100 эВ, и вероятность поглощения понижается при энергиях фотонов > 300 эВ. Пленки толщиной 230 нм поглощают с вероятностью близкой к единице фотоны с энергией < 500 эВ. Для поглощения с вероятностью близкой к единице фотонов с большей энергией потребуются более толстые пленки W .

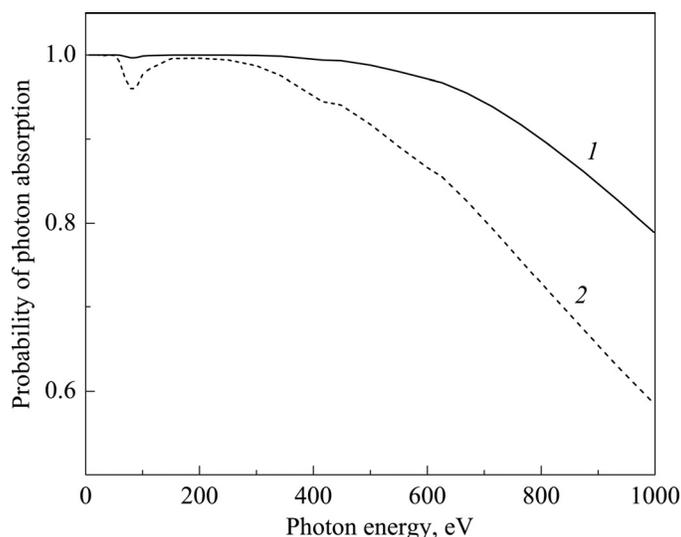


Рис.5. Вероятность поглощения фотонов с различной энергией в пленках W с толщинами: 1 – 230 нм и 2 – 130 нм.

Методом компьютерного моделирования процессов распространения тепла в трехслойном сенсоре [3–5] исследованы основные характеристики термоэлектрического детектора: максимальная величина возникающего на сенсоре электрического напряжения и скорость счета. Последняя определялась как обратная величина времени спада сигнала до фонового значения. Компьютерное моделирование процессов распространения тепла проводилось для трехслойного сенсора W/CeV₆/W, напыленного на подложку Al₂O₃, при поглощении фотонов с энергией 6–50 эВ в центре поверхности поглотителя. Кроме энергии фотона в расчетах изменялись толщина слоя поглотителя из W и термоэлектрического сенсора CeV₆. Были выбраны такие толщины слоев чувствительного элемента, которые соответствуют пленкам, экспериментально полученным в настоящей работе.

По данным компьютерного моделирования изучены временные зависимости возникающего на сенсоре напряжения. Для толщины поглотителя 100 нм время достижения максимума сигнала одинаково для толщин сенсора 100, 300 и 500 нм и равно 0.9 фс. В случае толщины поглотителя 200 нм время достижения максимума сигнала также одинаково для рассмотренных толщин сенсора и равно 2.7 фс. Время спада сигнала до фонового значения не зависит от изменения толщины сенсора в диапазоне 100–500 нм.

Зависимости максимума возникающего на сенсоре напряжения и скорости счета от энергии фотона приведены на рис.6. Видно, что максимальное напряжение линейно растет с увеличением энергии фотона и для всех энергий оно больше при толщине поглотителя 100 нм. Скорость счета увеличивается с уменьшением энергии фотона и для фотонов с энергией 10 эВ достигает 2.4 и 4.8 ТГц при толщинах поглотителя 100 и 200 нм, соответственно.

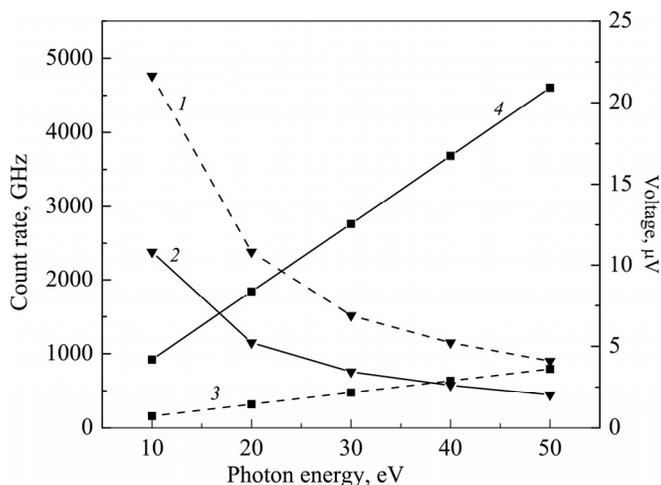


Рис.6. Зависимость скорости счета (1, 2) и максимального напряжения на сенсоре (3, 4) от энергии фотона для детектора с поверхностью 10×10 мкм². Толщины сенсора и теплоотвода соответственно 100 и 500 нм для поглотителя с толщинами 200 нм (1, 3) и 100 нм (2, 4).

4. Заключение

Определены условия получения пленок CeB_6 стехиометрического состава с малым содержанием примеси кислорода. Предлагается использовать составную мишень для напыления пленок W методом электронно-лучевого напыления. Это уменьшает теплоотвод из зоны мишени, на которую фокусируется электронный пучок, и обеспечивает большую скорость испарения при одинаковых параметрах электронного пучка. По данным рентгеноструктурного анализа получены пленки W α -фазы с кубической объемноцентрированной решеткой. По данным электронной микроскопии пленки W имеют гранулярную структуру с размером гранул около 200 нм. Удельное сопротивление пленок W при комнатной температуре уменьшается от 150 до 55 мкОм см с увеличением толщины пленок от 110 до 230 нм.

На основе полученных результатов сделан вывод, что поскольку пленки W отражают более 50% в диапазоне длин волн больше 500 нм, они могут служить поглотителями только для регистрации УФ и рентгеновских фотонов. Методом компьютерного моделирования изучены временные зависимости возникающего на чувствительном элементе $W/\text{CeB}_6/W$ сигнала при поглощении УФ фотонов. Показано, что при регистрации фотонов с энергией 6–50 эВ сигнал может достигать микровольт, обеспечивая тем самым высокое энергетическое разрешение. При этом достигается терагерцовая скорость счета.

Полученные результаты могут быть использованы для создания прототипа чувствительного элемента термоэлектрического детектора. Принимая во внимание преимущества термоэлектрического детектора [3–5], можно утверждать, что термоэлектрические детекторы с многослойной чувствительной ячейкой $W/\text{CeB}_6/W$ могут быть реальными конкурентами сверхпроводящих однофотонных детекторов.

Авторы выражают благодарность А.В. Еганяну за проведение рентгеновских измерений полученных образцов.

ЛИТЕРАТУРА

1. **D. van Vechten, K. Wood, G. Fritz, J. Horwitz, A. Gyulamiryan, A. Kuzanyan, V. Vartanyan, A. Gulian.** Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res., **444**, 42 (2000).
2. **В.А. Петросян.** Изв. НАН Армении, Физика, **46**, 194 (2011).
3. **A. Kuzanyan, V. Nikoghosyan, A. Kuzanyan.** Sensors & Transducers, **191**, 57 (2015).
4. **A.A. Kuzanyan, A.S. Kuzanyan, V.R. Nikoghosyan.** Sensors & Transducers, **207**, 21 (2016).
5. **А.А. Кузаян.** Изв. НАН Армении, Физика, **51**, 484 (2016).
6. **C.T. Chantler.** J. Phys. Chem. Ref. Data, **24**, 1 (1995).
7. **A.K. Sinha, T.E. Smith, T.T. Sheng, N.N. Axelrod.** J. Vac. Sci. Technol., **10**, 436 (1973).
8. **V. Stelmakh, V. Rinnerbauer, J.D. Joannopoulos, M. Soljatic, I. Celanovic,**

- J.J. Senkevich, C. Tucker, T. Ives, R. Shrader.** *J. Vac. Sci. Technol. A*, **31**, 061505 (2013).
9. **J.H. Souk, J.F. O'Hanlon, J. Angillelo.** *J. Vac. Sci. Technol. A*, **3**, 2289 (1985).
10. **T. Acsente, R.F. Negrea, L.C. Nistor, C. Logofatu, E. Matei, R. Birjega, C. Grisolia, G. Dinescu.** *Eur. Phys. J. D*, **69**, 161 (2015).
11. **D. Hatanaka, E. Asanuma, K. Takeda, T. Ikeda, M. Nakamura, Y. Nakanishi, F. Iga, Y. Harada, H. Yamaguchi, M. Yoshizawa.** *Proc. Int. Conf. Strongly Correlated Electron Systems (SCES2013), JPS Conf. Proc.*, **3**, 011049 (2014).
12. **J.Q. Xu, T. Mori, Y. Bando, D. Golberg, D. Berthebaud, A. Prytuliak.** *Mater. Sci. Engin. B*, **177**, 117 (2012).
13. **H. Shishido, K. Kawai, A. Futagami, S. Noguchi, T. Ishida.** *Proc. Int. Conf. Strongly Correlated Electron Systems (SCES2013), JPS Conf. Proc.*, **3**, 011045 (2014).
14. **А.А. Кузанын, А.С. Кузанын, Г.Р. Бадалян, С.И. Петросян, В.О. Варданян, В.Н. Гурин, М.П. Волков, С.Х. Пилюсян.** *ФТП*, **51**, 1041 (2017).
15. <https://www.calc.ru/134.html>
16. **M.A. Ordal, R.J. Bell, R.W. Alexander, L.A. Newquist, M.R. Querry.** *Appl. Opt.*, **27**, 1203 (1988).
17. **C.T. Chantler.** *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **24**, 71 (1995).

PREPARATION AND INVESTIGATION OF PROPERTIES OF
W/CeB₆/W HETEROSTRUCTURE FOR SENSITIVE ELEMENT
OF A SINGLE-PHOTON THERMOELECTRIC DETECTOR

S.I. PETROSYAN, A.A. KUZANYAN, G.R. BADALYAN, A.S. KUZANYAN

The possibility of preparation W/CeB₆/W heterostructures on Al₂O₃, AlN, Si, and W substrates by e-beam evaporation was investigated. Preparation conditions W thin films on dielectric substrates and CeB₆ films as well as CeB₆ films on dielectric and W substrates or W films are determined. Reflection spectra of W films, results of X-ray diffractometry, X-ray microanalysis and electron microscopy of W and CeB₆ films are presented. W/CeB₆/W heterostructures with various configurations and sizes are created. It has been shown by computer simulation that a detector with a W/CeB₆/W heterostructure can provide a signal at the level of microvolts and a terahertz count rate when detecting 6–50 eV energy photons. The obtained results serve as a basis for creating a prototype of a detection pixel of thermoelectric single-photon detector.

УДК 548.732

КРИВЫЕ КАЧАНИЯ РЕНТГЕНОВСКОЙ АСИММЕТРИЧНОЙ ДИФРАКЦИИ БРЭГГА С ДВУМЕРНОЙ КРИВИЗНОЙ ВОЛНОВОГО ФРОНТА

М.К. БАЛЯН

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

e-mail: mbalyan@ysu.am

(Поступила в редакцию 9 января 2018 г.)

Рассмотрена рентгеновская асимметричная брэгговская дифракция в идеальном полубесконечном кристалле с плоской входной поверхностью с учетом двумерной кривизны волнового фронта падающей на кристалл волны. С использованием функции Грина получено выражение для коэффициента отражения и исследованы кривые качания в зависимости от углов отклонения от выбранного точного направления Брэгга в плоскости дифракции и в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении в приближении локально-плоской волны. Исследованы вид, расположение и размеры области полного отражения кривых качания от степени асимметрии геометрии дифракции. Оценены требования к пространственной и временной когерентности для получения кривых качаний.

1. Введение

Коэффициент отражения динамически отраженной рентгеновской плоской волны от полубесконечного идеального кристалла зависит от параметра отклонения от условия Брэгга и от степени асимметрии геометрии дифракции. При фиксированном угле асимметрии зависимость коэффициента отражения от углового отклонения от условия Брэгга называется кривой качания [1, 2]. Кривую качания можно получить в результате дифракции от удаленного точечного источника как распределение интенсивности по углам отклонения на входной поверхности кристалла [3]. В работах [1–10] рассматривается кривая качания в зависимости от углового отклонения от условия Брэгга в плоскости дифракции. В работах [4–10] исследование проводится с использованием понятия римановой поверхности, каждый лист которой соответствует листам дисперсионной поверхности. В работах [9–10] рассмотрен резонансный случай рассеяния. Динамическая теория дифракции, учитывающая двумерную кривизну волнового фронта падающей волны (учитываются вторые производные амплитуд в уравнениях ди-

намической дифракции в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении) [11], позволяет изучить кривую качания как функцию углового отклонения от некоторого точного направления Брэгга в плоскости дифракции и в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении. Основываясь на работе [11], такие исследования были проведены в симметричном и асимметричном случаях Лауэ в рамках приближения локально-плоских волн [12, 13] и в приближении плоской падающей волны в симметричном случае Лауэ [14]. В работе [15] изучалась симметричная брэгговская дифракция сферической волны с учетом двумерной кривизны волнового фронта, а также кривые качания в приближении локально-плоской волны.

В настоящей работе изучаются кривые качания с использованием дифракции волны от удаленного точечного источника с учетом двумерной кривизны волнового фронта падающего излучения в асимметричном случае Брэгга в приближении локально-плоской волны.

2. Основные формулы

Согласно работе [16], амплитуду отраженной волны в асимметричном случае Брэгга (рис.1) в идеальном кристалле с плоской входной поверхностью и с учетом двумерной кривизны волнового фронта падающей от точечного источника волны можно написать в виде

$$E_h(x, y) = A \exp[i\Phi_0(x, y)] \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{J_1(\sigma x')}{x'} \exp[i\Phi(x', y)] H(x') dx', \quad (1)$$

$$\Phi_0(x, y) = k \left(\frac{y^2}{2L_s} - \frac{y^4}{8L_s^3} - \frac{x \cos(\theta - \alpha) y^2}{2L_s^2} - \Delta\theta \gamma_0 x + \frac{x \gamma_0^2}{2L_s} \right), \quad (2)$$

$$\Phi(x, y, x') = \frac{kx'^2 \gamma_0^2}{2L_s} + \beta(x, y)x', \quad (3)$$

$$\beta(x, y) = k\gamma_0 \left[\left(\Delta\theta + \frac{\chi_0(1+b)}{2b \sin 2\theta} \right) - \frac{1}{L_s} \left(x\gamma_0 + \tan \theta \frac{y^2}{2L_s} \right) \right]. \quad (4)$$

Здесь L_s – расстояние источник–кристалл, интегрирование проводится по входной поверхности Σ кристалла, θ – угол Брэгга, x и y – координаты точки наблюдения, а x' – координата точки интегрирования на поверхности Σ , $A = iE_0^i L_s^{-1} \sqrt{\chi_h \chi_h^{-1}} \sqrt{\gamma_0 \gamma_h^{-1}}$, $k = 2\pi / \lambda$ – волновое число, χ_0 и χ_h – Фурье-коэффициенты поляризуемости кристалла для направления прохождения и для данного отражения, $\gamma_0 = \sin(\theta - \alpha)$, $\gamma_h = \sin(\theta + \alpha)$, $b = \gamma_0 / \gamma_h$ – коэффициент

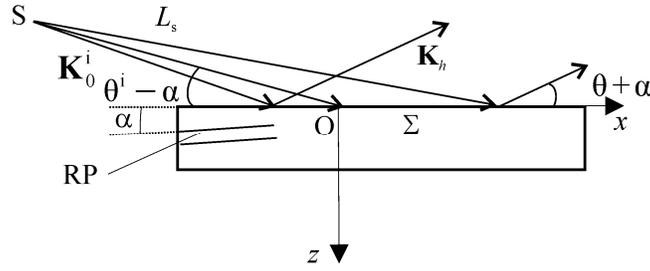


Рис.1. Схема асимметричной дифракции Брэгга: S – источник рентгеновских лучей, Oxz – координатная система в плоскости, образованная векторами \mathbf{K}_0^i и \mathbf{K}_h , ось Oy перпендикулярна плоскости рисунка.

асимметрии, α – угол между отражающими плоскостями RP и входной поверхностью кристалла, E_0^i – амплитуда падающей волны, $\sigma = k\sqrt{\chi_h\chi_{\bar{h}}\gamma_0\gamma_h} / \sin 2\theta$, \mathbf{K}_0^i – несущий волновой вектор падающей волны и \mathbf{K}_h – несущий волновой вектор отраженной волны, который выбран так, что удовлетворяет точному условию Брэгга. Угол α имеет положительное значение при повороте отражающих плоскостей против часовой стрелки относительно симметричного случая и отрицательное в противоположном случае. В выражении амплитуды (1) отличной от стандартной теории является зависимость локального параметра отклонения от условия Брэгга β не только от x , но и от координаты y . Отклонение от условия Брэгга $\Delta\theta = \theta^i - \theta$, где θ^i – угол скольжения падающей волны относительно отражающих плоскостей RP.

3. Кривые качания в асимметричном случае Брэгга

Переход к локально-плоской волне осуществляется игнорированием квадратичного относительно x' члена в выражении $\Phi(x, y, x')$ (см. формулу (3)). Соответствующую оценку, позволяющую такой переход, легко получить из условия $kx'^2\gamma_0^2 / 2L_s \ll \pi$. Учитывая, что основной вклад при интегрировании в формуле (1) дает область между нулем и первым нулем функции $J_1(x'\text{Re}\sigma)$, т. е. $0 < x' < 3.8 / \sigma_r$ ($\sigma_r = \text{Re}\sigma$), приходим к следующему условию применения приближения локально-плоской волны

$$L_s \gg L_{s0}, \quad (5)$$

где $L_{s0} = (3.8\sigma_r^{-1}\gamma_0)^2\lambda^{-1}$. Пренебрегая квадратичным членом в формуле (3) и используя табличный интеграл, для амплитуды дифрагированной волны в приближении локально-плоской волны из выражения (1) получим

$$E_h(x, y) = \frac{E_0^i}{L_s} \sqrt{\frac{\gamma_0}{\gamma_h}} \sqrt{\frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}}} \frac{\sigma e^{i(\Phi_0 + \pi)}}{\beta(x, y) + (\beta(x, y)^2 - \sigma^2)^{1/2}}. \quad (6)$$

Коэффициент отражения определяется стандартным выражением [1, 2]

$$R(x, y) = \frac{|E_h^2| \gamma_h}{(E_0^i / L_s) \gamma_0} = \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \left[p(x, y) - (p(x, y)^2 - 1)^{1/2} \right] \right|^2, \quad (7)$$

$$p(x, y) = \frac{\beta(x, y)}{\sigma} = \frac{\sqrt{b}}{\sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}}} \left[\Delta\Theta(x, y) \sin 2\theta + \frac{\chi_0(1+b)}{2b} \right], \quad (8)$$

$$\Delta\Theta(x, y) = \Delta\theta - \frac{x\gamma_0}{L_s} - \frac{y^2 \tan\theta}{2L_s^2} = \Delta\theta_{\parallel} + \Delta\theta_{\perp}, \quad (9)$$

где введены углы отклонения в плоскости дифракции и перпендикулярном к плоскости дифракции направлении

$$\Delta\theta_{\parallel} = \Delta\theta - \frac{x\gamma_0}{L_s}, \quad \Delta\theta_{\perp} = -\frac{y^2 \tan\theta}{2L_s^2}. \quad (10)$$

Согласно выражениям (7)–(10), коэффициент отражения является функцией углов отклонения в плоскости дифракции и перпендикулярном к плоскости дифракции направлении. При фиксированном угле асимметрии из зависимостей (7)–(10) от координат определяется кривая качания. В выражении (7) корень имеет две ветви, соответствующие двум ветвям дисперсионной поверхности и знак «+» или «-» перед корнем (т. е. ветвь) выбирается из условия $\left| p(x, y) \pm \sqrt{p(x, y)^2 - 1} \right|^2 < 1$ [1, 2].

Отметим, что приведенные формулы верны для σ -поляризации (фактор поляризации $C = 1$). Формулы для π -поляризации получаются заменой $\chi_h \rightarrow C\chi_h$ и $\chi_{\bar{h}} \rightarrow C\chi_{\bar{h}}$, где $C = \cos 2\theta$.

Из выражения (7) видно, что постоянные значения коэффициента отражения лежат на параболах

$$x\gamma_0 + \frac{y^2 \tan\theta}{2L_s} = \text{const}. \quad (11)$$

Как известно [1, 2], ширина области полного отражения определяется для непоглощающего кристалла из условия $p = \pm 1$, что для ширины, согласно формулам (8)–(10), дает выражение по x при фиксированном значении y

$$\Delta_x = \frac{2L_s |\chi_{hr}|}{\sqrt{b} \gamma_0 \sin 2\theta}. \quad (12)$$

Центры кривых качаний находятся из условия $p = 0$ для непоглощающего кристалла. Согласно формуле (8), центры находятся на параболе

$$\frac{x_c(y) \gamma_0}{L_s} = \left(\Delta\theta - \Delta\theta_0 - \frac{y^2 \tan \theta}{2L_s^2} \right), \quad (13)$$

а значения $p = \pm 1$ на параболах (рис.2)

$$\frac{x\gamma_0}{L_s} = \left(\Delta\theta - \Delta\theta_0 - \frac{y^2 \tan \theta}{2L_s^2} \right) \mp \frac{|\chi_{hr}|}{\sqrt{b} \sin 2\theta}, \quad (14)$$

откуда следует, что область полного отражения лежит между параболами (14). Здесь $\Delta\theta_0 = -\chi_{or}(1+b)/(2b)$, а χ_{or} и χ_{hr} – нулевой и **h** Фурье-коэффициенты действительной части поляризуемости кристалла, соответственно. Этот анализ показывает, что при фиксированном значении y получаются идентичные кривые качания по x со смещенными, согласно (13), относительно друг друга центрами и одинаковой шириной (12).

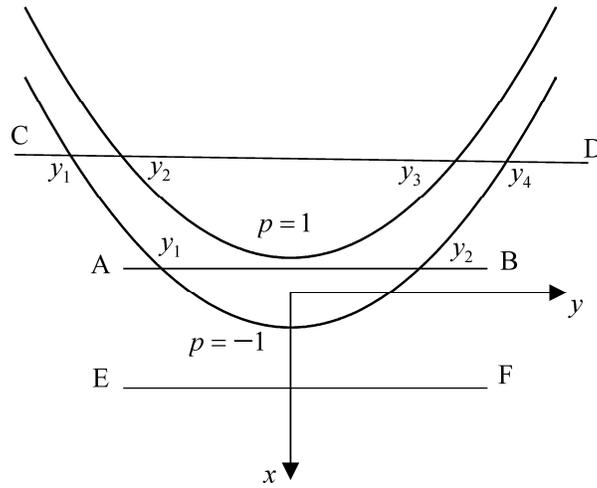


Рис.2. Расположение области полного отражения на плоскости Oxy . Центр координатной системы на рисунке помещен в точку $(x_c(0), 0)$.

При фиксированном значении x картина зависимости кривых качаний по y сложнее (рис.2). Если это фиксированное значение лежит между вершинами парабол (14) (линия АВ на рис.2), т. е. в пределах

$$x_c(0) - \frac{\Delta_x}{2} \leq x \leq x_c(0) + \frac{\Delta_x}{2}, \quad (15)$$

то область полного отражения лежит между двумя симметричными значениями y , соответствующими значению $p = -1$

$$y_{1,2} = \pm L_s \sqrt{\frac{2}{\tan \theta} \left(\Delta\theta - \Delta\theta_0 - \frac{x\gamma_0}{L_s} + \frac{|\chi_{hr}|}{\sqrt{b} \sin 2\theta} \right)}. \quad (16)$$

Из выражения (16) следует, что ширина области полного отражения по y для фиксированных значений x из области (15) определяется выражением

$$\Delta_y = y_2 - y_1 = 2L_s \sqrt{\frac{2}{\tan \theta} \left(\Delta\theta - \Delta\theta_0 - \frac{x\gamma_0}{L_s} + \frac{|\chi_{hr}|}{\sqrt{b} \sin 2\theta} \right)} \quad (17)$$

и будет зависеть от значения x . Согласно выражению (17), $\Delta_y = 0$ при $x = x_c(0) + \Delta_x/2$ и постепенно увеличивается с уменьшением x , достигая максимального значения $\Delta_y = 4L_s \sqrt{|\chi_{hr}| / (\sqrt{b} \tan \theta \sin 2\theta)}$ при $x = x_c(0) - \Delta_x/2$. При дальнейшем уменьшении x в области $x < x_c(0) - \Delta_x/2$ линия $x = \text{const}$ имеет четыре пересечения с областью полного отражения (рис.2). В этой области x получаются две области полного отражения по y между пересечениями линии $x = \text{const}$ с параболой $p = \mp 1$ и пересечениями с параболой $p = \pm 1$ (линия CD на рис.2). Координаты y пересечений с параболой $p = \mp 1$ соответствуют

$$y_{1,2} = -L_s \sqrt{\frac{2}{\tan \theta} \left(\Delta\theta - \Delta\theta_0 - \frac{x\gamma_0}{L_s} \pm \frac{|\chi_{hr}|}{\sqrt{b} \sin 2\theta} \right)}, \quad (18)$$

а с параболой $p = \pm 1$

$$y_{3,4} = L_s \sqrt{\frac{2}{\tan \theta} \left(\Delta\theta - \Delta\theta_0 - \frac{x\gamma_0}{L_s} \mp \frac{|\chi_{hr}|}{\sqrt{b} \sin 2\theta} \right)}. \quad (19)$$

Верхние знаки соответствуют первым индексам, нижние – вторым. Ширины областей полного отражения соответствуют

$$\Delta_{1y} = y_2 - y_1, \quad (20)$$

$$\Delta_{2y} = y_4 - y_3 = \Delta_{1y}. \quad (21)$$

Кривые качания по x асимметричны из-за поглощения [1, 2]. Это связано с тем, что коэффициент дифракционного поглощения имеет минимум не в центре области отражения, а для значения параметра отклонения вблизи одного из краев области отражения. Кривые качания по y в области x (15) симметричны по y несмотря на поглощение, а в каждой из областей (18) и (19) имеют асимметричный вид, но в целом по y кривые качания симметричны. Это связано с тем, что дифракционный коэффициент поглощения опять зависит от локального параметра отклонения (8), который зависит от x линейно, а от y зависит квадратично. Ширины областей полного отражения (20) и (21), согласно (18) и (19), уменьшаются с убыванием фиксированного значения x .

Для фиксированных значений $x > x_c(0) + \Delta_x/2$, т. е. когда эти фиксированные значения лежат ниже вершины параболы $p = -1$ (линия EF на рис.2), области полного отражения не существует.

4. Примеры кривых качания

Рассмотрим отражение Si(220) при $\lambda = 0.71 \text{ \AA}$ (17.46 кэВ) для σ -поляризации. Расстояние источник–кристалл $L_s = 5 \text{ м}$ и $\Delta\theta = \Delta\theta_0$. Зависимость расстояния L_{s0} (формула (5)) от угла асимметрии показана на рис.3, откуда видно, что условие локально-плоской волны для выбранного расстояния L_s хорошо выполняется для значений $\alpha > 0$. Для $\alpha = 5^\circ$ ($b = 0.36$) из формулы (5) имеем $L_{s0} \approx 34 \text{ см}$, и условие применения приближения локально-плоской волны (5) выполняется.

Зависимость коэффициента отражения R от x и y при угле асимметрии $\alpha = 5^\circ$ показана на рис.4, откуда видно, что область полного отражения лежит между парабололами, как было выяснено из рис.2.

С увеличением угла асимметрии ширина области полного отражения Δ_x

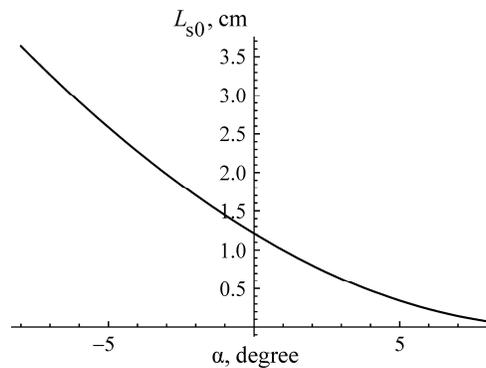


Рис.3. Зависимость расстояния L_{s0} от угла асимметрии.

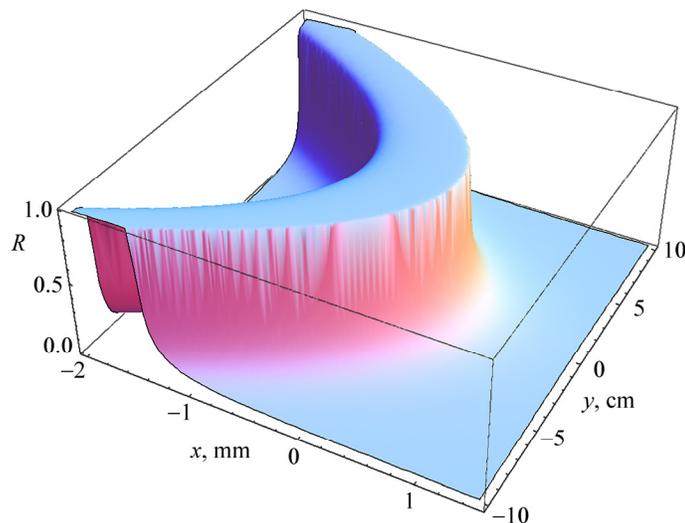


Рис.4. Зависимость коэффициента отражения R от x и y при $\alpha = 5^\circ$ ($b = 0.36$).

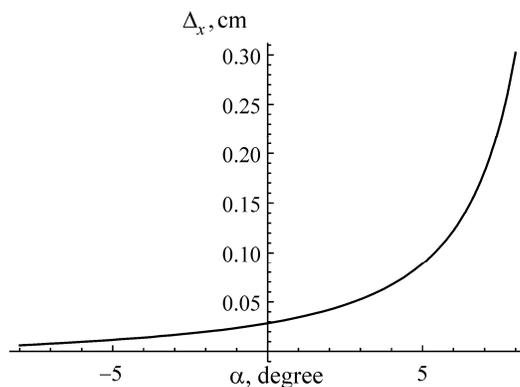


Рис.5. Зависимость ширины области полного отражения Δ_x от угла асимметрии.

(формула (12)) увеличивается при фиксированном расстоянии источник–кристалл (рис.5).

С увеличением угла асимметрии при фиксированном расстоянии L_s и $x = 0$ ширина области полного отражения Δ_y (формула (17)) увеличивается (рис.6).

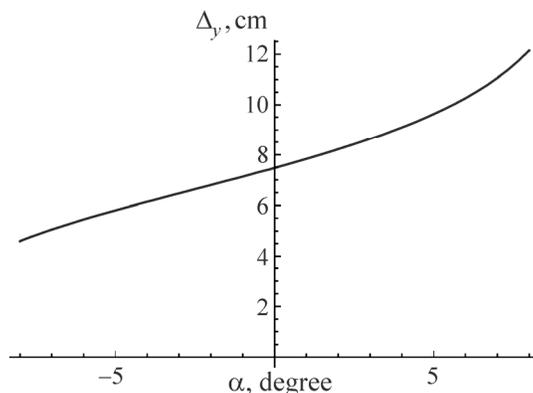


Рис.6. Зависимость ширины области полного отражения Δ_y от угла асимметрии при фиксированном значении $x = 0$.

На рис.7а показана зависимость коэффициента отражения R от y для значений $x = -\Delta_x/2, 0, \Delta_x/2$ при фиксированном значении L_s и $\alpha = 5^\circ$. Видно, что ширина области полного отражения увеличивается с уменьшением x , как это было выяснено из рис.2. Причем для $x = \Delta_x/2$ ширина области полного отражения равна нулю, а для $x = -\Delta_x/2$ видно начало образования двух областей полного отражения. У краев значение коэффициента отражения из-за поглощения равным образом чуть выше, чем в центре. Таким образом, этот эффект по y симметричен, между тем как тот же эффект по x асимметричен [1, 2]. На рис.7b показана зависимость коэффициента отражения от x для трех фиксированных

значений $y = -7, -5$ и 0 см. Как было выяснено из рис.2, в этом случае получаются идентичные кривые со смещением центра (смещение происходит в направлении отрицательных значений x и не зависит от знака y).

На рис.8 показана зависимость ширины области полного отражения (20) (или (21)) от x для значений x выше вершины параболы с $p = 1$ ($x < -\Delta_x/2$, рис.2), откуда видно, что ширина области полного отражения (20) уменьшается с убыванием x .

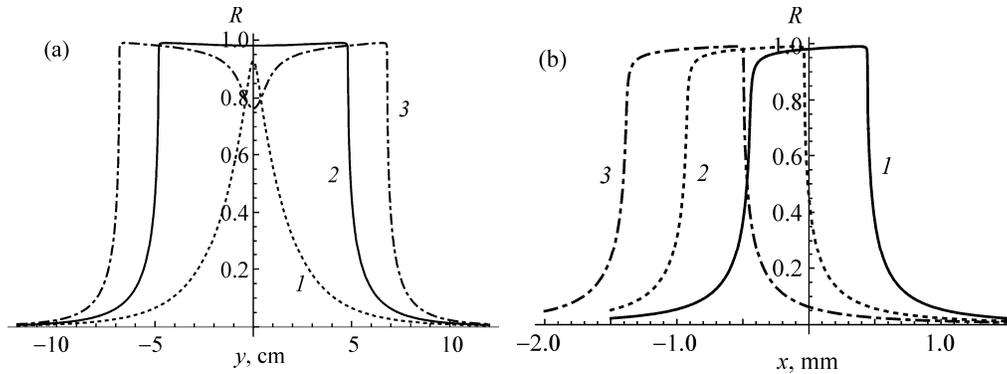


Рис.7. (а) Зависимость коэффициента отражения R от y для фиксированных значений x : 1 - $x = -\Delta_x/2$, 2 - $x = 0$ и 3 - $x = \Delta_x/2$. (б) Зависимость R от x для фиксированных значений y : 1 - $y = 0$, 2 - $y = -5$ см и 3 - $y = -7$ см.

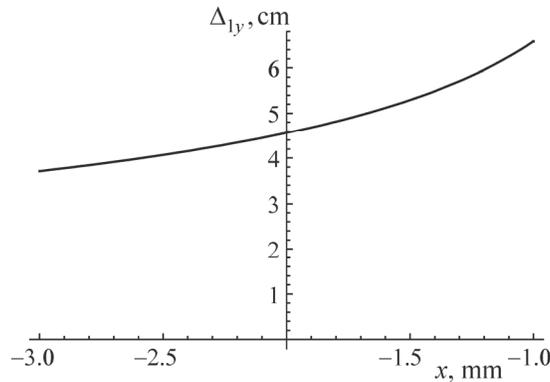


Рис.8. Зависимость ширины области полного отражения Δ_{1y} (формула (20)) от x при $\alpha = 5^\circ$.

Для этой же области значений x на рис.9 показана зависимость коэффициента отражения R от y для $x = -\Delta_x$, откуда видно, что кривая качания состоит из двух симметрично расположенных частей, каждая из которых асимметрична за счет поглощения. Такое поведение кривой качания соответствует анализу, проведенному на основе рис.2.

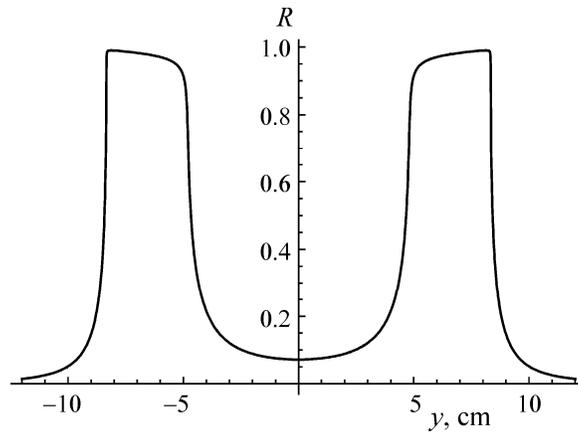


Рис.9. Зависимость коэффициента отражения от y для фиксированного значения $x = -\Delta_x$ при $\alpha = 5^\circ$.

В рассмотренном случае было предположено, что источник точечный, а падающее излучение монохроматическое. Это допущение верно, когда выполняются условия когерентности, налагаемые на размеры источника и степень монохроматичности падающего на кристалл излучения. Оценки условий когерентности были даны в работе [5]. Предположив, что источник имеет одинаковые размеры в плоскости дифракции и в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении, получаем, что размер источника (пространственная когерентность) должен быть меньше 71×71 мкм², а степень монохроматичности $\Delta\lambda / \lambda < 8 \times 10^{-5}$ для $\alpha = 5^\circ$. Такие условия могут быть реализованы как с использованием синхротронного излучения и лазеров на свободных электронах, так и с помощью лабораторных источников рентгеновского излучения.

5. Заключение

Интенсивность отраженной волны на входной поверхности полубесконечного кристалла при асимметричной брэгговской дифракции рентгеновской волны зависит от отклонения падающего пучка в плоскости дифракции и в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении от условия Брэгга и от угла асимметрии. При определенном значении угла асимметрии и для достаточно большого расстояния источник–кристалл, когда выполняется условие локально-плоской волны, коэффициент отражения как функция координат точки наблюдения на входной поверхности кристалла в плоскости дифракции и в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении эквивалентен кривой качания по

соответствующим угловым отклонениям приходящих в эту точку наблюдения лучей. Ширина области полного отражения в плоскости дифракции и в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении имеет различную зависимость от угла асимметрии. Область полного отражения заключается между двумя параболами и соответствующие значениям параметра отклонения $p = -1$ и $p = 1$. При фиксированном значении угла отклонения в перпендикулярном к плоскости дифракции направлении кривые качания по угловому отклонению в плоскости дифракции имеют такой же вид, как в стандартной теории, но со смещенными относительно друг друга центрами в зависимости от фиксированного значения. При фиксированном значении угла отклонения в плоскости дифракции кривые качания между вершинами парабол симметричны, а ширины увеличиваются до вершины параболы для значения $p = 1$. Ниже вершины параболы для значения $p = -1$ область полного отражения не существует. Выше вершины параболы с значением $p = 1$ кривая качания разделяется на две кривые качания, расположенные симметрично относительно плоскости дифракции. В целом кривые качания, перпендикулярные к плоскости дифракции, симметричны относительно углового отклонения и на несколько порядков шире, чем кривые качания в плоскости дифракции.

ЛИТЕРАТУРА

1. **З.Г. Пинскер.** Рентгеновская кристаллооптика. Москва, Наука, 1982.
2. **A. Authier.** Dynamical Theory of X-Ray Diffraction. Oxford, University Press, 2001.
3. **V. Mocella, Y. Epelboin, P. Guigay.** Acta Cryst., **A56**, 308 (2000).
4. **Н. Като, Т. Катагава, Т. Сака.** Кристаллография, **16**, 1110 (1971).
5. **Н. Като, Т. Катагава, Т. Сака.** Кристаллография, **16**, 979 (1972).
6. **T. Saka, T. Katagawa, N. Kato.** Acta Cryst., **A28**, 102 (1972).
7. **T. Saka, T. Katagawa, N. Kato.** Acta Cryst., **A28**, 113 (1972).
8. **T. Saka, T. Katagawa, N. Kato.** Acta Cryst., **A29**, 192 (1973).
9. **T. Saka.** Acta Cryst., **A72**, 338 (2016).
10. **T. Saka.** Acta Cryst., **A72**, 472 (2016).
11. **М.К. Балян.** Изв. НАН Армении, Физика, **49**, 62 (2014).
12. **М.К. Балян.** Изв. НАН Армении, Физика, **49**, 446 (2014).
13. **М.К. Балян.** Изв. НАН Армении, Физика, **53**, 111 (2018).
14. **М.К. Балян.** Изв. НАН Армении, Физика, **52**, 102 (2017).
15. **М.К. Балян.** Изв. НАН Армении, Физика, **50**, 134 (2015).
16. **М.К. Балян.** Изв. НАН Армении, Физика, **49**, 284 (2014).

ՌԵՆՏԳԵՆՅԱՆ ԴԻՖՐԱԿՑԻԱՅԻ ՃՈՃՄԱՆ ԿՈՐԵՐԸ ԲՐԵԳԻ ԱՆՀԱՄԱՉԱՓ
ԴԻՖՐԱԿՑԻԱՅԻ ԴԵՊՔՈՒՄ ԱԼԻՔՍՅԻՆ ՃԱԿԱՏԻ
ԵՐԿՉԱՓ ԿՈՐՈՒԹՅԱՆ ՀԱՇՎԱՌՄԱՄԲ

Մ.Կ. ԲԱԼՅԱՆ

Հաշվի առնելով բյուրեղի վրա ընկնող ալիքի ալիքային ճակատի երկչափ կորությունը դիտարկված է ունեցնող անհամաչափ բրեգյան դիֆրակցիան հարթ մուտքի մակերևույթով կիսաանվերջ կատարյալ բյուրեղում: Գրինի ֆունկցիայի օգտագործմամբ տեղային-հարթ ալիքի մոտավորությամբ ստացված է արտահայտություն անդրադարձման գործակցի համար և ուսումնասիրված են ճոճման կորերը կախված ընտրված ճշգրիտ Բրեգի ուղղությունից դիֆրակցիայի հարթության մեջ և դիֆրակցիայի հարթությանն ուղղահայաց ուղղությամբ անկյունային շեղումներից: Ուսումնասիրված են ճոճման կորերի տեսքը, դիրքը և լրիվ անդրադարձման տիրույթի չափերը կախված դիֆրակցիայի երկրաչափության անհամաչափության աստիճանից: Գնահատված են ճոճման կորերի ստացման ժամանակային և տարածական կոհերենտությունների պահանջները:

ROCKING CURVES OF THE X-RAY ASYMMETRICAL BRAGG DIFFRACTION
WITH TWO-DIMENSIONAL CURVATURE OF THE WAVE FRONT

M.K. BALYAN

The X-ray asymmetrical Bragg diffraction in a perfect semi-infinite crystal with a plane entrance surface is considered taking into account two-dimensional curvature of the wave front of the incident wave. An expression for reflection coefficient using the Green function in the approximation of locally plane wave is obtained and the rocking curves depending on the angular departure from the chosen exact Bragg direction in the diffraction plane and in the perpendicular to the diffraction plane direction are investigated. The rocking curves shape, position and the total reflection region sizes depending on asymmetry degree of diffraction geometry are investigated. The requirements to spatial and temporal coherency for obtaining rocking curves are estimated.

УДК 577.3; 547.963.3

ВЛИЯНИЕ СЛАБЫХ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН НА ТЕПЛОВЫЕ СВОЙСТВА ВОДНЫХ РАСТВОРОВ БИОМАКРОМОЛЕКУЛ

В.П. КАЛАНТАРЯН^{1*}, С.Н. АКОПЯН², П.О. ВАРДЕВАНЯН¹

¹Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

²Государственный инженерный университет, Ереван, Армения

*e-mail: vkalantaryan@ysu.am

(Поступила в редакцию 19 декабря 2017 г.)

Исследованы зависимости плотности (ρ) и коэффициента теплового расширения (α) дистиллированной воды, физиологического раствора и водно-солевого раствора ДНК при облучении растворов миллиметровыми электромагнитными волнами нетепловой интенсивности с частотами 64.5 и 50.3 ГГц от температуры. Показано, что при нагревании растворов плотность необлученных и облученных растворов уменьшается, однако имеется существенное отличие между ходом зависимости $\rho(t)$ для облученных и необлученных водно-солевых растворов. Расчеты показали, что для исследованных растворов коэффициент теплового расширения увеличивается с увеличением температуры, причем рост α происходит по разному для облученных растворов.

1. Введение

В настоящее время миллиметровые электромагнитные волны (МЭМВ) нетепловой интенсивности успешно применяются в клинической медицине, в различных областях, несмотря на то, что механизмы их действия на биологические объекты остаются до конца не исследованными. Обнаружены многочисленные эффекты МЭМВ низкой интенсивности на организм человека и животных, а также на клеточном уровне [1, 2]. Показано существование как селективных частотно-зависимых эффектов [3], так и неселективных, независимых от частоты воздействий [4, 5]. Однако до настоящего времени первичные мишени восприятия этих волн однозначно не выяснены. В ряде исследований показано, что МЭМВ могут изменять объемные свойства водных растворов, в частности, изменять структурированность воды [6, 7]. Недавно нами было показано [8], что МЭМВ не поглощаются поверхностным слоем водных растворов, проникают в более глубокие слои жидкости и приводят к дегидратации присутствующих в растворе ионов, вследствие чего увеличивается плотность растворов.

Целью настоящей работы было исследование плотности водно-солевых растворов и водно-солевых растворов дезоксирибонуклеиновых кислот (ДНК) в зависимости от температуры и определение коэффициента теплового расширения облученных низкоэнергетическими когерентными МЭМВ с частотами 50.3 и 64.5 ГГц, совпадающими с резонансными частотами колебаний молекулярных водных структур [9].

2. Материалы и методы исследований

В работе использовали ДНК тимуса теленка фирмы Sigma и NaCl фирмы Serva. Растворы ДНК были приготовлены в физиологическом растворе (0.15 M NaCl). Исследуемые водно-солевые растворы готовили за час до измерений. Плотность образцов определяли на денситометре DMA 4500 Anton Paar с чувствительностью 10^{-5} г/см³. Для облучения растворов применялись генераторы Г4-141 и Г4-142, работающие на основе лампы обратной волны, что подробно описано в работах [4, 8]. Диапазон частот излучения для Г4-141 составлял 37.5–53.37 ГГц (плотность потока мощности в месте нахождения образца 60 мкВт/см²), а для Г4-142 – 53.3–78.33 ГГц (плотность потока мощности 50 мкВт/см²). Измерения проводились в интервале температур $20^{\circ}\text{C} \leq t \leq 70^{\circ}\text{C}$. Точность определения температуры $\pm 0.05^{\circ}\text{C}$.

3. Результаты и обсуждение

В работе [8] было показано, что под действием МЭМВ нетепловой интенсивности плотность водно-солевых растворов и растворов ДНК увеличивается, достигая максимального значения при облучении 90 мин с частотой 50.3 ГГц, совпадающей с резонансной частотой колебаний гексагональных структур воды [9]: увеличение плотности физиологического раствора и водно-солевого раствора ДНК составляет 10^{-4} г/см³. Принято считать электромагнитное излучение нетепловым, если плотность потока мощности не превышает 10 мВт/см². Поэтому была исследована зависимость плотности водно-солевых растворов и растворов ДНК от температуры, когда растворы облучались 90 мин с резонансными частотами 50.3 и 64.5 ГГц колебаний молекулярных водных структур. Как следует из табл.1, где приведены значения плотности необлученных и облученных образцов при разных температурах, при нагревании растворов плотность необлученных и облученных водно-солевых растворов и растворов ДНК уменьшается, однако имеется существенное отличие между ходом зависимости для облученных и необлученных растворов ДНК, особенно в области $t \geq 60^{\circ}\text{C}$, когда начинает плавиться двуспиральная структура ДНК [4, 5]. В водно-солевых растворах ДНК концентрация ДНК остается постоянной, равной 6×10^{-8} г/см³.

Табл. 1. Плотность ρ необлученных и облученных бидистиллированной воды, водно-солевого раствора и раствора ДНК

Температура t , °С	Плотность необлученного раствора ρ , г/см ³			Плотность облученного раствора ρ , г/см ³		
	Бидистиллированная вода	Водно-солевой раствор	Раствор ДНК	Бидистиллированная вода	Водно-солевой раствор	Раствор ДНК
20	0.99823	0.99924	0.99924	0.99822	0.99935	0.99938
30	0.99568	0.99587	0.99588	0.99567	0.99592	0.99592
40	0.99225	0.99238	0.99236	0.99227	0.99245	0.99243
45	0.99025	0.99056	0.99062	0.99024	0.99068	0.99080
50	0.98807	0.98858	0.98858	0.98810	0.98863	0.98862
55	0.98573	0.98610	0.98610	0.98572	0.98609	0.98623
60	0.98324	0.98400	0.98400	0.98325	0.98402	0.98437
65	0.98060	0.98132	0.98132	0.98062	0.98133	0.98155
70	0.97782	0.97800	0.97815	0.97780	0.97818	0.97839

В табл.1 приведены среднеарифметические значения из 6-ти независимых измерений.

Имея значения плотности в температурном интервале 20–70°С для необлученных и облученных растворов (бидистиллированная вода, водно-солевой раствор и раствор ДНК), вычисляли коэффициент теплового расширения в указанном диапазоне температур по следующей формуле [10]:

$$\alpha(t) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{d \ln \rho}{dt}. \quad (1)$$

В табл.2 приведены значения коэффициента теплового расширения, вычисленные по формуле (1) и значения плотности для вышеуказанных растворов при различных температурах (табл.1).

Известно, что вода по сравнению с другими жидкостями имеет наименьшее значение α , которое объясняется структурными особенностями воды. В жидкой фазе молекулы образуют ассоциаты. Если за основу принять гексагональную структуру воды, то часть свободных молекул внедряется в пустоты гексагональных структур [11]. Как следует из табл.2, с увеличением температуры наблюдается увеличение α для исследованных растворов. Обычно увеличение молярного объема объясняется вытеснением части молекул воды из пустот гексагональной структуры и увеличением доли линейных водородных связей [10]. Для исследованных растворов рост α с повышением температуры происходит по-разному. Рост α гораздо сильнее для водно-солевого раствора, особенно при температурах выше 50°С. В присутствии ДНК при температурах выше 50°С α увеличивается,

Табл.2. Значения коэффициента теплового расширения α при разных температурах для исследованных растворов

Температура $t, ^\circ\text{C}$	Необлученный раствор, $\alpha, \times 10^5$			Облученный раствор, $\alpha, \times 10^5$			
				Частота 50.3 ГГц			Частота 64.5 ГГц
	Бидистиллированная вода	Водно-солевой раствор	Раствор ДНК	Бидистиллированная вода	Водно-солевой раствор	Раствор ДНК	Раствор ДНК
20	23.1	23.4	23.4	22.8	23.5	23.6	23.6
30	30.0	30.3	30.4	30.2	30.4	30.6	30.5
40	37.9	37.9	38.1	38.1	38.2	38.1	38.3
45	41.4	42.5	42.0	41.4	42.8	42.9	41.8
50	44.7	46.9	44.8	44.6	45.9	45.9	46.2
55	47.7	51.1	50.1	47.5	47.1	46.9	47.0
60	50.5	56.3	52.2	50.7	50.3	48.7	51.3
65	53.2	86.4	53.7	53.5	56.0	53.0	52.6
70	56.4	89.6	58.1	54.0	76.9	55.2	57.0

но не так сильно, как это имеет место для водно-солевого раствора. Вполне возможно, что такое поведение зависимости $\alpha(t)$ для водно-солевого раствора ДНК обусловлено плавлением ДНК вследствие нагревания.

В температурном интервале 20–50 $^\circ\text{C}$ облучение растворов резонансными частотами колебаний водных структур почти не влияет на значение α (табл.2). При температурах выше 50 $^\circ\text{C}$ α меньше для облученных образцов по сравнению с соответствующими необлученными растворами.

Из табл.2 следует, что ход зависимости $\Delta\alpha(t)$ (изменение коэффициента теплового расширения вследствие облучения) почти одинаков для облученных резонансными частотами водно-солевых растворов ДНК и отличается от аналогичной зависимости для бидистиллированной воды. Полученные экспериментальные данные можно объяснить, предполагая, что происходящие структурные изменения воды вследствие облучения затрудняют возможность образования линейных водородных связей при повышении температуры. Наличие максимума на всех кривых зависимости позволяет предположить, что существует некоторое оптимальное соотношение между частотой облучения и энергией образования водородных связей в воде.

4. Заключение

Под действием резонансных МЭМВ нетепловой интенсивности происходят определенные изменения в молекулярной структуре воды, вследствие чего плотность и коэффициент теплового расширения растворов в зависимости от

температуры в количественном отношении изменяются по-разному. Полученные нами данные позволяют предположить, что низкоинтенсивные МЭМВ имеют определенный эффект в условиях *in vitro* и могут влиять на биосистемы опосредованно, через воду. Учитывая тот факт, что термодинамические свойства воды во многом определяются образованием водородных связей между ее молекулами, можно предположить, что облучение в миллиметровом диапазоне инициирует именно их образование и, таким образом, влияет на кластеризацию воды.

ЛИТЕРАТУРА

1. O.V. Betskii, S.V. Savelev, L.A. Morozova. Biomedical Radioelectronics, **4**, 42 (2017).
2. M.K. Logani, I. Szabo, V.R. Makar, A. Bhanushali, S.I. Alekseev, M.C. Ziskin. Bioelectromag., **27**, 258 (2007).
3. A.B. Gapeyev, E.N. Mikhailik, N.K. Chemers. Bioelectromag., **29**, 197 (2008).
4. V. Kalantaryan, R. Martirosyan, Yu. Babayan, L. Nersesyan. Amer. J. Med. Biol. Res., **2**, 18 (2014).
5. S.N. Hakobyan, M.A. Shahinyan, Yu.S. Babayan. Biophys. Rev. Lett., **11**, 139 (2016).
6. V.P. Kalantaryan, Y.S. Babayan, E.S. Gevorgyan, S.N. Hakobyan, A.P. Antonyan, P.O. Vardevanyan. Prog. Electromag. Res. Lett., **13**, 1 (2010).
7. Ю.С. Бабаян, А.Ш. Маркарян, В.П. Калантарян, Р.С. Казарян, М.А. Парсаданян, П.О. Вардеванян. Биофизика, **52**, 382 (2007).
8. В.П. Калантарян, С.Н. Акопян, Ю.С. Бабаян. Известия НАН Армении, Физика, **52**, 79 (2017).
9. V.I. Petrosyan, N.I. Sinitsyn, V.A. Elkin, N.D. Devyatkov. Biomed. Radioelectronics, **5**, 62 (2001).
10. Г.И. Егоров, А.А. Сырбу, А.А. Колкер. Журнал общей химии, **72**, 744 (2002).
11. В.И. Петросян, А.В. Майбородин, С.А. Дубовицкий. Миллиметровые волны в биол. мед., **1**, 18 (2005).

EFFECT OF LOW ELECTROMAGNETIC WAVES ON THERMAL PROPERTIES OF BIOMACROMOLECULE WATER SOLUTIONS

V.P. KALANTARYAN, S.N. AKOPYAN, P.O. VARDEVANYAN

Dependences of density (ρ) and thermal expansion coefficient (α) of distilled water, physiological solution and water-saline solution of DNA on the temperature were studied under irradiation of solutions by millimeter electromagnetic waves of non-thermal intensity with 64.5 and 50.3 GHz frequencies. It was shown that at the heating of solutions the density of non-irradiated and irradiated solutions decreases, meanwhile there is a significant difference between variation of the dependence of $\rho(t)$ for irradiated and non-irradiated water-saline solutions. Calculations showed that for the studied solutions the thermal expansion coefficient increases with the temperature enhancement, moreover, the α growth occurs differently for the irradiated solutions.

УДК 541.64

ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ ДНК СЕНСОРОВ ПРИ НАЛИЧИИ ЗАРЯЖЕННЫХ ЛИГАНДОВ

Ш.А. ТОНОЯН¹, А.А. АКОПЯН², А.К. АНДРЕАСЯН¹,
В.Ф. МОРОЗОВ¹, Е.Ш. МАМАСАХЛИСОВ^{1*}

¹Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

²Институт радиофизики и электроники НАН Армении, Аштарак, Армения

*e-mail: y.mamasakhlisov@ysu.am

(Поступила в редакцию 4 декабря 2017 г.)

Проанализированы факторы, влияющие как на термодинамику гибридизации, так и на стабильность дуплексов ДНК–ДНК. Исследованы случаи неконкурентной гибридизации ДНК при наличии в растворе моно- и бивалентных положительно заряженных лигандов и проведено сопоставление со случаем незаряженных лигандов. Показано, что заряженные лиганды усиливают чувствительность ДНК-чипов в сравнении с незаряженными.

1. Введение

ДНК-чипы являются одним из перспективных инструментов с большим разнообразием областей применения, таких как медицинская диагностика, мониторинг загрязнителей окружающей среды, защиты от биологического оружия и т. д. [1, 2]. Одним из важных направлений разработки ДНК-чипов является повышение их чувствительности за счет усиления электрического сигнала и стабильности целевого зонда гибридизации. Эффективность таких устройств, как ДНК-датчики и ДНК-чипы зависит от точности предсказания экспериментальных параметров, отвечающих за термостабильность дуплексов нуклеиновых кислот и время формирования дуплексов ДНК [3]. Некоторые факторы влияют на термодинамику гибридизации, в частности, на поверхностную плотность одноцепочечных ДНК (длина 25–49 нуклеотидов), иммобилизованных на поверхности, и наличие конкурирующей гибридизации. Стабильность дуплексов ДНК–ДНК и ДНК–РНК определяется двумя ключевыми факторами: последовательностью и внешними факторами (рН, ионная сила, концентрация низкомолекулярных соединений (лигандов), наличие межфазных границ, геометрических ограничений и т. д.). Лучшее понимание физико-химических процессов, лежащих в основе

гибридизации ДНК и РНК на поверхности электрического преобразователя имеет важное значение для улучшения эффективности ДНК-чипов и их изготовления [4].

Одним из основных требований, предъявляемых к ДНК-сенсорам, является высокая чувствительность, которая, в свою очередь, требует максимальной эффективности гибридизации на границе раздела твердой и жидкой фаз. Гибридизация нуклеиновых кислот в значительной степени зависит от температуры, концентрации солей, вязкости, GC-состава и других физико-химических характеристик. Повышение чувствительности ДНК-датчиков может быть достигнуто с помощью электрохимически активных соединений с более высоким сродством к двухцепочечной ДНК, чем к одноцепочечной. Этот вид соединений может существенно повысить стабильность двухцепочечных участков и в то же время амплитуду генерируемого сигнала, что, в свою очередь, повысит чувствительность ДНК-датчика. Такими лигандами являются, например, интеркаляторы – молекулы с плоской гетероциклической структурой, которые помещаются между азотистыми основаниями и меняют локальную структуру двухцепочечной ДНК [5–7].

Термодинамика и кинетика гибридизации как в объеме [8, 9], так и на поверхности [4, 10–16] была тщательно изучена в последние годы. Спектр рассматриваемых проблем включает в себя кинетику гибридизации на поверхности [12, 14], влияние солей на гибридизацию ДНК в объеме [9], изотермы гибридизации на поверхности [4] и т. д. В то же время взаимодействия ДНК–лиганд также были рассмотрены в большом количестве работ, посвященных интеркаляции [5–7] и связыванию лигандов в малой бороздке [17, 18], их кросс-докингу [19] и т. д. Однако, насколько нам известно, влияние взаимодействия ДНК–лиганд на термодинамику и кинетику гибридизации никогда не было рассмотрено ранее. В контексте развития ДНК-биосенсоров, теоретический анализ влияния интеркаляции лигандов на гибридизацию ДНК на поверхности становится необходимым.

Настоящая работа посвящена изучению изотермы гибридизации ДНК на поверхности при наличии положительно заряженных лигандов, которые связываются с нативными участками ДНК. Хотя при практическом использовании ДНК-чипы погружаются в целевой раствор на относительно короткий промежуток, где кинетика гибридизации играет важную роль. Понимание равновесных свойств также необходимо для сравнительной оценки важности кинетических и термодинамических факторов для производительности ДНК-чипов.

2. Неконкурентная гибридизация при наличии лигандов

2.1. Свободная энергия

Рассмотрим равновесную изотерму гибридизации для идеализированной, но экспериментально доступной ситуации, когда ДНК-чип погружен в раствор, содержащий интеркалированные лиганды, и имеем только один тип одноцепочечной мишени (рис.1).

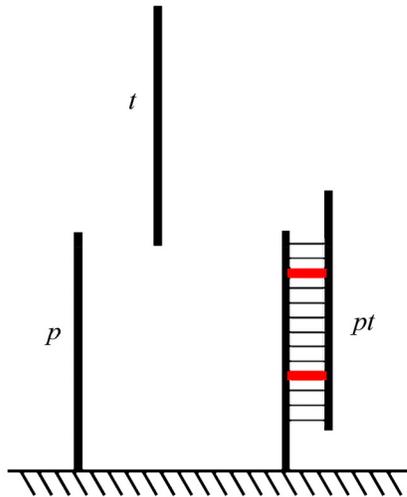
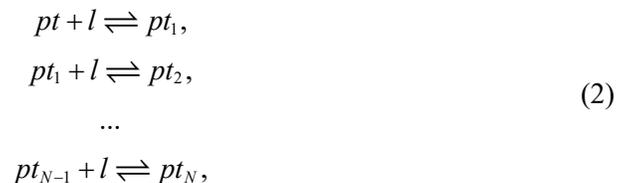


Рис.1. Схема неконкурентной гибридизации на поверхности при наличии лигандов.

Рассмотрим совокупность N_0 однопитевых пробных молекул ДНК p , где N_{pt} из них гибридизованы с мишенью t . Гибридизация p и t создает на поверхности двухцепочечный олигонуклеотид pt . В простейшем случае для одного вида мишени, состоящей из одноцепочечной ДНК, поверхность будет покрыта только свободными зондами p и гибридизованными олигонуклеотидами pt . В этом случае мы имеем одну реакцию



Реакции конкурентной гибридизации отсутствуют (рис.1). Зависимость степени гибридизации $x = N_{pt} / N_0$ от концентрации мишеней c_t описывается с помощью изотермы гибридизации. Для интеркалирующих лигандов l реакции связывания будут иметь следующий вид:



где pt является свободным дуплексом, а pt_j является дуплексом мишень–зонд, связанным с лигандом l .

В отсутствие лигандов свободная энергия слоя с зондами будет иметь следующий вид [11]:

$$G = G_0 + N_{pt}\mu_{pt}^0 + (N_0 - N_{pt})\mu_p^0 + N_0\Sigma\gamma_{el} + k_B T \left[N_{pt} \ln \left(\frac{N_{pt}}{N_0} \right) + (N_0 - N_{pt}) \ln \left(\frac{N_0 - N_{pt}}{N_0} \right) \right], \quad (3)$$

где Σ является площадью, приходящуюся на один зонд, G_0 – плотность свободной энергии голой поверхности, μ_{pt}^0 и μ_p^0 – химические потенциалы зондов pt и p в исходном состоянии, а γ_{el} – электростатическая плотность свободной энергии зондирующего слоя.

Если интеркаляция является единственным механизмом связывания лигандов, то образование комплекса ДНК–лиганд будет ограничено только двуцепочечными областями и свободная энергия слоя с зондами составляет

$$G_L = G + N_{pt} \left\{ m\mu_b^0 + k_B T \left[m \ln \left(\frac{m}{N} \right) + (N - m) \ln \left(\frac{N - m}{N} \right) \right] \right\}, \quad (4)$$

где m – число связанных лигандов из расчета на одну гибридизованную пробу pt , а μ_b^0 – химический потенциал связанного лиганда в исходном состоянии. Предполагается, что доступное количество мест связывания на дуплексе pt совпадает с длиной N . Таким образом, свободная энергия слоя с зондами запишется в виде функции от независимых величин: числа гибридизованных зондов N_{pt} и числа связанных лигандов $N_b = mN_{pt}$. Свободная энергия имеет вид

$$G_L(N_{pt}, N_b) = G(N_{pt}) + N_b\mu_b^0 + k_B T \left[N_b \ln \left(\frac{N_b}{NN_{pt}} \right) + (NN_{pt} - N_b) \ln \left(\frac{NN_{pt} - N_b}{NN_{pt}} \right) \right]. \quad (5)$$

2.2. Изотермы адсорбции и гибридизации

Состояние равновесия для реакций (1) и (2) будет определяться с помощью условий

$$\mu_{pt} = \mu_p + \mu_l, \quad (6)$$

$$\mu_b = \mu_l, \quad (7)$$

где величина μ_{pt} является химическим потенциалом гибридизованного зонда pt , μ_l и μ_p – химические потенциалы мишени и зонда, а μ_b и μ_l – химические потенциалы связанных и несвязанных лигандов, соответственно [20].

Плотность электростатической свободной энергии слоя с зондами γ_{el} была оценена в работе [11] в приближении двухкомпонентного ящика [21–24]. В этом приближении ступенчатый профиль распределения мономеров позволяет рассматривать полиэлектролиты на поверхности как непрерывную область с равномерным распределением заряда. При высоком содержании солей экранирование в заряженном слое приводит к следующему выражению для плотности электростатической свободной энергии:

$$\frac{\gamma_{el}}{k_B T} = 4\pi\sigma^2 l_B \frac{r_D^2}{H}, \quad (8)$$

где величина $l_B = e^2/(\epsilon k_B T)$ – длина Бюоррума, ϵ – диэлектрическая проницаемость, r_D – дебаевская длина экранирования и σ – поверхностная плотность заряда. Здесь H – толщина слоя с зондами, и предполагается, что заряды распределяются в этом слое равномерно. Так как каждая цепь содержит заряд $-eN$, поверхностная плотность заряда σ зависит от степени гибридизации x как

$$\sigma = \frac{NN_0 + NN_{pt} - zN_b}{A}, \quad (9)$$

где A – площадь поверхности сенсора и z – валентность положительно заряженного лиганда.

С учетом зависимости поверхностной плотности электростатической свободной энергии (8) от числа гибридизованных проб N_{pt} и общего числа связанных лигандов N_b обменный химический потенциал гибридизованного зонда ($\Delta\mu_{pt} = \mu_p - \mu_t$) запишется в виде

$$\Delta\mu_{pt} = \frac{\partial G_L}{\partial N_{pt}} = \Delta\mu_{pt}^0 + N_0 \Sigma \frac{\partial \gamma_{el}}{\partial N_{pt}} + k_B T \ln \frac{x}{1-x} + k_B T \ln(1-r), \quad (10)$$

где $r = N_b/(NN_{pt})$ описывает степень адсорбции лигандов l в двухцепочечной ДНК. Плотность электростатической свободной энергии γ_{el} рассматривается как функция от плотности зарядов на поверхности σ . В то же время химический потенциал связанных лигандов составляет [20]

$$\mu_b = \frac{\partial G_L}{\partial N_b} = \mu_b^0 + N_0 \Sigma \frac{\partial \gamma_{el}}{\partial N_b} + k_B T \ln \frac{r}{1-r}. \quad (11)$$

В приближении слабого раствора химический потенциал мишени имеет вид

$$\mu_t = \mu_t^0 + k_B T \ln c_t, \quad (12)$$

а химический потенциал свободных лигандов в растворе

$$\mu_l = \mu_l^0 + k_B T \ln c_l, \quad (13)$$

где величины c_t и c_l являются объемными концентрациями мишеней и лигандов, соответственно.

Учитывая уравнения (6)–(13), получим изотерму гибридизации

$$\frac{x(1-r)^N}{c_t(1-x)} = K_t \exp\left(-\frac{N_0 \Sigma}{k_B T} \frac{\partial \gamma_{cl}}{\partial N_{pl}}\right), \quad (14)$$

где $K_t = \exp\left(-\frac{\Delta G^0}{k_B T}\right)$ и $\Delta G^0 = \mu_{pl}^0 - \mu_p^0 - \mu_l^0$. Равновесное распределение l между связанными и свободными состояниями будет описываться изотермой адсорбции

$$\frac{r}{c_l(1-r)} = K_l \exp\left(-\frac{N_0 \Sigma}{k_B T} \frac{\partial \gamma_{cl}}{\partial N_b}\right), \quad (15)$$

где $K_l = \exp\left(-\frac{\Delta g^0}{k_B T}\right)$ и $\Delta g^0 = \mu_b^0 - \mu_l^0$. Система уравнений (14) и (15) преобразуется как

$$\begin{aligned} \frac{x(1-r)^N}{1-x} &= c_t K_t \exp[-\Gamma(1+x-zrx)], \\ \frac{r}{1-r} &= c_l K_l \exp\left[\frac{\Gamma}{N}(1+x-zrx)\right], \end{aligned} \quad (16)$$

где $\Gamma = 8\pi N \sigma_0 l_B \frac{r_D^2}{H}$ и $\sigma_0 = \frac{NN_0}{A}$.

3. Результаты

3.1. Изотермы адсорбции и гибридизации при наличии моновалентных лигандов

Численное решение системы уравнений (16) для моновалентных лигандов ($z=1$) дает изотермы гибридизации и адсорбции, приведенные на рис.2. Изотермы гибридизации для незаряженных лигандов получены в работе [25], где было показано, что они имеют вид

$$\frac{x}{1-x} = c_t \tilde{K}_t e^{-\Gamma(1+x)}, \quad (17)$$

где $\tilde{K}_t = K_t e^{-N \ln(1-r^*)}$ и $r^* = c_l K_l / (c_l K_l + 1)$ – равновесная степень адсорбции. Изотерма гибридизации для незаряженных лигандов приведена на рис.2, откуда видно, что степень адсорбции заряженных лигандов слабо зависит от концентрации ДНК-мишеней в растворе. В то же время наличие заряда

заметно усиливает гибридизацию мишень–зонд на поверхности сенсора при малых концентрациях мишеней c_t . Эффект, возможно, обусловлен частичной нейтрализацией заряда поверхностного слоя.

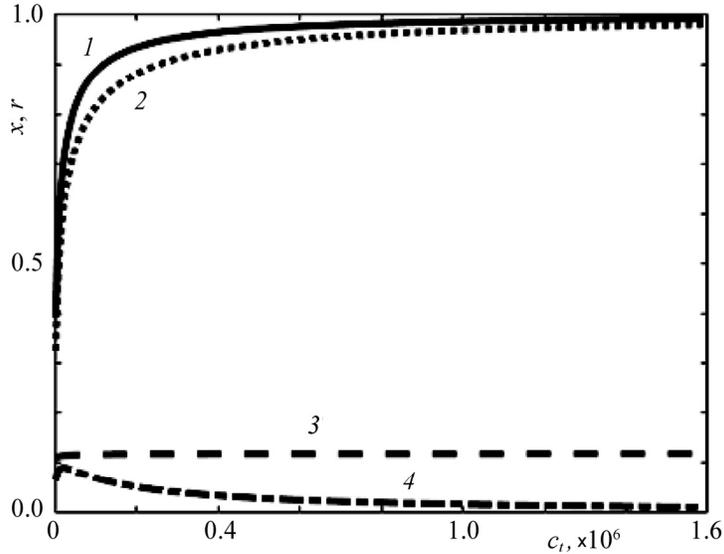


Рис.2. Изотермы гибридизации для моновалентного положительного заряженного лиганда (1), для незаряженных лигандов (2), для моновалентных лигандов (3) и сдвиг изотермы гибридизации от случая незаряженного лиганда к заряженному (4). Кривые получены для следующих значений параметров: $l_B \approx 7 \text{ \AA}$, $r_D = 3 \text{ \AA}$, $N = 16$, $K_t = 10^9 \text{ M}^{-1}$ и $\Gamma \approx 2.57$.

3.2. Изотермы адсорбции и гибридизации при наличии бивалентных лигандов

Гибридизация зонд–мишень на поверхности ДНК-сенсора при наличии бивалентных лигандов описывается системой уравнений (14), соответствующей $z = 2$. Степень заполнения определяется уравнением

$$r(1-r) = c_t K_l (c_t K_l)^{2/N} \left(\frac{1}{x} - 1 \right)^{2/N}. \quad (18)$$

Таким образом, решение для степени заполнения $r = r(x)$ в зависимости от степени гибридизации имеет две ветви: $r \geq 1/2$ и $r \leq 1/2$. Из уравнения (18) очевидным образом следует, что степень гибридизации удовлетворяет условию

$$\frac{(4c_t K_l)^{\frac{2}{N}} c_t K_l}{1 + (4c_t K_l)^{\frac{2}{N}} c_t K_l} \leq x \leq 1. \quad (19)$$

Таким образом, при наличии двухвалентных лигандов степень гибридизации не может быть ниже значения

$$x_{\min} = \frac{(4c_l K_l)^{\frac{2}{N}} c_l K_l}{1 + (4c_l K_l)^{\frac{2}{N}} c_l K_l}.$$

При $z = 2$ численное решение системы уравнений (14) дает изотермы гибридизации и адсорбции, представленные на рис.3. Ветви решений, соответствующие $r \geq 1/2$ и $r \leq 1/2$, представлены кривыми 2 и 3, соответственно.

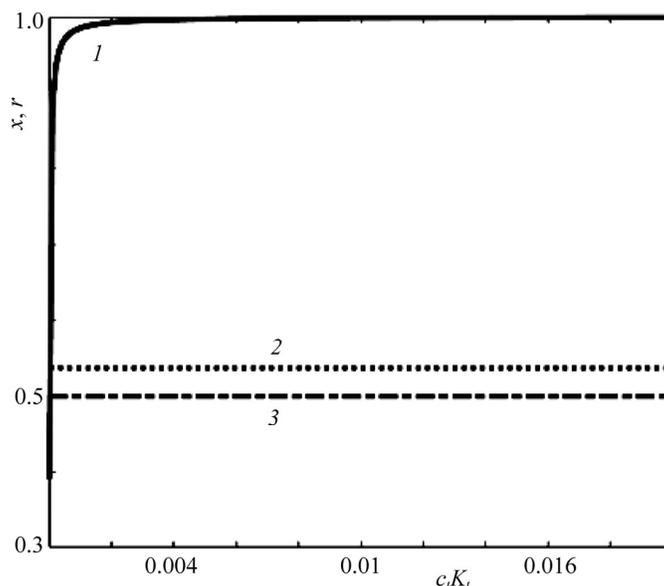


Рис.3. Изотерма гибридизации для бивалентного положительного заряженного лиганда (1) и изотермы адсорбции для решений $r \geq 1/2$ (2) и $r \leq 1/2$ (3). Кривые получены для следующих значений параметров: $l_B \approx 7 \text{ \AA}$, $r_D \approx 3 \text{ \AA}$, $N = 16$, $K_l = 10^9 \text{ M}^{-1}$ и $\Gamma \approx 2.57$.

Качественно эти решения не отличаются друг от друга и поведение изотермы гибридизации в обоих случаях практически одинаково. Однако в одном случае лиганды заполняют больше, а в другом меньше половины доступных центров связывания нативной ДНК. В зависимости от параметров системы либо одна, либо другая ветвь будут соответствовать метастабильному состоянию. Результаты, приведенные на рис.2 и 3, показывают, что наличие заряда у интеркалирующего лиганда усиливает гибридизацию на поверхности ДНК-сенсора по сравнению с таковой для незаряженного лиганда, вследствие чего повышается чувствительность ДНК-сенсора.

4. Заключение

Исследованы термодинамические свойства поверхности ДНК-сенсора с привитыми к нему ДНК-зондами, взаимодействующими с ДНК-мишенями и лигандами в растворе. Проанализированы некоторые факторы, влияющие на термодинамику гибридизации ДНК на границе раздела твердое тело–раствор. Для случаев неконкурентной гибридизации ДНК на поверхности исследованы такие термодинамические характеристики системы, как изотермы гибридизации ДНК-мишеней с ДНК-зондами и изотермы адсорбции интеркалирующих лигандов на комплексы зонд–мишень. Проведенный анализ показывает, что связывание с заряженными интеркалирующими лигандами приводит к увеличению чувствительности ДНК-сенсоров.

ЛИТЕРАТУРА

1. **D. Ivnitski, I. Abdel-Hamid, P. Atanasov, E. Wilkins.** *Biosensors and Bioelectronics*, **14**, 599 (1999).
2. **J. Labuda, A.M.O. Brett, G. Evtugyn, M. Fojta, M. Mascini, M. Ozsoz, I. Palchetti, E. Paleček, J. Wang.** *Pure Appl. Chem.*, **82**, 1161 (2010).
3. **J.H. Watterson, P.A.E. Piunno, U.J. Krull.** *Anal. Chem. Acta*, **457**, 29 (2002).
4. **A. Halperin, A. Buhot, E.B. Zhulina.** *J. Phys.: Condens. Matter.*, **18**, S463 (2006).
5. **G. Ananyan, A. Avetisyan, L. Aloyan, Y. Dalyan.** *Biophys. Chem.*, **156**, 96 (2011).
6. **A.A. Ghazaryan, Y.B. Dalyan, S.G. Haroutiunian, A. Tikhomirova, T.V. Chalikian.** *J. Amer. Chem. Soc.*, **128**, 1914 (2006).
7. **R.F. Pasternack, J.I. Goldsmith, S. Szep, E.J. Gibbs.** *Biophys. J.*, **75**, 1024 (1998).
8. **D.M. Hinckley, G.S. Freeman, J.K. Whitmer, J.J. de Pablo.** *J. Chem. Phys.*, **139**, 144903 (2013).
9. **D.M. Hinckley, J.P. Lequieu, J.J. de Pablo.** *J. Chem. Phys.*, **141**, 035102 (2014).
10. **A.W. Peterson, R.J. Heaton, R.M. Georgiadis.** *Nucl. Acids Res.*, **29**, 5163 (2001).
11. **A. Halperin, A. Buhot, E.B. Zhulina.** *Biophys. J.*, **86**, 718 (2004).
12. **M.F. Hagan, A.K. Chakraborty.** *J. Chem. Phys.*, **120**, 4958 (2004).
13. **M.M.A. Seckar, W. Bloch, P.M.S. John.** *Nucleic Acids Res.*, **33**, 366 (2005).
14. **N.V. Sorokin, V.R. Chechetkin, S.V. Pan'kov, O.G. Somova, M.A. Livshits, M.Y. Donnikov, A.Y. Turygin, V.E. Barsky, A.S. Zasedatelev.** *J. Biomol. Struct. Dyn.*, **24**, 57 (2006).
15. **D. Irving, P. Gong, R. Levicky.** *J. Phys. Chem. B*, **114**, 7631 (2010).
16. **T.J. Schmitt T.A. Knotts IV.** *J. Chem. Phys.*, **134**, 205105 (2011).
17. **S.M. Nelson, L.R. Ferguson, W.A. Denny.** *Mutation Research/Fund. Molec. Mechan. Mutagen.*, **623**, 24 (2007).
18. **V.V. Kostjukov, A.A.H. Santiago, F.R. Rodriguez, S.R. Castilla, J.A. Parkinson, M.P. Evstigneev.** *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **14**, 5588 (2012).
19. **C.G. Ricci, P.A. Netz.** *J. Chem. Inf. Model.*, **49**, 1925 (2009).
20. **C. Tanford.** *Proceed. Natl. Acad. USA*, **78**, 270 (1981).
21. **P. Pincus.** *Macromolecules*, **24**, 2912 (1991).
22. **J. Wittmer, J.F. Joanny.** *Macromolecules*, **26**, 2691 (1993).

23. **O.V. Borisov, E.B. Zhulina, T.M. Birshtein.** *Macromolecules*, **27**, 4795 (1994).
24. **I.Y. Wong, N.A. Melosh.** *Biophys. J.*, **98**, 2954 (2010).
25. **Y.Sh. Mamasakhlisov, A.P. Antonyan, A.A. Hakobyan.** *Proceed. YSU*, **51**, 66 (2017).

ԴՆԹ-Ի ՍԵՆՍՈՐՆԵՐԻ ԶԳԱՅՈՒՆՈՒԹՅՈՒՆԸ ԼԻՑԻԱՎՈՐՎԱԾ ԼԻԳԱՆԴՆԵՐԻ ԱՌԿԱՅՈՒԹՅԱՆ ԴԵՊՔՈՒՄ

Շ.Ա. ՏՈՆՈՅԱՆ, Ա.Ա. ՀԱԿՈԲՅԱՆ, Ա.Կ. ԱՆԴՐԻԱՍՅԱՆ,
Վ.Ֆ. ՄՈՐՈԶՈՎ, Ե.Շ. ՄԱՄԱՍԱԽԼԻՍՈՎ

Վերլուծվել են այն գործոնները, որոնք ազդում են ինչպես հիբրիդիզացիայի ջերմադինամիկայի, այնպես էլ ԴՆԹ-ԴՆԹ դուպլեքսների կայունության վրա: Այս աշխատանքում ուսումնասիրված են ԴՆԹ-ի ոչ մրցակցային հիբրիդիզացիայի դեպքերը՝ լուծիչում միա- և երկվալենտ, դրականապես լիցքավորված լիգանդների առկայությամբ: Արդյունքները համադրվել են չլիցքավորված լիգանդների դեպքի հետ: Մասնավորապես, ցույց է տրվել, որ լիցքավորված լիգանդները մեծացնում են ԴՆԹ-սենսորների զգայունությունը՝ չլիցքավորվածների համամատությամբ:

SENSITIVITY OF DNA SENSORS IN THE PRESENCE OF CHARGED LIGANDS

Sh.A. TONOYAN, A.A. HAKOBYAN, A.K. ANDREASSIAN,
V.F. MOROZOV, Y.Sh. MAMASAKHLISOV

Factors that influence both the thermodynamics of hybridization and the stability of DNA–DNA duplexes are analyzed. The noncompetitive DNA hybridization in the presence of mono- and bivalent positively charged ligands have been investigated. A comparison is made with the case of uncharged ligands. It has been shown that charged ligands enhance the sensitivity of DNA chips in comparison with uncharged ones.

Գ.Ա. Մուրադյան, Ա.Ժ. Մուրադյան. Լազերային վազող ալիքները Կապիցա- Դիրակի դիֆրակցիայի համար ատոմական ինտերֆերոմետրում.....	135
Տ.Ա. Իշխանյան, Ա.Հ. Հարությունյան, Վ.Ա. Մանուկյան, Ա.Մ. Իշխանյան. Աստիճանային օրենքով տրվող սինգուլյար պոտենցիալի դաշտում՝ թույլ էլեկտրական դաշտի կողմից հարուցված թունելային իոնի- զացիայի՝ բարձր ճշգրտության դիտարկում.....	143
Դ.Լ. Հովհաննիսյան, Ա.Հ. Վարդանյան, Գ.Դ. Հովհաննիսյան. Միջին ինֆրա- կարմիր տիրույթում սուբպիկովայրկյանային լազերային իմպուլսի չիրպի որոշումը չորրորդ հարմոնիկի ոչ կոլինեար գեներացիայի միջոցով.....	152
Ն. Կարապետյան, Հ. Տոնեյան, Ա. Կուտուզյան, Ս. Սուքիասյան, Վ. Ավետիսյան, Դ. Գուլբանյան, Կ. Ապրեայան, Լ. Մուրադյան. Սպեկտրոնի ձեւավորման պրոցեսի թվային հետազոտություն. Փուլային առանձ- նահատկությունները.....	173
Է.Գ. Լազարևա. Տատանվող լարը արագացուցիչներում բարակ փնջերի պրոֆիլների չափման համար. Նախնական թեստեր լազերային փնջի վրա.....	181
Հ. Պարսամյան, Ա. Բաբաջանյան, Կ. Լի. Մոդիֆիկացված Հիլբերտյան առաջին և երկրորդ կարգի կորերով միկրոալիքային շերտավոր ֆիլտրեր.....	193
Ա.Վ. Եզանյան, Է.Պ. Կոկանյան, Կ.Լ. Հովհաննեսյան, Տ.Բ. Բուտանևա, Լ.Է. Հովսեփյան. Հազվագյուտ հողային նոնաքարերի ջերմային ընդարձակման գործակիցների գնահատումը լայն ջերմաստիճանային տիրույթում.....	201
Ս.Բ. Պետրոսյան, Ա.Ա. Կուզանյան, Գ.Ռ. Բադալյան, Ա.Ս. Կուզանյան Միաֆոտոն ջերմաէլեկտրիկ դետեկտորի զգայուն տարրի համար W/CeB ₆ /W հետերոկառուցվածքի ստացումը և հատկությունների ուսումնասիրումը.....	208
Մ.Կ. Բայան. Ռենտգենյան դիֆրակցիայի ճոճման կորերը Բրեգի անհա- մաչափ դիֆրակցիայի դեպքում ալիքային ճակատի երկչափ կորության հաշվառմամբ.....	219
Վ.Պ. Քալանթարյան, Ս.Ն. Հակոբյան, Պ.Հ. Վարդելանյան. Թույլ էլեկտրա- մագնիսական ալիքների ազդեցությունը կենսամակրոմոլեկուլների ջրային լուծույթների ջերմային հատկությունների վրա.....	231
Շ.Ա. Տոնոյան, Ա.Ա. Հակոբյան, Ա.Կ. Անդրիասյան, Վ.Ֆ. Մորոզով, Ե.Շ. Մամասախլիսով. ԴՆԹ-ի սենսորների զգայունությունը լիցքա- վորված լիզանդների առկայության դեպքում.....	236

CONTENTS

G.A. Muradyan, A.Zh. Muradyan. Laser Running Waves for the Kapitza–Dirac Diffraction in the Atom Interferometer	135
T.A. Ishkhanyan, A.H. Harutyunyan, V.A. Manukyan, A.M. Ishkhanyan. Accurate Treatment of Tunnel Ionization, Induced by a Constant Electric Field, from a Power-Law Singular Potential.....	143
D.L. Hovhannisyan, A.H. Vardanyan, G.D. Hovhannisyan. Determination of the Subpicosecond Laser Pulse Chirp in the Middle IR Range Based on the Fourth Harmonic Noncollinear Generation.....	152
N. Karapetyan, H. Toneyan, A. Kutuzyan, M. Sukiasyan, V. Avetisyan, D. Gulqanyan, K. Apresyan, L. Mouradian. Numerical Study of Spectron Shaping Process: Phase Peculiarities	173
E.G. Lazareva. Vibrating Wire for Profile Measuring of Thin Beams in Accelerators: Preliminary Tests on a Laser Beam	181
H. Parsamyan, A. Babajanyan, K. Lee. Microwave Fractal Bandpass Filters Based on Modified Hilbert Curves of the First and Second Orders.....	193
A.V. Yeganyan, E.P. Kokanyan, K.L. Hovhannesyanyan, T.I. Butaeva, L.E. Hovsepyan. Estimation of Heat Expansion Coefficients of Rare-Earth Garnets in a Wide Temperature Range.....	201
S.I. Petrosyan, A.A. Kuzanyan, G.R. Badalyan, A.S. Kuzanyan. Preparation and Investigation of Properties of W/CeB ₆ /W Heterostructure for Sensitive Element of a Single-Photon Thermoelectric Detector.....	208
M.K. Balyan. Rocking Curves of the X-Ray Asymmetrical Bragg Diffraction with Two-Dimensional Curvature of the Wave Front.....	219
V.P. Kalantaryan, S.N. Akopyan, P.O. Vardevanyan. Effect of Low Electromagnetic Waves on Thermal Properties of Biomacromolecule Water Solutions.....	231
Sh.A. Tonoyan, A.A. Hakobyan, A.K. Andreassian, V.F. Morozov, Y.Sh. Mamasakhlisov. Sensitivity of DNA Sensors in the Presence of Charged Ligands	236

СОДЕРЖАНИЕ

Г.А. Мурадян, А.Ж. Мурадян. Лазерные бегущие волны для дифракции Капицы–Дирака в атомном интерферометре	135
Т.А. Ишханян, А.А. Арутюнян, В.А. Манукян, А.М. Ишханян. Высоко-точное рассмотрение туннельной ионизации, индуцированной постоянным электрическим полем, из степенного сингулярного потенциала	143
Д.Л. Оганесян, А.О. Вардамян, Г.Д. Оганесян. Определение чирпа субпикосекундного лазерного импульса в среднем ИК диапазоне на основе неколлинеарной генерации четвертой гармоники	152
Н. Карапетян, Г. Тоняян, А. Кутузян, М. Сукиасян, В. Аветисян, Д. Гулкянян, К. Апресян, Л. Мурадян. Численное исследование процесса формирования спектра: фазовые особенности.....	173
Э.Г. Лазарева. Вибрирующая струна для измерения профиля тонких пучков в ускорителях: предварительные тесты на лазерном пучке	181
Г. Парсамян, А. Бабаджанян, К. Лее. Микроволновые фрактальные полосовые фильтры, основанные на модифицированных кривых Гильберта первого и второго порядков	193
А.В. Еганян, Э.П. Коканян, К.Л. Ованесян, Т.И. Бутаева, Л.Э. Овсепян. Оценка коэффициентов теплового расширения редкоземельных гранатов в широком интервале температур	201
С.И. Петросян, А.А. Кузаян, Г.Р. Бадалян, А.С. Кузаян. Получение и исследование свойств гетероструктуры W/CeV ₆ /W для чувствительного элемента однофотонного термоэлектрического детектора.....	208
М.К. Бальян. Кривые качания рентгеновской асимметричной дифракции Брэгга с двумерной кривизной волнового фронта	219
В.П. Калантарян, С.Н. Акопян, П.О. Вардеванян. Влияние слабых электромагнитных волн на тепловые свойства водных растворов биомолекул	231
Ш.А. Тоняян, А.А. Акопян, А.К. Андреасян, В.Ф. Морозов, Е.Ш. Мамасакхисов. Чувствительность ДНК сенсоров при наличии заряженных лигандов.....	236

Заказ № 854

Тираж 150. Цена договорная.

Подписано к печати 03.04.2018. Печ. л. 7.25.

Типография НАН РА. Ереван, пр. Маршала Баграмяна, 24.