

ФИЗИКА • ՖԻԶԻԿԱ • PHYSICS



ИЗВЕСТИЯ
НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК АРМЕНИИ
ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ԳԻՏՈՒԳՈՐԴԱԿԱՆ ԲԱԶՄԱՆԻ ԱՊԱՐԱՆԻ ԱՎԱԴԱՐԱՆԻ
PROCEEDINGS
OF NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF ARMENIA

ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ՀԱՆՐԱՊԵՏՈՒԹՅԱՆ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԶԳԱՅԻՆ ԱԿԱԴԵՄԻԱ

НАЦИОНАЛЬНАЯ АКАДЕМИЯ НАУК РЕСПУБЛИКИ АРМЕНИЯ

ՏԵՂԵԿԱԳԻՐ ИЗВЕСТИЯ

ՖԻԶԻԿԱ ФИЗИКА

ՀԱՏՈՐ ТОМ

58

№ 1

ՀՀ ԳԱԱ "ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆ" ՀՐԱՏԱՐԱԿՉՈՒԹՅՈՒՆ

ИЗДАТЕЛЬСТВО "ГИТУТЮН" НАН РА

ԵՐԵՎԱՆ

ЕРЕВАН

2023

Журнал издается с 1966 г.
Выходит 4 раза в год
на русском и английском языках

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

Карен М. Гамбарян, главный редактор
Арам В. Папоян, зам главного редактора
Нателла Р. Агамалян, ответственный секретарь

А.А. Ахумян, Э.М. Казарян, Р.Б. Костанян, Х.В. Неркарян, Е.Ш. Мамасакхлисов,
А.О. Меликян, А.Г. Мкртчян, Д.Г. Саркисян, А.А. Саркисян, А.А. Саарян, Г. Пихлер
(Хорватия), С.Г. Казарян (Великобритания), Д.В. Рошупкин (Россия), М. Аузинш
(Латвия), Д. Будкер (Германия, США), Т.А. Вартанян (Россия)

ԽՄԲԱԳՐԱԿԱՆ ԿՈՒԵԳԻՍ

Կարեն Մ. Ղամբարյան, գլխավոր խմբագիր
Արամ Վ. Պապոյան, գլխավոր խմբագրի տեղակալ
Նատելլա Ռ. Աղամալյան, պատասխանատու քարտուղար

Ա.Ա. Հախումյան, Է.Մ. Ղազարյան, Ռ.Բ. Կոստանյան, Խ.Վ. Ներկարարյան,
Ե.Շ. Մամասախլիսով, Ա.Օ. Մելիքյան, Ա.Հ. Մկրտչյան, Դ.Գ. Սարգսյան,
Հ.Ա. Սարգսյան, Ա.Ա. Սահարյան, Գ. Պիխլեր (Խորվաթիա), Ս.Գ. Կազարյան
(Մեծ Բրիտանիա), Դ.Վ. Ռոշչուպկին (Ռուսաստան), Մ. Աուզինշ (Լատվիա),
Դ. Բուդկեր (Գերմանիա, ԱՄՆ), Տ.Ա. Վարտանյան (Ռուսաստան)

EDITORIAL BOARD

Karen M. Gambaryan, editor-in-chief
Aram V. Papoyan, associate editor
Natella R. Aghamalyan, executive secretary

A.A. Hakhumyan, E.M. Ghazaryan, R.B. Kostanyan, K.V. Nerkararyan, E.Sh. Ma-
masakhlisov. A.H. Melikyan, A.H. Mkrтчhyan, D.H. Sarkisyan, H.A. Sarkisyan, A.A.
Saharyan, G. Pichler (Croatia), S.G. Kazarian (UK), D.V. Roschupkin (Russia), M.
Auzinsh (Latvia), D. Budker (Germany, USA), T.A. Vartanyan (Russia)

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.

e-mail: izvestiya-fizika@sci.am

ԲՈՎԱՆԴԱԿՈՒԹՅՈՒՆ

Գ.Վ. Մարտիրոսյան. ¹¹¹ In իզոտոպի ստացումը անագի թիրախներից.....	3
Տ.Վ. Քոթանջյան, Ա.Յու. Ալեքսանյան, Ա.Հ. Քեչեչյան, Ս.Մ. Ամիրխանյան, Հ.Ռ. Գուլքանյան, Վ.Ս. Պողոսով, Լ.Ա. Պողոսյան. Տետրանէյտրոնի որոնումը բիսմութի միջուկի ֆոտոճեղքման ռեակցիայում.....	10
Ս.Գ. Հարությունյան, Ա.Վ. Մարգարյան, Է.Գ. Լազարելա, Մ. Chung, Գ.Վ. Միրզոյան, Ն.Ս. Մեսրոպյան, Վ.Գ. Խաչատրյան, Ա.Դ. Դավթյան. ԱՐԵԱԼ արագացուցչի էլեկտրոնային փնջի կորուստի մոնիտոր հիմնված PIN-ֆոտոդիոդների վրա	22
Ն. Ակոպով, Գ. Ղևոնդյան, Վ. Մուրադյան, Գ. Քառյան. Մոնտե Կարլո մեթոդի միջոցով Belle II գիտափորձում ARICH գրանցիչի բնութագրերի ուսումնասիրություններ D [±] -մեզոնների օգնությամբ.....	36
Դ.Հ. Բադալյան, Ա.Ժ. Մուրադյան. Էլեկտրոնի՝ սպինից կախված բազմաուղիցքում քվանտային լարում.....	45
Տ.Ա. Սարգսյան. Էլեկտրոնային վիճակները գլանային քվանտային կետում Գաուսյան և Բեսսելյան լազերային ճառագայթների ազդեցության տակ.....	55
Ա.Դ. Սարգսյան. Կալիումի D ₂ գծի ատոմական անցումների հետազոտությունն ուժեղ մագնիսական դաշտերում միկրոմետրական հաստության բջջում, հազեցած կլանման մեթոդի օգնությամբ.....	65
Ս.Թ. Գևորգյան, Մ.Ս. Գևորգյան. Դաշտի խճճված վիճակները օպտիկական ռեզոնատորում չայլասերված պարամետրիկական տրոհման երևույթում.....	75
Լ. Ասլանյան, Ա. Այվազյան. Լույսի բևեռացման հավասարաէլիպտական վիճակները թվիստ կոդմոնոքոշմամբ նեմատիկ հեղուկ բյուրեղում	84
Մ.Ս. Ալեքսանյան, Գ.Հ. Շահխաթունի, Է.Ա. Խաչատուրյան, Գ.Է. Շահնազարյան, Ա.Գ. Սայունց, Հ.Ռ. Հովհաննիսյան, Դ.Ա. Քանանով. Ացետոնի գոլորշիներ հայտնաբերող ԲՊԱՆԽ/SnO ₂ սենսորի հետազոտություն	94
Հ.Լ. Մարգարյան, Պ.Կ. Գասպարյան, Վ.Կ. Աբրահամյան, Ն.Հ. Հակոբյան, Հ.Ս. Չիլինգարյան, Դ.Կ. Փոխարարյան, Գ.Մ. Ստեփանյան. Տեսադիտարկող	

սարքերին համակցվող ղեկավարելի հեղուկ բյուրեղային օպտիկական ֆիլտր	102
Ա.Ա. Լալայան, Հ.Ս. Երիցյան. Ֆրաունհոֆերի դիֆրակցիան ճեղքից դեպի բաց ալիքային վեկտորների մակերեսով համասեռ անիզոտրոպ միջավայր	108
Ա.Վ. Եզանյան, Ն.Է. Կոկանյան, Մ. Այլերի, Է.Պ. Կոկանյան. Հիպերձայնային ալիքների կլանումը լիթիումի նիոբատի միաբյուրեղներում	113
Գ.Ե. Այվազյան, Լ.Ա. Հախոյան, Հ.Ռ. Դաշտոյան, Լ.Ա.Մաթևոսյան. Սև սիլիցիումի վրա վակուումային փոշեպատմամբ $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$ պերովսկիտային թաղանթների ստացումը և հետազոտումը	118
Մ.Կ. Բալյան. Դիֆրակցիոն դաշտերը և լիցքերի դաշտերը ներկայացված Հերցի վեկտորի միջոցով էլեկտրադինամիկայում	128
Ա.Ռ. Ալոյան, Ա.Ա. Ավետիսյան. ԴՆԹ-ի հետ TMetAlPyP3 և ZnTMetAlPyP3 պորֆիրինների կապման սպեկտրալ հետազոտություններ	137

CONTENTS

G.V. Martirosyan. ^{111}In Isotope Production on Tin Target	3
T.V. Kotanjyan, A.Y. Aleksanyan, A.O. Kechechyan, S.M. Amirkhanyan, H.R. Gulkanyan, V.S. Pogosov, L.A. Poghosyan. Searching for Tetraneutron in Bismuth Nucleus Photodisintegration Reaction.....	10
S.G. Arutunian, A.V. Margaryan, E.G. Lazareva, M. Chung, G.V. Mirzoyan, N.S. Mesropyan, V.G. Khachatryan, A.D. Davtyan. Electron Beam Loss Monitor of Areal Accelerator Based on PIN-Photodiodes.....	22
N. Akopov, G. Ghevondyan, V. Muradyan, G. Karyan. Investigations of Characteristics for ARICH Detector with $D^{*\pm}$ -Mesons Decay at Belle II Experiment Using the Monte Carlo Method	36
D.A. Badalyan, A.Zh. Muradyan. Spin-Dependent Multichannel Scattering of Electron in a Quantum Wire.....	45
T.A. Sargsian. Electronic States in a Cylindrical Quantum Dot Under the Influence of Gaussian and Bessel Laser Beams	55
A.D. Sargsyan. Investigations of Atomic Transitions of D_2 Line of Potassium in Strong Magnetic Fields Using Saturated Absorption Technique in a Microcell	65
S.T. Gevorgyan, M.S. Gevorgyan. Entangled Field States in the Process of Nondegenerate Parametric Decay in an Optical Cavity	75
L. Aslanyan, A. Ayvazyan. Equielliptical State of Light Polarization in Twist Oriented Nematic Liquid Crystal	84
M.S. Aleksanyan, G.H. Shahkhatuni, E.A. Khachaturyan, G.E. Shahnazaryan, A.G. Sayunts, H.R. Hovhannisyan, D.A. Kananov. Investigation of the MWCNT/SnO ₂ Sensor for the Detection of Acetone Vapors	94
H.L. Margaryan, P.K. Gasparyan, V.K. Abrahamyan, N.H. Hakobyan, H.S. Chilingaryan, D.K. Pokhsranyan, G.M. Stepanyan. Controlled Liquid Crystal Optical Filter Combined with Video Surveillance Devices.....	102
A.A. Lalayan, O.S. Eritsyan. Fraunhofer Diffraction by Slit into a Homogeneous Anisotropic Medium with an Open Surface of Wave Vectors.....	108
A.V. Yeganyan, N.E. Kokanyan, M. Aillerie, E.P. Kokanyan. Absorption of Hypersonic Waves in Single Crystals of Lithium Niobate.....	113
G.Y. Ayvazyan, L.A. Hakhoyan, H.R. Dashtoyan, L.A. Matevosyan. Preparation and Investigation of Vacuum-Deposited $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$ Perovskite Films on Black Silicon	118
M.K. Balyan. Diffraction Fields and Fields of Charges, Expressed in Terms of Hertz Vector in Electrodynamics	128
L.R. Aloyan, A.A. Avetisyan. Spectral Study of the Binding of TMetAlPyP3 and ZnTMetAlPyP3 Porphyrins to DNA.....	137

СОДЕРЖАНИЕ

Г.В. Мартиросян. Получение изотопа ^{111}In на мишенях $^{112,114}\text{Sn}$	3
Т.В. Котанджян, А.Ю. Алексанян, А.О. Кечечян, С.М. Амирханян, Г.Р. Гулкян, В.С. Погосов, Л.А. Погосян. Поиск тетранейтрона в реакции фоторасщепления ядра висмута.....	10
С.Г. Арутюнян, А.В. Маргарян, Э.Г. Лазарева, М. Chung, Г.В Мирзоян, Н.С. Месропян, В.Г. Хачатрян, А.Д. Давтян. Монитор потерь электронного пучка ускорителя AREAL на базе PIN-фотодиодов	22
Н. Акопов, Г. Гевондян, В. Мурадян, Г. Карян. Исследования характеристик детектора ARICH в распаде $D^{*\pm}$ -мезона в эксперименте Belle II с применением метода Монте-Карло	36
Д.А. Бадалян, А.Ж. Мурадян. Спин-зависимое многоканальное рассеяние электрона в квантовой проволоке.....	45
Т.А. Саргсян. Электронные состояния в цилиндрической квантовой точке под воздействием гауссова и бесселева лазерных пучков	55
А.Д. Саргсян. Исследование атомных переходов D_2 линии калия в сильных магнитных полях с помощью техники насыщенного поглощения в микро-ячейке	65
С.Т. Геворгян, М.С. Геворгян. Запутанные состояния поля в процессе невырожденного параметрического распада в оптическом резонаторе	75
Л.С. Асланян, А.Э. Айвазян. Эквизллиптические состояния поляризации света в твист-ориентированном нематическом жидком кристалле.....	84
М.С. Алексанян, Г.А. Шахатуни, Э.А. Хачатурян, Г.Э. Шахназарян, А.Г. Саюнци, А.Р. Оганесян, Д.А. Кананов. Исследование сенсора МСУНТ/ SnO_2 для обнаружения паров ацетона.....	94
А.Л. Маргарян, П.К. Гаспарян, В.К. Абраамян, Н.Г. Акопян, А.С. Чилингарян, Д.К. Похсрарян, Г.М. Степанян. Жидкокристаллический управляемый оптический фильтр, комбинируемый с устройствами видеонаблюдения.....	102
А.А. Лалаян, О.С. Ерицян. Дифракция Фраунгофера на щели в однородную анизотропную среду с открытой поверхностью волновых векторов.....	108
А.В. Еганян, Н.Э. Коканян, М. Айллери, Э.П. Коканян. Поглощение гиперзвуковых волн в монокристаллах ниобата лития	113

Г.Е. Айвазян, Л.А. Ахоян, А.Р. Даштоян, Л.А. Матевосян. Получение и исследование вакуумно-напыленных перовскитных пленок $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$ на черном кремнии	118
М.К. Балян. Дифракционные поля и поля зарядов, выраженные через вектор Герца в электродинамике	128
Л.Р. Алоян, А.А. Аветисян. Спектральное исследование связывания TMetAlPyP3 и ZnTMetAlPyP3 порфиринов с ДНК.....	137

Заказ № 1207

Тираж 150. Цена договорная.

Подписано к печати 29.11.2023. Печ. л. 10.5.

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

ПОЛУЧЕНИЕ ИЗОТОПА ^{111}In НА МИШЕНЯХ $^{112,114}\text{Sn}$

Г.В. МАРТИРОСЯН*

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

*e-mail: gevorgmartirosyan97@gmail.com

(Поступила в редакцию 1 ноября 2022 г.)

^{111}In является одним из наиболее употребляемых диагностических изотопов. Обсуждается возможность получения ^{111}In из мишеней ^{114}Sn и ^{112}Sn . Анализ проведен на основе расчетных данных, полученных с использованием кода TALYS-1.95. В то время как облучение мишени ^{114}Sn приводит к крайне низкому выходу ^{111}In , реакция $^{112}\text{Sn}(p,x)$ является перспективной из-за высоких выходов не прямых каналов образования. Согласно результатам моделирования выход ^{111}In в реакции $^{112}\text{Sn}(p,x)$ выше, чем в коммерчески используемой реакции $^{111}\text{Cd}(p,n)^{111}\text{In}$, и сравним с выходом в реакции $^{112}\text{Cd}(p,2n)^{111}\text{In}$.

1. Введение

Различные изотопы широко используются в медицине для диагностических и терапевтических целей. Обычно короткоживущие гамма- и позитрон-излучатели используются в диагностике, а относительно долгоживущие изотопы, излучающие частицы с пробегом, соизмеримым с размерами клетки, используются в терапевтических целях [1]. ^{111}In один из радиоизотопов, наиболее часто используемых в диагностической ядерной медицине для однофотонной эмиссионной компьютерной томографии (ОФЭКТ) [2,3]. ^{111}In распадается путем захвата электронов с периодом полураспада 2.83 дня. Энергия излучаемых при этом гамма-квантов (171.3 и 245.4 кэВ) удобна для регистрации. Обычно ^{111}In получают в реакциях, инициированных протонами или α -частицами на кадмиевых или серебряных мишенях [4], однако, ^{111}In также может образовываться в большом количестве и в других ядерных реакциях [5]. В статье рассматривается получение радиоизотопов ^{111}In в реакциях, инициированных протонами на мишенях ^{112}Sn и ^{114}Sn . Анализ проведен на основе расчетов, выполненных с использованием TALYS-1.95 [6].

2. Моделирование при помощи TALYS

Код TALYS дает возможность делать расчеты для легких налетающих частиц (протонов, нейтронов, дейтронов, трития, альфа-частиц и гамма-квантов) с энергиями от 1 кэВ до нескольких десятков МэВ [7,8]. Код включает в себя несколько ядерных моделей, таких как оптическая модель, модель прямых реакций,

предравновесная модель, модель составного ядра и модель деления. Расчеты по всем моделям проводятся с использованием обширной базы данных ядерной структуры и параметров ядерных моделей. Согласно TALYS, при энергиях налетающих частиц $E < 0.2$ МэВ происходят предравновесные реакции, при $E > 8$ МэВ – множественное испарение частиц, а при $E > 40$ МэВ – множественное предравновесное испарение частиц [6]. Реакции предравновесного типа представляют собой многоэтапные процессы, которые имеют свойства как прямых процессов, так и составного ядра. Они происходят после завершения начальной стадии реакции, но задолго до установления статистического равновесия. На начальных стадиях исход реакции зависит от начальных условий налетающей частицы, но по мере развития реакции создаваемые состояния становятся все более и более сложными, память о начальных условиях теряется и, в конце концов, устанавливается статистическое равновесие. Эти промежуточные процессы являются доминирующими в широком диапазоне энергий налетающих частиц (10–200 МэВ).

Код TALYS также включает опцию производства медицинских изотопов и позволяет рассчитывать выходы и активности продуктов ядерных реакций [6].

3. Получение ^{111}In на мишени ^{114}Sn

Результаты Talys-1.95 расчетов для сечений реакций $^{114}\text{Sn}(p,x)$, ведущих к образованию изотопов индия в диапазоне энергий от порогового значения до 35 МэВ, представлены на рис.1. Максимальное сечение образования ^{111}In составляет около 18.2 мб при энергии 20 МэВ. При этой энергии образуется две основные примеси: $^{110\text{m}}\text{In}$ ($T_{1/2} = 69$ мин [9]) и $^{110\text{g}}\text{In}$ ($T_{1/2} = 4.9$ ч). Вклад изотопов $^{112\text{m}}\text{In}$ ($T_{1/2} = 20.56$ мин), $^{112\text{g}}\text{In}$ ($T_{1/2} = 14.97$ мин), $^{113\text{m}}\text{In}$ ($T_{1/2} = 1.66$ ч) и $^{109\text{g}}\text{In}$ ($T_{1/2} = 4.159$ ч) пренебрежимо мал.

Поскольку максимум функции возбуждения реакции $^{114}\text{Sn}(p,\alpha)^{111}\text{In}$ приходится на 20 МэВ, наибольшие выходы можно ожидать при энергиях 25→15 МэВ. Нежелательными примесями, возникающими при этих энергиях, являются

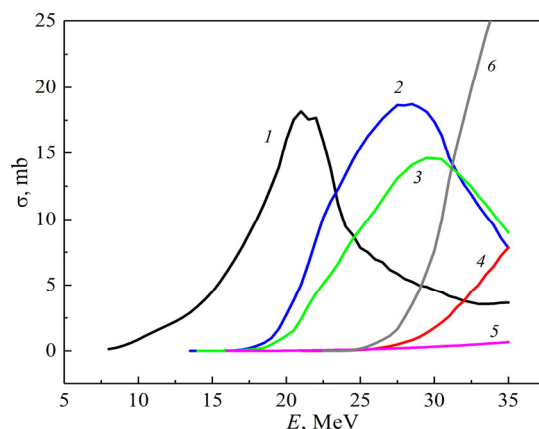


Рис.1. Функция возбуждения реакций $^{114}\text{Sn}(p,x)$, ведущих к образованию различных изотопов индия: 1 – ^{111}In , 2 – $^{110\text{m}}\text{In}$, 3 – $^{110\text{g}}\text{In}$, 4 – ^{112}In , 5 – ^{113}In , 6 – ^{109}In .

наиболее долгоживущие ^{109g}In и ^{110g}In . Избежать присутствия этих примесей можно либо уменьшив энергию облучения до порога образования примеси, либо достаточно выдержав мишень после конца облучения. Зависимость активностей изотопов ^{111}In и $^{110m,g}\text{In}$ от времени облучения и охлаждения мишени приведена на рис.2а. Уменьшение начальной энергии до значения, когда сечения нежелательных реакций незначительны (17 МэВ) не является эффективным, хотя изотопная чистота на конец облучения очень высока, активность ^{111}In слишком мала (рис.2б).

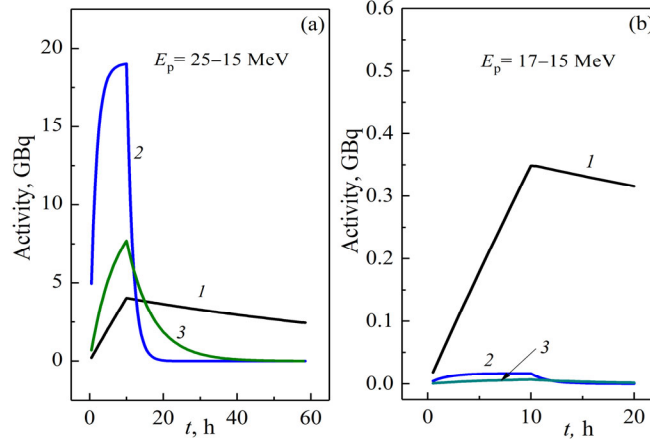


Рис.2. Увеличение изотопической чистоты ^{111}In : (а) после окончания облучения активность ^{111}In падает медленно, в то время как активность ^{110}In становится пренебрежимо малой после ~30 часов охлаждения мишени; (б) облучение при более низкой энергии приводит к высокой изотопической чистоте ^{111}In , но активность продукта очень низкая. Обозначения кривых соответствуют изотопам: 1 – ^{111}In , 2 – ^{110m}In , 3 – ^{110g}In .

Рассчитанный выход ^{111}In из мишени ^{114}Sn при энергии протонного пучка 25→15 МэВ, а также фракции основных изотопных примесей, представлены в табл.1. Активность ^{111}In на конец облучения значительно ниже, чем активность ^{110g}In . После 48 часов охлаждения мишени доля ^{110g}In становится незначительной (0.5%), в то время как активность ^{111}In уменьшается только в 1.67 раза по сравнению с активностью на конец облучения. Доля примесей ^{109}In также пренебрежимо мала (0.1%). Однако, окончательный выход ^{111}In составляет всего 1.71 МБк/(мкА час), что делает этот способ производства ^{111}In нецелесообразным.

4. Получение ^{111}In на мишени ^{112}Sn

Привлекательность этого метода в том, что помимо прямого канала образования посредством $^{112}\text{Sn}(p,2p)$ реакции, при облучении мишени ^{112}Sn образуется изотоп ^{111}Sb , который распадается в ^{111}Sn с периодом полураспада $T_{1/2} = 75$ сек, последний, в свою очередь, распадается в ^{111}In с периодом полураспада $T_{1/2} = 35.3$ мин [9]. Вклад каналов $^{112}\text{Sn}(p,pn)^{111}\text{Sn} \rightarrow ^{111}\text{In}$ и $^{112}\text{Sn}(p,n)^{111}\text{Sb} \rightarrow$

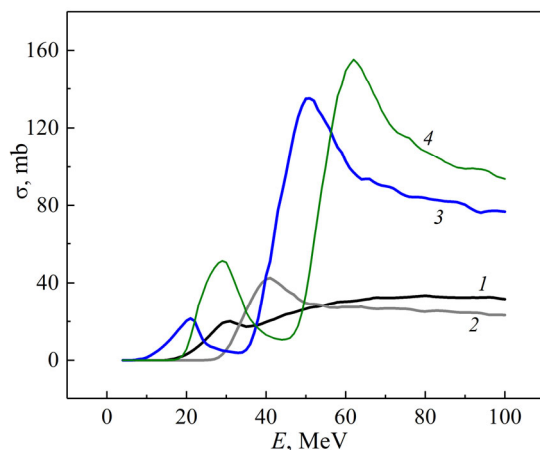


Рис.3. Функции возбуждения реакций на мишени ^{112}Sn , приводящих к образованию изотопов индия $^{108-111}\text{In}$. Обозначения кривых соответствуют реакциям: 1 – $^{112}\text{Sn}(p,2p)^{111}\text{In}$, 2 – $^{112}\text{Sn}(p,2pn)^{110g}\text{In}$, 3 – $^{112}\text{Sn}(p,\alpha)^{109g}\text{In}$, 4 – $^{112}\text{Sn}(p,an)^{108}\text{In}$.

$^{111}\text{Sn} \rightarrow ^{111}\text{In}$ namного увеличивает выход ^{111}In .

Функции возбуждения реакций на мишени ^{112}Sn , приводящих к образованию изотопов индия $^{108-111}\text{In}$, приведены на рис.3. При энергиях 35→25 МэВ ^{111}In имеет наибольшие сечения, за исключением короткоживущего ^{108}In ($T_{1/2} = 58$ мин), который распадается в стабильный ^{107}Cd . Указанный интервал энергий наиболее удобен для производства ^{111}In . Как было отмечено выше, помимо $^{112}\text{Sn}(p,2p)$ реакции, ^{111}In также образуется в реакциях $^{112}\text{Sn}(p,2n)^{111}\text{Sb} \rightarrow ^{111}\text{Sn} \rightarrow ^{111}\text{In}$ и $^{112}\text{Sn}(p,pn)^{111}\text{Sn} \rightarrow ^{111}\text{In}$. Максимальные значения сечений этих реакций приходятся на энергию ~22 МэВ и равны 800 и 260 мб, соответственно (рис.4). Согласно расчетам с использованием кода TALIS-1.95, спустя 6 часов после окончания облучения, когда все изотопы ^{111}Sn и ^{111}Sb распались в ^{111}In , выход ^{111}In составляет 193 МБк / (мкА час) (табл.1).

Необходимо учесть образование изотопов ^{109m}Sn ($T_{1/2} = 18$ мин) и ^{109m}In

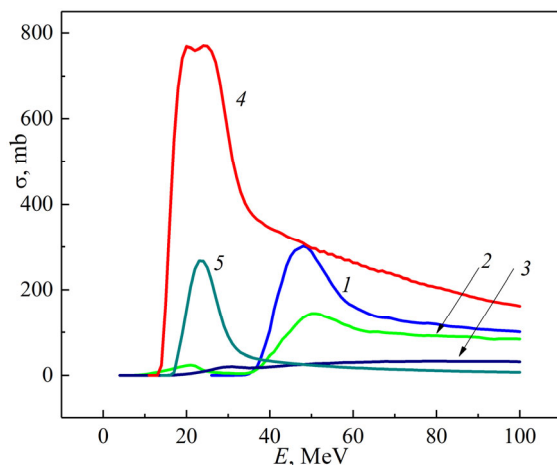


Рис.4. Функции возбуждения реакций: 1 – $^{112}\text{Sn}(p,2n+d)^{109}\text{Sn}$, 2 – $^{112}\text{Sn}(p,\alpha)^{109}\text{In}$, 3 – $^{112}\text{Sn}(p,2p)^{111}\text{In}$, 4 – $^{112}\text{Sn}(p,pn)^{111}\text{Sn}$, 5 – $^{112}\text{Sn}(p,2n)^{111}\text{Sb}$.

Табл.1. Выход ^{111}In в некоторых протон-ядерных реакциях

Реакция	Энергия протонов, МэВ	Выход, МБк / мкА час (время, прошедшее после конца облучения)	Фракция примесей, % от выхода ^{111}In	Ссылка
$^{114}\text{Sn}(p,\alpha)^{111}\text{In}$	25–15	2.85 (ЕОВ*)	^{110}gIn (267 %) ^{109}gIn (0.1%)	Данная работа
		2.05 (30 час)	^{110}gIn (5.4 %)	
		1.71 (48 час)	^{110}gIn (0.5 %)	
$^{112}\text{Sn}(p,2p)^{111}\text{In} +$ $^{112}\text{Sn}(p,pn)^{111}\text{Sn} \rightarrow$ $^{111}\text{In} + ^{112}\text{Sn}(p,2n)^{111}\text{Sb}$ $\rightarrow ^{111}\text{Sn} \rightarrow ^{111}\text{In}$	35–25	117 (ЕОВ)	^{110}gIn (26%)	Данная работа
		193 (6 час)	^{109}gIn (4.3%)	
		160 (24 час)	^{110}gIn (0.6%) ^{109}gIn (0.4%)	
$^{112}\text{Sn}(p,2p)^{111}\text{In} +$ $^{112}\text{Sn}(p,pn)^{111}\text{Sn} \rightarrow ^{111}\text{In} +$ $^{112}\text{Sn}(p,2n)^{111}\text{Sb}$ $\rightarrow ^{111}\text{Sn} \rightarrow ^{111}\text{In}$	23.6	46 (ЕОВ)	–	[5]
$^{111}\text{Cd}(p,n)^{111}\text{In}$	18–7	65 (ЕОВ)	^{110}gIn (241 %) ^{109}In (0%)	Данная работа
		51 (24 час)	^{110}gIn (10 %)	
		48 (30 час)	^{110}gIn (4.6 %)	
		40 (48 час)	^{110}gIn (0.4%)	
$^{112}\text{Cd}(p,2n)^{111}\text{In}$	30–15	260 (ЕОВ)	^{110}gIn (209%) ^{109}gIn (0.34%)	Данная работа
		158.5 (48 час)	^{110}gIn (0.11%)	
$^{111}\text{Cd}(p,n)^{111}\text{In}$	18–7	74 (ЕОВ)	–	[10]
$^{112}\text{Cd}(p,2n)^{111}\text{In}$	30–15	281 (ЕОВ)	–	[10]

*ЕОВ (End Of Bombardment) обозначены активности изотопов на момент конца облучения

($T_{1/2} = 4.159$ час), поскольку продукт их распада ^{109}Cd ($T_{1/2} = 462.3$ дн) является самой долгоживущей примесью. На рис.4 приведены функции возбуждения реакций, приводящих к образованию изотопов ^{111}In и ^{109}Cd . Порог реакции

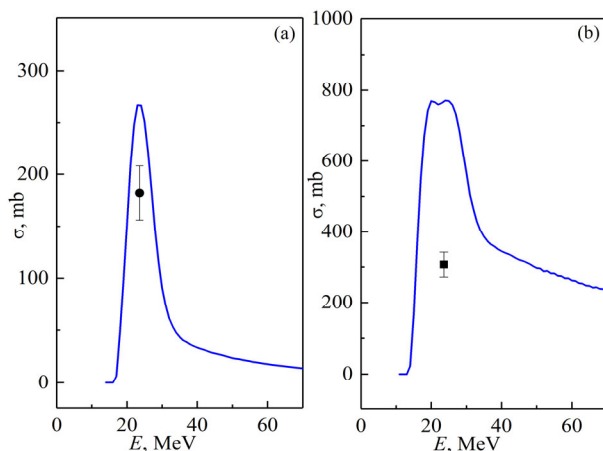


Рис.5. Рассчитанные с использованием кода TALYS1.95 (кривые) и экспериментальные значения из работы [5] (точки) для сечений реакций на мишени ^{112}Sn , приводящих к непрямому образованию ^{111}In : (а) $^{112}\text{Sn}(p,2n)^{111}\text{Sb}$, (б) $^{112}\text{Sn}(p,pn)^{111}\text{Sn}$.

$^{112}\text{Sn}(p,2n+d)^{109}\text{Sn}$ 28 МэВ, $^{112}\text{Sn}(p,\alpha)^{109}\text{In}$ реакция беспороговая. Согласно расчетам с использованием TALYS-1.95, спустя 6 часов после конца облучения, когда изотопы ^{109}Sn и ^{109}In полностью распались, выход ^{109}Cd составляет 0.009 МБк/(мкА час), что соответствует 0.005% выхода ^{111}In .

Единственные экспериментальные данные по протон-ядерным реакциям на мишени ^{112}Sn в рассматриваемом диапазоне энергий опубликованы в работе [5]. Значения сечений реакций $^{112}\text{Sn}(p,2n)^{111}\text{Sb}$ и $^{112}\text{Sn}(p,pn)^{111}\text{Sn}$, полученные в [5], намного меньше полученных нами с использованием кода TALYS-1.95 (рис.5), выход ^{111}In также ниже рассчитанного по коду TALYS 1.95 (табл.1).

5. Заключение

Рассмотрена возможность получения изотопа ^{111}In из мишеней $^{112,114}\text{Sn}$. Расчеты с использованием TALYS-1.95 показали, что облучение мишени ^{114}Sn ведет к очень низкому выходу ^{111}In , что делает этот метод нецелесообразным. С другой стороны, использование мишени ^{112}Sn кажется довольно привлекательным. В этом случае выход ^{111}In намного превосходит выход коммерчески используемой реакции $^{111}\text{Cd}(p,n)$ и сравним с выходом реакции $^{112}\text{Cd}(p,2n)$ (табл.1).

В работе [10], где обсуждается получение ^{111}In из мишеней $^{111,112}\text{Cd}$, в качестве примеси рассматривается только $^{114\text{m}}\text{In}$, который образуется из тяжелых изотопов Cd, присутствующих в мишенях. В случае мишени ^{112}Sn нежелательной примесью является $^{109\text{m}}\text{In}$, который распадается в долгоживущий ^{109}Cd . Активность ^{109}Cd , согласно нашим расчетам, очень низкая, что делает присутствие этой примеси приемлемым. Кроме того, наши расчеты показывают, что $^{109\text{m}}\text{In}$ также образуется при облучении мишени ^{112}Cd , хотя и в небольших количествах. Поэтому можно сделать вывод, что получение ^{111}In из мишени ^{112}Sn возможно, однако полученные расчетные данные должны быть проверены экспериментально.

ЛИТЕРАТУРА

1. S.C. Srivastava. Semin. Nucl. Med., **42**, 151 (2012).
2. Y. Krausz, Z. Keidar, I. Kogan, et al., Clin. Endocrinol, **59**, 565 (2003).
3. E. Bombardieri, V. Ambrosini, C. Aktolun, et al., Eur. J. Nucl. Med. Mol. Imaging, **37**, 1441 (2010).
4. Technical Reports Series No. 468. Cyclotron Produced Radionuclides: Physical Characteristics and Production Methods, IAEA. Viena, 2009.
5. E. Biták, E. Rurarz, S. Mikolajewski, J. Wojtkowska. Nukleonika, **52**, 17 (2007).
6. A. Koning, S. Hilaire, S. Goriely. TALYS 1.95. A Nuclear Reaction Program, 2019. <http://www.talys.eu/>.
7. G.H. Hovhannisyan, T.M. Bakhshyan, A.S. Danagulyan, R.K. Dallakyan. Nuclear Inst. and Methods in Physics Research B, **482**, 25 (2020).
8. G.H. Hovhannisyan, A.V. Stepanyan, E.R. Saryan, L.A. Amirakyan. J. Contemp. Phys., **55**, 183 (2020).
9. <https://www.nndc.bnl.gov/nudat3/>
10. F. Tárkányi, F. Szelecsényi, P. Kopecký, et al. Appl. Radiat. Isot., **45**, 239 (1994).

^{111}In ԻԶՈՏՈՊԻ ՍՏԱՑՈՒՄԸ ԱՆԱԳԻ ԹԻՐԱԽՆԵՐԻՑ

Գ.Վ. ՄԱՐՏԻՐՈՍՅԱՆ

^{111}In կարևոր բժշկական իզոտոպ է, որը օգտագործվում է ախտորոշման նպատակով: Քննարկվում է դրա ստացման հնարավորությունը ^{114}Sn և ^{112}Sn թիրախներից պրոտոն-միջուկային ռեակցիաներում: Եզրակացությունները արված են TALYS-1.95 հաշվարկների հիման վրա: ^{114}Sn թիրախի ճառագայթումը ^{111}In իզոտոպի փոքր ելքեր է ապահովում, մինչդեռ $^{112}\text{Sn}(p,x)$ ռեակցիաները ավելի արդյունավետ են, քանի որ անուղղակի առաջացման եղանակները մեծացնում են ^{111}In -ի ելքը: Համաձայն հաշվարկների արդյունքների, ^{111}In -ի ելքը $^{112}\text{Sn}(p,x)$ ռեակցիաներում ավելի մեծ է, քան արդյունաբերական արտադրության համար կիրառվող $^{111}\text{Cd}(p,n)^{111}\text{In}$ ռեակցիայում և համեմատելի է $^{112}\text{Cd}(p,2n)^{111}\text{In}$ ռեակցիայից ելքի հետ:

^{111}In ISOTOPE PRODUCTION ON TIN TARGET

G.V. MARTIROSYAN

^{111}In is an important diagnostic medical radioisotope. We discuss the possibility of its production from ^{114}Sn and ^{112}Sn targets in proton-induced reactions. Analysis made on the base of TALYS-1.95 calculations. While the irradiation of ^{114}Sn target leads to unfeasibly low yield of ^{111}In , $^{112}\text{Sn}(p,x)$ production route is promising because of high yields of indirect production channels. According to simulation results, the yield of ^{111}In in $^{112}\text{Sn}(p,x)$ reactions is higher than in the commercially used reaction $^{111}\text{Cd}(p,n)^{111}\text{In}$ and is comparable to yield in $^{112}\text{Cd}(p,2n)^{111}\text{In}$ reaction.

ПОИСК ТЕТРАНЕЙТРОНА В РЕАКЦИИ ФОТОРАСЩЕПЛЕНИЯ ЯДРА ВИСМУТА

Т.В. КОТАНДЖЯН^{1*}, А.Ю. АЛЕКСАНИЯН¹, А.О. КЕЧЕЧЯН²,
С.М. АМИРХАНИЯН¹, Г.Р. ГУЛКАНИЯН¹, В.С. ПОГОСОВ¹, Л.А. ПОГОСЯН¹

¹Национальная научная лаборатория им. А.И. Алиханяна, Ереван, Армения

²Объединенный институт ядерных исследований (ОИЯИ), Дубна, Россия,

* e-mail: tigran.kotanjyan@mail.yerphi.am

(Поступила в редакцию 7 сентября 2022 г.)

На линейном ускорителе электронов ННЛА (ЕрФИ) при средних энергиях $\hat{E}_e = 28$ и 30 МэВ (с гауссовской шириной $\sigma_e \approx 0.7$ МэВ) осуществлен поиск околопорогового образования четырехнейтронной системы в индуцированной тормозными фотонами реакции $^{209}\text{Bi}(\gamma, 4n)^{205}\text{Bi}$ (с порогом $E_{\gamma}^{th} = 29.5$ МэВ). В эксперименте был применен метод активационного анализа. Гамма-спектроскопические измерения проводились в подземной низкофоновой лаборатории ННЛА. Благодаря низкофоновым условиям удастся при $E_e = 30$ МэВ надежно идентифицировать ядро ^{205}Bi и впервые определить взвешенное по спектру тормозных фотонов сечение σ_w и усредненное по спектру тормозных фотонов сечение $\langle\sigma\rangle$ этого редкого околопорогового процесса: $\sigma_w = (4.42 \pm 0.48) \times 10^{-4}$ мб и $\langle\sigma\rangle = (1.95 \pm 0.22)$ мб. При энергии $\hat{E}_e = 28$ МэВ образования ^{205}Bi не наблюдается. Низкофоновые условия позволяют также наблюдать редкий процесс распада долгоживущего ($T_{1/2} = 3.68 \times 10^5$ лет) радионуклида ^{208}Bi , образованного в однеитронной реакции $^{209}\text{Bi}(\gamma, n)^{208}\text{Bi}$, и измерить при энергиях $\hat{E}_e = 28$ и 30 МэВ ее взвешенное и среднее сечения, соответственно, $\sigma_w = (19.6 \pm 3.5)$ и (16.4 ± 2.2) мб и $\langle\sigma\rangle = (139 \pm 25)$ и (142 ± 19) мб. На основе данных при $\hat{E}_e = 28$ МэВ установлена верхняя граница 10^{-5} выхода реакции образования гипотетического связанного состояния четырех нейтронов (тетранейтрона) по отношению к выходу реакции $^{209}\text{Bi}(\gamma, n)^{208}\text{Bi}$. Проведено сравнение полученных экспериментальных данных с предсказаниями моделей TALYS1.9 и FLUKA. Показано, что предсказания моделей сильно (более чем на порядок) занижены по сравнению с измеренным при $\hat{E}_e = 30$ МэВ сечением реакции $^{209}\text{Bi}(\gamma, 4n)^{205}\text{Bi}$. Такое расхождение может быть обусловлено тем, что в моделях не предусмотрена возможность образования коррелированных нейтронных систем, в частности, резонансного состояния четырех нейтронов с энергией возбуждения около 2.4 МэВ, обнаруженного недавно в реакции $^1\text{H}(^8\text{He}, ^1\text{H}+^4\text{He})4n$. По-видимому, наблюдаемое в данной работе околопороговое образование четырехнейтронной системы может служить косвенным указанием на ее резонансный характер.

1. Введение

Поиск связанных состояний нейтронов (нейтронных ядер) долгое время остается одной из актуальных задач ядерной физики. Обнаружение таких состояний имело бы далеко идущие последствия для уточнения наших представлений

о свойствах ядерных сил и о структуре атомного ядра, а также о механизмах космического нуклеосинтеза и формирования нейтронных звезд. Хотя имеющиеся теоретические предсказания, как правило, указывают на маловероятность существования нейтронных ядер (см. недавний обзор [1], а также работы [2–4]), недостаток знания свойств нейтрон–нейтронных взаимодействий, а также трехнейтронных и многонейтронных сил не позволяет сделать однозначных выводов касательно этой проблемы (см., например, обзорные работы [5,6]). Ситуация неоднозначна также с точки зрения экспериментальных данных. Хотя в большинстве экспериментов были получены отрицательные результаты, опубликованные недавно данные содержат указания на существование связанных или резонансных многонейтронных состояний. Так, в работе [7] было наблюдеено несколько событий, соответствующих выбиванию связанного тетранейтрона (4n) из ядра ^{14}Be . В работах [8,9] было наблюдеено образование резонансного («квазисвязанного») четырехнейтронного состояния в реакциях $^4\text{He}(^8\text{He}, ^8\text{Be})4n$ и $^1\text{H}(^8\text{He}, ^1\text{H}+^4\text{He})4n$. В работе [10], где изучалась реакция трехпротонной передачи $^7\text{Li}(^7\text{Li}, ^{10}\text{C})4n$, было получено указание на существование связанного состояния 4n с энергией связи 0.42 ± 0.16 МэВ. В работах [11,12] были осуществлены эксперименты по поиску связанных многонейтронных систем, xn , вылетающих при α -индуцированном делении ^{238}U , используя для их идентификации вторичные мишени из ^{88}Sr [11] и ^{27}Al [12], в которых xn может вступить в реакцию передачи ядру-мишени нескольких нейтронов с образованием характерных дочерних радиоактивных ядер, подлежащих последующей идентификации при помощи γ -спектроскопии; в этих экспериментах было наблюдеено образование радиоактивных ядер ^{92}Sr и ^{28}Mg , которые по мнению авторов, образуются в реакциях, соответственно, $^xn(^{88}\text{Sr}, ^{92}\text{Sr})(x-4)n$ и $^xn(^{27}\text{Al}, ^{28}\text{Mg})p(x-2)n$, инициируемых, по всей вероятности, шестинейтронными ядрами 6n . Сравнительно недавно были опубликованы [13] результаты измерения γ -спектра калифорниевого источника, которые были интерпретированы авторами как возможное проявление октанейтронной (8n) радиоактивности ядра ^{252}Cf с вероятностью $R_8 = 1.74 \times 10^{-6}$ по отношению к α -распаду; этот результат, однако, не был подтвержден выполненными в работе [14] измерениями, из которых следует более строгое ограничение $R_8 < 5 \times 10^{-7}$. Одновременно в работе [14] был установлен также верхний предел секстанейтронной радиоактивности ядра ^{250}Cf : $R_6 < 7 \times 10^{-6}$.

Целью настоящей работы является попытка поиска фотовывивания тетранейтрона из ядра висмута, а именно, реакции $^{209}\text{Bi}(\gamma, 4n)^{205}\text{Bi}$ с образованием дочернего радионуклида ^{205}Bi вблизи порога этой реакции ($E_\gamma^{\text{th}} = 29.5$ МэВ) с использованием тормозных фотонов, образованных электронами со средними энергиями $\hat{E}_e = 28$ и 30 МэВ (с гауссовским разбросом шириной $\sigma_e \approx 0.7$ МэВ) на линейном ускорителе электронов ННЛА [15].

2. Экспериментальная часть

Эксперимент проводился на пучке линейного ускорителя при энергиях начальных электронов $\hat{E}_e = 28$ и 30 МэВ (с разбросом по энергии примерно 2.5%). Следует отметить, что экспериментальное наблюдение образования ^{205}Bi при $\hat{E}_e = 28$ МэВ возможно (с учетом энергетического разброса) лишь при существовании связанного состояния 4n с энергией связи по меньшей мере ~ 1 МэВ.

Именно этим обусловлен выбор энергии фотонов 28 МэВ для исследования околопорогового образования тетранейтрона в реакции $^{209}\text{Bi}(\gamma, 4n)^{205}\text{Bi}$. Выведенный из ускорителя пучок электронов проходил через отклоняющий магнит и направлялся на облучаемую установку, проходя предварительно стальной коллиматор с внутренним диаметром 14 мм и длиной 32 мм (при энергии $\hat{E}_e = 30$ МэВ в него вставлялся также алюминиевый коллиматор с внутренним диаметром 10 мм и длиной 17 мм). Непосредственно после коллиматора были последовательно расположены вольфрамовый радиатор для генерации тормозных фотонов, алюминиевый поглотитель электронов, тонкая медная мишень и мишень из кристалла германата висмута ($\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$ или BGO). При $\hat{E}_e = 28$ МэВ вольфрамовый радиатор имел толщину 2 мм и квадратный профиль размером 20×20 мм², алюминиевый поглотитель – цилиндрическую форму толщиной 30 мм и диаметром 20 мм, медная мишень – толщину 50 мкм и квадратный профиль размером 20×20 мм², BGO мишень – толщину 2 мм и квадратный профиль размером 20×20 мм². При $\hat{E}_e = 30$ МэВ вольфрамовый радиатор имел цилиндрическую форму толщиной 2 мм и диаметром 12 мм, алюминиевый поглотитель – цилиндрическую форму толщиной 20 мм и диаметром 12 мм, медная мишень – толщину 25 мкм и круглый профиль диаметром 12 мм, BGO мишень – толщину 1 мм и круглый профиль диаметром 12 мм. Схематическое изображение мишенной системы можно найти в [16,17]. Медная мишень (с естественным содержанием 69.1% и 30.9% изотопов ^{63}Cu и ^{65}Cu) использовалась для измерения выхода мониторинной реакции $^{65}\text{Cu}(\gamma, n)^{64}\text{Cu}$, относительно сечения (функция возбуждения) $\sigma_m(E_\gamma)$ которой имеются экспериментальные данные практически во всей области энергий E_γ , где $\sigma_m(E_\gamma)$ достаточно значимо [18, 19]. На основе выхода мониторинной реакции оценивался средний ток электронов I_e за время облучения при данной E_e (см. подробности в работе [20]). Продолжительность облучения при $\hat{E}_e = 28$ и 30 МэВ составила, соответственно, полтора часа и два часа.

Надежная идентификация ^{205}Bi по характерному γ -излучению, сопровождающему его β -распад (с периодом полураспада $T_{1/2} = 15.31$ дней), может служить однозначным свидетельством о вылете из ядра ^{209}Bi четырех сопутствующих нейтронов. Гамма-спектроскопические измерения висмутосодержащих мишеней проводились с помощью экспериментальной установки на основе германиевого детектора HPGe GCD-20180, установленного в подземной лаборатории ННЛА [21, 22] в Аванском соляном руднике на глубине 650 метров водного эквивалента. Чувствительный объем кристалла германия составляет 101.2 см³. Разрешение детектора при 1.33 МэВ равно 1.8 кэВ. Детектор окружен защитой из радиационно-чистых свинца и меди для подавления влияния внешнего фона. Для предотвращения попадания радона в установку она окружена полиэтиленовым мешком, который продувается азотом. Подробное описание германиевого детектора и методики его калибровки можно найти в [16].

Спектр тормозных фотонов, знание которого необходимо для расчета взвешенного по нему сечения мониторинной реакции и определения среднего тока электронов I_e , вычислялся с использованием программного пакета GEANT-4 (версия 10.4) [23]. Кроме основного вклада в спектр от вольфрамового радиатора учитывались также тормозные фотоны, образованные в коллиматорах и алюминиевом замедлителе (см. подробности в [16,17,20]). В расчетах учитывался

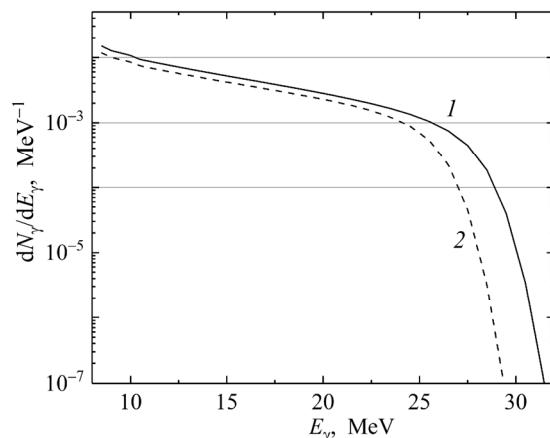


Рис.1. Рассчитанный по GEANT-4 спектр фотонов (на один первичный электрон), падающих на медную мишень при $\hat{E}_e = 30$ (кривая 1) и 28 МэВ (кривая 2).

энергетический разброс пучка электронов. На рис.1 приведены результирующие спектры на медной мишени при $\hat{E}_e = 28$ и 30 МэВ. Аналогичным образом рассчитывался спектр тормозных фотонов, падающих на мишень BGO.

3. Результаты измерений и их обсуждение

При измерениях облученные мишени, как правило, располагались на расстоянии 105 мм от крышки германиевого кристалла. В случае мониторинг реакции $^{65}\text{Cu}(\gamma, n)^{64}\text{Cu}$ с образованием сравнительно короткоживущего изотопа ^{64}Cu ($T_{1/2} = 12.7$ часов) измерения проводились сначала в наземном помещении с использованием установки на базе сверхчистого германиевого детектора HPGe Ortec GEM15P4-70.

В случае реакции $^{209}\text{Bi}(\gamma, 4n)^{205}\text{Bi}$ с образованием сравнительно долгоживущего изотопа ^{205}Bi ($T_{1/2} = 15.31$ дней) облученная мишень BGO остывала в течение нескольких дней, затем в течение 2–3 месяцев проводилась серия измерений в подземной лаборатории продолжительностью 3–4 дней на каждое измерение. Проводились также дополнительные продолжительные измерения с целью определения выхода долгоживущего изотопа ^{208}Bi ($T_{1/2} = 3.68 \times 10^5$ лет) в реакции $^{209}\text{Bi}(\gamma, n)^{208}\text{Bi}$ и отношения выходов четырехнейтронной и одонейтронной реакций. При определении выходов изотопов висмута были использованы следующие гамма-линии, энергии E_γ (в кэВ) и относительные интенсивности I_γ (в %), которые составляют для ^{205}Bi : 703.4 (31.1%) и 1764.3 (32.4%); для ^{208}Bi : 2614.5 (99.8%) [24]. Для обеспечения возможно большей эффективности при регистрации линии 2614.5, мишень располагалась на близком расстоянии (2 мм) от крышки германиевого кристалла. При этом не возникает необходимости внесения поправок на истинные совпадения, т.к. эта линия не сопровождается другими распадными линиями.

В качестве примеров на рис.2–5 приведен ряд измеренных спектров γ -квантов от мишени BGO вблизи энергий $E_\gamma = 703.4$ кэВ, 1764.3 кэВ и

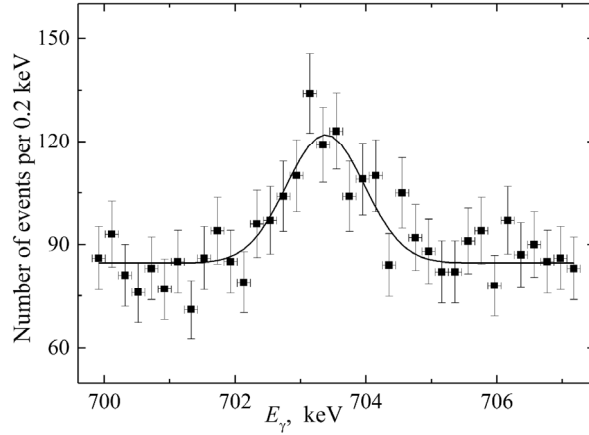


Рис.2 γ -спектр от BGO мишени вблизи энергии $E_\gamma = 703.4$ кэВ при $\hat{E}_e = 30$ МэВ.

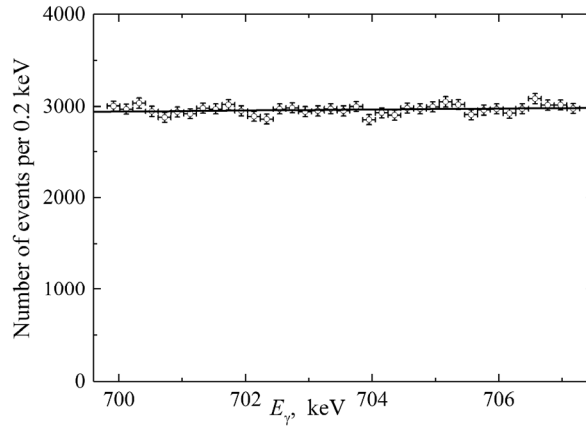


Рис.3 γ -спектр от BGO мишени вблизи энергии $E_\gamma = 703.4$ кэВ при $\hat{E}_e = 28$ МэВ.

2614.5 кэВ. Низкофоновые условия, созданные в подземной лаборатории, позволяют однозначно идентифицировать γ -линии исследуемых радиоизотопов: удастся выделить γ -линии с энергиями 703.4 и 1764.3 кэВ (рис.2 и 4) и надежно идентифицировать редкий околопороговый процесс $^{209}\text{Bi}(\gamma, 4n)^{205}\text{Bi}$ при $\hat{E}_e = 30$ МэВ. В случае линии $E_\gamma = 1764.3$ кэВ необходимо учесть вклад линии 1764.5 кэВ радиоизотопа ^{214}Bi , образующегося в распадной цепочке содержащихся в окружающем воздухе радона (^{222}Rn) и окружающих материалах урана (^{238}U). Этот вклад определяется путем измерения площади фотопика полного поглощения для линии $E_\gamma = 609.3$ кэВ изотопа ^{214}Bi (рис.4).

Удастся также выделить γ -линию с энергией 2614.5 кэВ (рис.5) долгоживущего дочернего радиоизотопа ^{208}Bi благодаря значительному подавлению в низкофоновой лаборатории вклада от цепочки распада ^{232}Th (содержащегося в окружающих материалах), и тем самым однозначно идентифицировать однеитронную реакцию $^{209}\text{Bi}(\gamma, n)^{208}\text{Bi}$.

Достоверность идентификации ядра ^{205}Bi проверялась при помощи анализа

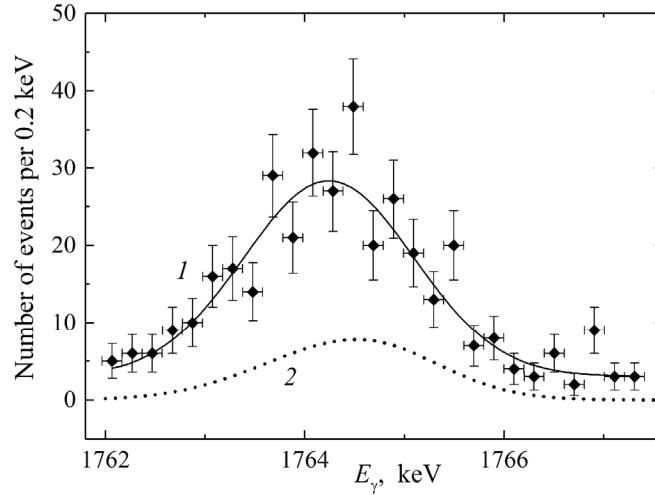


Рис.4. γ -спектр от BGO мишени вблизи энергии $E_\gamma = 1764.3$ кэВ при $\hat{E}_e = 30$ МэВ. Кривой 2 показан фоновый вклад линии $E_\gamma = 1764.5$ кэВ изотопа ^{214}Bi , образующегося в распадной цепочке содержащегося в окружающих материалах ^{238}U .

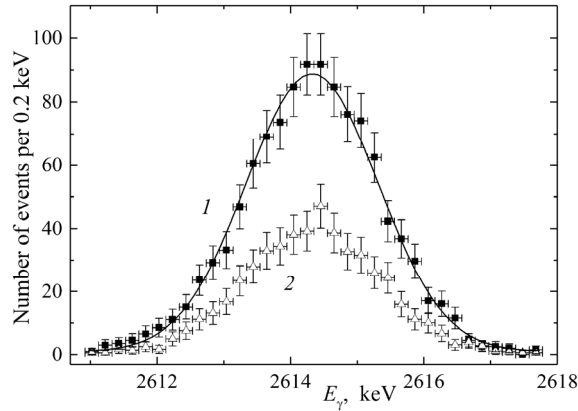


Рис.5. γ -спектр от BGO мишени вблизи энергии $E_\gamma = 2614.5$ кэВ при $\hat{E}_e = 30$ МэВ. Знаками на кривой 2 показан нормированный фон от содержащегося в окружающих материалах ^{232}Th .

кривой его распада, приведенной на рис.6. Полученное подгоночное значение периода полураспада $T_{1/2} = 15.7 \pm 4.8$ дней сопоставимо с табличным значением 15.31 дней для ^{205}Bi . Из рис.6 также видно, что результаты измерений для двух линий $E_\gamma = 703.4$ кэВ и 1764.3 кэВ в пределах ошибок согласуются друг с другом.

При подпороговой энергии $\hat{E}_e = 28$ МэВ не наблюдается указаний на наличие сигнала от линии $E_\gamma = 703.4$ кэВ, как это следует из рис.3 и результатов (не приведенных в данной статье) других дополнительных четырех измерений спектра вблизи этой линии. Горизонтальной (фоновой) линией на рис.3 показан результат фита данных при фиксированной нулевой величине вклада от распадной линии $E_\gamma = 703.4$ кэВ. Оценка верхней границы этого вклада осуществлялась следующим образом. При подгонке всех вышеупомянутых пяти спектров в фитируемую

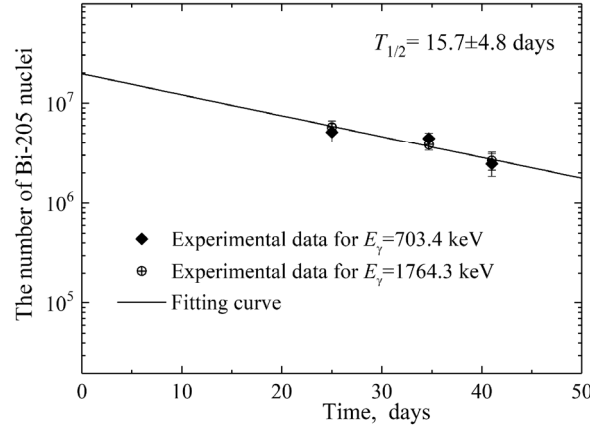


Рис.6. Кривая распада изотопа ^{205}Bi при $\hat{E}_e = 30$ МэВ. Экспериментальные точки соответствуют линиям распада 1764.3 кэВ и 703.4 кэВ. Линия – результат экспоненциального фитирования.

функцию кроме фоновой линии включался также гипотетический фиксированный вклад (в виде гауссовской функции) от распадной линии и прослеживался рост суммарной (по всем пяти спектрам) величины $\chi^2_{\min}$ в зависимости от увеличения этого гипотетического вклада. Верхней границей (на уровне достоверности 68%) последнего бралось значение, соответствующее росту величины $\chi^2_{\min}$ на единицу ($\Delta\chi^2_{\min} = 1$), по сравнению со случаем фиксированного нулевого вклада от распадной линии.

Полученное в результате спектроскопического анализа значение (или его верхняя граница) площади фотопика полного поглощения для гамма-линии данного радиоизотопа использовалось для оценки его выхода Y (или его верхней границы), который в данной работе определяется как количество ядер этого радиоизотопа, образованных в мишени за секунду её облучения тормозными фотонами. Величина Y связана с используемым иногда в литературе выходом y , нормированным на средний ток I_e первичных электронов следующим образом: $y = Y/I_e$ (см. например, работу [25]). Выходы Y определялись по следующей формуле:

$$Y = \frac{S(t_R / t_L) \lambda}{I_e \varepsilon_\gamma (1 - e^{-\lambda t_e}) e^{-\lambda t_c} (1 - e^{-\lambda t_R})}, \quad (1)$$

где S – площадь фотопика полного поглощения, ε_γ – эффективность регистрации γ -кванта, λ – постоянная распада данного радиоизотопа, t_e – время облучения, t_c – время между концом облучения и началом измерений (время остывания), t_R и t_L – реальное и живое время гамма-спектроскопического измерения. Отношение t_L/t_R в среднем составляло 95% в случае наземных измерений и 99.5% в случае подземных измерений. В качестве окончательной оценки Y^{exp} бралось усредненное по кратным измерениям значение. С другой стороны, Y^{exp} может быть представлен как

$$Y^{\text{exp}} = I_e v_t \sigma_w, \quad (2)$$

где v_t – количество ядер мишени на единичную площадь, составляющее $v_t = 6.56 \times 10^{19} \text{ см}^{-2}$ ($1.312 \times 10^{20} \text{ см}^{-2}$) для ^{65}Cu в медной мишени и $v_t = 2.756 \times 10^{21} \text{ см}^{-2}$ ($1.378 \times 10^{21} \text{ см}^{-2}$) для ^{209}Bi в BGO мишени при $\hat{E}_e = 28 \text{ МэВ}$ (30 МэВ); σ_w – взвешенное сечение, получаемое путем свертывания функции возбуждения $\sigma(E_\gamma)$ данной реакции со спектром $W(E_\gamma, E_e)$ тормозных фотонов, падающих на соответствующую мишень (вычисляемым при помощи программного пакета GEANT4):

$$\sigma_w = \int \sigma(E_\gamma) W(E_\gamma, E_e) dE_\gamma. \quad (3)$$

Из анализа результатов спектроскопических измерений для мониторинг реакции с использованием выражений (1)–(3) были извлечены следующие значения для I_e : $(3.46 \pm 0.36) \times 10^{12} \text{ сек}^{-1}$ при 28 МэВ и $(4.33 \pm 0.47) \times 10^{12} \text{ сек}^{-1}$ при 30 МэВ. В приведенных ошибках, помимо статистической ошибки определения площади фотопика S , учтены также погрешности других входящих в выражение (1) величин, составляющих около 5% для ε_γ , 2% для I_γ , 1% для λ , 2% для t_e и менее 1% для t_c , t_R и t_L .

Полученные оценки тока, наряду с измеренными значениями выходов Y^{exp} изучаемых реакций, использовались для определения из соотношения (2) взвешенного сечения σ_w , а также усредненного по спектру тормозных фотонов сечения $\langle \sigma \rangle = \sigma_w / w$ для этой реакции, где

$$w = \int W(E_\gamma, E_e) dE_\gamma \quad (4)$$

представляет собой приходящееся на один первичный электрон количество тормозных фотонов с энергиями выше порога $E_\gamma^{\min}$ исследуемой реакции ($E_\gamma^{\min} = 7.5 \text{ МэВ}$ и 29.5 МэВ , соответственно, для однонейтронной и четырехнейтронной реакций). В верхнем пределе интегрирования $E_\gamma^{\max}$ в выражениях (3) и (4) учитывается разброс по энергии $\hat{E}_e$ первичных электронов (см. также Рис.1): при $\hat{E}_e = 30 \text{ МэВ}$ он принимался равным $E_\gamma^{\max} = 33 \text{ МэВ}$, а при $\hat{E}_e = 28 \text{ МэВ}$ – $E_\gamma^{\max} = 31 \text{ МэВ}$.

Полученные значения Y^{exp} , σ_w и $\langle \sigma \rangle$ (или их верхние пределы для четырехнейтронной реакции при $\hat{E}_e = 28 \text{ МэВ}$) представлены в табл.1. Можно заметить, что измеренные в данной работе сечения $\langle \sigma \rangle$ реакции $^{209}\text{Bi}(\gamma, n)^{208}\text{Bi}$ в пределах ошибок, по крайней мере качественно согласуются с полученными на основе данных [25,26], а также предсказываемыми в моделях TALYS1.9 [27] и FLUKA [28] значениями. Отметим также, что предсказываемое моделями ненулевое значение усредненного сечения реакции $^{209}\text{Bi}(\gamma, 4n)^{205}\text{Bi}$ при $\hat{E}_e = 28 \text{ МэВ}$ обусловлено разбросом по энергии $\hat{E}_e$ (см. выше).

Отношение выходов (или взвешенных сечений) $R = Y^{\text{exp}}(^{205}\text{Bi}) / Y^{\text{exp}}(^{209}\text{Bi}) = \sigma_w(^{205}\text{Bi}) / \sigma_w(^{209}\text{Bi}) = (2.6 \pm 0.3) \times 10^{-5}$ при $\hat{E}_e = 30 \text{ МэВ}$ можно рассматривать как одну из возможных оценок верхнего предела выхода четырехнейтронной связанной системы по отношению к выходу одиночного нейтрона (безотносительно энергии связи гипотетического тетранейтрона). Этот предел на уровне достоверности 68% составляет примерно 3×10^{-5} . Более строгое ограничение $R < 10^{-5}$ получается из приведенных в табл.1 данных при подпороговой энергии $\hat{E}_e = 28 \text{ МэВ}$.

Из данных табл.1 следует, что предсказания моделей TALYS1.9 и FLUKA сильно занижены по сравнению с измеренным при $\hat{E}_e = 30 \text{ МэВ}$ выходом реакции

Табл.1. Выходы Y^{exp} , взвешенные и усредненные сечения, соответственно, σ_w и $\langle\sigma\rangle$ (или их верхние границы) реакций $^{209}\text{Bi}(\gamma, n)^{208}\text{Bi}$ и $^{209}\text{Bi}(\gamma, 4n)^{205}\text{Bi}$ и их сравнение с модельными предсказаниями. Приведенные ошибки сечений включают также систематические погрешности

	$\hat{E}_e = 30 \text{ МэВ}$		$\hat{E}_e = 28 \text{ МэВ}$	
	^{208}Bi	^{205}Bi	^{208}Bi	^{205}Bi
$Y^{\text{exp}}, \text{сек}^{-1}$	$(9.81 \pm 0.95) \times 10^7$	$(2.56 \pm 0.28) \times 10^3$	$(1.87 \pm 0.30) \times 10^8$	$< 1.2 \times 10^3$
$\sigma_w, \text{мб}$	16.4 ± 2.2	$(4.42 \pm 0.48) \times 10^{-4}$	19.6 ± 3.5	$< 2 \times 10^{-4}$
$\langle\sigma\rangle, \text{мб}$	142 ± 19	1.95 ± 0.22	139 ± 25	
$\langle\sigma\rangle, \text{мб на основе данных [25,26]}$	169 ± 17		173 ± 17	
$\langle\sigma\rangle, \text{мб (TALYS1.9)}$	179	0.139	163	0.0164
$\langle\sigma\rangle, \text{мб (FLUKA)}$	158	0.0183	142	0.00014

$^{209}\text{Bi}(\gamma, 4n)^{205}\text{Bi}$. Такое расхождение, по-видимому, обусловлено тем, что в моделях не предусмотрена возможность образования коррелированных нейтронных систем, в частности, резонансного состояния четырех нейтронов с энергией возбуждения $E^* = 2.37 \text{ МэВ}$ и шириной $\Gamma = 1.75 \text{ МэВ}$, обнаруженного недавно в реакции $^8\text{He}(p, p^4\text{He})4n$ [9].

4. Заключение

На линейном ускорителе электронов ННЛА с использованием тормозных фотонов и метода активационного анализа осуществлен поиск связанного состояния четырех нейтронов (тетранейтрона) в реакции $^{209}\text{Bi}(\gamma, 4n)^{205}\text{Bi}$, при средних энергиях электронов $\hat{E}_e = 28$ и 30 МэВ (с разбросом энергии около 2.5%), около порога этой реакции ($E_{\gamma}^{\text{th}} = 29.5 \text{ МэВ}$). Идентификация дочернего ядра ^{205}Bi проводилась путем гамма-спектроскопических измерений в подземной низкофоновой лаборатории ННЛА. Благодаря низкофоновым условиям удастся при $\hat{E}_e = 30 \text{ МэВ}$ надежно идентифицировать это ядро и определить взвешенное по спектру тормозных фотонов сечение σ_w и усредненное по спектру тормозных фотонов сечение $\langle\sigma\rangle$ этого редкого околопорогового процесса: $\sigma_w = (4.42 \pm 0.48) \times 10^{-4} \text{ мб}$ и $\langle\sigma\rangle = (1.95 \pm 0.22) \text{ мб}$. При энергии $\hat{E}_e = 28 \text{ МэВ}$ образования ^{205}Bi не наблюдается; для верхней границы взвешенного сечения σ_w искомой реакции $^{209}\text{Bi}(\gamma, 4n)^{205}\text{Bi}$ на уровне достоверности 68% получено $2 \times 10^{-4} \text{ мб}$. Низкофоновые условия позволяют также наблюдать редкий процесс распада долгоживущего ($T_{1/2} = 3.68 \times 10^5 \text{ лет}$) радионуклида ^{208}Bi , образованного в однеитронной реакции $^{209}\text{Bi}(\gamma, n)^{208}\text{Bi}$, и измерить при энергиях $E_e = 28$ и 30 МэВ ее взвешенное и

среднее сечения, соответственно, $\sigma_w = (19.6 \pm 3.5)$ и (16.4 ± 2.2) мб и $\langle \sigma \rangle = (139 \pm 25)$ и (142 ± 19) мб. На основе данных при $\hat{E}_e = 28$ и 30 МэВ, для верхней границы выхода реакции образования гипотетического тетранейтрона по отношению к выходу однопоточной реакции $^{209}\text{Bi}(\gamma, n)^{208}\text{Bi}$ получены на уровне достоверности 68%, соответственно значения 10^{-5} и 3×10^{-5} . Проведено сравнение полученных экспериментальных данных с предсказаниями моделей TALYS1.9 и FLUKA, показывающее, что эти предсказания сильно (более чем на порядок) занижены по сравнению с измеренным при $\hat{E}_e = 30$ МэВ выходом реакции $^{209}\text{Bi}(\gamma, 4n)^{205}\text{Bi}$. Такое расхождение может быть обусловлено тем, что в моделях не предусмотрена возможность образования коррелированных нейтронных систем, в частности, резонансного состояния четырех нейтронов с энергией возбуждения $E^* \approx 2.4$ МэВ, обнаруженного недавно в реакции $^1\text{H}(^8\text{He}, ^1\text{H}+^4\text{He})4n$ [10]. По-видимому, наблюдаемое в данной работе околопороговое образование четырехнейтронной системы может служить косвенным указанием на резонансный характер этой системы.

Авторы выражают благодарность персоналу линейного ускорителя ННЛА (ЕрФИ) за обеспечение пучками электронов для облучения экспериментальной установки.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Комитета по Науке РА в рамках научных проектов № 21SCG-1C018 и № 21T-1C253.

ЛИТЕРАТУРА

1. F.M. Marqués. arXiv:2106.00516 [nucl-ex], 2021.
2. N.T. Timofeyuk. J. Phys., **G29**, L3 (2003).
3. E. Hiyama, R. Lazauskas, J. Carbonell, M. Kamimura. arxiv:1604.04363 [nucl-th], 2016.
4. A.M. Shirokov, G. Papadimitriou, A. I. Mazur, I. A. Mazur, R. Roth, J.P. Varyet. arxiv:1607.05631 [nucl-th], 2016.
5. K. Bodek. Few-Body Systems, **55**, 713 (2014).
6. R.Ya. Kezarashvili. arxiv:1608.00169 [nucl-th], 2016.
7. F.M. Marqués, M. Labiche, N.A. Orr, J.C. Angélique, L. Axelsson, B. Benoit, U.C. Bergmann, M.J.G. Borge, W.N. Catford, S.P.G. Chappell et al., Phys. Rev. C, **65**, 044006 (2002).
8. K. Kisamori, S. Shimoura, H. Miya, S. Michimasa, S. Ota, M. Assie, H. Baba, T. Baba, D. Beaumel, M. Dozono et al., Phys. Rev. Lett., **116**, 052501 (2016).
9. M. Duer, T. Aumann, R. Gernhäuser, V. Panin, S. Paschalis, D.M. Rossi, N.L. Achouri, D. Ahn, H. Baba, C.A. Bertulani et al., Nature, **606**, 678 (2022).
10. T. Faestermann, A. Bergmaier, R. Gernhäuser, D. Kolla, M. Mahgoub. Phys. Lett. B, **824**, 136799 (2022).
11. B.G. Novatsky, E. Yu. Nikolsky, S.B. Sakuta, D.N. Stepanov. JETP Lett., **96**, 280 (2012).
12. B.G. Novatsky, S.B. Sakuta and D.N. Stepanov. JETP Lett., **98**, 656 (2013).
13. G.N. Dudkin, A.A. Garapatskii, V.N. Padalko. Nucl. Instr. Meth. A, **760**, 73 (2014).
14. G. Ayvazyan, H. Gulkanyan, V. Poghosov, L. Poghosyan. J. Contemp. Phys., **51**, 1 (2016).
15. A. Sirunyan, A. Hakobyan, G. Ayvazyan, A. Babayan, H. Vardanyan, G. Zohrabyan, K. Davtyan, H. Torosyan, A. Papyan. J. Contemp. Phys., **53**, 271 (2018).

16. A.S. Hakobyan, A.Y. Aleksanyan, S.M. Amirkhanyan, H.R. Gulkanyan, T.V. Kotanjyan, V.S. Pogoso, L.A. Poghosyan. J. Contemp. Phys., **55**, 111 (2020).
17. A. Aleksanyan, S.M. Amirkhanyan, A. Balabekyan, N.A. Demekhina, H.R. Gulkanyan, T.V. Kotanjyan, V. Mangasaryan, V.S. Pogoso, L.A. Poghosyan, S. Faltajanyan. J. Contemp. Phys., **55**, 275 (2020).
18. S.C. Fultz, R.L. Bramblett, J.T. Caldwell, R.R. Harvey. Phys. Rev. B, **133**, 1149 (1964).
19. V.V. Varlamov, A.I. Davydov, M.A. Makarov, V.N. Orlin, N.N. Peskov. Bulletin of the Russian Academy of Sciences. Physics, **80**, 317 (2016).
20. A. Aleksanyan, S.M. Amirkhanyan, H.R. Gulkanyan, T.V. Kotanjyan, V.S. Pogoso, L.A. Poghosyan. J. Contemp. Phys., **57**, 112 (2022).
21. A.A. Vasenko, I.V. Kirpichnikov, V.A. Kuznetsov, A.S. Starostin, A.G. Djanyan, V.S. Pogoso, S.P. Shachysisyan, A.G. Tamanyan. Mod. Phys. Lett. A, **5**, 1299 (1990).
22. A.R. Balabekyan, N.A. Demekhina, E. Melyan, S. Faltajanyan, A. Aleksanyan, S. Amirkhanyan, H. Gulkanyan, T. Kotanjyan, A.S. Hakobyan. J. Contemp. Phys., **55**, 1 (2020).
23. J. Allison, K. Amako, J. Apostolakis, P. Arce, M. Asai, T. Aso, E. Bagli, A. Bagulya, S. Banerjee, G. Barrand et al., Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A, **835**, 186 (2016).
24. SA National Nuclear Data Center database “Chart of Nuclides. Basic properties of atomic nuclei”, <https://www.nndc.bnl.gov/nudat3/>.
25. S.S. Belyshev, D.M. Filipescu, I. Gheoghe, B.S. Ishkhanov, V.V. Khankin, A.S. Kurilik, A.A. Kuznetsov, V.N. Orlin, N.N. Peskov, K.A. Stopani, O. Tesileanu, V.V. Varlamov. Eur. Phys. J. A, **51**, 67 (2015).
26. R.R. Harvey, J.T. Caldwell, R.L. Bramblett, S.C. Fultz. Phys. Rev. B, **136**, 126 (1964).
27. A. Koning, S. Hilaire, M. Duijvestijn. Proceedings of the International Conference on Nuclear Data for Science and Technology – ND 2007, **058**, 211 (2007).
28. G. Battistoni, T. Boehlen, F. Cerutti, P.W. Chin, L.S. Esposito, A. Fassò, A. Ferrari, A. Lechner, A. Empl, A. Mairani et al., Annals of Nuclear Energy, **82**, 10 (2015).

ՏԵՏՐԱՆԵՅՏՐՈՆԻ ՈՐՈՆՈՒՄԸ ԲԻՍՄՈՒԹԻ ՄԻՋՈՒԿԻ
ՖՈՏՈՃԵՂՔՄԱՆ ՌԵԱԿՑԻԱՅՈՒՄ

Տ.Վ. ՔՈԹԱՆՋՅԱՆ, Ա.ՅՈՒ. ԱԼԵՔՍԱՆՅԱՆ, Ա.Հ. ՔԵՉԵՉՅԱՆ, Ս.Մ. ԱՄԻՐԽԱՆՅԱՆ,
Հ.Ռ. ԳՈՒԼԳԱՆՅԱՆ, Վ.Ս. ՊՈՂՈՍՅԱՆ, Լ.Ա. ՊՈՂՈՍՅԱՆ

ԱԱԳԼ-ի գծային էլեկտրոնային արագացուցչի վրա $\tilde{E}_e = 28$ և 30 ՄԷՎ միջին էներգիաների ($\sigma_e \approx 0.7$ ՄԷՎ զառույան լայնությամբ) դեպքում իրականացվել է քառանյութային համակարգի շեմամերձ առաջացման որոնում արգելակման ճառագայթման ֆոտոններով հարուցված $^{209}\text{Bi}(\gamma, 4n)^{205}\text{Bi}$ ռեակցիայում (շեմային էներգիան՝ $E_{\gamma}^{th} = 29.5$ ՄԷՎ): Գիտափորձում կիրառվել է հարուցված ակտիվության մեթոդը: ^{205}Bi դուստր միջուկի նույնականացումն իրագործվել է զամմասակտրաչափական վերլուծությամբ ԱԱԳԼ-ի ստորգետնյա լաբորատորիայում, որում առկա ցածր ֆոնային պայմանների շնորհիվ հաջողվել է $\tilde{E}_e = 30$ ՄԷՎ-ի դեպքում հուսալիորեն նույնականացնել այդ միջուկը և առաջին անգամ շեմամերձ էներգիաների տիրույթում չափել $^{209}\text{Bi}(\gamma, 4n)^{205}\text{Bi}$ ռեակցիայի՝ արգելակման ֆոտոնների սպեկտրով կշռավորված կտրվածքը՝ $\sigma_w = (4.42 \pm 0.48) \times 10^{-4}$ մբ և այդ սպեկտրով միջինացված կտրվածքը՝ $\langle \sigma \rangle = (1.95 \pm 0.22)$ մբ: $\tilde{E}_e = 28$ ՄԷՎ-ի դեպքում ^{205}Bi -ի առաջացման վկայություններ չեն դիտարկվել: Ցածրֆոնային պայմաններում կատարված չափումները հնարավորություն են ընձեռում նաև գրանցելու $^{209}\text{Bi}(\gamma, n)^{208}\text{Bi}$ միանյութային ռեակցիայում առաջացած ^{208}Bi երկարակյաց ռադիոնուկլիդի ($T_{1/2} = 3.68 \times 10^5$ տարի) տրոհման

հազվադեպ պրոցեսը և որոշելու այդ ռեակցիայի կշռավորված և միջինացված կտրվածքները $\hat{E}_e = 28$ և 30 ՄէՎ էներգիաների դեպքում, համապատասխանաբար՝ $\sigma_w = (19.6 \pm 3.5)$ և (16.4 ± 2.2) մբ և $\langle \sigma \rangle = (139 \pm 25)$ և (142 ± 19) մբ: $\hat{E}_e = 28$ ՄէՎ-ի դեպքում ստացված տվյալների հիման վրա որոշվել է հիպոթետիկ քառանեյտրոն կապված համակարգի (տետրանեյտրոնի) առաջացման ռեակցիայի ելքի վերին սահմանը՝ համեմատած $^{209}\text{Bi}(\gamma, n)^{208}\text{Bi}$ ռեակցիայի ելքի հետ. այն կազմում է 10^{-5} : Ստացված փորձարարական տվյալների համեմատությունը TALYS1.9 և FLUKA մոդելների կանխատեսումների հետ ցույց է տալիս, որ $\hat{E}_e = 30$ ՄէՎ-ի դեպքում $^{209}\text{Bi}(\gamma, 4n)^{205}\text{Bi}$ ռեակցիայի չափված կտրվածքն անհամեմատ (ավելի քան մեկ կարգով) ավելի մեծ է, քան տեսական արժեքը: Նման տարաձայնությունը կարող է պայմանավորված լինել այն բանով, որ մոդելներում նախատեսված չէ կոռելացված նեյտրոնային համակարգերի առաջացման հնարավորությունը, ինչը վերջերս հաստատվել է $^1\text{H}(^8\text{He}, ^1\text{H}+^4\text{He})4n$ ռեակցիայի հետազոտման գիտափորձում, որում հայտնաբերվել է 2.4 ՄէՎ գրգռման էներգիայով քառանեյտրոն ռեզոնանսային համակարգ: Ըստ երևույթին, տվյալ աշխատանքում դիտարկված քառանեյտրոն համակարգի շեմամերձ առաջացումը $^{209}\text{Bi}(\gamma, 4n)^{205}\text{Bi}$ ռեակցիայում կարող է հանդիսանալ անուղղակի վկայություն այդ համակարգի ռեզոնանսային բնույթի վերաբերյալ:

SEARCHING FOR TETRANEUTRON IN BISMUTH NUCLEUS PHOTODISINTEGRATION REACTION

T.V. KOTANJYAN, A.Y. ALEKSANYAN, A.O. KECHECHYAN,
S.M. AMIRKHANYAN, H.R. GULKANYAN, V.S. POGOSOV, L.A. POGHOSYAN

At the linear electron accelerator AANL (YerPhI), at mean electron energies $\hat{E}_e = 28$ and 30 MeV (with a Gaussian width $\sigma_e \approx 0.7$ MeV), an attempt is undertaken to search for near-threshold production of four-neutron system in the reaction $^{209}\text{Bi}(\gamma, 4n)^{205}\text{Bi}$ (with the threshold energy $E_{\gamma}^{th} = 29.5$ MeV) induced by bremsstrahlung photons. The induced activity method was applied in the experiment. The gamma-spectroscopic measurements were carried out in the underground laboratory of the AANL. Owing to low-background conditions in the laboratory, one achieves, at $\hat{E}_e = 30$ MeV, a reliably identification of ^{205}Bi radionuclide and first determination of the near-threshold cross sections of this rare process, namely, the weighted by the spectrum of bremsstrahlung photons cross section $\sigma_w = (4.42 \pm 0.48) \times 10^{-4}$ mb and the averaged over the spectrum of bremsstrahlung photons cross section $\langle \sigma \rangle = (1.95 \pm 0.22)$ mb. No ^{205}Bi production was observed at $\hat{E}_e = 28$ MeV. Low-background conditions allow one also to identify the rare decays of the ^{208}Bi nucleus produced in the reaction $^{209}\text{Bi}(\gamma, n)^{208}\text{Bi}$, and measure its weighted and averaged cross sections at $\hat{E}_e = 28$ and 30 MeV: $\sigma_w = (19.6 \pm 3.5)$ and (16.4 ± 2.2) mb and $\langle \sigma \rangle = (139 \pm 25)$ and (142 ± 19) mb, respectively. From the data at $\hat{E}_e = 28$ MeV, an upper limit of the yield of a hypothetical four-neutron bound state (tetraneutron) production reaction relative to the yield of the reaction $^{209}\text{Bi}(\gamma, n)^{208}\text{Bi}$ is estimated to be 10^{-5} . The obtained experimental data are compared with predictions of the TALYS1.9 and FLUKA models. It is shown that the measured at $\hat{E}_e = 30$ MeV cross section of the reaction $^{209}\text{Bi}(\gamma, 4n)^{205}\text{Bi}$ strongly overestimates (by more than one order of magnitude) the theoretical value. This disagreement can be caused by the fact that the models do not foresee the production of correlated neutron clusters, in particular, four-neutron resonance state with 2.4 MeV excitation energy observed recently in the reaction $^1\text{H}(^8\text{He}, ^1\text{H}+^4\text{He})4n$. The near-threshold production of four-neutron system, observed in present work, can, probably, serve as an indirect indication on its resonance nature.

МОНИТОР ПОТЕРЬ ЭЛЕКТРОННОГО ПУЧКА УСКОРИТЕЛЯ AREAL НА БАЗЕ PIN-ФОТОДИОДОВ

С.Г. АРУТЮНЯН^{1,2}, А.В. МАРГАРЯН², Э.Г. ЛАЗАРЕВА^{2*}, М. CHUNG³,
Г.В. МИРЗОЯН², Н.С. МЕСРОПЯН², В.Г. ХАЧАТРЯН¹, А.Д. ДАВТЯН¹

¹Институт синхротронных исследований «Candle», Ереван, Армения

²Национальная научная лаборатория им. А.И. Алиханяна, Ереван, Армения

³Ulsan National Institute of Science and Technology, Ulsan, South Korea

*e-mail: ella.lazareva@yerphi.am

(Поступила в редакцию 29 сентября 2022 г.)

Разработан и испытан прототип системы измерения потоков электронов на основе PIN-фотодиодов для пучка электронов с энергией до 5 МэВ ускорителя AREAL Института синхротронных исследований. Система в перспективе будет использована для измерения потерь пучка из вакуумной камеры ондулятора SASE100, предназначенного для генерации излучения в терагерцовом диапазоне и будет установлен в тракт ускорителя AREAL при его модернизации. Метод использования PIN-фотодиодов в качестве монитора потерь пучка основан на эффекте образования электронно-дырочных пар при прохождении ионизирующих частиц через запирающий слой фотодиода. Расчеты процессов взаимодействия электронов с веществом запирающего слоя проводились с использованием программы PCLab. Эксперименты, проведенные на электронном пучке ускорителя, показали, что разработанная система способна эффективно регистрировать потоки электронов, как основного пучка ускорителя AREAL, так и его темнового тока.

1. Введение

Программа модернизации ускорителя AREAL основана на увеличении энергии электронного пучка до 20/50 МэВ и включает в себя разработку источника терагерцового излучения на основе ондулятора SASE100, в котором предполагается использовать принцип самоусиленной спонтанной эмиссии (self-amplified spontaneous emission (SASE) [1]). Станция ALPHA с таким источником излучения будет одним из перспективных устройств ускорителя AREAL.

Ондулятор SASE100 с периодичностью магнитной системы 27.3 мм и длиной сегмента 4.4922 м предназначен для создания переменного магнитного поля 0.47 Т в зазоре размером 12 мм в вертикальном направлении [2]. Вакуумная камера ондулятора в дальнейших расчетах промоделирована прямоугольным профилем с внешними размерами 20×15 мм² и толщиной ≈ 2 мм (материал – алюминий). Магнитная система ондулятора собрана на постоянных магнитах из NdFeB с остаточной магнитной индукцией ≈ 1.2 Т при коэрцитивном поле 1400–600 кА/м и температурах до 60°C. Для таких магнитов большой проблемой может стать радиационное повреждение, обусловленное потерями электронного пучка.

Особенно опасны аварийные ситуации, когда потери пучка обусловлены не слабым потоком периферийных частиц пучка (регулярные потери), а «высаживанием» всего пучка на стенки камеры. Для предотвращения таких ситуаций требуется разработка и инсталлирование системы потерь пучка с учетом конструктивных особенностей ондулятора. На рис.1 изображен общий вид ондулятора и фрагмент вакуумной камеры.

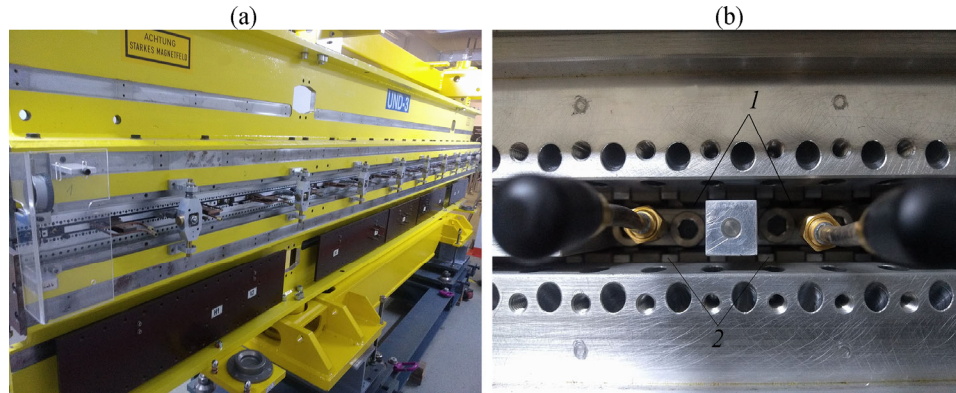


Рис.1. (а) Общий вид ондулятора SASE100. (б) Фрагмент вакуумной камеры и магнитной системы ондулятора: 1 – полюса магнитной системы, 2 – постоянные магниты с горизонтальной поляризацией.

Как видно из рис.1б, из-за ограниченности вакуумной камеры в вертикальном направлении полюсами и постоянными магнитами, доступное для внедрения датчиков пространство в горизонтальном направлении небольшое. Это обстоятельство ограничивает выбор возможных методов диагностирования потерь пучка практически двумя методами: с помощью оптических волокон [3] и компактных PIN-фотодиодов [4–7].

2. Оптические волокна. PIN-фотодиоды

В случае оптических волокон, физическими эффектами, определяющими прохождение частиц/излучения через волокно, могут служить радиационное помутнение волокна, либо (при низких интенсивностях облучения и высоких энергиях детектируемых частиц) измерение черенковских фотонов, генерируемых при прохождении частиц через волокно. Локализация области взаимодействия пучка с волокном при этом требует быстрых измерений достаточно малых сигналов (пространственное разрешение порядка 20 см требует проведения измерений в области 1 нс [4]). В работе [3] обсуждаются системы мониторинга потерь пучка с помощью оптических волокон километровых длин, при этом пространственное разрешение достигает нескольких метров.

PIN-фотодиоды широко используются для детектирования рентгеновского и γ -излучений, а также заряженных частиц. Метод основан на эффекте образования электронно-дырочных пар при прохождении частиц через вещество. Для генерации электронно-дырочной пары требуется ≈ 3.6 эВ энергии. Образовавшиеся электроны в присутствии электрического поля дрейфуют в сторону области N , а дырки – в сторону области P . PIN-фотодиоды отличаются тем, что содержат достаточно толстый (несколько сот микрометров) запирающий слой, на котором происходит значительная передача энергии пролетающей частицы данному

слою. Необходимая энергия для создания электронно-дырочной пары в полупроводнике примерно в 10 раз меньше, чем для создания пары электрон/ион в газе. Кроме того, плотность полупроводника примерно на три порядка больше, чем у газа. Поэтому ионизирующая частица создает в полупроводнике гораздо больший сигнал на длину пути, чем в объеме газа. В соответствии с этим PIN-фотодиоды часто называют твердотельными ионизационными камерами [4,8,9]. Большим преимуществом по сравнению с обычными ионизационными камерами является то, что для работы PIN-фотодиодов требуется низковольтное питание.

2.1. Регистрация фотонов, заряженных частиц и нейтронов

Широкое распространение PIN-фотодиоды получили для регистрации рентгеновского и γ -излучений. Фирма Hamamatsu разработала специальный класс фотодиодов для рентгеновского излучения (см. работу [10]). В качестве преимуществ в работе [11] отмечаются высокая эффективность детектирования, широкий динамический диапазон, хорошая радиационная стойкость и низкая стоимость кремниевых PIN-фотодиодов. Системы на базе PIN-фотодиодов используются в качестве детекторов для визуализации дозы облучения в радиотерапии [12]. В работе, [13] при разработке детектирующих систем для радиологического оборудования, PIN-фотодиоды RD100A использовались как более доступная альтернатива традиционным в этой области ионизационным камерам.

Идея использования PIN-фотодиодов для обнаружения потерь пучка заряженных частиц была впервые обсуждена в 1987 году (см. работу [5]). В работе [14] рассматривалась матрица из PIN-фотодиодов для детектирования заряженных частиц при столкновениях пучков в ускорителе SSC. В работе [15] разработана процедура калибровки PIN-фотодиодов с кремниевым запирающим слоем для измерения α -излучения источников на базе изотопов ^{239}Pu (Plutonium), ^{241}Am (Americium) и ^{244}Cm (Curium). В работе [16] на базе распространенных BPW34F PIN-фотодиодов разработана система детектирования потоков протонов, эквивалентных большому флюенсу нейтронов. Была собрана матрица из 7×7 фотодиодов с расстояниями между диодами 3.8 мм. Использовались 800 MeV протоны ускорителя Los Alamos Neutron Science Center (LANSCE). В работе [17] матрица из 49 PIN-фотодиодов использовалась для регистрации потока мюонов в эксперименте T2K (Tokai-to-Kamioka, эксперимент по нейтринным осцилляциям). Применялись HAMAMATSU S3590-08 PIN-фотодиоды с активной площадью $10 \times 10 \text{ мм}^2$ и толщиной запирающего слоя 300 мкм. Система фотодиодов предварительно была протестирована на электронном пучке с энергией 100 МэВ в Университете Киото (количество электронов 10^7 – 10^9 электрон/импульс, частота повторения импульсов 15 Гц). В работе [18] PIN-фотодиоды использовались как детекторы энергии фрагментов ядерных реакций распадов.

Отметим, что существуют предложения по использованию PIN-фотодиодов для детектирования нейтронов с дискриминацией гамма излучения. Обсуждается как непосредственный захват нейтронов фотодиодами, так и более предпочтительный вариант использования пластиковых сцинтилляторов, конвертирующих быстрые нейтроны в протоны [19]. Протоны в диапазоне энергий 3–12 МэВ улавливаются в кремниевом слое PIN-фотодиода, генерируя фототок. Метод показал свою работоспособность для источника нейтронов AmBe.

2.2. Выделение заряженных частиц на фоне излучения.

Выбор метода мониторинга пучка

В [4,5,7] для подавления фона синхротронного излучения было включено считывание по совпадению показаний двух диодов, расположенных друг против друга. Такая система мониторинга потерь пучка была установлена в 1993 году в ускорителе HERAp и являлась полезным диагностическим инструментом, в том числе важной частью системы защиты сверхпроводящих магнитов. Вторая система мониторинга потерь пучка была установлена в 1994 году в HERAe для изучения серьезного ограничения тока пучка, характеризующегося очень коротким временем жизни электронного пучка (в общей сложности вокруг всего кольца было установлено 214 PIN-фотодиода). В результате увеличился накопленный ток пучка и время его жизни [5].

Выбор между приведенными выше двумя методами мониторинга потерь пучка в данной работе сделан в пользу PIN-фотодиодов, так как нашей группой наработан определенный опыт использования таких фотодиодов для измерения профилей тонких лазерных пучков [7,8,20–22]. В этих работах с помощью PIN-фотодиодов измерялись потоки отраженных от вибрирующей струны фотонов, где струна служила миниатюрным сканером. Здесь использовалось другое полезное качество фотодиодов – их быстродействие. В процессе полупериода колебания струны производилось больше сотни измерений, что делает возможным профилирование поперечного сечения сфокусированного лазерного пучка с микрометрическим разрешением. Планируется также разработка системы измерения потерь пучка в ондуляторе SASE100 с помощью метода оптических волокон.

3. Оценка чувствительности PIN-фотодиодов

Количество электронно-дырочных пар при прохождении ионизирующей частицы через запирающий слой PIN-фотодиода зависит от типа заряженной частицы, ее энергии и свойств материала запирающего слоя. Наиболее распространены PIN-фотодиоды с кварцевым запирающим слоем. Зависимость потерь частицы от ее типа и энергии определяется соотношениями между сечениями рассеяния конкурирующих процессов, таких как ионизационные потери, тормозное излучение, рассеяние Меллера и Баба и аннигиляционные процессы [22]. Высокоэнергетические электроны взаимодействуют с веществом, в основном, посредством тормозного излучения, в то время как фотоны высоких энергий – путем образования электрон–позитронных пар [23,24].

Процессы взаимодействия электронов с веществом рассчитывались с помощью программы PCLab, разработанной в Томском политехническом университете, включающей все основные каналы взаимодействия электронов/излучения [9,10,25,26]. Базовые расчеты нормированы на один влетающий электрон.

Параметры электронного пучка AREAL следующие: энергия электронов 20 МэВ, частота повторения импульсов 20 Гц, заряд импульса 250 пК, средний ток 5 нА, поперечное сечение пучка 0.25 см^2 , среднее значение потока пучка $1.25 \times 10^{11} \text{ n}_e/\text{с}/\text{см}^2$.

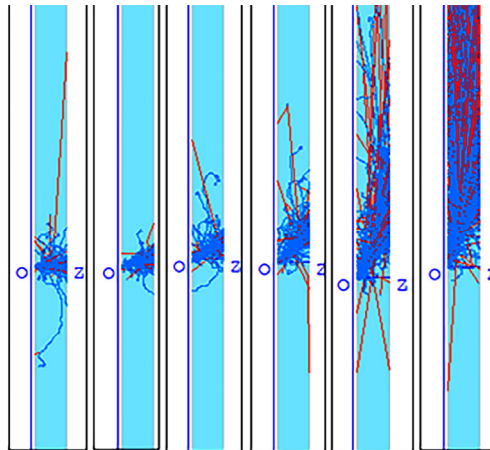


Рис.2. Моделирование прохождения электрона через алюминиевый слой толщиной 2 мм при разных углах падения относительно нормали: 0°, 15°, 30°, 45°, 60°, 75°. Изображены траектории вторичных частиц: электронов и фотонов.

На рис.2 приводятся траектории рассеянных/генерируемых частиц (результаты вычислений для нескольких значений угла влета электрона, углы отсчитываются от нормали к поверхности барьера).

В табл.1 показаны потоки вторичных частиц при пролете одного электрона с энергий 20 МэВ через 2 мм алюминиевую стенку под разными относительно нормали углами падения.

В табл.1 приняты следующие обозначения: θ – угол влета электрона, $d_{Al} = 2$ мм толщина барьера, $d_{Al_eff} = d_{Al} / \cos\theta$ – эффективная толщина барьера, e_{Nf} – количество электронов на выходе, e_{Ef} – средняя энергия электронов на выходе, p_{Nf} – количество позитронов на выходе, p_{Ef} – средняя энергия

Табл.1. Интегральные характеристики вторичных частиц/фотонов на выходе за барьером из алюминия, при прохождении одного электрона для разных углов падения

θ	d_{Al_eff} , см	e_{Nf}	e_{Ef} , МэВ	p_{Nf}	p_{Ef} , МэВ	ph_{Nf}	ph_{Ef} , МэВ
0	0.2	1.05	18.8	5.10×10^{-5}	2.33×10^{-4}	0.177	0.33
15	0.207	1.05	18.8	6.00×10^{-5}	2.02×10^{-4}	0.182	0.34
30	0.231	1.06	18.6	6.90×10^{-5}	2.82×10^{-4}	0.201	0.375
45	0.283	1.07	18.3	8.50×10^{-5}	3.62×10^{-4}	0.245	0.463
60	0.4	1.08	17.5	1.83×10^{-4}	6.78×10^{-4}	0.347	0.653
75	0.773	0.994	13.1	6.12×10^{-4}	2.16×10^{-3}	0.591	1.06

позитронов на выходе, ph_Nf – количество фотонов на выходе, ph_Ef – средняя энергия фотонов на выходе.

Как видно из табл.1 на выходе из барьера позитроны практически отсутствуют, в основном наблюдаются электроны и фотоны с возрастающей средней энергий с увеличением эффективной толщины пробега. Вылетающие электроны и позитроны, в основном, движутся в направлении влетающего электрона, и в дальнейших оценках это будет учитываться.

Отклик PIN-фотодиода оценивается аналогично тому, как сделано в работах [4,5]. А именно, введением понятия минимальной ионизирующей частицы (МИЧ), теряющей на ионизацию 2 МэВ на сантиметре пути независимо от ее энергии и типа. Приняты следующие параметры: запирающий слой $d_Si = 100$ мкм, обратное напряжение смещения 24 В. Необходимая энергия для создания электронно-дырочной пары составляет ≈ 3.6 эВ в кремнии. Энергия, выделяемая МИЧ в кремнии ≈ 3.7 МэВ/см (в работе [4] потери МИЧ для любого материала принимаются в диапазоне 1–2 МэВ/(г/см²), плотность Si 2.33 г/см³). Предполагается, что поверхность фотодиода параллельна поверхности вакуумной камеры.

В табл.2 приведены оценки числа электронно-дырочных пар в запирающем слое PIN-фотодиода с толщиной 100 мкм от одного электрона. В табл.2 приняты следующие обозначения: $d_Si_eff = d_Si / \cos\theta$ – эффективная толщина слоя фотодиода для частиц, падающих под углом; e_loss – потери энергии электронов, падающих на кремниевый запирающий слой фотодиода; $e_e-holes$ – количество электронных дыр, генерируемых электронами; p_loss – потери энергии позитронов, падающих на запирающий слой; $p_e-holes$ – количество электронных дыр, генерируемых позитронами; ph_loss – потери энергии фотонов, падающих на запирающий слой; $ph_e-holes$ – количество электронных дыр, генерируемых фотонами; $F_e-holes$ – полное количество генерируемых электронных дыр.

Табл.2. Расчеты электронно-дырочных пар в запирающем слое PIN-фотодиода

θ	d_Si_eff , см	e_loss , МэВ	$e_e-holes$	p_loss , МэВ	$p_e-holes$	ph_loss , МэВ	$ph_e-holes$	$F_e-holes$
0	1.00×10^{-2}	3.89×10^{-2}	1.11×10^4	1.89×10^{-6}	0.539	6.53×10^{-3}	1.87×10^3	1.30×10^4
15	1.04×10^{-2}	4.04×10^{-2}	1.15×10^4	2.30×10^{-6}	0.657	6.97×10^{-3}	1.99×10^3	1.35×10^4
30	1.15×10^{-2}	4.52×10^{-2}	1.29×10^4	2.95×10^{-6}	0.842	8.61×10^{-3}	2.46×10^3	1.54×10^4
45	1.41×10^{-2}	5.57×10^{-2}	1.59×10^4	4.45×10^{-6}	1.27	1.28×10^{-2}	3.67×10^3	1.96×10^4
60	2.00×10^{-2}	8.00×10^{-2}	2.29×10^4	1.35×10^{-5}	3.87	2.57×10^{-2}	7.33×10^3	3.02×10^4
75	3.86×10^{-2}	1.42×10^{-1}	4.06×10^4	8.75×10^{-5}	25	8.44×10^{-2}	2.41×10^4	6.48×10^4

В табл.3 показаны расчеты плотности тока разрешения через фотодиод. В качестве параметра разрешения выбрано условие, что сигнал от электронно-дырочных пар сравнивается с темновым током фотодиода порядка 0.1 нА (характеристика PIN-фотодиодов Hamamatsu S1223).

В табл.3 приняты следующие обозначения: $S_{eff}=S_{photodiode}$ – эффективная площадь фотодиода (расчет для PIN-фотодиода Hamamatsu S1223 с площадью апертуры 6.6 мм²), N_e – плотность потока электронов через фотодиод, обеспечивающая электронно-дырочный ток 0.1 нА, сравнимый с темновым током фотодиода; F_e – полный поток электронов через фотодиод; P_e – электронно-дырочный поток через фотодиод (равный значению F_e , умноженному на коэффициент преобразования электронно-дырочных пар на барьере (коэффициент $F_{e-holes}$ из табл.2); I_{detect} величина разрешения плотности тока падающих электронов в области фотодиода.

Табл.3. Расчет плотности тока разрешения в области фотодиода

$S_{eff}, \text{см}^2$	$N_e, \text{e/c/см}^2$	$F_e, n_e/c$	$P_e, e-hole/c$	$I_{detect}, \text{А/см}^2$
6.60×10^{-2}	7.29×10^5	4.81×10^4	6.25×10^8	1.17×10^{-13}
6.38×10^{-2}	7.25×10^5	4.62×10^4	6.25×10^4	1.16×10^{-13}
5.72×10^{-2}	7.11×10^5	4.07×10^4	6.25×10^4	1.14×10^{-13}
4.67×10^{-2}	6.83×10^5	3.19×10^4	6.25×10^4	1.09×10^{-13}
3.30×10^{-2}	6.27×10^5	2.07×10^4	6.25×10^4	1.00×10^{-13}
1.71×10^{-2}	5.65×10^5	9.65×10^4	6.25×10^4	9.04×10^{-14}

В расчетах фотодиод моделируется квадратом со стороной 2.57 мм (эффективная площадь фотодиода 6.6 мм²). Поскольку поток проходящих через алюминиевый барьер частиц падает на поверхность фотодиода под углом, эффективная площадь фотодиода S_{eff} уменьшается (множитель $\cos \theta$), что в определенной степени компенсирует увеличение количества генерируемых в барьере частиц при падении входной частицы под большими углами к нормали поверхности вакуумной камеры. В третьем столбце таблицы приводится плотность потока электронного пучка ($n_e/c/\text{см}^2$), в четвертом – количество входных электронов, которые попадают в апертуру фотодиода и в пятом – количество этих электронов умножается на коэффициент размножения электронно-дырочных пар от одного электрона (последний столбец в табл.2). Это количество конвертируется в ток фотодиода. Значения в колонке $n_e/c/\text{см}^2$ подбираются так, чтобы полученный ток равнялся темновому току фотодиода 0.1 нА. Полученное значение плотности

потока электронов пучка интерпретируется как разрешение фотодиода. Как видно в итоге, оно практически не зависит от угла влета электронов пучка в вакуумную камеру и составляет ≈ 0.1 пА/см².

4. Электронная схема

Электронный пучок в ускорителе AREAL состоит из очень коротких сгустков электронов (менее 1 пс). Прохождение этих электронов через стенки камеры порождает импульсы вторичных электронов/позитронов/фотонов с несколько большей длительностью. Однако, с точки зрения измерения потерь электронов, существенны только средние значения потоков, т.е. измерительная система должна обладать интегрирующим свойством. Измерительная система состояла из двух плат: платы предварительного интегрирования и усиления и платы дополнительного усиления, оцифровки и хранения данных. Для усиления слабых электрических сигналов обычно используются операционные усилители в режиме обратной связи по току, либо по напряжению. Для работы с фотодиодами, особенно для обеспечения высоких скоростей, обычно используется схема обратной связи по току [27] (такие усилители называются трансимпедансными). Отличия и сходства между операционными усилителями, основанными на обратной связи по напряжению и току, обсуждаются в работе [28]. В нашем эксперименте PIN-фотодиоды BPW34 (PHD Sensor) были подключены к платам предварительного усиления, после чего интегрированные сигналы по четырем каналам подавались на плату 4×RAM SPI PhW. Здесь происходило дополнительное усиление сигнала с помощью операционного усилителя INA 128, его оцифровка при помощи АЦП MCP3301 и параллельная запись полученной информации в запоминающие микрочипы (LC512 с емкостью памяти 512 кбит). Используемые 12-разрядные АЦП формировали выходной сигнал со знаком, в пределах (–4096, 4096). Информация считывалась через USB порт компьютера при помощи платы A_Line_Adapter. Источник постоянного тока обеспечивал питание схемы 4×RAM SPI PhW. Плата предусмотрена для подключения четырех фотодиодов.

5. Экспериментальная часть

5.1. Предварительные эксперименты

Целью предварительных экспериментов было изучение свойства интегрирования первичного усилителя, а также сравнение характеристик каналов схемы измерения.

В эксперименте использовались три PIN-фотодиода с тремя первичными интегрирующими усилителями и быстрая 4-х канальная плата 4×RAM SPI PhW. Измерения по всем каналам производились параллельно, что позволяло также измерять быстрые сигналы.

Было проведено два предварительных эксперимента при следующих условиях:

- В первом – фотодиоды были помещены в черную коробку и сопряжены с быстрыми светодиодами, на которые подавались короткие электрические импульсы с длительностью ≈ 40 нс. Частота следования импульсов регулировалась генератором частоты. На рис.3а приведены результаты измерений с выходов трех интегрирующих плат. Фотодиоды освещались светодиодами, запитываемыми короткими импульсами с различной частотой повторения.
- Во втором – были сравнены характеристики трех интегрирующих каналов. Для этого все три фотодиода освещались одним удаленным источником света с регулируемой интенсивностью. На рис.3б приведены результаты эксперимента.

Как видно из рис.3а среднее значение выходного напряжения прямо пропорционально частоте световых импульсов светодиодов, т.е. интегрирование действительно выполняется. Из-за разницы параметров измерительных каналов, светодиодов, операционных усилителей и других используемых элементов, чувствительности 3-х изготовленных интегрирующих каналов отличаются: для 1 – 1.795×10^{-5} В/Гц, 2 – 3.645×10^{-5} В/Гц и 3 – 4.193×10^{-5} В/Гц. Чувствительности каналов по отношению к световым потокам совпадают с точностью $\pm 5\%$ (см. рис.3б).

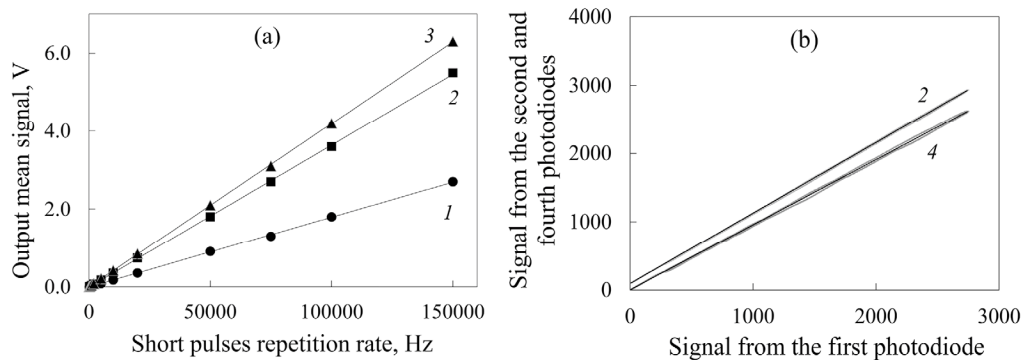


Рис.3. (а) Сигналы с первичных интегрирующих плат 1, 2, 3. (б) Сравнение характеристик измерительной схемы фотодиодов 2 и 4 по отношению к первому фотодиоду.

5.2. Эксперименты на электронном пучке AREAL

Эксперименты на ускорителе электронов AREAL проводились при включенном/выключенном питании высокочастотной (ВЧ) системы ускорителя, при включенном/выключенном лазерном излучении, падающим на катод ускорителя, а также при различных энергиях пучка.

На рис.4 схематически представлены ток пучка, темновой ток ускорителя AREAL и расположение фотодиодов. Поскольку темновой ток образуется в результате ускорения случайных электронов при включенной системе ВЧ и выключенном лазерном излучении на катоде, кроме широкого распределения по энергии, следует ожидать, что угловое распределение электронов также больше углового распределения электронов пучка.

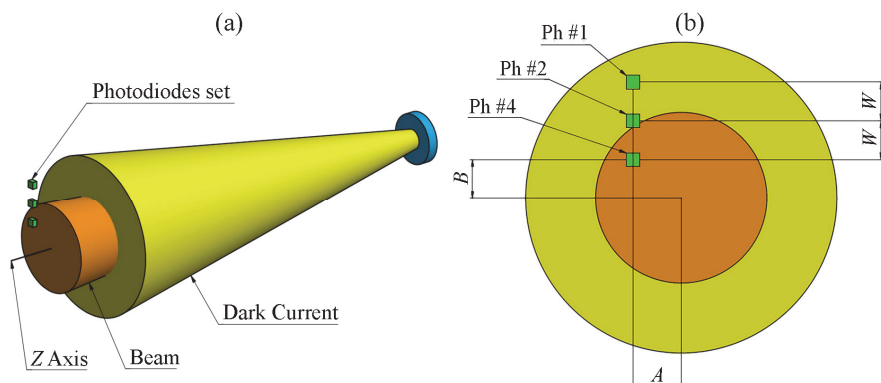


Рис.4. Изометрический вид: ток пучка и темновой ток. (а) Расположение фотодиодов в плоскости, ортогональной оси ускорителя Z , и (b) A и B – расстояния фотодиода 4 (нижнего) от оси ускорителя (по горизонтали и вертикали), W – расстояние между фотодиодами.

Световой фон

Отметим, что кроме электронов пучка фотодиоды регистрировали также облучение светом, так как даже при полном отключении освещения туннеля ускорителя в нем присутствовали некоторые источники света: экраны компьютеров и световые табло приборов. Для того, чтобы оценить этот вклад вначале фотодиоды были помещены в черный ящик и произведены измерения. Было обнаружено, что в таких условиях измерительная схема генерирует небольшой отрицательный сигнал, который необходимо вычесть при последующих измерениях.

Далее был проведен эксперимент, где фотодиоды размещались на штативе в области пучка, ВЧ система, облучение фотокатода лазерным излучением и освещение в туннеле были выключены. Средние значения светового фона по каналам: 1 – 7.47; 2 – 6.27; 4 – 7.46. Приведенные величины много меньше верхнего предела 4096 12-разрядного аналого-цифрового преобразователя (АЦП) МСР3301.

Далее были проведены два эксперимента при следующих условиях:

Позиция $Z = 400$ мм, энергия 3.6 МэВ ($A = 70$ мм, $B = 0$ мм, $W = 30$ мм)

ВЧ система включена, освещение фотокатода выключено (темный ток, пучка нет). Обнаружены сигналы на всех фотодиодах (см. рис.5а). Фотодиоды 2 и 4 регистрируют выход за верхний предел диапазона измерений. Самый удаленный от оси фотодиод 1 выдает сильный сигнал вблизи верхнего предела насыщения. Расстояния от оси пучка до фотодиодов: 1 – 138.9 мм; 2 – 114.0 мм; 4 – 92.2 мм.

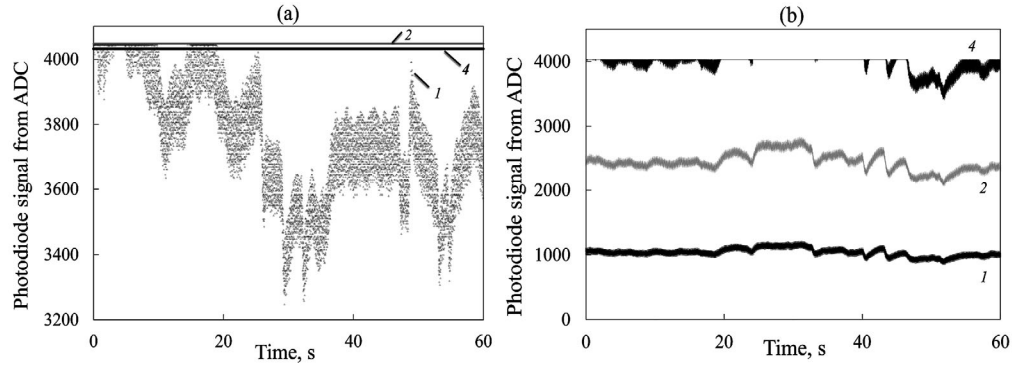


Рис.5. (а) Показания фотодиодов 1, 2 и 4 в плоскости $Z = 400$ мм, $A = 70$ мм, $B = 0$ мм. (б) Показания фотодиодов 1, 2 и 4 в плоскости $Z = 400$ мм, $A = 70$ мм, $B = 60$ мм.

Позиция $Z = 400$ мм, энергия 3.6 МэВ ($A = 70$ мм, $B = 60$ мм, $W = 30$ мм)

В этом эксперименте система фотодиодов была смещена в сторону увеличения расстояния от оси ускорителя так, чтобы фотодиод 4 занял положение первого в предыдущем эксперименте. Расстояния от оси пучка до фотодиодов: 1 – 92.2 мм; 2 – 76.2 мм; 4 – 70.0 мм. В этом эксперименте система ВЧ была включена, а освещение фотокатода выключалось в интервалах 0–20 с и 40–60 с (темновой ток). В интервале 20–40 с освещение фотокатода было включено и присутствовали как темновой ток, так и основной пучок.

Результаты эксперимента представлены на рис.5б. Как видно, показания всех фотодиодов стали попадать в диапазон измерений.

На рис.5б просматривается процедура включения/выключения освещения фотодиодов, формирующая электронный пучок. Темновой ток и основной пучок имеют различные поперечные размеры в зависимости от расстояния вдоль оси Z , (см. рис.4). В случае, когда фотодиоды удалены на большие расстояния от выходного фланца ускорителя и расположены в периферийной области пучка (в поперечном направлении), то пучок здесь уже не чувствуется, а темновой ток все еще присутствует. Именно этим объясняется то, что на рис.5б включение пучка просматривается достаточно слабо. Размещение же фотодиодов ближе к оси пучка приводит к тому, что выходные сигналы насыщаются (выходят за допустимые пределы измерения). Учитывая это, в следующем эксперименте фотодиоды были приближены к оси пучка, а расстояние от выходного фланца увеличено.

Позиция $Z = 1400$ мм, энергия 3.6 МэВ ($A \approx 0$ мм, $B \approx 0$ мм, $W = 30$ мм)

Для того, чтобы выделить переход от темнового тока к току пучка, система фотодиодов была приближена к оси пучка и отдалена по оси Z от выходного фланца. Энергия пучка сохранялась на уровне 3.6 МэВ. До 30-й секунды присутствовал только темновой ток, с 30-й с включался также ток пучка. Результаты эксперимента показаны на рис.6а.

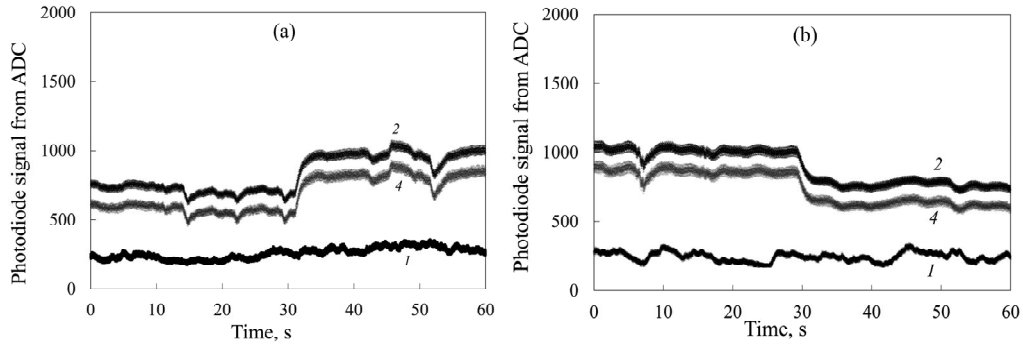


Рис.6. (а) Система фотодиодов 1, 2 и 4 на плоскости $Z = 1400$ мм. До 30-й секунды присутствует только темновой ток, после – и темновой ток и основной пучок. (б) Система фотодиодов 1, 2 и 4 на плоскости $Z = 1400$ мм. До 30-й секунды присутствуют темновой ток и основной пучок, после – только темновой ток.

Как видно из рис.6а максимальный сигнал наблюдался для фотодиода 2. Отсюда следует, что ось пучка проходила между фотодиодами 2 и 4. Для этих двух фотодиодов факт включения пучка наглядно просматривается в отличие от наиболее удаленного фотодиода 1. Эксперимент был проведен и в обратном порядке. Процесс начинался с включенного тока пучка, который на 30-й с выключался. До 30-й с присутствовали и основной пучок и темновой ток, после 30-й с – только темновой ток. Результаты эксперимента приведены на рис.6б.

Видно, что на рис.6а и 6б показания фотодиодов 4 и 2 хорошо коррелируют друг с другом и регистрируют процесс включения/выключения пучка.

Позиция $Z = 1000$ мм, энергия 2 МэВ ($A \approx 0$ мм, $B \approx 0$ мм, $W = 30$ мм)

Следующий этап проводился при энергии пучка 2 МэВ, фотодиоды располагались на плоскости $Z = 1000$ мм. На рис.7а представлены результаты измерений. В течение первых 30 с присутствовал только темновой ток, в последующие 30 с включался также основной пучок.

На следующем этапе условия эксперимента были те же, однако, первые 30 с измерения проводились в присутствии тока, а последующие 30 с присутствовал

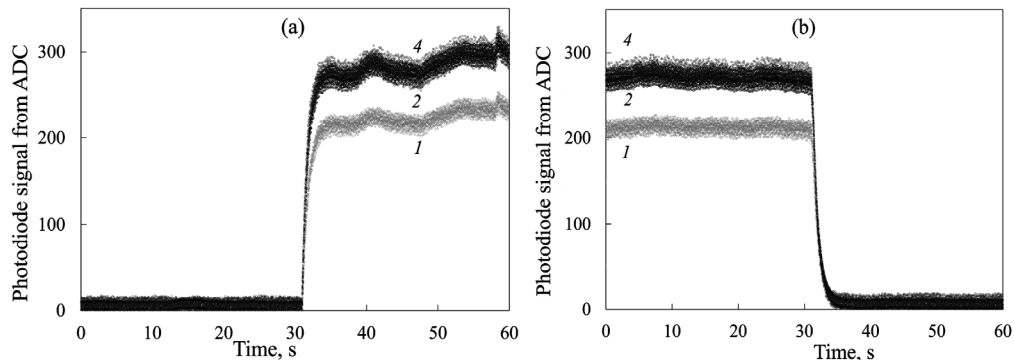


Рис.7. (а) Система фотодиодов 1, 2 и 4 на плоскости $Z = 1000$ мм, включение основного пучка: интервал 30–60 с. (б) Система фотодиодов 1, 2 и 4 на плоскости $Z = 1000$ мм, включение основного пучка: интервал 0–30 с.

только темновой ток. (рис.7b).

Как видно из рис.7а и 7b при энергии пучка в 2 МэВ в экспериментах наблюдался только основной пучок, темновой ток практически отсутствовал.

6. Заключение

Проведено сравнение систем мониторинга потерь пучка, работающих на разных принципах (применение оптических волокон или PIN-фотодиодов). В условиях поставленной задачи, а именно для проведения измерений потерь электронного пучка в узком пространственном диапазоне за пределами ондуляторной камеры SASE100, выбрана и разработана система, работающая на PIN-фотодиодах.

Произведена оценка чувствительности фотодиодов BPW34 и Hamamatsu S1223 к электронному пучку и сделан вывод о том, что такие фотодиоды способны регистрировать электронный ток в фА-диапазоне. Разработан и изготовлен предварительный предусилитель, позволяющий регистрировать короткие импульсы (длительность электронных сгустков находится в пикосекундном диапазоне). Электронные платы тестировались короткими импульсами, излучаемых светодиодами. Разработана и изготовлена специальная система для интегрирования коротких световых импульсов (длительность импульса ≈ 40 нс).

Предварительные эксперименты на ускорителе AREAL показали, что измерительная система действительно интегрирует короткие световые импульсы, а также импульсы ионизирующего излучения (первичные электроны тока темного пучка и ускоренного электронного пучка, а также возможные вторичные электроны/позитроны и фотоны).

В экспериментах не удалось получить абсолютные характеристики системы измерения электронов, так как диапазон измерения имеющегося в наличии цилиндра Фарадея не совпадал с нашей системой. Разрешение цилиндра Фарадея находилось в области потоков электронов, которые насыщают PIN-фотодиоды, т.е. разработанная система регистрации оказалось более чувствительной.

Авторы выражают благодарность Б.А. Григоряну за постановку задачи и большое внимание к работе, а также сотрудникам ускорителя AREAL за помощь в осуществлении экспериментов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Комитета по науке РА в рамках научных проектов 20APP-2G001 и 21T-2G079.

ЛИТЕРАТУРА

1. **V.M. Tsakanov, G.A. Amatuni et al.** NIM A, **829**, 284 (2016).
2. **L. Gumprecht, J. Eidam et al.** Status of the Undulator System for the VUV-FEL Phase II. Annual Report, Desy, Hamburg, 11076 (2003).
3. **H. Henschel, M. Korfer, J. Kuhnenn, U. Weinand, F. Wulf.** NIM A, **526**, 537 (2004).
4. **K. Wittenburg.** Proceedings of the 2018 CERN-Accelerator-School course on Beam Instrumentation, (Tuusula, Finland, 2018), pp. 397-435.
5. **K. Wittenburg.** The Pin-Diode Beam Loss Monitor System at HERA. AIP CP, **546**, 3 (2000).
6. **K. Wittenburg.** DESY, Beam Loss Monitors, CAS Beam Instrumentation, (Hamburg, Germany, 2018), pp. 35,36.
7. **W. Bialowons. F. Ridoutt, K. Wittenburg.** Electron Beam Loss Monitors for HERA,

- EPAC 27, London, 1628 (1994).
8. **P. Palni, M. Hoefkamp, A. Taylor, S. Vora, H. McDuff, Q. Gua, S. Seidel.** NIM A, **735**, 213 (2014).
 9. **S. Srivastava, R. Henry, A. Topka.** JIES, **1**(1), 47 (2007).
 10. <http://usa.hamamatsu.com/cmpdetectors/X-ray.htm>.
 11. **S. Ban, H. Hirayama, Y. Namito et al.** NST, **31**(2), 163 (1994).
 12. **A. Espinoza.** Development of a Silicon Detector for Dose Imaging and Measurement, University of Wollongong, 2010.
 13. **C. Murata, D. Fernandes, N. Lavínia, L. Caldas, S. Pires, R. Medeiros.** RPC, **95**, 101 (2014).
 14. **S.L. Shapiro, W. Dunwoodie.** NIM A, **275**, 580 (1989).
 15. **F. Jiménez.** Test Procedure for PIN Diode Radiation Detectors, ININ, México, **508**, 1 (2008).
 16. **M. Hoefkamp, A. Grummer, I. Rajen, S. Seidel.** NIM A, **890**, 108 (2018).
 17. **K. Matsuoka, A. Ichikawa, H. Kubo, et al.** NIM A, **624**, 591 (2010).
 18. **G. Knyazheva, S. Khlebnikov, et al.** NIM B, **248**, 7 (2006).
 19. **C. Mesquita, T. Filho, M. Hamada.** IEEE TNS, **50**(4), 899 (2003).
 20. **S.G. Arutunian, S.A. Badalyan, M. Chung, E.G. Lazareva, A.V. Margaryan, G.S. Harutyunyan.** RSI, **90**, 073302 (2019).
 21. **S.G. Arutunian, A.V. Margaryan, G.S. Harutyunyan, E.G. Lazareva, A.T. Darpasyan, D.S. Gyulamiryan, M. Chung, D. Kwak.** RSI. **92**, 033303 (2021).
 22. **E.G. Lazareva.** J. Contemp. Phys., **53**(2), 136 (2018).
 23. **M. Tanabashi et al.** Phys. Rev. D, **98**, 030001 (2018).
 24. **V. Khachatryan.** Beam–Matter Interaction and Radiation Dose Measurements, Candle SRI Yerevan, Armenia, 2019.
 25. **В.И. Беспалов.** Компьютерная лаборатория КЛ PCLab, Томск: Изд. ТПУ, 2018.
 26. **В.И. Беспалов.** Лекции по радиационной защите, Томск: Изд. ТПУ, 2017.
 27. <https://www.scribd.com/document/169316125/si-pd-circuit-e>.
 28. **J. Karki.** Voltage Feedback Vs Current Feedback Op Amps Application Report, TI SLVA, **051**, 1998.

ELECTRON BEAM LOSS MONITOR OF AREAL ACCELERATOR BASED ON PIN-PHOTODIODES

S.G. ARUTUNIAN, A.V. MARGARYAN, E.G. LAZAREVA, M. CHUNG,
G.V. MIRZOYAN, N.S. MESROPYAN, V.G. KHACHATRYAN, A.D. DAVTYAN

A prototype PIN-photodiode based electron flux measurement system for the AREAL accelerator electron beam (energy up to 5 MeV) was developed and tested. The system will eventually be used to measure beam losses from the vacuum chamber of the SASE100 undulator, which is intended for generation of radiation in the terahertz range and will be installed in the AREAL accelerator tract during its modernization. The method of using PIN-photodiodes as a beam loss monitor is based on the effect of electron–hole pairs formation when ionizing particles pass through the photodiode barrier layer. Calculations of interaction of electrons with the substance of the barrier layer were performed using the PCLab program. The experiments carried out on the accelerator electron beam, showed that the developed system is capable of effectively registering the electron fluxes of both the main beam of the AREAL accelerator and its dark current.

ИССЛЕДОВАНИЯ ХАРАКТЕРИСТИК ДЕТЕКТОРА ARICH В РАСПАДЕ $D^{*\pm}$ -МЕЗОНА В ЭКСПЕРИМЕНТЕ BELLE II С ПРИМЕНЕНИЕМ МЕТОДА МОНТЕ-КАРЛО

Н. АКОПОВ, Г. ГЕВОНДЯН*, В. МУРАДЯН, Г. КАРЯН

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

*e-mail: gayane.gevondyan@yerphi.am

(Поступила в редакцию 4 ноября 2022 г.)

Дана оценка моделирования с применением метода Монте-Карло (МК) отношения сигнала к фону в спектре инвариантной массы системы каон–пион для распадов $D^0 \rightarrow K^- \pi^+$ и $\bar{D}^0 \rightarrow K^+ \pi^-$, производимых в цепочке распадов $D^{*+} \rightarrow D^0 \pi^+$ и $D^{*-} \rightarrow \bar{D}^0 \pi^-$, в различных интервалах импульсов/углов пионов (когда пион попадает в аксептанс детектора ARICH) и каонов (каон регистрируется в ARICH). Табулированные значения упомянутых отношений будут использованы коллаборацией Belle II для изучения производительности работы детектора ARICH. Затем результаты эффективностей и вероятностей ложной идентификации сигналов, полученные на основе табулированных отношений, будут важным ингредиентом для будущих физических интерпретаций данных коллаборации Belle II.

1. Введение

Эксперимент Belle II на асимметричном e^+e^- коллайдере SuperKEKB [1,2] в Исследовательской организации ускорителей высоких энергий (КЕК, Цукуба, Япония) нацелен на поиск CP-асимметрии в различных редких распадах, а также на новую физику, выходящую за пределы Стандартной Модели, и предполагает набор данных с высокой статистикой, соответствующей интегральной светимости 50 ab^{-1} . Его предшественник, эксперимент Belle, позволял идентифицировать пионы и каоны с импульсами до 2 ГэВ/с в передней области детектора. Однако в эксперименте Belle II для поиска новой физики в таких процессах, как $B \rightarrow \rho \gamma$ ($\rho \rightarrow \pi\pi$), необходима идентификация заряженных частиц в передней области с более высокими значениями импульсов вплоть до 4 ГэВ/с. Для достижения этой цели к спектрометру Belle II был добавлен дополнительный детектор идентификации частиц (PID), называемый черенковским счетчиком изображений аэрогелевого кольца (ARICH – Aerogel Ring Imaging Cherenkov). Создание счетчика ARICH было завершено в октябре 2018 г., а в декабре 2018 г. детектор был установлен и интегрирован в схему оборудования спектрометра Belle II. Эффективность и вероятность ложной идентификации сигналов детектора ARICH являются основными характеристиками, существенными для физического интерпретация.

2. Детектор ARICH в эксперименте Belle II

Счетчик ARICH расположен в передней части спектрометра Belle II [1,2]. Это устройство для идентификации частиц нового типа, разработанное для эксперимента Belle II. Он имеет форму прямоугольного тороида с внешним радиусом 1140 мм, внутренним радиусом 420 мм и длиной 280 мм.

Для идентификации частиц детектором ARICH используются черенковские фотоны, излучаемые в аэрогелевом радиаторе, когда скорость частицы превышает значение скорости света в веществе. Излученные фотоны регистрируются системой лавинных фотодетекторов (HAPD) и измеряется угол излучения фотона. RICH детектором, измеряя угол излученного фотона, можно определить массу частицы по соотношению:

$$\cos\theta = \frac{\sqrt{(mc/\mathbf{p})^2 + 1}}{n}, \quad (1)$$

где θ – угол эмиссии черенковских фотонов, m – масса частицы, n – индекс рефракции аэрогеля, и $\mathbf{p}$ – импульс частицы, измеренный системой трековых детекторов.

Идентификация частиц счетчиком ARICH основана на сравнении наблюдаемой картины образов фотонов с функцией плотности вероятности (PDF), которая описывает ожидаемое распределение черенковских фотонов и фоновых попаданий фотонов на плоскость детектора (для заданных параметров заряженного трека) и предполагаемой гипотезы о типе частицы. Для каждого заряженного трека, проходящего через ARICH, оценивается значение функции правдоподобия для шести гипотез частиц: электрона, мюона, пиона, каона, протона и дейтрона. Функция правдоподобия для гипотезы частицы h определяется как:

$$L_h = \prod p_{h,i}(m_{h,i}); p_{h,i}(m_{h,i}) = \frac{e^{-n_{h,i}} n_{h,i}^{m_{h,i}}}{m_{h,i}!}, \quad (2)$$

где произведение берется по всем пикселям счетчика ARICH, а $p_{h,i}(m_{h,i})$ – это вероятность наблюдать $m_{h,i}$ попаданий на i -м пикселе, в то время как ожидается в среднем $n_{h,i}$ попаданий (для принятой гипотезы h) [1,2]. Поскольку в ARICH не различаются многофотонные попадания от однофотонных, $p_{h,i}(m_i)$ можно перефразировать как:

$$p_{h,i}(nohit) = e^{-n_{h,i}}, \quad (3)$$

$$p_{h,i}(hit) = 1 - p_{h,i}(nohit) = 1 - e^{-n_{h,i}}, \quad (4)$$

На основе уравнений (2) и (3) уравнение (1) может быть переписано как:

$$\ln L_h = -N_h \sum [n_{h,i} + \ln(1 - e^{-n_{h,i}})], \quad (5)$$

где N_h есть ожидаемое полное число попаданий, и сумма берется по пикселям, где были попадания. Разделение между каонами и пионами производится наложением критерия отбора на логарифм отношения правдоподобия (см. уравнение (5)), которое определено как:

$$R_{K/\pi} = \frac{\ln L_K}{\ln L_K + \ln L_\pi}, \quad (6)$$

$$R_{\pi/K} = \frac{\ln L_\pi}{\ln L_K + \ln L_\pi}. \quad (7)$$

3. Определение эффективности

Эффективность регистрации детектора ARICH, а также вероятность ошибочной идентификации в зависимости от импульса частицы и угла являются очень важными характеристиками для любого детектора идентификации частиц (PID) в оценке различных наблюдаемых величин, таких как поперечное сечение, вклад в полное сечение и других. Обычный подход к расчету эффективности основан на использовании известных распадов резонансов с пионами, каонами и протонами в конечном состоянии. Для проведенных исследований были использованы распады $D^{*-} \rightarrow \bar{D}^0 \pi^-$ и $D^{*+} \rightarrow D^0 \pi^+$. Выполняя подгонку спектра инвариантных масс, образованного распадающимися частицами, а затем применяя условие нахождения инвариантной массы в окне подгоночных значений резонансной массы и ширины, можно с большой вероятностью определить тип адрона в конечном состоянии. На основе функции PID, определяемой как логарифмическая достоверность вероятности, заданная детектором ARICH, уравнение (5), мы можем рассчитать эффективность и вероятность ложной идентификации по формулам:

$$\epsilon_K = \frac{\text{число } K \text{ треков после } R_{K/\pi} > R_{cut}}{\text{число } K \text{ треков}}, \quad (8)$$

$$\epsilon_\pi = \frac{\text{число } \pi \text{ треков после } R_{\pi/K} > R_{cut}}{\text{число of } \pi \text{ треков}}, \quad (9)$$

$$\eta_K = \frac{\text{число } K \text{ треков после } R_{K/\pi} < (1 - R_{cut})}{\text{число } K \text{ треков}}, \quad (10)$$

$$\eta_\pi = \frac{\text{число } \pi \text{ треков после } R_{\pi/K} < (1 - R_{cut})}{\text{число } \pi \text{ треков}}, \quad (11)$$

где $R_{\pi/K}$ и $R_{K/\pi}$ определены по формулам (6,7) и было определено $R_{cut} = 0.6$ после специальных исследований.

3.1. Отбор событий

Чтобы реконструировать распады $D^{*-} \rightarrow \bar{D}^0 + \pi^-$ и $D^{*+} \rightarrow D^0 + \pi^+$, необходимо ввести ограничения. Треки должны быть заряжены противоположно. Кроме того, трек должен удовлетворять следующим требованиям: $p_\perp$ (поперечный импульс) > 0.1 ГэВ/с; $pValue$ (χ^2 вероятность фитирования трека) > 0.001 ; p (импульс) > 0.3 ГэВ/с; $0.0 < Q$ (энергия высвобождаемая при распаде) < 0.01 ГэВ; $0.866 < \cos\theta < 0.97$.

4. Результаты и обсуждение

Типичные графики распределения инвариантной массы для цепочки распадов $D^{*-} \rightarrow \bar{D}^0 + \pi^-$ и $D^{*+} \rightarrow D^0 + \pi^+$ показаны соответственно на рис.1а и 1б. Также показан результат подгонки, выполненной комбинированной функцией Гаусса + полином Чебышева второго порядка. Для расчета эффективности в соответствии с уравнениями (8, 9) необходимо оценить, как число событий в числителе, так и в знаменателе после вычитания фона, т.е. на основе результатов подгонки для среднего и дисперсии оценить число событий в области сигнала (распределенного по Гауссу) в пределах $M \pm 3\sigma$. На рис.1 (а также на рис.2) показана кривая 1, соответствующая подгонке функцией Гаусса, кривая 2 – подгонке полиномом

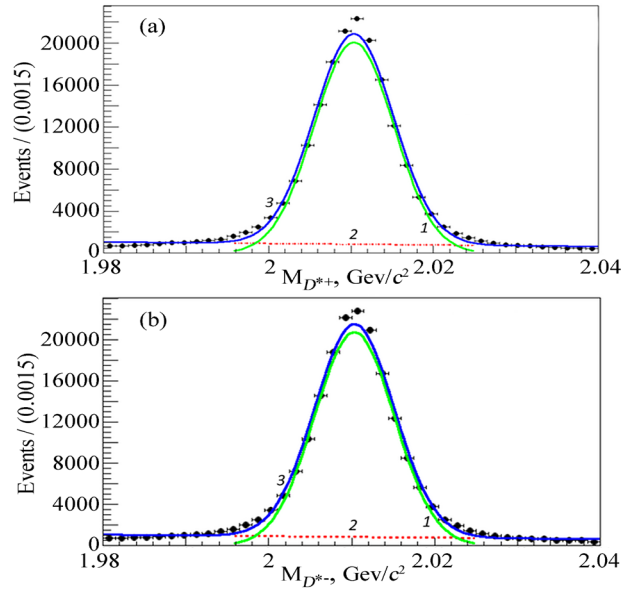


Рис.1. Распределение по инвариантной массе для (a) D^{*+} ($\mu=2.010342 \pm 0.000014$, $\sigma=0.004816 \pm 0.000013$, $a_0=-0.2480 \pm 0.01$, $n_{\text{bkg}}=34241 \pm 271$, $n_{\text{sig}}=166159 \pm 453$) и (b) D^{*-} ($\mu=2.010358 \pm 0.000014$, $\sigma=0.004823 \pm 0.000013$, $a_0=-0.2498 \pm 0.01$, $n_{\text{bkg}}=33856 \pm 271$, $n_{\text{sig}}=161505 \pm 448$).

Чебышева, кривая 3 – подгонке комбинированной функцией Гаусса + полиномом Чебышева, черными точками показано распределение инвариантной массы, полученное на основе моделирования по методу Монте-Карло. Из-за необходимости извлечения эффективности в зависимости от импульса адрона ($\mathbf{p}_h$) и угла (θ_h) необходимо использовать в анализе множество двойных бинов по определенному импульсу адрона и углу. Это создает определенные трудности при ограниченной статистике данных по рассматриваемым распадам. При отсутствии достаточной статистики в некоторых двойных бинах становится невозможным выполнение процедуры подгонки, обеспечивающей стабильность полученных значений среднего μ и дисперсии σ , а также чисел событий сигнала – N_{signal} и фона – N_{back} , которые позже будут использоваться для определения массового окна для извлечения эффективности и самой эффективности.

Трудности, связанные с возможным отсутствием статистики в экспериментальных данных для выполнения необходимой подгонки инвариантных масс-спектров по многим двойным бинам, можно разрешить с помощью следующей схемы:

1. проверить, насколько хорошо моделируемые данные МК согласуются с экспериментальными данными в терминах инвариантного спектра масс, при этом все применяемые ограничения должны быть идентичными для экспериментальных данных и данных МК;
2. в случае хорошего согласования мы можем использовать огромное количество заранее сгенерированных выборок МК, обеспечивающих достаточную статистику в каждом двойном бине импульса/угла для любой из исследованных мод распада;

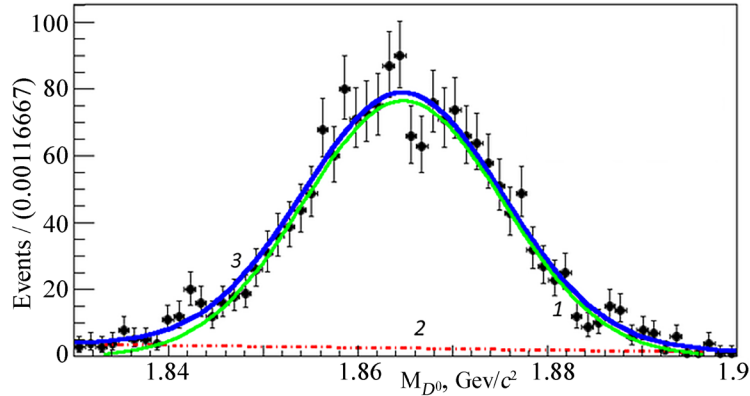


Рис.2. Распределение по инвариантной массе в 2.1–2.9 ГэВ/с и 0.34–0.38 рад двойном бине ($\mu=1,8648\pm0.00032$, $\sigma=0.01050\pm 0.00033$, $a_0=-0.4930\pm 0.23$, $n_{\text{bkg}}=150\pm41$, $n_{\text{sig}}=1724\pm 57$).

3. выполнить процедуру подгонки с данными МК, затем определить отношение μ сигнала к фоновым событиям для каждого двойного бина;

$$\mu(\mathbf{p}_h, \theta_h) = \frac{N_{\text{signal}}^h = \int N(x, M, \sigma) dx}{N_{\text{back}}^h = \int P(x, n) dx + N_{\text{signal}}^h}, \quad (12)$$

где $N(x, M, \sigma)$ и $P(x, n)$ — функция Гаусса и многочлен Чебышева порядка n , используемые для процедуры подгонки.

Табл.1. Коэффициенты $\mu(\mathbf{p}_h, \theta_h) \pm \Delta\mu(\mathbf{p}_h, \theta_h)$ для случая отсутствия условия ARICH PID (в соответствии со знаменателем в выражениях (9, 11)), вычисленные для пионов

$\mathbf{p}_{\text{bin}}/\theta_{\text{bin}}$	1	2	3	4	5	6
1	0.732±0.0216	0.880±0.0115	0.906±0.0082	0.898±0.0085	0.943±0.0058	0.939±0.0066
2	0.766±0.0211	0.901±0.0106	0.939±0.0058	0.949±0.0052	0.948±0.0051	0.956±0.0053
3	0.839±0.0126	0.892±0.0082	0.892±0.0079	0.924±0.006	0.928±0.0056	0.927±0.0063
4	0.776±0.0155	0.845±0.0098	0.851±0.0095	0.879±0.0072	0.879±0.007	0.895±0.0076
5	0.763±0.0199	0.852±0.0122	0.801±0.0148	0.872±0.0101	0.886±0.009	0.892±0.01
6	0.755±0.0366	0.875±0.0209	0.871±0.0209	0.890±0.0169	0.897±0.0163	0.930±0.0167

Табл.2. Коэффициенты $\mu(\mathbf{p}_h, \theta_h) \pm \Delta\mu(\mathbf{p}_h, \theta_h)$ для случая с условием ARICH PID (в соответствии с числителем в выражениях (8, 9)), вычисленные для пионов

$\mathbf{p}_{\text{bin}}/\theta_{\text{bin}}$	1	2	3	4	5	6
1	0.788±0.0212	0.895±0.0116	0.918±0.0087	0.911±0.0088	0.955±0.0055	0.944±0.0069
2	0.801±0.0208	0.910±0.0101	0.950±0.0056	0.955±0.0051	0.952±0.0052	0.964±0.005
3	0.858±0.012	0.901±0.0083	0.908±0.0078	0.932±0.0059	0.939±0.0053	0.935±0.0064
4	0.808±0.0147	0.865±0.0096	0.871±0.0093	0.896±0.0071	0.889±0.007	0.905±0.0078
5	0.806±0.0194	0.877±0.0118	0.822±0.0149	0.882±0.0103	0.888±0.0094	0.898±0.0107
6	0.835±0.0371	0.893±0.0209	0.897±0.0197	0.905±0.0166	0.912±0.0163	0.938±0.017

Табл.3. Коэффициенты $\mu(\mathbf{p}_h, \theta_h) \pm \Delta\mu(\mathbf{p}_h, \theta_h)$ для случая с условием ARICH misID (в соответствии с числителем в выражениях (10,11)), вычисленные для пионов

$\mathbf{p}_{bin}/\theta_{bin}$	1	2	3	4	5	6
1	0.647±0.1142	0.849±0.0495	0.977±0.0114	0.949±0.0163	0.961±0.0124	0.938±0.0175
2	0.691±0.0631	0.979±0.0103	0.949±0.0149	0.964±0.0114	0.939±0.0139	0.943±0.014
3	0.901±0.0336	0.954±0.0182	0.944±0.018	0.920±0.0176	0.929±0.0144	0.920±0.0153
4	0.909±0.034	0.929±0.0226	0.869±0.0264	0.941±0.0175	0.913±0.0143	0.880±0.0193
5	0.785±0.0874	0.896±0.0277	0.889±0.0243	0.866±0.0229	0.890±0.0194	0.887±0.0217
6	1.000±0.0066	0.868±0.0391	0.830±0.0461	0.797±0.0482	0.832±0.0473	0.925±0.0386

Табл.4. Коэффициенты $\mu(\mathbf{p}_h, \theta_h) \pm \Delta\mu(\mathbf{p}_h, \theta_h)$ для случая отсутствия условия ARICH PID (в соответствии со знаменателем в выражениях (9,11)), вычисленные для каонов

$\mathbf{p}_{bin}/\theta_{bin}$	1	2	3	4	5	6
1	0.768±0.0181	0.832±0.0122	0.832±0.0117	0.864±0.0102	0.871±0.0094	0.866±0.0108
2	0.816±0.0171	0.884±0.0094	0.917±0.0071	0.928±0.0065	0.939±0.0058	0.940±0.0064
3	0.737±0.0216	0.927±0.0094	0.932±0.006	0.946±0.005	0.951±0.0046	0.953±0.0052
4	0.824±0.0163	0.938±0.0071	0.906±0.0069	0.916±0.006	0.939±0.0048	0.938±0.0056
5	0.876±0.0136	0.902±0.0092	0.876±0.0101	0.927±0.0066	0.944±0.0054	0.945±0.0063
6	0.851±0.0205	0.941±0.0105	0.915±0.0133	0.919±0.0113	0.945±0.0092	0.942±0.0105

Табл.5. Коэффициенты $\mu(\mathbf{p}_h, \theta_h) \pm \Delta\mu(\mathbf{p}_h, \theta_h)$ для случая с условием ARICH PID (в соответствии с числителем в выражениях 8, 9), вычисленные для каонов

$\mathbf{p}_{bin}/\theta_{bin}$	1	2	3	4	5	6
1	0.831±0.0145	0.874±0.0109	0.883±0.0098	0.909±0.0084	0.918±0.0076	0.913±0.0091
2	0.858±0.015	0.904±0.0085	0.940±0.0062	0.949±0.0056	0.956±0.0049	0.952±0.0059
3	0.766±0.0209	0.948±0.0081	0.945±0.0056	0.959±0.0044	0.959±0.0043	0.961±0.0048
4	0.834±0.0161	0.956±0.0059	0.921±0.0066	0.929±0.0056	0.954±0.0042	0.947±0.0054
5	0.905±0.0122	0.916±0.0087	0.907±0.0091	0.949±0.0058	0.957±0.0049	0.958±0.0057
6	0.881±0.0194	0.973±0.008	0.943±0.0117	0.949±0.0095	0.952±0.009	0.957±0.0097

Величины $\mu(\mathbf{p}_h, \theta_h)$ будут применяться для экспериментальных инвариантных масс – спектров в каждом двойном бине $(\mathbf{p}_h, \theta_h)$ для определения событий сигнала по формуле:

$$N_{signal}^{data}(\mathbf{p}_h, \theta_h) = N_{total}^{data}(\mathbf{p}_h, \theta_h)\mu(\mathbf{p}_h, \theta_h). \quad (13)$$

Действия по описанной схеме в соответствии с формулами (12) и (13) должны быть проделаны в двух вариантах: сначала для спектров, фитированных с применением R_{cut} (соответственно, числителю в выражениях (8, 9)), затем без

Табл.6. Коэффициенты $\mu(\mathbf{p}_h, \theta_h) \pm \Delta\mu(\mathbf{p}_h, \theta_h)$ для случая с условием ARICH misID (в соответствии с числителем в выражениях (10, 11)), вычисленные для каонов

$\mathbf{p}_{\text{bin}}/\theta_{\text{bin}}$	1	2	3	4	5	6
1	0.760±0.0459	0.880±0.0264	0.821±0.0294	0.858±0.0234	0.829±0.0260	0.858±0.0234
2	0.871±0.0332	0.906±0.0254	0.912±0.0191	0.910±0.0188	0.936±0.0141	0.890±0.0217
3	0.774±0.059	0.968±0.0191	0.971±0.0127	0.924±0.0179	0.939±0.0132	0.951±0.0143
4	0.900±0.0462	0.963±0.0188	1.000±0.0024	0.950±0.0137	0.927±0.0136	0.926±0.0175
5	0.973±0.031	0.866±0.0414	0.953±0.0326	0.933±0.0184	0.951±0.0133	0.889±0.0256
6	0.964±0.1309	0.963±0.0374	0.717±0.1172	0.922±0.001	0.922±0.0326	0.981±0.0145

применения R_{cut} (соответственно знаменателю в выражениях (8, 9)). Коэффициенты μ также должны быть определены для случаев, когда пион или каон находятся в аксептансе ARICH. Тогда на финальной стадии будут получены четыре таблицы со значениями коэффициентов μ .

Для оценки статистических ошибок $\Delta\mu$, в выражении (12), ошибки, полученные при подгонке спектра инвариантных масс в разных импульсных (угловых) интервалах из выборок МК: $\Delta N_{\text{signal}}^{\text{МК}}$ и $\Delta N_{\text{back}}^{\text{МК}}$ использовались для определения значений $\Delta\mu$ с учетом корреляции между выборками событий N_{signal} и N_{back} в виде:

$$\Delta\mu = \frac{1}{N_{\text{total}}} \sqrt{(\mu\Delta N_{\text{total}})^2 + \Delta N_{\text{signal}}^2 - 2\mu^{3/2}\Delta N_{\text{signal}}\Delta N_{\text{total}}}, \quad (14)$$

$$\text{где } N_{\text{total}} = N_{\text{signal}} + N_{\text{back}}, \Delta N_{\text{total}} = \sqrt{\Delta N_{\text{signal}}^2 + \Delta N_{\text{back}}^2}.$$

На основании этих неопределенностей следующий перенос ошибок на уровне выражения (13) будет окончательно выполнен. В настоящей работе мы использовали 6×6 двумерный биннинг по $\mathbf{p}_h$ ГэВ/с: 0.5—1.3—2.1—2.9—3.7—4.5—5.3 и θ_h rad: 0.3—0.34—0.38—0.42—0.46—0.5—0.54. Вычисленные значения $\mu(\mathbf{p}_h, \theta_h)$ и их ошибки $\Delta\mu(\mathbf{p}_h, \theta_h)$ приведены в таблицах 1–6.

4.1. Инструменты, использованные для процедуры фитирования

Для выполнения большого объема необходимых фитирований во многих двойных импульсных/угловых бинах процедура фитирования была реализована с использованием Python библиотеки RooFit [3].

В результате фитирования возможно определить не только необходимые параметры Гауссиана и полинома, но также числа сигнальных и фоновых событий в пределах $\pm 3\sigma$ и оценки погрешностей для указанных чисел. На рис.2 показан типичный пример с фитированным спектром для объединенной $D^0\bar{D}^0$ выборки в определенном двойном $(\mathbf{p}_h, \theta_h)$ бине.

4.2. Использованные МК выборки

МК выборки, использованные для извлечения отношений $\mu(\mathbf{p}_h, \theta_h)$ (см. уравнение (12)), были получены с помощью системы GRID [4] на основе

огромного количества так называемых «общих (generic)» МК выборок, подготовленных коллаборацией Belle II, которые включают в себя различные кварковые комбинации такие как, например: $u\bar{u}$, $d\bar{d}$, $s\bar{s}$, $c\bar{c}$ так же как $B^0\bar{B}^0$, B^-B^+ пары которые объединены с весами, пропорциональными соответствующему сечению для процессов $e^+e^- \rightarrow q\bar{q}$.

Основной генератор моделирования взаимодействий адронов — это пакет Pythia8 [5], а проводка заряженных треков через материал мишени и детекторов осуществляется с помощью пакета Geant4 [6]. Все моделирования выполнены в оболочке специального математического обеспечения для анализа эксперимента Belle II (basf2 [7]), с детальным моделированием откликов вовлеченных детекторов и с учетом их калибровочных констант. Также осуществляется полная реконструкция заряженных треков на основе их следов в соответствующих детекторах. Подобное максимально реалистичное моделирование с учетом характеристик всего спектрометра Belle II обеспечивает хорошее согласование для сравнения данных с моделированием по методу МК, примеры такого сравнения могут быть найдены в опубликованных статьях [8–10].

5. Заключение

Разработан эффективный подход, имплементированный для решения проблемы оценки производительности детектора ARICH, который играет важную роль в идентификации заряженных частиц спектрометром эксперимента Belle II. Продемонстрирована схема извлечения отношений числа сигнальных событий к числу фоновых событий в спектрах инвариантной массы рассмотренных распадов $D^{*\pm} \rightarrow D^0 (\bar{D}^0) \pi^\pm \rightarrow (K^\mp \pi^\pm) \pi^\pm$, как функция импульса и угла пионов и каонов с помощью метода Монте-Карло, который обеспечивает достаточную статистику для стабильного фитирования спектров инвариантной массы комбинированной функцией Гаусса и полинома Чебышева. Разработанный подход может быть легко применен для других распадов с различными комбинациями частиц в конечном состоянии.

Полученные результаты будут использованы коллаборацией Belle II в будущих исследованиях таких важных проблем современной физики, как нарушение СР-четности, а также поиска новой физики за пределами Стандартной Модели.

Мы благодарим программу поддержки аспирантов за 2021 год (EIF and PMI PhD supporting program 2021) и Гос. Комитет Армении по науке за предоставление гранта No. 20TTCG-1C010. Также многих коллег Национальной научной лаборатории имени А. И. Алиханяна за полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. T. Abe et al. [Belle II Collaboration]. arXiv:1011.0352 [physics.ins-det].
2. I. Adachi, T.E. Browder, P. Krizan, S. Tanaka, Y. Ushiroda. Nucl. Inst. Meth. A, **907**, 46 (2018).
3. https://root.cern/doc/master/group_tutorial_roofit.html.
4. T. Nakamura, G. Iwai, H. Matsunaga, K. Murakami, T. Sasaki, S. Suzuki, W. Takase. J. Phys.: Conf. Ser., **898**, 052042 (2017).

5. T. Sjostrand, S. Ask, J.R. Christiansen, R. Corke, N. Desai, P. Ilten, S. Mrenna, S. Prestel, C.O. Rasmussen, P.Z. Skands. Comput. Phys. Commun., **191**, 159 (2015).
6. S. Agostinelli et al. Nucl. Instrum. Meth. A, **506**, 250 (2003).
7. T. Kuhr, C. Pulvermacher, M. Ritter, T. Hauth, N. Braun. Comput. Softw. Big Sci., **3**, 1 (2019).
8. F. Abudinén, N. Akopov, A. Aloisio, et al. Eur. Phys. J. C, **82**, 283 (2022).
9. F. Abudinén et al. Phys.Rev.Lett., **127**, 211801 (2021).
10. F. Abudinén et al. Phys.Rev.Lett., **127**, 181802 (2021).

ՄՈՆԻՏԵ ԿԱՌԼՈ ՄԵԹՈԴԻ ՄԻՋՈՑՈՎ BELLE II ԳԻՏԱՓՈՐՁՈՒՄ ARICH
ԳՐԱՆՑԻՉԻ ԲՆՈՒԹԱԳՐԵՐԻ ՈՒՍՈՒՄՆԱՍԻՐՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐ
D[±]-ՄԵՋՈՆՆԵՐԻ ՕԳՆՈՒԹՅԱՄԲ

Ն.ԱԿՈՊՈՎ, Գ.ՂԵՎՈՆԴՅԱՆ, Վ. ՄՈՒՐԱԴՅԱՆ, Գ. ՔԱՌՅԱՆ

Տրված է մոդելավորման գնահատականը Մոնտե Կարլո մեթոդի միջոցով, գնահատելով ազդանշանի և ֆոնի հարաբերակցությունը պիոնկաոն համակարգի ինվարիանտ զանգվածի սպեկտրում, օգտագործելով $D^0 \rightarrow K^- \pi^+$ ու $\overline{D}^0 \rightarrow K^+ \pi^-$ տրոհումները, որոնք սկիզբ են առնում $D^{*+} \rightarrow D^0 + \pi^+$ և $D^{*-} \rightarrow \overline{D}^0 + \pi^-$ տրոհումներից տարբեր իմպուլսային/անկյունային բիներում: Ստացված աղյուսակային տվյալները կօգտագործվեն Belle II գիտափորձի անդամների կողմից՝ ARICH զբանցիչի կատարողականությունն ուսումնասիրելու համար: Այնուհետև ARICH զբանցիչի արդյունավետության և սխալ նույնականացման հավանականության արդյունքներ՝ ստացված աղյուսակային տվյալների հիման վրա՝ կդառնան ապագայում ֆիզիկայում վերլուծությունների կարևոր բաղադրիչ:

INVESTIGATIONS OF CHARACTERISTICS FOR ARICH DETECTOR WITH
D^{*±}-MESONS DECAY AT BELLE II EXPERIMENT
USING THE MONTE CARLO METHOD

N. AKOPOV, G. GHEVONDYAN, V. MURADYAN, G. KARYAN

An estimate is given of the simulation with the Monte Carlo method using the signal to background ratios in invariant mass spectra of pion-kaon system for decays of $D^0 \rightarrow K^- \pi^+$ and $\overline{D}^0 \rightarrow K^+ \pi^-$ originated from decays of $D^{*+} \rightarrow D^0 + \pi^+$ and $D^{*-} \rightarrow \overline{D}^0 + \pi^-$ at different momentum/angular bins of pions (when pion is coming to the ARICH acceptance) and kaons (kaon is in ARICH acceptance). The tabulated data for mentioned ratios will be used by Belle II collaboration to study the ARICH performance. Then the results of ARICH efficiencies and misidentification probability extracted based on tabulated ratios, will become important ingredient for future physics analysis.

СПИН-ЗАВИСИМОЕ МНОГОКАНАЛЬНОЕ РАССЕЯНИЕ ЭЛЕКТРОНА В КВАНТОВОЙ ПРОВОЛОКЕ

Д.А. БАДАЛЯН, А.Ж. МУРАДЯН*

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

*e-mail: muradyan@ysu.am

(Поступила в редакцию 14 октября 2022 г.)

Рассмотрено многоканальное квантовое туннелирование электронного потока через потенциальный барьер из тонкого дефекта, встроенного в квантовую проволоку. На электроны также воздействует магнитное поле, направленное вдоль провода. Получены аналитические выражения для коэффициентов рассеяния и коэффициента спиновой поляризации. Показано, что в определенных энергетических интервалах каждого канала туннельного рассеяния электроны полностью поляризованы независимо от других параметров системы. Любая заданная степень поляризации может быть получена путем управления энергетическим спектром с помощью магнитного поля.

1. Введение

В переносе электронов по квантовой мезоскопической проволоке когерентные эффекты доминируют в баллистическом режиме низких температур [1,2]. Если отвлечься от проблемы ввода электронов в квантовую проволоку, то важную роль в физике проводимости в первую очередь играют поперечные размеры проволоки. Они квантуют движение электрона и тем самым существенно изменяют продольные транспортные свойства системы. Проводимость демонстрирует структуру гистограммы, и каждый шаг имеет высоту $e^2/\pi\hbar$ или целое число от нее. Из-за низкой размерности проводника меняется также действие различных точечных дефектов (примесей, вакансий) на ход транспорта частиц. Например, установлено, что проводимость нанотрубки может регулироваться в широком диапазоне даже единственной примесью, на базе явления квантового туннелирования [3–11]. Аналогичная картина возможна и при изучении спинового транспорта в присутствии электрических и магнитных полей, обеспечивающих внешнее управление проводимостью [12–15]. Наиболее существенным является квантовый перенос спин-поляризованных носителей и управление свойствами спинового туннелирования для разработки так называемых спинтронных устройств, таких как спин-квантовые компьютеры, спин-транзисторы, спиновые фильтры, анализаторы спиновой поляризации и т.д. [16], управляемых спиновой поляризацией и внешним магнитным полем.

Аналитический подход к данным задачам сопряжен с серьезными математическими трудностями и обычно при их решении используются численные методы. Вместе с тем, уже много лет рассматриваются одномерные модели, где потенциал рассеяния зависит только от координаты, в направлении которой происходит рассеяние. Более точные результаты могут быть получены в квазиодномерных моделях [17–20], в которых, в соответствии с реалиями, поперечное движение не исключается, а ограничивается. В этих условиях при упругом рассеянии продольного движения частица может перейти на другой квантовый уровень поперечного движения и может возникнуть новый канал рассеяния со своим значением импульса или волнового вектора. То есть, рассеяние в квазиоднородной системе, в отличие от одномерной, является многоканальным.

В настоящей работе исследовано квазиодномерное спин-зависимое рассеяние электрона на находящемся в нанопроволоке тонком дефекте при наличии постоянного магнитного поля. Энергетический спектр и коэффициенты прохождения и отражения определены для нанотрубки и внутреннего дефекта с цилиндрической симметрией. Модель адекватно описывает физику многоканального рассеяния в тех случаях, когда потенциал окружающей среды существенно превосходит внутреннее значение потенциала. Благодаря эффективному обмену между каналами, возможному для заданной энергии, формируется регулируемый составной спектр туннелирования. Получены формулы для поляризационных составляющих туннельного электронного тока и найдены условия, при которых туннелированный электронный ток, в частности, становится полностью поляризованным.

2. Основные уравнения

Рассмотрим квантовую нить цилиндрической формы, разделенную на две части тонким слоем изолятора (δ -легированная примесь). Слева и справа от примеси включено магнитное поле $\mathbf{H}$, направленное вдоль оси z , совпадающей с осью цилиндра. Электрон с энергией E , двигаясь по трубке, налетает на примесь слева. Потенциал рассеяния в цилиндрической системе координат ρ , ϕ , z зависит от переменных ρ и z :

$$U(\mathbf{r}) = U(\rho, z). \quad (1)$$

Энергия собственного магнитного момента электрона μ_s во внешнем магнитном поле $\mathbf{H} = (0, 0, H)$ описывается членом

$$U_s(\mathbf{r}) = -(\mu_s \cdot \mathbf{H}) = \mu_0 \sigma_z H, \quad (2)$$

где μ_0 – магнетон Бора, σ_z принимает значения ± 1 , где верхний знак соответствует состоянию, в котором спин электрона направлен по оси z , а нижний знак – против оси z . Если пренебречь влиянием магнитного поля на импульс микрочастицы, что хорошо выполняется при выбранной геометрии, особенно для низколежащих энергетических уровней поперечного движения, то уравнение Паули для электрона с учетом формул (1) и (2) можно представить в виде двух

стационарных уравнений Шредингера

$$\hat{H}^{\pm}\psi^{\pm}(\mathbf{r}) = E\psi^{\pm}(\mathbf{r}), \quad (3)$$

где волновая функция ψ^{+} описывает состояние, в котором спин электрона направлен по оси z , волновая функция ψ^{-} – против оси z , E – энергия падающей на барьер микрочастицы, а

$$\hat{H}^{\pm} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\mathbf{r}) \pm \mu_0 H. \quad (4)$$

В цилиндрических координатах для уравнений (3) получим

$$\left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \chi^2 - V(\rho, z) \mp h \right) \psi^{\pm}(\rho, \varphi, z) = 0, \quad (5)$$

где $\chi^2 = (2m / \hbar^2) E$, $V(\rho, z) = (2m / \hbar^2) U(\rho, z)$, $h = \mu_0 (2m / \hbar^2) H$.

Стенки нанопроволоки считаются непроницаемыми, то есть

$$\psi^{\pm}(\rho, \varphi, z) = 0, \text{ если } \rho \geq a, \quad (6)$$

где a – радиус сечения. В связи с условием (6) напомним, что в диапазоне низких температур рассеяние электрона на краях образца может доминировать в формировании сопротивления течению электронов и степени присутствия декогерентности в системе [21,22]. Условие (6) обнуляет вероятность непосредственного столкновения электрона со стенками нанотрубки и тем самым является существенным для когерентного квантовомеханического описания рассеяния электрона на потенциале примеси.

Цилиндрическая симметрия потенциала $V(\rho, z)$, совместно с граничным условием (6) позволяет произвести разделение угловой переменной φ в уравнении (5) и решение представить в виде разложения

$$\psi^{\pm}(\rho, \varphi, z) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \psi_{nm}^{\pm}(z) R_{nm}(\rho) \cos m\varphi, \quad (7)$$

где учтено, что суммирование по орбитальному моменту m можно производить только по значениям $m \geq 0$, ввиду симметрии задачи относительно отражения $\varphi \rightarrow -\varphi$. $R_{nm}(\rho)$ по определению является решением хрестоматийного уравнения

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} + \chi_{nm}^2 - \frac{m^2}{\rho^2} \right) R_{nm}(\rho) = 0 \quad (8)$$

с граничным условием $R_{nm}(a) = 0$ и условием нормировки $a^{-2} \int_0^a R_{nm}^2(\rho) \rho d\rho = 1$, а именно:

$$R_{nm}(\rho) = \frac{\sqrt{2}}{J_{m+1}(\chi_{nm} a)} J_m(\chi_{nm} \rho). \quad (9)$$

Здесь $J_m(\dots)$ – цилиндрическая функция Бесселя первого рода, а значения χ_{nm} определяются из условия на стенках нанотрубки $J_m(\chi_{nm} a) = 0$ и равны соответственно $\chi_{10} a = 2.405$, $\chi_{11} a = 3.832$ и т.д.

Для получения уравнения для «продольной» волновой функции $\psi_{nm}^{\pm}(z)$

подставим общее решение (7) в уравнение (5), учтем уравнение (8) и ортонормированность поперечной части волновой функции $R_{nm}(\rho)\cos m\varphi$. В результате будем иметь систему

$$\frac{d^2\psi_{nm}^\pm(z)}{dz^2} + \left(\chi^2 - \chi_{nm}^2 \mp h\right)\psi_{nm}^\pm(z) - \sum_{n'=1}^{\infty} V_{nm,n'm}(z)\psi_{n'm}^\pm(z) = 0, \quad (10)$$

где для взаимодействия с дефектом введено обозначение

$$V_{nm,n'm}(z) = \frac{1}{a^2} \int_0^a V(\rho, z) R_{nm}(\rho) R_{n'm}(\rho) \rho d\rho. \quad (11)$$

Из системы (10) непосредственно видно, что рассеяние электрона по каждому магнитному квантовому числу m происходит независимо. Поэтому целесообразно вывести m из семейства индексов и воспринять его как параметр. Тогда (10) можем записать в виде

$$\frac{d^2\psi_n^\pm(z, m)}{dz^2} + k_n^{\pm 2}(m)\psi_n^\pm(z, m) - \sum_{n'} V_{nn'}(z, m)\psi_{n'}^\pm(z, m) = 0, \quad (12)$$

где $\psi_n^\pm(z, m) = \psi_{nm}^\pm(z)$, $V_{nn'}(z, m) = V_{nm,n'm}(z)$, $n, n' = 1, 2, \dots$,

$$k_n^\pm(m) = \sqrt{\chi^2 - \chi_{nm}^2 \mp h}, \quad (13)$$

а нумерация каналов уходит в бесконечность, то есть число энергетических уровней поперечного движения в потенциальной яме нанопроволоки.

3. Амплитуды спин-зависимого многоканального рассеяния

Система (12) через коэффициенты $V_{nn'}(z, m)$ неявно зависит от координаты z и, в общем случае, не поддается аналитическому решению. Но если дефект в нанопроволоке достаточно тонкий [9], то потенциал $V(\rho, z)$ можно записать в виде

$$V(\rho, z) = f(\rho)\delta(z), \quad (14)$$

где $\delta(z)$ – дельта функция Дирака. Тогда управляющая система (12) записывается в виде

$$\frac{d^2\psi_n^\pm(z, m)}{dz^2} + k_n^{\pm 2}(m)\psi_n^\pm(z, m) - \delta(z) \sum_{n'} A_{nn'}(m)\psi_{n'}^\pm(z, m) = 0, \quad (15)$$

где связывающие каналы коэффициенты

$$A_{nn'}(m) = \frac{1}{a^2} \int_0^a f(\rho) R_{nm}(\rho) R_{n'm}(\rho) \rho d\rho \quad (16)$$

постоянны и одинаковы для обеих поляризаций.

При физически допустимом условии $k_n^\pm \geq 0$ решения (15) представляют собой свободно распространяющиеся волны:

$$\psi_n^\pm(z, m) = \begin{cases} \delta_{n1} \exp(i k_n^\pm(m)z) + r_n^\pm(m) \exp(-i k_n^\pm(m)z), & z < 0 \\ t_n^\pm(m) \exp(i k_n^\pm(m)z), & z > 0, \end{cases} \quad (17)$$

где $t_n^\pm$ и $r_n^\pm$ – амплитуды прохождения и отражения по n -му каналу с заданным

орбитальным моментом m , и частица падает на потенциал дефекта по первому ($n=1$) каналу.

Условие непрерывности волновых функций $\psi_n^\pm(z, m)$ и условие сшивания их производных при прохождении через сингулярную точку $z=0$ имеют вид:

$$\psi_n^\pm(+0, m) = \psi_n^\pm(-0, m), \quad (18a)$$

$$2ik_n^\pm(m)t_n^\pm(m) - 2ik_n^\pm(m)\delta_{n1} = \sum_{n'} A_{nn'}(m)t_{n'}^\pm(m), \quad (18b)$$

С учетом (17), они принимают вид

$$t_n^\pm(m) = \delta_{n1} + r_n^\pm(m), \quad (19a)$$

$$2ik_n^\pm(m)t_n^\pm(m) - 2ik_n^\pm(m)\delta_{n1} = \sum_{n'} A_{nn'}(m)t_{n'}^\pm(m), \quad (19b)$$

где бесконечная в общем случае система уравнений (19b) определяет амплитуды $t_n^\pm$, после чего амплитуды $r_n^\pm$ определяются соотношением (19a). Такая упрощенная структура частично обусловлена выбором одноканального условия падения частицы на потенциал дефекта.

Здесь сделаем важное дополнение, что, поскольку, вероятности возбуждения поперечных состояний с энергиями, превышающими входное значение E , уменьшаются по экспоненциальному закону, то мы можем ограничиться конечным числом уровней до $E_N \leq E$ и для определения коэффициентов использовать правило Крамера:

$$t_n^\pm(m) = \frac{D_n^\pm(m)}{D^\pm(m)}, \quad (20)$$

где $D^\pm(m)$ – определитель системы уравнений (19b), а $D_n^\pm(m)$ – определитель, где вместо n -го столбца стоит столбец правой части.

Каждая электронная поляризация удовлетворяет условию сохранения потока до и после рассеяния:

$$\sum_{n=1}^N k_n^\pm(m) \left(|t_n^\pm(m)|^2 + |r_n^\pm(m)|^2 \right) = k_1^\pm(m). \quad (21)$$

4. Коэффициент спиновой поляризации

Главным предметом спинтроники является спиновой токоперенос. Коэффициент поляризации спинов многоканального рассеяния введем по аналогии с формулой (13) из работы [23] для каждого канала $n=1, 2, \dots, N$,

$$p_n(m) = \frac{j_n^+(m) - j_n^-(m)}{j_n^+(m) + j_n^-(m)}, \quad (22)$$

а также усредненного по всем каналам,

$$P_N(m) = \frac{\sum_{n=1}^N (j_n^+(m) - j_n^-(m))}{\sum_{n=1}^N (j_n^+(m) + j_n^-(m))}, \quad (23)$$

где $j_n^\pm(m) = k_n^\pm(m) |t_n^\pm(m)|^2 / k_1^\pm(m)$ – плотность потока вероятности в n -ом канале для спиновых поляризаций, нормированных на падающий поток первого канала. Как и следовало ожидать, определение степени поляризации, по существу, сводится к вычислению коэффициентов прохождения для произвольного радиального распределения $f(\rho)$. Однако наиболее крутых и, следовательно, предпочтительных зависимостей для экспериментальных и прикладных интересов следует ожидать в случае узкополосного распределения дефекта. Мы смоделируем его дельта-функцией Дирака с неким радиусом $\rho_0 \geq 0$:

$$f(\rho) = \frac{\lambda}{\pi} \frac{\delta(\rho - \rho_0)}{\rho}, \quad (24)$$

где λ – «мощность» потенциала. Тогда основополагающий элемент задачи, коэффициент связи между каналами $A_{nn'}(m)$, дается формулой

$$A_{nn'}(m) = \frac{2\lambda}{\pi a^2} \frac{J_m(\chi_{nm} \rho_0)}{J_{m+1}(\chi_{nm} a)} \frac{J_m(\chi_{n'm} \rho_0)}{J_{m+1}(\chi_{n'm} a)}. \quad (25)$$

Напомним, что рассеяние включает каналы, для которых выполняется условие положительности энергии продольного движения: $\sqrt{\chi_{nm}^2 \mp \hbar} < \chi$.

Определители $D^\pm(m)$, $D_n^\pm(m)$ при этом можно вычислить по формулам, взятым из [24]:

$$D^\pm(m) = \left(1 + i \sum_{n=1}^N \frac{A_{nn}(m)}{2k_n^\pm(m)} \right) \prod_{n=1}^N (-2i k_n^\pm(m)). \quad (26)$$

$$D_n^\pm(m) = -2i k_n^\pm(m) \left(1 + i \sum_{n'=1}^N \frac{A_{n'n'}(m)}{2k_{n'}^\pm(m)} \right) \prod_{n'=1}^N (-2i k_{n'}^\pm(m)) \quad (27)$$

(штрих у знаков суммы и произведения означает отсутствие членов с $n' = n$). С их помощью из (20) для $t_n^\pm(m)$ удастся получить следующие компактные выражения:

$$t_1^\pm(m) = 1 - i \frac{A_{11}(m)}{2k_1^\pm(m)} G_N^\pm(m), \quad r_1^\pm(m) = t_1^\pm(m) - 1, \quad (28a)$$

$$t_{n \neq 1}^\pm(m) = r_{n \neq 1}^\pm(m) = -i \frac{A_{1n}(m)}{2k_n^\pm(m)} G_N^\pm(m), \quad (28b)$$

где введены обозначения

$$G_N^\pm(m) = \left(1 + i \sum_{n=1}^N \frac{A_{nn}(m)}{2k_n^\pm(m)} \right)^{-1}. \quad (29)$$

Они обобщают соответствующие выражения, полученные в [24], на предмет учета спина электрона и наличия продольного магнитного поля.

Вероятности туннелирования через коэффициенты связи между каналами рассеяния даются формулами

$$\left| t_1^\pm(m) \right|^2 = \frac{1 + \left(\sum_{n=2}^N \frac{A_{nn}(m)}{2k_n^\pm(m)} \right)^2}{1 + \left(\sum_{n=1}^N \frac{A_{nn}(m)}{2k_n^\pm(m)} \right)^2}, \quad \left| t_{n \neq 1}^\pm(m) \right|^2 = \frac{\left(\frac{A_{1n}(m)}{2k_n^\pm(m)} \right)^2}{1 + \left(\sum_{n'=1}^N \frac{A_{n'n'}(m)}{2k_{n'}^\pm(m)} \right)^2}, \quad (30)$$

а усредненный по всем каналам коэффициент поляризации принимает вид

$$P_N(m) = \frac{F_N^+(m) - F_N^-(m)}{F_N^+(m) + F_N^-(m)}, \quad (31)$$

где введено обозначение

$$F_N^\pm(m) = 1 - \frac{\frac{A_{11}(m)}{2k_1^\pm(m)} \sum_{n=1}^N \frac{A_{nn}(m)}{2k_n^\pm(m)}}{1 + \left(\sum_{n=1}^N \frac{A_{nn}(m)}{2k_n^\pm(m)} \right)^2}. \quad (32)$$

Формулы (22) и (31) с выражениями (25), (30) и (32) определяют искомую поляризацию электронного потока на выходе из нанотрубки для узкополосного радиального распределения (24).

4.1. Коэффициенты связи между каналами

Связь между возможными каналами рассеяния задается в общем случае интегралом (16), где $R_{nm}(\rho)$ – ортонормированные собственные функции продольной степени свободы электрона. С удалением n и n' друг от друга коэффициенты $A_{nn'}(m)$ быстро уменьшаются, сами по себе уменьшая эффективное число каналов рассеяния, если функция $f(\rho)$ достаточно медленная. В рассматриваемом же нами случае сильной радиальной локализованности (25) реализуется обратное условие, коэффициенты $A_{nn'}(m)$ при удалении n и n' не уменьшаются и число каналов ограничивается исключительно по энергетическим соображениям.

4.2. Одноканальное рассеяние

Состояния малых энергий, вплоть до значения $\chi = \sqrt{\chi_{1m}^2 - h}$, не могут образоваться в системе нанопроволоки. При желании ввода из свободного пространства они будут полностью отражены от входного края нанопроволоки. В области $\sqrt{\chi_{1m}^2 - h} < \chi < \sqrt{\chi_{1m}^2 + h}$ система, оставаясь недоступной для одной (плюсовой) поляризации, становится частично проницаемой для второй поляризации. В этом диапазоне система действует как идеальный поляризационный фильтр, который по мере эффективности туннелирования позволяет изучить свойства дефекта при относительно простых условиях.

Если энергия электрона находится в более высокой зоне

$\sqrt{\chi_{1m}^2 + h} < \chi < \sqrt{\chi_{2m}^2 - h}$, рассеяние становится одноканальным для обеих электронных поляризаций. С продвижением к верхнему краю коэффициент поляризации уменьшается и приближается к нулю, т.е. к исходному неполяризованному состоянию: с увеличением энергии коэффициенты прохождения для обеих поляризаций приближаются друг к другу.

Поляризации одноканального рассеяния электрона в зависимости от величины магнитного поля представлен на рис.1 для нескольких значений мощности барьера λ . Как видно, кривая, выпуклая при малых λ , становится вогнутой с ростом λ , что может служить удобным индикатором для качественно-экспериментальной оценки параметров дефекта нанотрубки. Примечательно, что скорость перехода от выпуклого характера к вогнутому характеру быстро уменьшается с ростом квантового числа вращательного момента m . Что касается зависимости от местоположения ρ_0 кругового дефекта, то она медленная, изменяется в узких пределах и, на наш взгляд, не имеет заметного прикладного значения.

4.3. Двухканальное рассеяние

В следующем интервале энергий $\sqrt{\chi_{2m}^2 - h} < \chi < \sqrt{\chi_{2m}^2 + h}$ второй канал закрыт для плюс-поляризованных электронов, и регистрация на этом канале, как и в вышеуказанном случае $\sqrt{\chi_{1m}^2 - h} < \chi < \sqrt{\chi_{1m}^2 + h}$, автоматически обеспечивает поток полностью минус-поляризованных электронов. В дальнейшем картина полной минус-поляризации для каждого n -ого канала регистрации повторяется в интервале $\sqrt{\chi_{nm}^2 - h} < \chi < \sqrt{\chi_{nm}^2 + h}$.

Открытие второго и более высоких каналов рассеяния в общем случае обогащает параметрическую зависимость степени поляризации делая возможным ее управление на полном диапазоне. В частности, при относительно больших мощностях потенциала λ коэффициент поляризации $P_2(m)$ получается стабильный

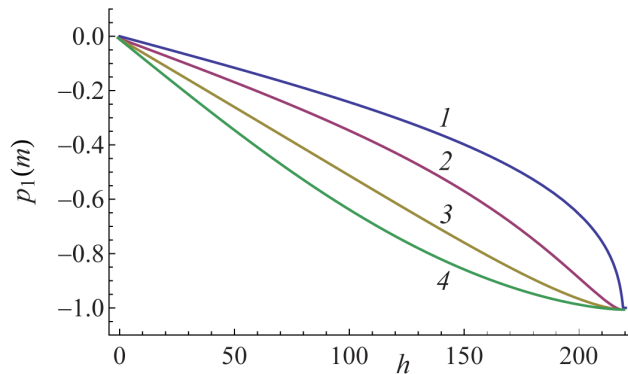


Рис.1. Коэффициент поляризации туннелированных электронов $p_1(m=0)$ в зависимости от магнитного поля в границах, допустимых для первого канала рассеяния, при разных значениях мощности потенциала дефекта λ : 1 – 1, 2 – 10, 3 – 25 и 4 – 100.

и близкий к единице. Для формирования потока полностью плюс-поляризованных электронов следует обратить направление магнитного поля.

5. Заключение

В настоящей работе исследовано многоканальное квантовое рассеяние электрона точечным дефектом квантовой нанотрубки с учетом взаимодействия спина электрона с внешним продольным магнитным полем. В рамках установленной модели получены точные формулы для коэффициентов прохождения и отражения и степени поляризации электронного пучка. Показано, что в области малых энергий выбранная схема является высококачественным формирователем степени поляризации электронов, регулируемым напряженностью магнитного поля. В частности, в определенном интервале энергий каждого канала рассеяния, монотонно увеличивающемся с напряженностью магнитного поля, все туннелированные электроны на выходе из нанотрубки имеют определенную поляризацию независимо от значений других параметров.

Работа выполнена при финансовой поддержке Комитета науки МОНКС РА в рамках Лаборатории исследования и моделирования квантовых явлений ЕГУ.

ЛИТЕРАТУРА

1. **S. Datta.** Electronic Transport in Mesoscopic Systems. Cambridge: Cambridge University Press, 1997.
2. **D. Ferry, S.M. Goodnick.** Transport in Nanostructures. Cambridge: Cambridge University Press, 2010.
3. **C.L. Kane, M.P.A. Fisher.** Phys. Rev. Lett., **68**, 1220 (1992).
4. **K.A. Matveev, L.I. Glazman.** Phys. Rev. Lett., **70**, 990 (1993).
5. **A. Furusaki, N. Nagaoka.** Phys. Rev. B, **47**, 4631 (1993).
6. **Ю.Н. Ханин, Е.Е. Вдовин, А. Мищенко, К.С. Новоселов,** ФТП, **53**, 1058 (2019).
7. **I.V. Krive, A. Palevski, R.I. Shekhter, M. Jonson.** Low Temp. Phys., **36**, 155 (2010).
8. **A. Nogaret.** J. Phys.: Cond. Matter, **22**, 253201 (2010).
9. **S. Pignetti, F. Dolcini, D. Bercioux, H. Grabert.** Phys. Rev. B: Cond. Matter, **79**, 035121 (2008).
10. **А.А. Арсеньев.** ТМФ, **147**, 92 (2006).
11. **К.С. Денисов, И.В. Рожанский, Н.С. Аверкиев, Е. Lahderanta.** ФТП, **51**, 45 (2017).
12. **И.А. Дмитриев, Р.А. Сурис.** ФТП, **35**, 219 (2001).
13. **А.Н. Афанасьев, П.С. Алексеев, А.А. Грешнов, М.А. Семина.** ФТП, **55**, 566 (2021).
14. **M. Mekkaoui, A. Jellal, A. Bahaoui.** Physica E, **134**, 114924 (2021).
15. **B. Ivlev.** Phys. Rev. A, **73**, 052106 (2006).
16. **L.B. Chandrasekar, M. Karunakaran, K. Gnanasekar.** Commun. Theor. Phys., **71**, 339 (2019).
17. **D. Boese, M. Lischka, L.E. Reichl.** Phys. Rev. B, **62**, 16933 (2000).
18. **S. Souma, A. Suzuki.** Phys. Rev. B, **65**, 115307 (2002).
19. **J. Prior, A. Suzuki.** Phys. Rev. B, **65**, 115307 (2002).
20. **D.A. Badalyan, A.Zh. Muradyan.** J. Contemp. Phys., **57**, 41 (2022).
21. **T. Scaffidi, N. Nandi, B. Schmidt, A.P. Mackenzie, J.E. Moore.** Phys. Rev. Lett., **118**, 226601 (2017).

22. **A.N. Afanasiev, P.S. Aleksseev, A.A. Greshnov, M.A. Semina.** arXiv:2010.01642 (2021).
23. **V.I. Perel', S.A. Tarasenko, I.N. Yassievich, A.F. Ioffe, S.D. Ganichev, V.V. Bel'kov, W. Prettl.** Phys. Rev. B, **67**, 201304 (2003).
24. **D.M. Sedrakian, D.H. Badalyan, A.Y. Aleksanyan.** J. Contemp. Phys., **51**, 335 (2016).

ԷԼԵԿՏՐՈՆԻ՝ ՍՊԻՆԻՑ ԿԱԽՎԱԾ ԲԱԶՄՈՒՂԻ ՑՐՈՒՄ ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ԼԱՐՈՒՄ
 Դ.Հ. ԲԱԴԱԼՅԱՆ, Ա.Ժ. ՄՈՒՐԱԴՅԱՆ

Դիտարկված է էլեկտրոնային հոսքի քվանտային թունելացումը բարակ արատի պոտենցիալային արգելքով, որը ներդրված է քվանտային լարում: Էլեկտրոնների վրա ազդում է նաև մագնիսական դաշտ՝ ուղղված լարի երկայնքով: Ստացված են անալիտիկ արտահայտություններ ցրման գործակիցների և սպինային բևեռացման գործակցի համար: Ցույց է տրված, որ թունելային ցրման յուրաքանչյուր ուղու որոշակի էներգետիկ ինտերվալներում էլեկտրոնները լրիվ բևեռացված են՝ անկախ համակարգի մյուս պարամետրերից: Ընդհանուր դեպքում կամայական տրված բևեռացման աստիճան կարող է ստացվել էներգետիկ սպեկտրը մագնիսական դաշտով կառավարելով:

SPIN-DEPENDENT MULTICHANNEL SCATTERING OF ELECTRON IN A QUANTUM WIRE

D.A. BADALYAN, A.Zh. MURADYAN

A multichannel quantum tunneling of an electron stream through a potential barrier of a thin defect embedded in a quantum wire is theoretically considered. The electrons are also affected by a magnetic field directed along the wire. Analytical expressions for the scattering coefficients and the spin polarization coefficient are obtained. It is shown that in certain energy intervals of each tunneling scattering channel, the electrons are completely polarized independently of other parameters of the system. In general, any given degree of polarization can be obtained by controlling the energy spectrum using a magnetic field.

ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ В ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ КВАНТОВОЙ ТОЧКЕ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ ГАУССОВА И БЕССЕЛЕВА ЛАЗЕРНЫХ ПУЧКОВ

Т.А. САРГСЯН^{1,2*}

¹Российско–Армянский университет, Ереван, Армения

²Институт химической физики НАН РА, Ереван, Армения

*e-mail: tigran.sargsian@rau.am

(Поступила в редакцию 25 октября 2022 г.)

Рассмотрены электронные состояния в цилиндрической квантовой точке с ограничивающим модифицированным потенциалом Пешля–Теллера под воздействием высокочастотного лазерного излучения. Рассмотрены два типа лазерного излучения: гауссово и бесселево. Под воздействием высокочастотного лазерного излучения ограничивающий потенциал квантовой точки преобразуется к новому – эффективному ограничивающему потенциалу. Например, в случае бесселева пучка, вместо потенциальной ямы Пешля–Теллера в аксиальном направлении получается двойная потенциальная яма. Это приводит к интересному поведению энергетических состояний электрона. В частности, происходит антикроссинг состояний, а также слияние соседних пар энергетических уровней.

1. Введение

Благодаря бурному развитию полупроводниковой наноэлектроники квантовые точки (КТ) нашли свое применение в многочисленных, на первый взгляд весьма далеких друг от друга, областях. КТ активно используются в медицине [1], в оптике [2], в электронике [3] и т.д. Одной из наиболее важных, но далеко не единственных особенностей КТ является дискретность энергетического спектра последних, а также возможность контроля энергетического спектра и, в свою очередь, электронных и оптических свойств КТ с помощью огромного количества инструментов. Во-первых, возможна экспериментальная реализация КТ с различной, наперед заданной геометрией, что будет существенным образом влиять на свойства КТ [4–8]. Во-вторых, свойствами КТ можно управлять посредством различных внешних воздействий [9–14].

Одним из таких внешних воздействий является лазерное излучение [15–17]. Лазерное излучение может быть использовано не только для индуцирования квантовых переходов между разными уровнями, но также для деформации ограничивающего потенциала КТ и, в последствии, управления локализацией носителей заряда.

Наиболее популярно рассмотрение квантовых наноструктур под воздействием гауссова лазерного излучения, так как изначально лазерное излучение имеет профиль, описываемый гауссовой кривой. Однако посредством различных

оптических элементов, например аксикона, можно получить отличающиеся от гауссова профили лазерного излучения [18]. В частности, одним из интересных вариантов является бесселев лазерный пучок. Он имеет ряд преимуществ по сравнению с гауссовым, а именно: неподверженность дифракции и расхождению, а также наличие нескольких отчетливых пиков.

В настоящей работе рассмотрено воздействие гауссова и бесселева лазерных пучков на электронные состояния в цилиндрической КТ InAs/GaAs с модифицированным потенциалом Пешля–Теллера в аксиальном направлении и параболическим потенциалом в радиальном направлении.

2. Теоретическая модель

В этом разделе приведем описание теоретической модели, рассматриваемой в данной задаче. В частности, как уже отмечалось, будет рассмотрено движение электрона в цилиндрической КТ, ограниченной параболическим потенциалом в радиальном и модифицированным потенциалом Пешля–Теллера в аксиальном направлениях. На рассматриваемую структуру падает лазерное излучение, поляризованное в аксиальном направлении OZ (рис.1).

В цилиндрических координатах пространственная волновая функция $\Psi(\rho, \phi, z)$ может быть представлена в виде произведения аксиальной $\phi(z)$ и радиальной $f(\rho, \phi)$ частей, а уравнение Шредингера для рассматриваемой системы в аксиальном направлении будет иметь следующий вид [19,20]:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z + \alpha(t)) \right] \phi(z, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi(z, t), \quad (1)$$

где m^* – эффективная масса, а $V(z + \alpha(t))$ – ограничивающий потенциал. Движение электрона под воздействием лазерного излучения характеризуется параметром:

$$\alpha(t) = \alpha_0 \sin(\Omega t) \hat{e}_z, \quad (2)$$

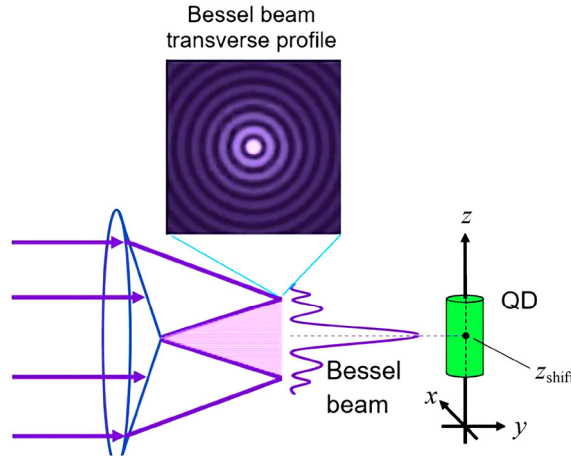


Рис.1. Схема облучения цилиндрической КТ бесселевым лазерным пучком, поляризованным в аксиальном направлении. Во вкладке изображен поперечный профиль бесселева пучка.

где $\alpha_0 = eA_0 / (m^* \Omega)$ – параметр, определяющий амплитуду колебания электрона под воздействием лазерного излучения, e – величина заряда электрона, A_0 – амплитуда вектор-потенциала, Ω – частота лазерного излучения, $\hat{e}_z$ – единичный вектор поляризации [21].

В высокочастотном приближении уравнение (1) может быть записано в виде [22–24]:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \langle V(z, \alpha_0) \rangle \right] \varphi(z) = E_z \varphi(z), \quad (3)$$

где E_z – энергия частицы в аксиальном направлении, а:

$$\langle V(z, \alpha_0) \rangle = \frac{1}{T} \int_0^T V(z + \alpha(t)) dt, \quad (4)$$

эффективный ограничивающий потенциал, который подчеркивает, что частица реагирует только на усредненный по времени быстро осциллирующий потенциал с периодом $T = 2\pi/\Omega$ [25, 26].

В случае гауссова и бесселева пучков для параметра α_0 можно записать, соответственно [17, 27]:

$$\alpha_0 \sim \begin{cases} \sqrt{I_G} \sqrt{\exp \left[-2 \frac{(z + z_{\text{shift}})^2}{w^2} \right]}, \\ \sqrt{I_B} J_0 \left(\frac{2\pi}{\lambda} (z + z_{\text{shift}}) \right), \end{cases} \quad (5)$$

где w – радиус пучка, $J_0(z)$ – функция Бесселя нулевого порядка, λ – длина волны лазерного излучения, z_{shift} – сдвиг пика лазерного излучения, I_G и I_B – интенсивности гауссова и бесселева пучков, соответственно. Выходная мощность лазера в обоих случаях одинакова, однако мощности на единицу площади, то есть интенсивности I_G и I_B , отличаются.

Ограничивающие потенциалы в радиальном и аксиальном направлении в отсутствии внешних воздействии имеют следующий вид:

$$V(\rho, \varphi) = \gamma_0 \rho^2 / 4, \quad (6)$$

$$V(z) = U - U / \text{ch}^2(z/\beta), \quad (7)$$

где $\gamma_0 = 2m^* \omega_{\text{conf}} a_B^2 / \hbar$, ω_{conf} – частота параболического ограничивающего потенциала, a_B – эффективный боровский радиус, U и β – соответственно высота и полуширина потенциальной ямы в аксиальном направлении.

Задача в отсутствии внешних полей была решена аналитически в работе [28], тогда как для решения задачи при наличии воздействия лазерного излучения необходимо прибегнуть к численным методам, например, воспользоваться методом численной дискретизации.

Как уже говорилось, будет рассмотрена КТ из InAs выращенная в матрице из GaAs. Материальные параметры, используемые в данной работе следующие: $m_{\text{InAs}}^* = 0.023m_0$ и $m_{\text{GaAs}}^* = 0.063m_0$ – эффективные массы электрона в InAs и GaAs,

соответственно, m_0 – масса свободного электрона, $\epsilon_r = 15.15$ – диэлектрическая проницаемость для InAs, $n_r(T) = 3.417 + 9 \times 10^{-5} T + 7 \times 10^{-7} T^2 - 7.5 \times 10^{-10} T^3$ – температурная зависимость показателя преломления для InAs [29], $E_{g, \text{InAs}}(T) = 0.415 - 2.76 \times 10^{-4} T^2 / (T + 83)$ эВ и $E_{g, \text{GaAs}}(T) = 1.519 - 5.405 \times 10^{-4} T^2 / (T + 204)$ эВ – температурные зависимости энергий запрещенных зон для InAs и GaAs, соответственно [30]. Все длины в данной работе будут представлены в эффективном боровском радиусе электрона для InAs – $a_B = \epsilon_r \hbar^2 / (e^2 m^*) \approx 35$ нм, а энергии – в эффективных ридбергах $E_R = \hbar^2 / (2 m^* a_B^2) \approx 1.36$ мэВ. Полуширина потенциальной ямы в аксиальном направлении равна $\beta = 1.5 a_B$, а высота U зависит от значения разрыва между зонами проводимости InAs и GaAs: $U = \Delta E_c$ [31]. Результаты приведены для температуры в 77 К.

На рис.2 представлен вид ограничивающего потенциала в аксиальном направлении в зависимости от параметра лазерного излучения α при двух положениях пика излучения: в центре КТ $z_{\text{shift}} = 0$ и смещенного от центра на расстояние $z_{\text{shift}} = 0.75 a_B$. Как видно из рис.2а,с, симметричный характер ограничивающего потенциала не терпит изменений в обоих случаях расположения пика гауссова лазерного излучения, однако с увеличением значения параметра α

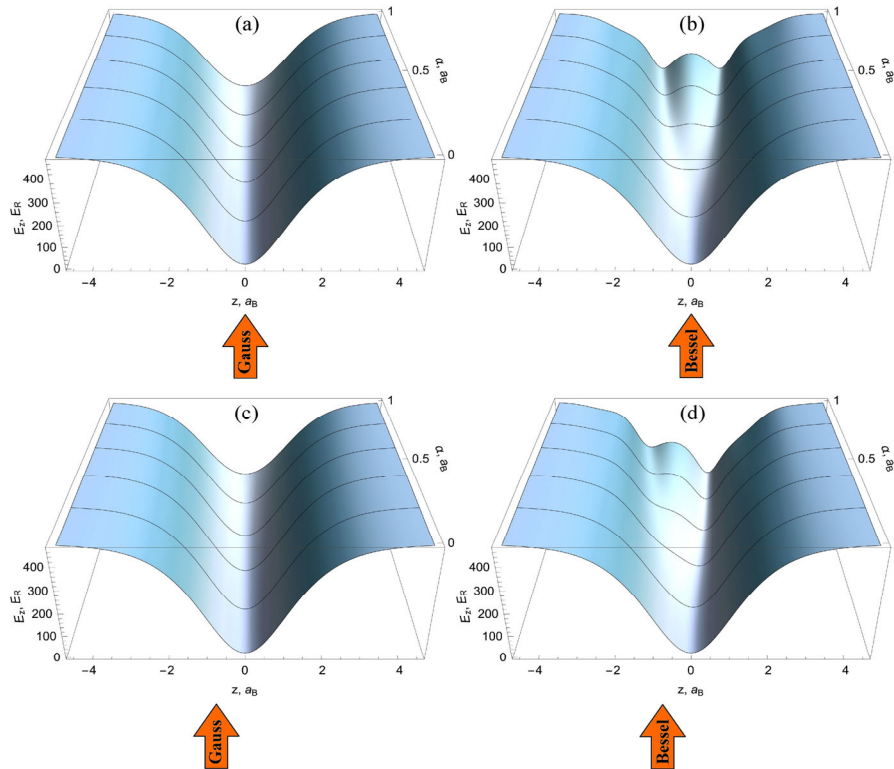


Рис.2. Поведение ограничивающего потенциала в зависимости от параметра α в случае гауссова (а,с) и бесселева (b,d) лазерных пучков при положениях пика лазерного излучения $z_{\text{shift}} = 0$ (a,b) и $z_{\text{shift}} = 0.75 a_B$ (c,d).

уменьшается эффективная глубина потенциальной ямы. Под воздействием бesselового излучения со значениями $\alpha > 0.6a_B$ в потенциальной яме начинает образовываться второй минимум. Это обусловлено тем, что в центре бesselового пучка, где интенсивность принимает максимальное значение, эффективный потенциал возрастает, создавая добавочный барьер. Эти два минимума в случае с $z_{\text{shift}} = 0$ расположены симметрично относительно центра КТ (рис.2b), а при $z_{\text{shift}} = 0.75a_B$ – асимметрично, с более высоким расположением в области падения пика лазерного излучения (рис.2d). Отметим, что эффективный потенциал возрастает также в области вторичных пиков бesselового пучка, однако вклад последних относительно невелик и при малых значениях α едва заметен на общем профиле эффективного ограничивающего потенциала.

3. Энергетический спектр и волновые функции

Далее детальной рассмотрим энергетический спектр и волновые функции электрона в вышеупомянутой системе. Внимание будет уделено только состояниям в аксиальном направлении с квантовыми числами n_z , тогда как по радиальному и магнитному квантовым числам n_r и m будут рассмотрены только основные состояния.

На рис.3 представлены квадраты абсолютных значений волновых функций

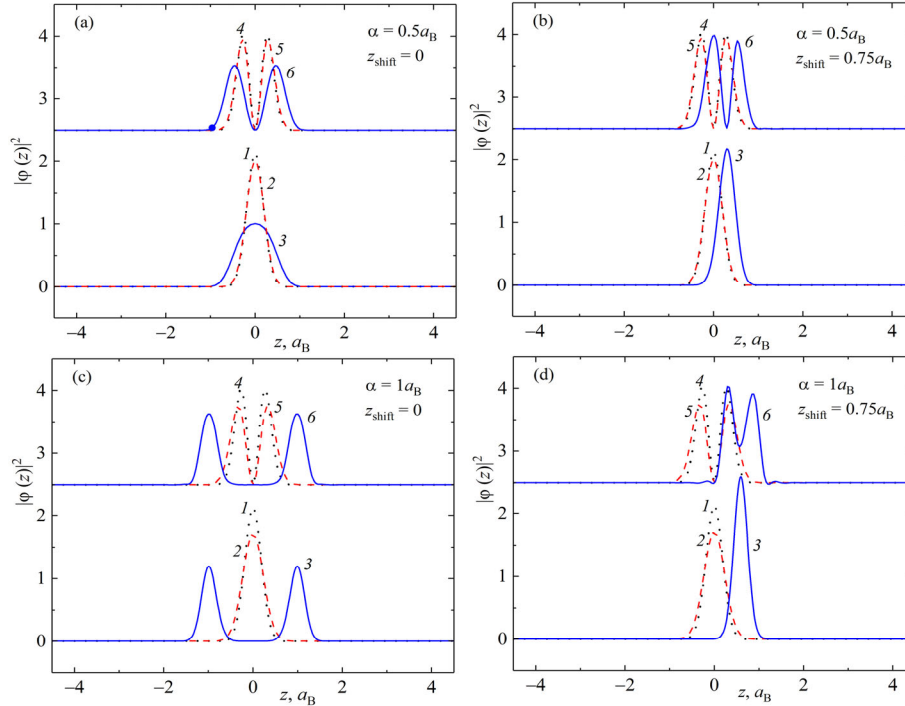


Рис.3. Квадраты абсолютных значений волновых функций электрона в отсутствии (1,4) и при наличии гауссова (2,5) или бesselового (3,6) лазерных пучков при разных значениях параметров α и z_{shift} . Для наглядности волновые функции первого возбужденного состояния на графиках смещены наверх на произвольную величину относительно волновых функций основного состояния.

в аксиальном направлении при разных значениях параметра α лазерного излучения и при различных положениях пика излучения z_{shift} . Для наглядности волновые функции первого возбужденного состояния на графиках смещены вверх на произвольную величину относительно волновых функций основного состояния. Как видно из всех графиков, волновые функции под воздействием гауссова лазерного пучка всегда остаются локализованными в центре системы, что объясняется характером гауссова излучения. Благодаря симметричному распределению пиков бесселева пучка схожая картина наблюдается также в случае несмещенного бесселева излучения (рис.3а). Однако, как уже отмечалось, с ростом значения параметра α в центре системы возникает барьерная область, что приводит к образованию второго симметричного минимума. Это серьезным образом влияет на локализацию электрона в системе, как видно из рис.3с. Смещение бесселева излучения с центра системы приводит к смещению минимума потенциальной ямы, а далее с ростом значения параметра α к образованию второго ассиметричного минимума (рис.3b,d).

На рис.4 представлены зависимости энергий первых двух состояний от полуширины потенциальной ямы в аксиальном направлении в отсутствии лазерного излучения и при наличии гауссова или бесселева излучения разных

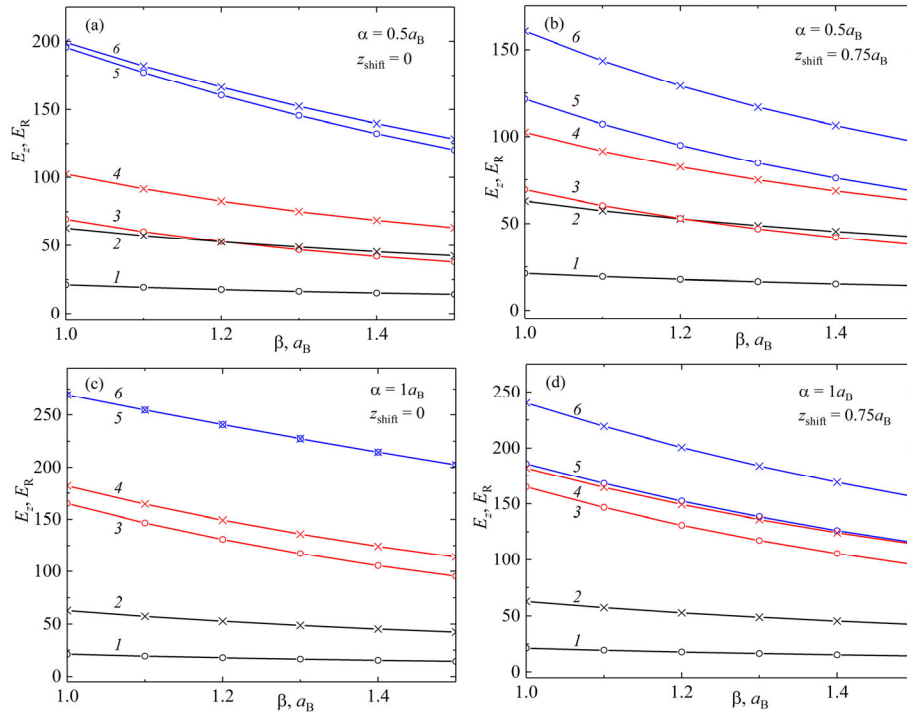


Рис.4. Зависимости энергий основного (1,3,5) и первого возбужденного (2,4,6) состояний от полуширины потенциальной ямы в отсутствии лазерного излучения (1,2) и при наличии гауссова (3,4) или бесселева (5,6) излучения при разных значениях параметров α и z_{shift} .

интенсивностей и при разных положениях пика излучения. Как видно, с помощью параметров α и z_{shift} можно контролировать не только абсолютные значения, но также и разность между значениями энергетических уровней. Также из рис.4с видно, что в случае облучения бесселевым лазерным пучком основное и первое возбужденное состояния вырождены, так как при соответствующих значениях параметров α и z_{shift} в рассматриваемой системе возникает второй, симметричный минимум.

На рис.5 представлены зависимости энергий первых четырех состояний от параметров α и z_{shift} гауссова или бесселева лазерных пучков. Под воздействием гауссова пучка изменяется эффективная глубина потенциальной ямы и, следовательно, абсолютные значения и разности между значениями энергии электрона, что отчетливо продемонстрировано на рис.5а. Серьезные качественные изменения происходят под воздействием бесселева пучка. Как уже отмечалось под рис.2b, при значениях $\alpha > 0.6a_B$ в центре КТ начинается образовываться барьерная область и возникает симметричная двойная система. На рис.5b видно, что, начиная с вышеупомянутого значения параметра лазера, основной и первый возбужденный энергетические уровни вырождаются. По мере увеличения значения α то же самое происходит и со вторым и третьим энергетическими уровнями. Далее из рис.5с видно, что при постоянном значении α смещение положения пика гауссова излучения не влияет на энергетический спектр рассматриваемой системы.

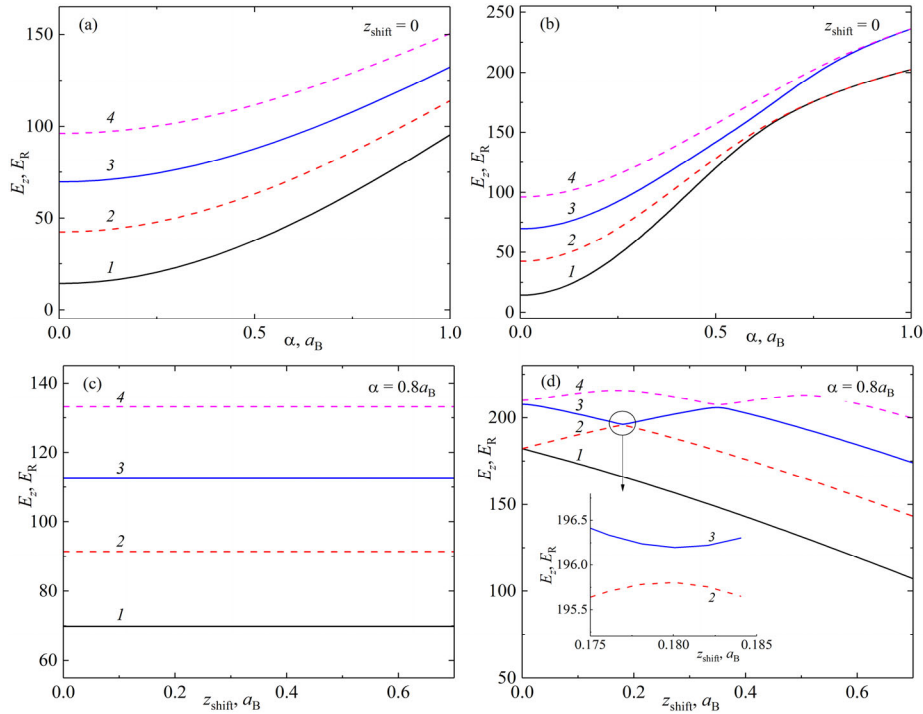


Рис.5. Зависимости энергий первых четырех состояний (1–4) от параметров α и z_{shift} гауссова (а,с) или бесселева (b,d) лазерных пучков при значениях параметров $z_{\text{shift}} = 0$ (a,b) и $\alpha = 0.8a_B$ (c,d).

Более интересная картина наблюдается при смещении положения пика бесселева пучка (рис.5d). При значении $\alpha = 0.8a_B$ со смещением положения пика бесселева пучка нарушается симметрия двойной системы и значения энергии основного и первого возбужденного состояний удаляются друг от друга. То же самое происходит со вторым и третьим возбужденными состояниями и это продолжается до тех пор, пока энергии возрастающего первого возбужденного и спадающего второго возбужденного состояний пересекутся и произойдет антикроссинг при значениях $z_{\text{shift}} \approx 0.18a_B$, что видно на вставке к рис.5d. При последующем смещении положения пика бесселева пучка z_{shift} такие антикроссинги происходят и с последующими парами энергетических состояний до тех пор, пока основной пик лазерного излучения не покинет систему. В этом случае воздействие лазерного излучения на систему начнет исчезать и энергетические состояния вернуться к своим начальным, невозмущенным значениям.

В табл.1 приведены значения энергий запрещенных зон и величины разрыва зоны проводимости для InAs и GaAs, а также значения энергий первых четырех состояний от параметров α и z_{shift} гауссова или бесселева лазерных пучков при двух температурах: 77 и 300 К. Как видно, с увеличением температуры уменьшаются значения величин запрещенных зон и, следовательно, разрывы между зонами проводимости. Соответственно уменьшаются также значения энергетических уровней.

Табл.1. Значения энергий запрещенных зон и величины разрыва зоны проводимости для InAs и GaAs, а также значения энергий первых четырех состояний от параметров α и z_{shift} гауссова и бесселева лазерных пучков при температурах 77 и 300 К

	$E_{g,\text{InAs}}$	$E_{g,\text{GaAs}}$	ΔU_e		$\alpha = 0,$ $z_{\text{shift}} = 0$	Бесселев пучок $\alpha = 0.5a_B,$ $z_{\text{shift}} = 0$	Гауссов пучок $\alpha = 0.5a_B,$ $z_{\text{shift}} = 0$	Бесселев пучок $\alpha = 0.5a_B,$ $z_{\text{shift}} = 0.75a_B$	Гауссов пучок $\alpha = 0.5a_B,$ $z_{\text{shift}} = 0.75a_B$
$T = 77 \text{ K}$	298	1109.91	474.28	$n_z = 1$	14.3	120.44	37.79	68.59	37.79
				$n_z = 2$	42.46	128.37	63.11	97.23	63.11
				$n_z = 3$	69.73	141.86	87.75	122.27	87.75
				$n_z = 4$	96.12	157.1	111.7	144	111.7
$T = 300 \text{ K}$	257.78	1047.25	461.17	$n_z = 1$	14.1	117.17	36.92	66.89	36.92
				$n_z = 2$	41.85	125.06	61.88	95.09	61.88
				$n_z = 3$	68.72	138.43	86.16	119.68	86.16
				$n_z = 4$	94.71	153.53	109.75	140.99	109.75

4. Заключение

Таким образом, в настоящей работе были рассмотрены энергетические состояния электрона в цилиндрической КТ из InAs в матрице GaAs и возможность манипуляции ими посредством внешнего лазерного излучения двух типов: гауссова и бесселева. Волновые функции под воздействием гауссова и несмещенного бесселева лазерного пучка всегда остаются симметричными относительно

центра системы. Однако смещение положения последнего с центра системы приводит к смещению минимума потенциала КТ, а далее и к образованию второго минимума, что серьезным образом влияет на локализацию электрона в системе. Манипулируя параметрами лазера возможно контролировать не только абсолютные значения, но и разность между значениями энергетических уровней.

Исследование было проведено в рамках программы Faculty Research Funding, реализуемой фондом Enterprise Incubator Foundation (EIF) при поддержке PMI Science.

ЛИТЕРАТУРА

1. **R.E. Bailey, A.M. Smith, S. Nie.** Physica E, **25**, 1 (2004).
2. **U. Woggon.** Optical Properties of Semiconductor Quantum Dots. Berlin: Springer, 1997.
3. **F.A. Zwanenburg, A.S. Dzurak, A. Morello, M.Y. Simmons, L.C. Hollenberg, G. Klimeck, S. Rogge, S.N. Coppersmith, M.A. Eriksson.** Rev. Modern Phys., **85**, 961 (2013).
4. **D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan, T.V. Kotanjyan, H.K. Tevosyan.** Superlattices Microstruct., **78**, 40 (2015).
5. **D.A. Baghdasaryan, D.B. Hayrapetyan, H.A. Sarkisyan, E.M. Kazaryan, A. Medvids.** J. Contemp. Phys., **52**, 129 (2017).
6. **D.A. Baghdasaryan, D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan.** Physica B, **479**, 85 (2015).
7. **D.A. Baghdasaryan, D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan.** Eur. Phys. J. B, **88**, 1 (2015).
8. **D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan, H.K. Tevosyan.** Superlattices Microstruct., **64**, 204 (2013).
9. **İ. Karabulut, S. Baskoutas.** J. Appl. Phys., **103**, 073512 (2008).
10. **C.A. Duque, N. Porras-Montenegro, Z. Barticevic, M. Pacheco, L.E. Oliveira.** J. Phys.: Condens. Matter, **18**, 1877 (2006).
11. **M.J. Karimi, G. Rezaei, M. Nazari.** J. Lumin., **145**, 55 (2014).
12. **T.A. Sargsian, M.A. Mkrtchyan, H.A. Sarkisyan, D.B. Hayrapetyan.** Physica E, **126**, 114440 (2021).
13. **D.B. Hayrapetyan, A.S. Achoyan, E.M. Kazaryan, H.K. Tevosyan.** J. Contemp. Phys., **48**, 285 (2013).
14. **D.B. Hayrapetyan, S.M. Amirkhanyan, E.M. Kazaryan, H.A. Sarkisyan.** Physica E, **84**, 367 (2016).
15. **Y.P. Varshni.** Superlattices Microstruct., **30**, 45 (2001).
16. **L. Lu, W. Xie, H. Hassanabadi.** J. Lumin., **131**, 2538 (2011).
17. **T.A. Sargsian, P.A. Mantashyan, D.B. Hayrapetyan.** Nano-Struct. Nano-Objects, **33**, 100936 (2023).
18. **P. Mantashyan, R. Drampyan, J. Beeckman, O. Willekens, K. Neyts.** Opt. Commun., **338**, 467 (2015).
19. **H.A. Kramers.** Collected Scientific Papers. Amsterdam: North-Holland Publishing Company, 1956.
20. **M. Gavrila, J.Z. Kamiński.** Phys. Rev. Lett., **52**, 613 (1984).
21. **C. González-Santander, T. Apostolova, F. Domínguez-Adame.** J. Phys.: Condens. Matter, **25**, 335802 (2013).
22. **E.C. Niculescu, L.M. Burileanu, A. Radu.** Superlattices Microstruct., **44**, 173 (2008).
23. **F.M.S. Lima, M.A. Amato, O.A.C. Nunes, A.L.A. Fonseca, B.G. Enders, E.F. da Silva, Jr.** J. Appl. Phys., **105**, 123111 (2009).

24. S.E.R.P.İ.L. Sakiroglu, E.S.İ.N. Kasapoglu, R.L. Restrepo, C.A. Duque, I. Sökmen. Phys. Status Solidi B, **254**, 1600457 (2017).
25. R.L. Restrepo, A.L. Morales, V. Akimov, V. Tulupenko, E.S.İ.N. Kasapoglu, F.A.T.İ.H. Ungan, C.A. Duque. Superlattices Microstruct., **87**, 143 (2015).
26. F.A.T.İ.H. Ungan, U. Yesilgul, S. Sakiroglu, E.S.İ.N. Kasapoglu, H.Ü.S.E.Y.İ.N. Sari, I. Sökmen. J. Lumin., **143**, 75 (2013).
27. C.L. Arnold, S. Akturk, A. Mysyrowicz, V. Jukna, A. Couairon, T. Itina, R. Stoian, C. Xie, J.M. Dudley, F. Courvoisier, S. Bonanomi. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **48**, 094006 (2015).
28. D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan, H.K. Tevosyan. Physica E, **46**, 274 (2012).
29. G.D. Gillen, C. DiRocco, P. Powers, S. Guha. Appl. Opt., **47**, 164 (2008).
30. Z.M. Fang, K.Y. Ma, D.H. Jaw, R.M. Cohen, G.B. Stringfellow. J. Appl. Phys., **67**, 7034 (1990).
31. M. Oloumi, C.C. Matthai. J. Phys.: Condens. Matter, **2**, 5153 (1990).

ԷԼԵԿՏՐՈՆԱՅԻՆ ՎԻՃԱԿՆԵՐԸ ԳԼԱՆԱՅԻՆ ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ԿԵՏՈՒՄ
ԳԱՌԻՍՅԱՆ ԵՎ ԲԵՍՍԵԼՅԱՆ ԼԱԶԵՐԱՅԻՆ ՃԱՌԱԳԱՅԹՆԵՐԻ
ԱԶԴԵՅՈՒԹՅԱՆ ՏԱԿ

Տ.Ա. ՍԱՐԳՍՅԱՆ

Տվյալ հոդվածում դիտարկվել են էլեկտրոնային վիճակները գլանաձև քվանտային կետում, որը սահմանափակված է Պեշլ–Թելլերի ձևափոխված սահմանափակող պոտենցիալով և գտնվում է բարձր հաճախության լազերային ճառագայթման ազդեցության տակ: Դիտարկվել են լազերային ճառագայթման երկու տեսակ՝ Գաուսյան և Բեսսելյան: Բարձր հաճախության լազերային ճառագայթման ազդեցության տակ քվանտային կետի սահմանափակող պոտենցիալը փոխակերպվում է նոր՝ արդյունավետ սահմանափակող պոտենցիալի: Օրինակ, Բեսսելի փնջի դեպքում, Պեշլ–Թելլերի պոտենցիալ փոսի փոխարեն, առանցքային ուղղությամբ ստացվում է կրկնակի պոտենցիալ փոս: Սա հանգեցնում է էլեկտրոնի էներգետիկ վիճակների հետաքրքիր վարքագծի: Մասնավորապես, տեղի է ունենում վիճակների հակահատում, ինչպես նաև էներգետիկ մակարդակների հարևան զույգերի միաձուլում:

ELECTRONIC STATES IN A CYLINDRICAL QUANTUM DOT UNDER THE
INFLUENCE OF GAUSSIAN AND BESSEL LASER BEAMS

T.A. SARGSIAN

The electronic states in a cylindrical quantum dot with a modified Pöschl–Teller confinement potential under the influence of high-frequency laser radiation are considered. Two types of laser radiation are considered: Gaussian and Bessel. Under the influence of high-frequency laser radiation, the confinement potential of the quantum dot is converted to a new, effective confinement potential. For example, in the case of a Bessel beam, instead of a Pöschl–Teller potential well, a double potential well is obtained in the axial direction. This leads to an interesting behavior of the energy states of the electron. In particular, the abovementioned leads to the formation of anti-crossing of the states, as well as to the merging of the neighboring pairs of energy levels.

ИССЛЕДОВАНИЕ АТОМНЫХ ПЕРЕХОДОВ D_2 ЛИНИИ КАЛИЯ В СИЛЬНЫХ МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ С ПОМОЩЬЮ ТЕХНИКИ НАСЫЩЕННОГО ПОГЛОЩЕНИЯ В МИКРО-ЯЧЕЙКЕ

А.Д. САРГСЯН*

Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак, Армения

*e-mail: sarmeno@mail.ru

(Поступила в редакцию 21 июня 2022 г.)

Исследованы атомные переходы D_2 линии ^{39}K в сильных продольных магнитных полях, вплоть до 1000 Гс, с высоким спектральным разрешением. Использовался метод насыщенного поглощения (НП) в микро-ячейке, заполненной парами К, с толщиной $L = 30$ мкм. Производилось двойное дифференцирование спектра НП, которое позволило получать узкие (~ 50 МГц) атомные линии и проводить исследования частотного и вероятностного поведения индивидуального перехода. Атомы К имеют наименьшую величину сверхтонкого расщепления нижнего уровня среди щелочных металлов. Это позволяет при полях $B > 300$ Гс наблюдать разрыв связи между полным угловым моментом электрона $\mathbf{J}$ и магнитного момента ядра $\mathbf{I}$. В случае использования циркулярного поляризованного излучения (σ^+ или σ^-) в сильных магнитных полях регистрируются две группы (каждая из которых состоит из 4) эквидистантно расположенных 8-атомных переходов. Экспериментальные результаты хорошо описываются известной теоретической моделью.

1. Введение

Исследования поведения атомных уровней и переходов во внешних магнитных и электрических полях проводятся достаточно давно, поскольку позволяют лучше понять структуру атомов [1–5]. Атомарные пары калия используются гораздо реже, чем пары Rb или Cs, так как плотность паров К очень мала при комнатной температуре ($5.8 \times 10^8 \text{ см}^{-3}$) и даже при умеренной температуре $\sim 100^\circ\text{C}$ доплеровское уширение достигает ~ 1 ГГц. Поэтому атомные переходы ^{39}K оказываются полностью скрытыми доплеровским уширением. Это особенно сильно проявляется для D_2 линии калия, где частотные расстояния сверхтонкой структуры между верхними уровнями составляют 3–20 МГц. Магнитооптические процессы на атомах Cs, Rb и К успешно применяются во многих задачах, таких как разработка узкополосных оптических фильтров [6], создание оптических изоля-

торов [7], стабилизация частоты лазерного излучения к узким атомным переходам, смещенным в сильных магнитных полях [8,9] и др.

Известно, что в сильных магнитных полях, которые определяются из условия $B \gg B_0 = A_{\text{HFS}}/\mu_B$, где A_{HFS} коэффициент связи сверхтонкой структуры для нижнего основного уровня, а μ_B – магнетон Бора (константы приведены в [10]), происходит разрыв связи полного углового момента электрона $\mathbf{J}$ и магнитного момента ядра $\mathbf{I}$. В этом случае, известном как режим Пашена–Бака на сверхтонкой структуре (ПБС) [11–19], поведение атомных уровней описывается проекциями m_J и m_I . Величина B_0 для атомов $^{39}\text{K} \sim 165$ Гс, что существенно меньше величины B_0 для атомов Cs и Rb (к примеру, для атомов ^{133}Cs и ^{87}Rb величины B_0 равны 1.7 кГс и 2.4 кГс, соответственно). Из-за малости величины B_0 для атомов ^{39}K полный разрыв связи $\mathbf{J}$ и $\mathbf{I}$ наблюдается уже при относительно малых полях ~ 1 кГс. Поскольку, частотное расстояние между переходами в сильных полях ~ 100 МГц, в то время как доплеровское уширение для атомов K ~ 1 ГГц, то важным условием является применение бездоплеровской спектроскопии.

В работе [20] было продемонстрировано, что использование нано-ячейки (НЯ) с толщиной атомарных паров $L \sim 350$ нм позволяет успешно изучать поведение атомных переходов D_2 линии ^{39}K , в широком диапазоне магнитных полей. Однако изготовление оптических НЯ [21–23] остается технически сложной задачей и поэтому широкого применения они пока не получили.

Целью настоящей работы является экспериментальная демонстрация того, что ячейки микронной толщины (МЯ) также могут быть успешно использованы для детальных исследований атомных переходов D_2 линии ^{39}K в магнитных полях. Наряду с технической простотой в изготовлении, необходимая рабочая температура (в случае K) МЯ составляет 80–100°C, что существенно ниже рабочей температуры НЯ 150–180°C.

Основное преимущество МЯ по сравнению с обычными ячейками сантиметровой длины заключается в том, что, как показано в работе [8], в спектре насыщенного поглощения (НП) практически отсутствуют так называемые «кроссовер» (СО) резонансы. Это позволяет успешно использовать спектры НП, формируемые в калиевой МЯ, для исследования атомных переходов в сильных магнитных полях.

2. Экспериментальная часть

2.1. МЯ с парами K

Окна МЯ изготовлены из хорошо отполированного кристаллического сапфира с размерами 20×30 мм и толщиной 2.3 мм. Для минимизации двулучепреломления S -ось перпендикулярна поверхности окна. Для обеспечения зазора толщиной $L \sim 30$ мкм между внутренними поверхностями окон помещены тонкие платиновые полоски. В нижней части окон просверлено отверстие, куда до склейки окон вставляется тонкая сапфировая трубка диаметром ~ 2 мм (диаметр

внутреннего отверстия трубки 0.8 мм). К сапфировой трубке горячей пайкой припаивается «молибденовое стекло», которое в свою очередь, припаивается к вакуумной системе, и заполнение К производится таким же образом, как для стеклянных ячеек (детали конструкции приведены в работе [24]).

Проведем сравнение МЯ с НЯ. Во-первых, изготовление НЯ является технически более сложной задачей с необходимостью обеспечения широких областей с толщинами зазоров между внутренними поверхностями величиной в длину волны и (или) полдлины волны. В случае МЯ для формирования зазора достаточно разместить между внутренними поверхностями окон тонкие платиновые полоски (прокладки) необходимой толщины (10–30 мкм). Поскольку изготовление МЯ может вызывать определенные технические трудности, в работе [24] приведена предлагаемая конструкция стеклянной МЯ с сапфировыми окнами (которая может быть изготовлена во многих лабораториях). Другая конструкция МЯ приведена в работе [25].

2.2. Экспериментальная установка

На рис.1 приведена схема эксперимента. Используется МЯ, заполненная К, с толщиной 30 мкм в направлении лазерного излучения. МЯ помещалась в печь, в которой имелись отверстия для прохождения лазерного излучения, и нагревалась до $\sim 100^\circ\text{C}$, что обеспечивало плотность атомов $N \sim 2 \times 10^{11} \text{ см}^{-3}$.

Использовалось излучение перестраиваемого узкополосного диодного лазера с внешним резонатором ECDL (extended cavity diode laser) с длиной волны 766.7 нм и шириной $\sim 1 \text{ МГц}$ [26]. Температура определялась термопарой, которая была прикреплена к хвостовой части МЯ, которая помещалась между сильными постоянными магнитами (ПМ), имеющими отверстия для прохождения луча лазера. Варьирование магнитного поля в МЯ производилось изменением

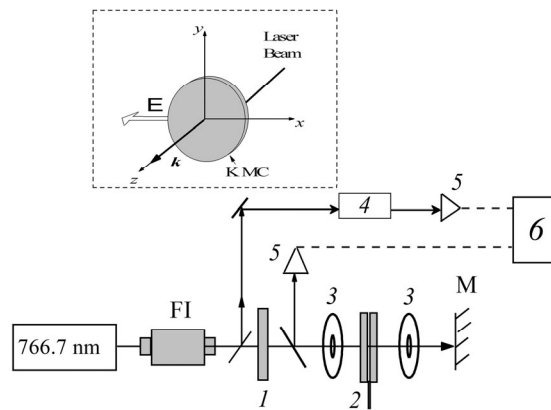


Рис.1. Схема экспериментальной установки. Диодный лазер с длиной волны 766.7 нм; FI – фарадеевский изолятор; 1 – четвертьволновая пластина, 2 – МЯ с К внутри печи; 3 – постоянные магниты с отверстием для прохождения луча лазера; 4 – узел для формирования частотного репера; 5 – фотоприемники; 6 – четырехканальный цифровой осциллограф Tektronix TDS 2024C, М – зеркало.

расстояния между ПМ. Для формирования излучения с круговой поляризацией σ^+ или σ^- применялась четвертьволновая пластина $\lambda/4$. Часть излучения, прошедшего через МЯ, с помощью зеркала М направлялась точно назад (в этом случае падающее излучение служит накачкой, а отраженное – пробным излучением) для формирования спектра НП в МЯ. С помощью нейтральных фильтров (на схеме не показаны) подбирались оптимальные мощности для накачки и пробного излучения, необходимые для формирования узких оптических резонансов, селективных по атомным скоростям (в английской литературе – VSOP) и имеющих относительно большие амплитуды при малой спектральной ширине. Для формирования частотного репера часть лазерного излучения направлялась на узел 4, где использовалась К ячейка с длиной $L = 1.5$ см, и была собрана схема НП. Взаимное расположение напряженности лазерного поля $\mathbf{E}$ и направления лазерного излучения $\mathbf{k}$ ($k = 2\pi/\lambda$) и калиевая МЯ приведены на вставке в верхнем левом углу рис.1.

3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЯ

3.1. Использование σ^+ - и σ^- -поляризованных лазерных излучений

На рис.2 кривая 1 показывает спектр насыщенного поглощения, формируемый в ячейке с $L = 1.5$ см (спектр НП, формируемый в сантиметровой К ячейке, изучен в работах [27,28]).

Как видно из кривой 1, наряду с узкими оптическими VSOP резонансами, расположенными на атомных переходах $1, 2 \rightarrow 0, 1', 2', 3'$, в спектре присутствует

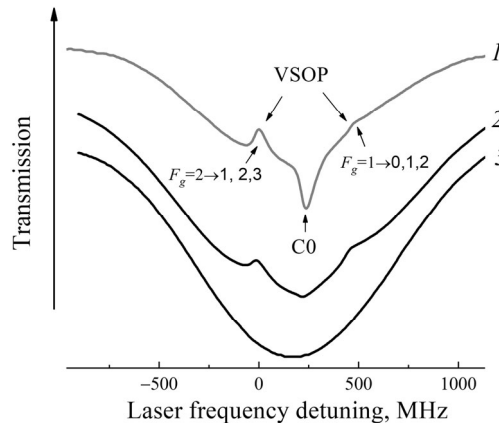


Рис.2. Кривая 1 – спектр НП при использовании К ячейки с длиной $L = 1.5$ см, в спектре присутствует ярко выраженный СО резонанс. Стрелками отмечены атомные переходы $F_g=2 \rightarrow F_e=1, 2, 3$ и $F_g=1 \rightarrow F_e=0, 1, 2$, которые частотно перекрываются из-за малого частного интервала между ними. Кривая 2 – спектр НП при использовании К МЯ с $L = 30$ мкм. Кривая 3 – спектр пропускания через К ячейку с длиной $L = 1.5$ см. Стрелками также показаны селективные по атомным скоростям оптические VSOP резонансы, формируемые на атомных переходах.

сильно выраженный СО-резонанс, который демонстрирует увеличенное поглощение. На кривой 2 показан спектр НП в МЯ с $L = 30$ мкм. Как видно, ярко выраженный на кривой 1 СО резонанс практически отсутствует на кривой 2.

Кривая 3 изображает спектр пропускания через ячейку с длиной $L = 1.5$ см. Как видно вследствие огромного доплеровского уширения [10] в спектре нет каких-либо выделенных VSOP резонансов. Известно, что СО резонансы формируются атомами, которые летят в направлении распространения излучений накачки и пробного, в то время как VSOP резонансы формируются атомами, которые летят перпендикулярно излучениям накачки и пробного. Как было показано в работах [29,30], в тонких ячейках время T_{CO} для формирования СО резонансов составляет L/V_A (где V_A – тепловая скорость атома), и при $L \leq 30$ мкм оно мало и недостаточно для формирования СО. Время же T_{VSOP} для формирования VSOP равно D/V_A , где D – диаметр лазерного пучка (2 мм), что на два порядка больше и достаточно для формирования VSOP. Для измерения величины магнитного поля в работе [31] был использован спектр НП в сантиметровой ячейке, заполненной парами атомов Rb, содержащий СО резонансы. Однако уже при полях $B > 50$ Гс из-за присутствия расщепленных компонент СО резонансов спектр становился настолько сложным (большое число перекрываемых по частоте компонент VSOP и СО резонансов), что дальнейшее применение спектра НП становилось бесполезным. Как показано ниже, спектр НП в МЯ остаётся удобным для идентификации атомных уровней вплоть до полей ~ 1 кГс.

Как показано в работах [32–35], метод второй производной (second derivative SD) $A''(\nu)$, примененный к спектрам поглощения $A(\nu)$ атомных паров, позволяет спектрально разделять атомные переходы с правильным воспроизведением частотных интервалов между переходами и их относительными вероятностями, что дает возможность существенно увеличить и зарегистрировать слабовыраженные пики (которые показывают положения атомных переходов) в спектре поглощения. На рис.3а приведен спектр НП от МЯ (кривая 1) в случае приложенного магнитного поля с индукцией $B = 785$ Гс (σ^- -поляризованное излучение). Хотя на кривой 1 пики VSOP слабо выражены, однако применение SD к спектрам НП позволяет существенно увеличить контраст VSOP и зарегистрировать все 8 атомных переходов, которые формируются в сильных магнитных полях. Кривая 2 на рис.3а – SD спектр кривой 1 (здесь и далее спектры для удобства инвертированы). На кривой 2 видны узкие VSOP (с полной шириной на полувысоте порядка 50 МГц), которые демонстрируют уменьшение поглощения. Важно отметить, что ширина VSOP в 20 раз меньше доплеровской ширины. Ячейка была нагрета до температуры $\sim 100^\circ\text{C}$. Мощность лазерного излучения 1мВт. Кривая 3 – реперный спектр НП в сантиметровой ячейке. Диаграмма на рис.3б показывает восемь атомных переходов в базе проекций m_J и m_I с правилами отбора при σ^- -излучении $\Delta m_J = m'_J - m_J = -1$ и $\Delta m_I = m'_I - m_I = 0$ (штрихами отмечены соответствующие величины для верхних уровней). Важно отметить, что если в слабых магнитных полях расщепление атомных уровней описывается полным моментом атома

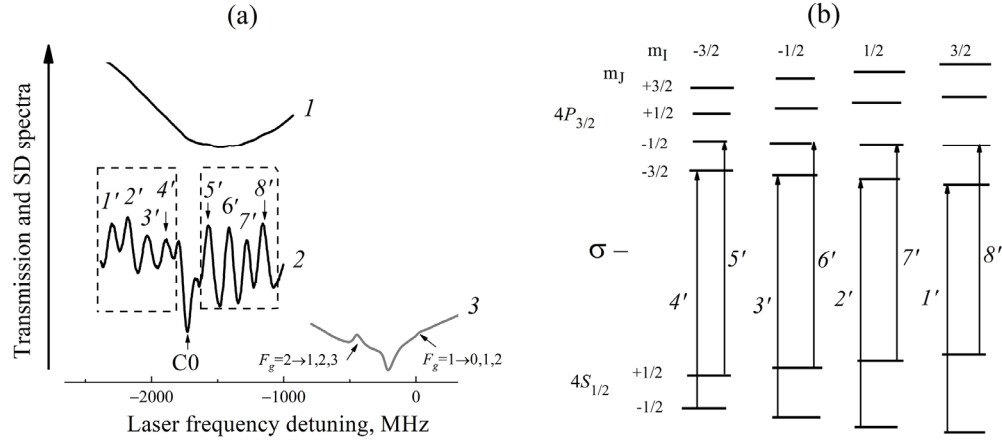


Рис.3. (а) Калиевая МЯ с $L = 30$ мкм, σ^- -поляризованное излучение: кривая 1 – спектр НП в МЯ, магнитное поле $B = 785$ Гс; кривая 2 – SD кривой 1; кривая 3 – реперный спектр НП в ячейке с $L = 1.5$ см. Для удобства спектры смещены по вертикали. В качестве 0 выбрана частота переходов $F_g=1 \rightarrow F_e=0,1,2$. (б) Диаграмма атомных переходов, обозначенных на спектре 1'–8', которые остаются в режиме ПБС при σ^- -поляризации лазерного излучения.

$\mathbf{F} = \mathbf{J} + \mathbf{I}$ и его проекцией m_F , где $\mathbf{J}$ полный угловой момента электрона, а $\mathbf{I}$ магнитный момент ядра (для атома ^{39}K $I = 3/2$), то в сильных магнитных полях расщепление атомных уровней описывается проекциями m_J и m_I (режим ПБС) [11–20]). В режиме ПБС число атомных переходов в спектре сокращается до 8 для ^{39}K (вероятности остальных переходов при полях >100 Гс стремятся к нулю [20]) и не меняется при дальнейшем увеличении магнитного поля. Видно, что все 8 атомных переходов смещены в низкочастотную область. Как видно, на кривой 2 рис.3а кроме атомных 1'–8' переходов также наблюдается СО резонанс, который, однако, не мешает «полезным» переходам, так как находится между группами переходов 1'–4' и 5'–8'. Заметим, что амплитуды переходов в группе, которая имеет начальный нижний уровень $4S_{1/2}$, $m_J = -1/2$, приблизительно в 3 раза меньше амплитуд переходов в группе, которая имеет начальный нижний уровень $4S_{1/2}$, $m_J = +1/2$. Это верно как при использовании σ^+ -, так и σ^- -поляризованных излучений, что согласуется с результатами работы [20].

В режиме ПБС частотные наклоны S (МГц/Гс) и вероятности атомных переходов в одной группе определяются фиксированными значениями проекций m_J нижнего и верхнего уровней и стремятся к одной и той же величине в пределах группы [20]. Из кривой 2 на рис.3а видно, что амплитуды переходов в своих группах 1'–4' и 5'–8' примерно одинаковы и частотные интервалы примерно равны, что также является проявлением режима ПБС. Кривая 1 на рис.4а показывает спектр НП при использовании σ^+ -поляризованного излучения. Кривая 2 – SD спектр кривой 1. На спектре 2 видны узкие VSOP (~50 МГц), которые демонстрируют уменьшение поглощения. Величина B составляет 777 Гс. Кривая 3 – реперный спектр НП. Видно, что все 8 атомных переходов смещены в высокочастотную область.

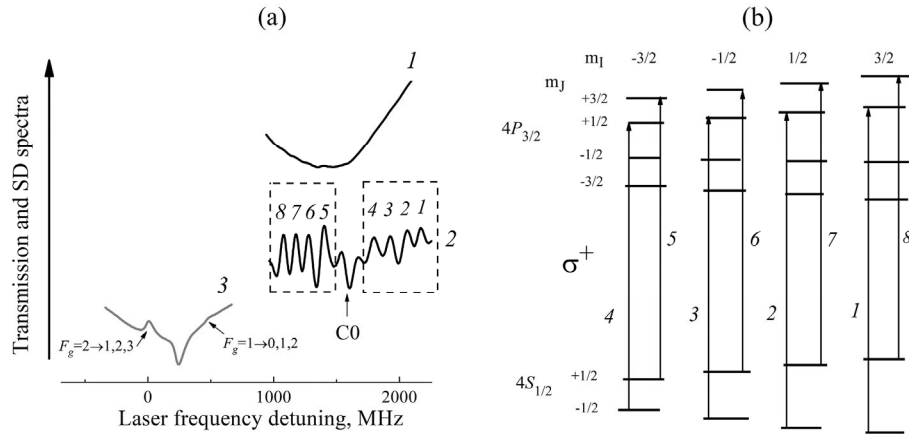


Рис.4. (а) Калиевая МЯ с $L = 30$ мкм, σ^+ -поляризованное излучение: кривая 1 – спектр НП в МЯ, приложено магнитное поле $B = 777$ Гс; кривая 2 – SD кривой 1; кривая 3 – реперный спектр НП в ячейке с $L=1.5$ см. В качестве нулевой частоты выбрана частота переходов $F_g=2 \rightarrow F_e=1,2,3$. (б) Диаграмма атомных переходов, обозначенных на спектре 1–8, которые остаются в режиме ПБС при σ^+ -поляризации лазерного излучения.

На рис.5а приведены расчетные частотные сдвиги компонент 1'–8' в зависимости от величины магнитного поля при σ^- -поляризации (теоретическая модель описана в работах [1,36–38]): сплошные линии – теоретические кривые, черные квадратики на кривых – экспериментальные результаты. Как видно, наблюдается хорошее согласие эксперимента с теоретическими кривыми. На рис.5б приведены расчетные частотные сдвиги компонент 1–8 в зависимости от величины магнитного поля при σ^+ -поляризации: сплошные линии – теоретические кривые, черные квадратики на кривых – экспериментальные результаты.

Отметим, что режим ПБС в парах атомов К был исследован в работе [39] с использованием процесса электромагнитно-индуцированной прозрачности (ЭИП). Однако, поскольку ЭИП-резонансы пропадали при $B > 100$ Гс, то удалось

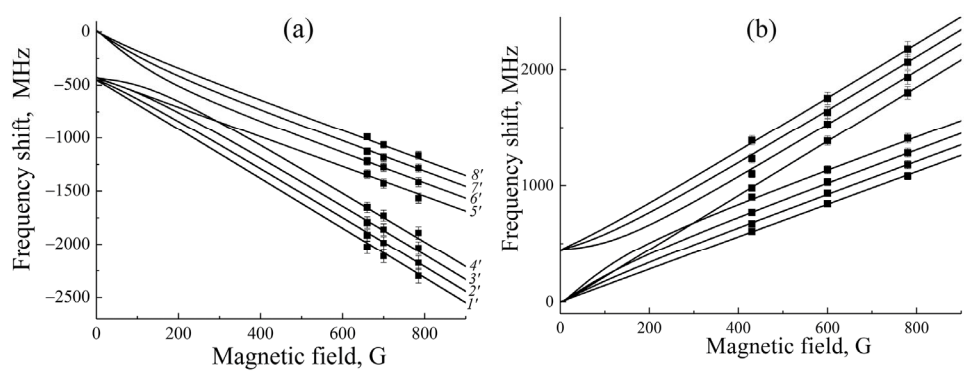


Рис.5. (а) Зависимость частотных сдвигов компонент 1'–8' при σ^- -поляризации. Теоретические кривые (сплошные линии). Черные квадратики на кривых – экспериментальные результаты. (б) Зависимость частотных сдвигов компонент 1–8 при σ^+ -поляризации. Расхождение эксперимента с теорией менее 3%.

зарегистрировать только начало режима ПБС, так как для наблюдения полного режима необходимы поля $B > 165$ Гс, как это реализовано в настоящей работе.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С помощью техники насыщенного поглощения и МЯ с толщиной $L = 30$ мкм впервые были исследованы атомные переходы D_2 линии калия. В спектре SD насыщенного поглощения в микро-ячейке формируемые резонансы имели малую спектральную ширину (~ 50 МГц), что в 20 раз уже доплеровской ширины. Поскольку атомы ^{39}K имеют наименьшую величину $A_{\text{HFS}}/\mu_B \approx 165$ Гс среди всех щелочных металлов, это позволило нам еще при сравнительно умеренных магнитных полях $B > 300$ Гс наблюдать разрыв связи между **J** и **I** (режим ПБС). В случае использования σ^+ -(или σ^- -) поляризованного лазерного излучения в режиме ПБС регистрируются две группы, состоящие из четырех, почти эквидистантно расположенных по частоте атомных переходов, каждый из которых в своей группе имеет практически одинаковую амплитуду. Поскольку частотные интервалы между переходами порядка 100 МГц, то для их исследования необходимо использовать спектроскопию свободную от доплеровского уширения, что обеспечивает техника насыщенного поглощения с использованием МЯ.

Показано, что при использовании σ^+ - и σ^- -поляризованных излучений амплитуды переходов в группе, которая имеет начальный нижний уровень $4S_{1/2}$, $m_J = -1/2$ приблизительно в 3 раза меньше амплитуд переходов в группе, которая имеет начальный нижний уровень $4S_{1/2}$, $m_J = +1/2$, что согласуется с результатами работы [20].

Отметим, что приведенные выше результаты для ^{39}K по количеству атомных переходов и их поведению в зависимости от магнитного поля будут наблюдаться также для D_2 линий атомов щелочных металлов, имеющих магнитный момент ядра $I = 3/2$, в частности, для ^{87}Rb , Na , ^{41}K и др. Различие в величинах B_0 для этих атомов и ^{39}K приводит к тому, что отмеченные выше особенности будут наблюдаться при больших величинах магнитного поля B , к примеру, для ^{87}Rb требуются примерно в 10–15 раз большие магнитные поля, чем для ^{39}K . В частности, так как для реализации режима ПБС на тонкой структуре атомов Rb требуются магнитные поля ~ 60 Тесла [40], в то время как для атомов калия требуемая величина магнитного поля ~ 6 Тесла.

Отметим возможные практические применения: а) формирование частотного репера на сильно смещенных частотах (до ± 3 ГГц) относительно исходных атомных уровней ^{39}K ; б) стабилизация частоты лазера на сильно смещенных атомных переходах [8, 9]; в) картографирование сильно неоднородных магнитных полей с 30-микронным пространственным разрешением. Отметим, что аналогичные исследования атомов калия в магнитных полях могут также быть реализованы с помощью атомного пучка, который применяется, например, в земановском замедлителе, однако такого рода исследования крайне дорогие и сложные [41].

Автор благодарит Д. Саркисяна и А. Тонояна за полезные обсуждения.
Исследование выполнено при финансовой поддержке Комитета по науке РА
в рамках научного проекта № 21Т-1С005.

ЛИТЕРАТУРА

1. **P. Tremblay, A. Michaud, M. Levesque, S. Thériault, M. Breton, J. Beaubien, N. Cyr.** Phys. Rev. A, **42**, 2766 (1990).
2. **Е.Б. Александров, Г.И. Хвостенко, М.П. Чайка.** Интерференция атомных состояний. Москва: Наука, 1991.
3. **C. Umfer, L. Windholz, M. Musso.** Z. Phys. D, **25**, 23 (1992).
4. **А.Д. Саргсян, А.С. Саркисян, А.В. Папоян, Д.Г. Саркисян.** Известия НАН Армении, Физика, **44**, 195 (2009).
5. **А.В. Папоян.** Известия НАН Армении, Физика, **53**, 30 (2018).
6. **M.A. Zentile, D.J. Whiting, J. Keaveney, C.S. Adams, I.G. Hughes.** Opt. Lett., **40**, 2000 (2015).
7. **L. Weller, K.S. Kleinbach, M.A. Zentile, S. Knappe, I.G. Hughes, C.S. Adams.** Opt. Lett., **37**, 3405 (2012).
8. **A. Sargsyan, A. Tonoyan, R. Mirzoyan, D. Sarkisyan, A. Wojciechowski, A. Stabrawa, W. Gawlik.** Opt. Lett., **39**, 2270 (2014).
9. **R.S. Mathew, F. Ponciano-Ojeda, J. Keaveney, D.J. Whiting, I.G. Hughes.** Opt. Lett., **43**, 4204 (2018).
10. **M.A. Zentile, J. Keaveney, L. Weller, D.J. Whiting, C.S. Adams, I.G. Hughes.** Computer Physics Commun., **189**, 162 (2015).
11. **B.A. Olsen, B. Patton, Y.Y. Jau, W. Happer.** Phys. Rev., A, **84**, 063410 (2011).
12. **M.A. Zentile, R. Andrews, L. Weller, S. Knappe, C.S. Adams, I.G. Hughes.** J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **47**, 075005 (2014).
13. **S. Scotto, D. Ciampini, C. Rizzo, E. Arimondo.** Phys. Rev. A, **92**, 063810 (2015).
14. **А. Саргсян, А. Амирян, Т.А. Вартанян, Д. Саркисян.** Опт. и Спектр., **121**, 848 (2016).
15. **D.J. Whiting, J. Keaveney, C.S. Adams, I.G. Hughes.** Phys. Rev. A, **93**, 043854 (2016).
16. **D.J. Whiting, R.S. Mathew, J. Keaveney, C.S. Adams, I.G. Hughes.** J. Mod. Opt., **65**, 713 (2018).
17. **А. Саргсян, А.Амирян,Т.А. Вартанян, Д. Саркисян.** Опт. и Спектр., **126**, 253 (2019).
18. **F.S. Ponciano-Ojeda, F.D. Logue, I.G. Hughes.** J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **54**, 015401 (2020).
19. **C.R. Higgins, I.G. Hughes.** J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **54**, 165403 (2021).
20. **A. Sargsyan, E. Klinger, A. Tonoyan, C. Leroy, D. Sarkisyan.** J Phys. B: At., Mol. Opt. Phys., **51**, 145001 (2018).
21. **D. Sarkisyan, D. Bloch, A. Papoyan, M. Ducloy.** Opt. Commun., **200**, 201 (2001).
22. **T. Peyrot, Ch. Beurthe, S. Coumar, M. Roullia, K. Perronet, P. Bonnay, C.S. Adams, A. Browaeys, Y.R.P. Sortais.** Opt. Lett., **44**, 1940 (2019).
23. **T.F. Cutler, W.J. Hamlyn, J. Renger, K.A. Whittaker, D. Pizzey, I.G. Hughes, V. Sandoghdar, C.S. Adams.** Phys. Rev. Appl., **14**, 034054 (2020).

24. **А. Саргсян, М.Г. Бейсон, Д. Саркисян, А.К. Мохapatра, Ч.С. Адамс.** Опт. и спектр., **109**, 581 (2010).
25. **T. Baluktsian, C. Urban, T. Bublat, H. Giessen, R. Löw, T. Pfau.** Opt. Lett. **35**, 1950 (2010).
26. **V.V. Vassiliev, S.A. Zibrov, V.L. Velichansky.** Rev. Sci. Instrum., **77**, 013102 (2006).
27. **V.L. Velichansky, A.S. Zibrov, V.S. Kargopol'tsev, O.R. Kachurin, V.V. Nikitin, V.A. Sautenkov, G.G. Kharisov, D.A. Tyurikov.** Sov. J. Quantum Electron., **10**, 1244 (1980).
28. **K. Pahwa, L. Mudarikwa, J. Goldwin.** Opt. Express, **20**, 17456 (2012).
29. **T.A. Vartanyan, D.L. Lin.** Phys. Rev. A, **51**, 1959 (1995).
30. **A.V. Ermolaev, T.A. Vartanyan.** Phys. Rev. A, **105**, 013518 (2022).
31. **J.A. Zieliska, F.A. Beduini, N. Godbout, M.W. Mitchell.** Opt.Lett., **37**, 524 (2012).
32. **A. Savitzky, M. Golay.** Anal. Chem., **36**, 1627 (1964).
33. **G. Talsky.** Derivative Spectrophotometry: Low and High Order, VCH Publishers, 1994.
34. **A. Sargsyan, A. Tonoyan, R. Momier, C. Leroy, D. Sarkisyan.** JOSA B, **39**, 973 (2022).
35. **А. Саргсян,** ЖПС, **89**, 17 (2022).
36. **G. Dutier, S. Saltiel, D. Bloch, M. Ducloy.** JOSA B, **20**, 793 (2003).
37. **R. Momier, A. Aleksanyan, E. Gazazyan, A. Papoyan, C. Leroy.** J. Quant. Spectrosc. Radiat.Transf., **257**, 107371 (2020).
38. **R. Momier, A.V. Papoyan, C. Leroy.** J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf., **272**, 107780 (2021).
39. **A. Lampis.** Coherent Light-Matter Interactions with Potassium Atoms. PhD thesis, University of Birmingham, 2017. <http://etheses.bham.ac.uk/id/eprint/8261>.
40. **D. Ciampini, R. Battesti, C. Rizzo, E. Arimondo.** Phys. Rev. A, **96**, 052504 (2017).
41. **B. Ohayon, G. Ron.** Review of Scientific Instruments, **86**, 103110 (2015).

INVESTIGATIONS OF ATOMIC TRANSITIONS OF D₂ LINE OF POTASSIUM IN STRONG MAGNETIC FIELDS USING SATURATED ABSORPTION TECHNIQUE IN A MICROCELL

A.D. SARGSYAN

Atomic transitions of ³⁹K D₂ line are studied in strong longitudinal magnetic fields, up to 1000 G, with a high spectral resolution. The saturated absorption (SA) method was used in a micro-cell filled with K vapors with a thickness of $L = 30 \text{ }\mu\text{m}$. A double differentiation of the SA spectrum was carried out, which made it possible to obtain narrow ($\sim 50 \text{ MHz}$) atomic lines and to study the frequency and probabilistic behavior of an individual transition. K atoms have the smallest hyperfine splitting of the ground levels among alkali metals. This allows one to observe the break of the coupling between the electronic total angular momentum **J** and nuclear **I** angular momentums at relatively low magnetic fields $B > 300 \text{ G}$. In the case of using circular polarized radiation (σ^+ or σ^-), two groups (each consisting of 4) equidistantly located total 8 atomic transitions are recorded in strong magnetic fields. The experimental results are well described by a known theoretical model.

ЗАПУТАННЫЕ СОСТОЯНИЯ ПОЛЯ В ПРОЦЕССЕ НЕВЫРОЖДЕННОГО ПАРАМЕТРИЧЕСКОГО РАСПАДА В ОПТИЧЕСКОМ РЕЗОНАТОРЕ

С.Т. ГЕВОРГЯН*, М.С. ГЕВОРГЯН

Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак, Армения

*e-mail: saribek.gevorgyan@gmail.com

(Поступила в редакцию 19 декабря 2022 г.)

Для процесса невырожденного параметрического распада в оптическом резонаторе, в котором квант с энергией $\hbar\omega_3$ распадается на два кванта с энергиями $\hbar\omega_2$ и $\hbar\omega_1$, где $\hbar\omega_3 = \hbar\omega_2 + \hbar\omega_1$, исследована возможность образования запутанных состояний поля по переменным числам фотонов между взаимодействующими модами оптической системы. Показано, что между модами с частотами ω_2 и ω_1 сильно запутанные состояния получаются в случае сильной связи между взаимодействующими модами, а в случае слабой или очень сильной связи между этими модами образуются относительно слабо запутанные состояния в сравнении вышеупомянутым случаем. В случае слабой связи эти моды локализуются в запутанных вакуумных состояниях с малыми значениями квантовой энтропии. Для мод с частотами ω_3 и ω_1 запутанные состояния образуются лишь в случае сильной связи.

1. Введение

Запутанные квантовые состояния света играют ключевую роль во многих областях квантовой информации: квантовых вычислениях, квантовой обработке данных, квантовой коммуникации и в квантовом изображении. Свойство квантовой запутанности находит также применение в экспериментах по обоснованию квантовой механики. В последние годы достаточно хорошо была исследована возможность получения запутанных состояний поля в простейших оптических системах (см., например, работу [1] и ссылки в ней). В работе показано, что запутанные состояния поля можно получить в простых оптических системах, как, например, в процессах внутррезонаторной генерации второй и третьей гармоник, и внутррезонаторной генерации второй и третьей субгармоник. В частности, для этих систем было показано, что запутанные состояния поля образуются в случаях достаточно сильной связи между взаимодействующими модами. В случае очень сильной или очень слабой связи между взаимодействующими модами в этих системах запутанные состояния не образуются.

Внутррезонаторный параметрический распад, при котором фотоны накачки параметрически преобразуются в пары фотонов внутри $\chi^{(2)}$ нелинейной среды, является интересным процессом из-за его многочисленных приложений,

в частности, для создания источников света настраиваемых в широком спектральном диапазоне даже шириной до двух октав. [3–6], и генерации сжатого света [7–9]. Отметим также, что уже почти три десятилетия внерезонаторный параметрический распад используется для генерации запутанных пар фотонов [10,11].

Для процесса внутрирезонаторного параметрического распада с помощью вышеуказанного алгоритма Монте–Карло в работе [12] была исследована квантовая динамика оптического поля. Вычислены функции Вигнера, квантовая энтропия и число фотонов взаимодействующих мод поля.

В настоящей работе для процесса внутрирезонаторного невырожденного параметрического распада с помощью алгоритма Монте–Карло [2] исследована возможность образования запутанных состояний взаимодействующих мод оптического поля.

2. Нелинейная система и основные уравнения

Мы рассматриваем модель невырожденного параметрического распада в оптическом резонаторе, в котором квант с энергией $\hbar\omega_3$ распадается на два кванта с энергиями $\hbar\omega_2$ и $\hbar\omega_1$, $\hbar\omega_3 = \hbar\omega_2 + \hbar\omega_1$. Мода с частотой ω_3 резонансно возмущается внешним классическим полем. Уравнение матрицы плотности этой оптической системы можно представить в следующем виде:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = (i\hbar)^{-1} [H_{\text{sys}}, \rho] + L(\rho), \quad (1)$$

где

$$H_{\text{sys}} = \frac{i\hbar\chi}{2} (a_3^+ a_2 a_1 - a_3 a_2^+ a_1^+) + i\hbar E (a_3^+ - a_3), \quad (2)$$

$$L(\rho) = \sum_{i=1}^3 \frac{\gamma_i}{2} (2a_i \rho a_i^+ - \rho a_i^+ a_i - a_i^+ a_i \rho). \quad (3)$$

Здесь a_i и a_i^+ ($i=1,2,3$) – операторы уничтожения и рождения фотонов взаимодействующих мод, χ – коэффициент связи между модами, пропорциональный нелинейной восприимчивости $\chi^{(2)}$ среды, E – классическая амплитуда возмущающего поля на частоте ω_3 , γ_i ($i=1,2,3$) – коэффициенты затухания взаимодействующих мод через зеркала резонатора. В выражении (2) фаза возмущающего поля для простоты опущена.

Исследуем динамику нормированных корреляционных функций флуктуаций числа фотонов взаимодействующих мод:

$$g_{ik}(t) = \frac{\langle ((n_i(t) - \langle n_i(t) \rangle) + (n_k(t) - \langle n_k(t) \rangle))^2 \rangle}{(\langle n_i(t)^2 \rangle - \langle n_i(t) \rangle^2) + (\langle n_k(t)^2 \rangle - \langle n_k(t) \rangle^2)}. \quad (4)$$

Здесь $n_i = a_i^+ a_i$, где $i=1,2,3$ – операторы числа фотонов взаимодействующих мод оптической системы. Выражение (4) можно написать в следующем виде:

$$g_{ik}(t) = 1 + \frac{2(\langle n_i(t)n_k(t) \rangle - \langle n_i(t) \rangle \langle n_k(t) \rangle)}{\langle n_i(t)^2 \rangle - \langle n_i(t) \rangle^2 + \langle n_k(t)^2 \rangle - \langle n_k(t) \rangle^2}. \quad (5)$$

В случае отсутствия корреляции флуктуаций числа фотонов между взаимодействующими модами значение корреляционной функции, представленной выражениями (4) и (5), стремится к единице.

Если корреляционная функция флуктуаций числа фотонов для каких-либо двух мод отличается от единицы, то в этом случае вышеуказанные моды находятся в запутанных состояниях по переменным числа фотонов. В дальнейшем для краткости изложения их просто будем называть запутанными состояниями.

Нормированную корреляционную функцию флуктуации числа фотонов взаимодействующих мод, представленную выражением (5) вычисляем с помощью алгоритма Монте–Карло, приведенного в работе [2]. Согласно этому алгоритму, матрицу плотности системы в случае развития из начального чистого состояния можно вычислить как математическое ожидание величины $\sigma(t) = |\varphi(t)\rangle\langle\varphi(t)|$

$$\rho(t) = M\{\sigma(t)\} \equiv M\{|\varphi(t)\rangle\langle\varphi(t)|\}. \quad (6)$$

Здесь члены $|\varphi(t)\rangle$ представляют квантовые траектории системы, которые вычисляются с помощью алгоритма Монте–Карло [2]. Среднее значение произвольного оператора f вычисляем с помощью выражения (6) для матрицы плотности оптической системы следующим образом:

$$\langle f \rangle = \text{tr}(\rho(t)f) = M\{\langle\varphi(t)|f|\varphi(t)\rangle\}. \quad (7)$$

С помощью формулы (7) вычисляем корреляционные функции флуктуации чисел фотонов взаимодействующих мод, представленных формулой (5).

Динамику системы исследуем в безразмерном времени $\tau = \gamma_1 t$ в случае равенства коэффициентов затухания мод в оптическом резонаторе $\gamma_1 = \gamma_2 = \gamma_3$ и в безразмерных параметрах

$$\varepsilon = E / \gamma_1, \quad k = \chi / \gamma_1 \quad (8)$$

в случае развития взаимодействующих мод из начальных вакуумных состояний, для значения внешнего классического возмущения $\varepsilon = 10$ и для значений параметра $k = 0.1, 1, 10$. Динамика всех корреляционных функций флуктуаций числа фотонов мод поля вычисляем с помощью 1000 квантовых траекторий оптической системы.

3. Корреляция флуктуаций числа фотонов оптической системы в случае слабой связи между взаимодействующими модами

Рассмотрим корреляцию флуктуации числа фотонов в случае слабой связи между взаимодействующими модами оптической системы ($k = 0.1$). На рис.1 представлена динамика корреляционной функции флуктуаций числа фотонов g_{21} взаимодействующих мод с частотами ω_2 и ω_1 . В области больших времен взаимодействия $\tau \gg 1$ значение корреляционной функции g_{21} приблизительно равно 1.5. Последнее показывает, что в этой области взаимодействия флуктуации числа фотонов взаимодействующих мод с частотами ω_2 и ω_1 сильно коррелируют и эти моды находятся в сильно запутанном состоянии.

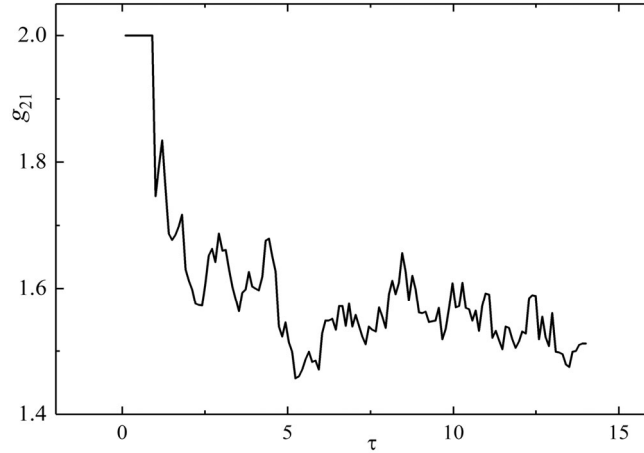


Рис.1. Динамика корреляционной функции флуктуаций числа фотонов мод g_{21} с частотами ω_2 и ω_1 для значения параметра системы $k = 0.1$.

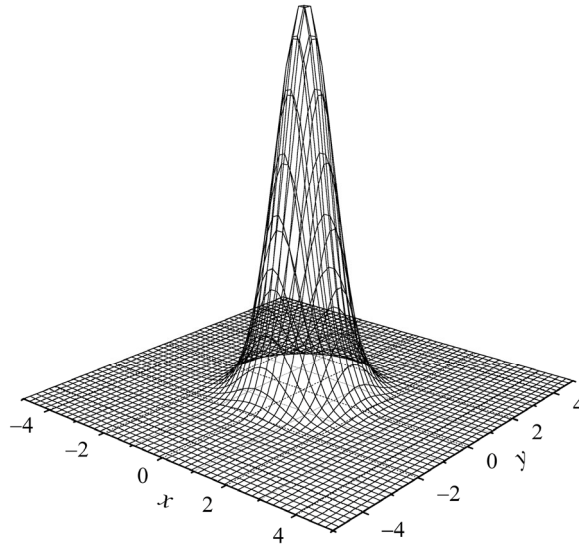


Рис.2. Функция Вигнера моды с частотой ω_2 в стационарном пределе взаимодействия оптической системы для значения параметра системы $k = 0.1$.

Функции Вигнера состояния мод исследуемой оптической системы были исследованы в работе [12]. Функция Вигнера стационарного состояния моды с частотой ω_2 для вышеуказанных параметров системы приведена на рис.2, и она представляет функцию Вигнера вакуумного состояния поля. Квантовая энтропия этого состояния ($S_2(t) = -Tr(\rho_2(t) \ln(\rho_2(t)))$), где $\rho_2(t)$ матрица плотности моды с частотой ω_2) мала и приблизительно равна $S_2 \approx 0.09$. Вышеуказанное показывает, что в этой области взаимодействия моды с частотами ω_2 и ω_1 локализуются в стационарных вакуумных запутанных состояниях с малой квантовой энтропией состояний.

На рис.3 для случая вышеуказанных параметров развития системы представлена корреляционная функция флуктуаций числа фотонов взаимодействующих

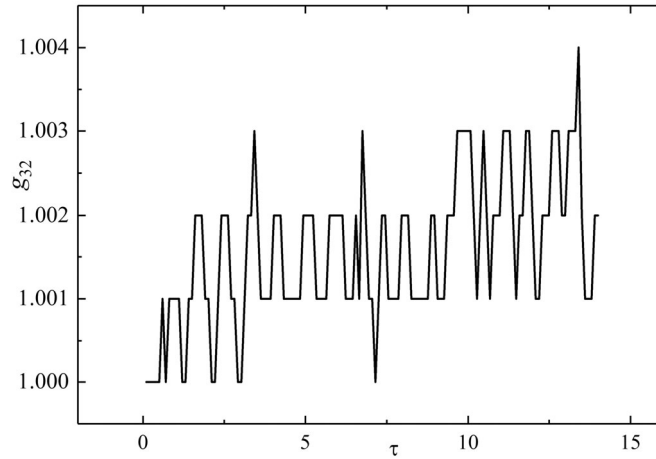


Рис.3. Динамика корреляционной функции g_{32} флуктуаций числа фотонов мод с частотами ω_3 и ω_2 для значения параметра системы $k = 0.1$.

мод g_{32} с частотами ω_3 и ω_2 . В этом случае корреляционная функция в области больших времен взаимодействия очень близка к единице, это показывает, что флуктуации числа фотонов взаимодействующих мод не коррелируют. Вследствие чего в стационарной области взаимодействия запутанные состояния поля не возникают.

4. Корреляция флуктуаций числа фотонов оптической системы в случае сильной связи между взаимодействующими модами

Рассмотрим динамику корреляционных функций флуктуаций числа фотонов взаимодействующих мод оптической системы в случае сильной связи между этими модами поля ($k=1$). На рис.4 представлена корреляционная функция флуктуаций числа фотонов мод поля g_{21} с частотами ω_2 и ω_1 . В стационарном пределе в области больших времен взаимодействия ($\tau \gg 1$) корреляционная функция стремится к значению $g_{21} \approx 1.9$. Последнее показывает, что в этой

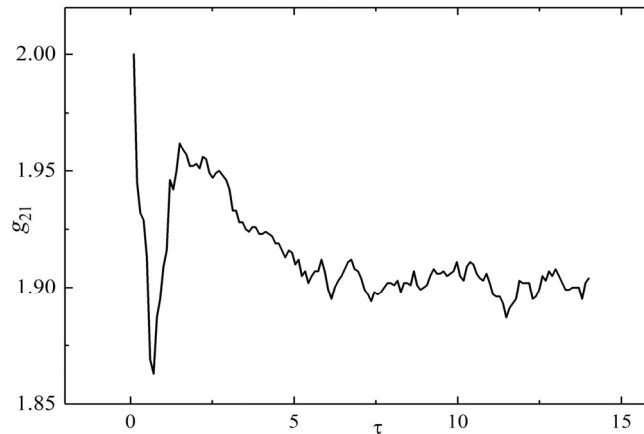


Рис.4. Динамика корреляционной функции флуктуаций числа фотонов мод g_{21} с частотами ω_2 и ω_1 для значения параметра системы $k = 1$.

области взаимодействия флуктуации числа фотонов взаимодействующих мод с частотами ω_2 и ω_1 очень сильно коррелируют, вследствие чего в стационарном пределе эти моды локализуются в очень сильно запутанном состоянии. Число фотонов мод для этого случая в стационарном пределе взаимодействия приблизительно равно: $n_2 = n_1 \approx 5$ [12]. Отметим, что значение корреляционной функции g_{21} больше значения корреляционной функции в стационарном пределе взаимодействия для этих же мод в случае слабой связи между модами, приведенной в предыдущем разделе ($g_{21} \approx 1.5$). Последнее показывает, что в случае сильной связи между модами в оптической системе, моды с частотами ω_2 и ω_1 локализуются в гораздо более сильном запутанном состоянии, чем в случае слабой связи.

На рис.5 для случая вышеуказанных параметров взаимодействия представлена динамика корреляционной функции флуктуаций числа фотонов взаимодействующих мод g_{32} с частотами ω_3 и ω_2 . В области больших времен взаимодействия значение корреляционной функции g_{32} приблизительно равно 1.2. Последнее показывает, что моды поля с частотами ω_3 и ω_2 в стационарном пределе взаимодействия локализуются в запутанных состояниях. Число фотонов моды с частотой ω_3 в этом случае в области больших времен взаимодействия приблизительно равно $n_3 \approx 8$. Отметим, что в случае слабой связи между модами, приведенном в предыдущем разделе, в стационарном пределе взаимодействия эти моды в запутанных состояниях не локализовались.

5. Корреляция флуктуаций числа фотонов оптической системы в случае очень сильной связи между взаимодействующими модами

В этом разделе исследуем динамику корреляционных функций флуктуаций числа фотонов взаимодействующих мод оптической системы в области очень сильной связи между модами ($k=10$). На рис.6 представлена динамика корреляционной функции флуктуаций числа фотонов мод оптического поля g_{21}

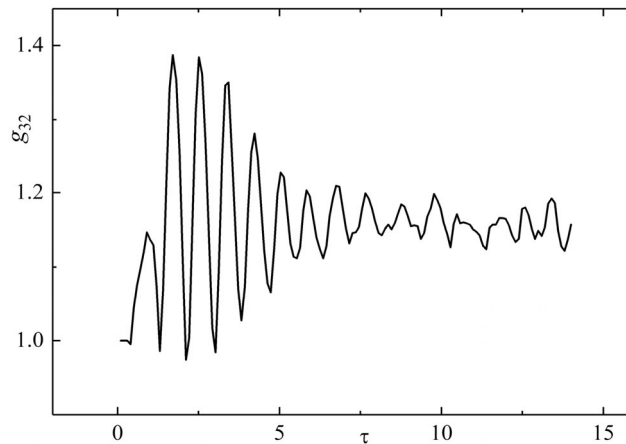


Рис.5. Динамика корреляционной функции флуктуаций числа фотонов мод g_{32} с частотами ω_3 и ω_2 для значения параметра системы $k=1$.

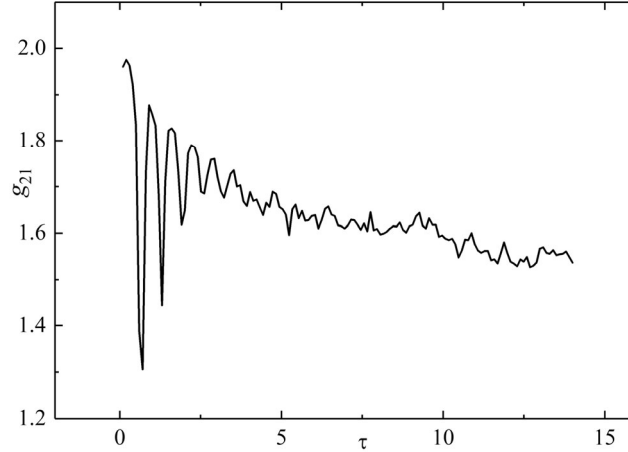


Рис.6. Динамика корреляционной функции флуктуаций числа фотонов мод g_{21} с частотами ω_2 и ω_1 для значения параметра системы $k = 10$.

с частотами ω_2 и ω_1 . В области больших времен взаимодействия в стационарном пределе значение корреляционной функции g_{21} приблизительно равно 1.6. Последнее показывает, что в этой области взаимодействия вышеуказанные моды локализуются в достаточно сильно запутанных состояниях. Число фотонов мод в этих состояниях приблизительно равно $n_2 = n_1 \approx 5$ [12]. Значение корреляционной функции в стационарном пределе меньше корреляционной функции тех же мод в случае сильной связи между модами ($g_{21} \approx 1.9$) и больше значения этой же функции в случае слабой связи между модами ($g_{21} \approx 1.5$). Вследствие этого моды с частотами ω_2 и ω_1 в случае сильной связи между модами в стационарном пределе взаимодействия локализуются в очень сильно запутанных состояниях, а в случае очень сильной или слабой связи стационарные состояния этих мод гораздо менее запутаны.

На рис.7 представлена динамика корреляционной функции флуктуаций

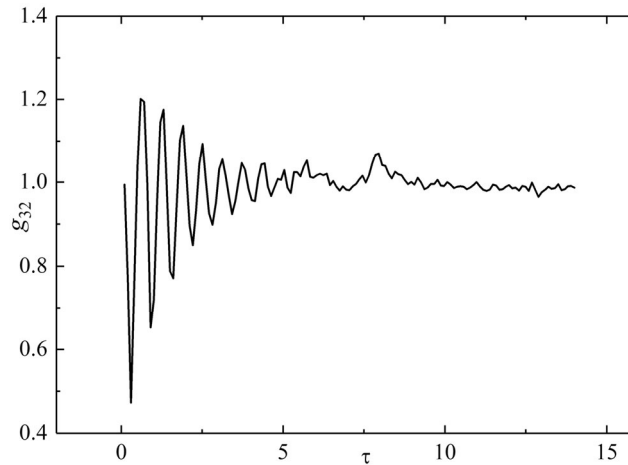


Рис.7. Динамика корреляционной функции флуктуаций числа фотонов мод g_{32} с частотами ω_3 и ω_2 для значения параметра системы $k = 10$.

числа фотонов мод g_{32} с частотами ω_3 и ω_2 . Функция вычислена для вышеуказанных значений параметров оптической системы. В этом случае в области больших времен взаимодействия в стационарном пределе корреляционная функция стремится к значению $g_{32} \approx 1$, которое показывает отсутствие корреляции между флуктуациями числа фотонов этих мод. Вследствие этого в стационарном пределе моды не локализуются в запутанных состояниях.

Корреляционная функция флуктуаций числа фотонов мод g_{32} с частотами ω_3 и ω_2 в стационарном пределе взаимодействия отлична от единицы лишь в случае сильной связи между взаимодействующими модами, вследствие чего в оптической системе стационарные запутанные состояния этих мод образуются лишь в этом случае.

6. Заключение

Для процесса невырожденного параметрического распада в оптическом резонаторе, в котором квант с энергией $\hbar\omega_3$ распадается на два кванта с энергиями $\hbar\omega_2$ и $\hbar\omega_1$, где $\hbar\omega_3 = \hbar\omega_2 + \hbar\omega_1$, исследована возможность образования запутанных состояний поля по переменным числа фотонов между взаимодействующими модами оптической системы. С этой целью методом Монте–Карло исследована динамика нормированных корреляционных функций флуктуаций числа фотонов взаимодействующих мод. Показано, что в стационарном пределе взаимодействия значение этих корреляционных функций сильно зависит от значения коэффициента связи между модами. Показано, что между модами с частотами ω_2 и ω_1 сильно запутанные состояния получаются в случае сильной связи между взаимодействующими модами (большие коэффициенты связи). В случае слабой или очень сильной связи (малые или очень большие коэффициенты связи, соответственно) между этими модами образуются относительно слабо запутанные состояния в сравнении с вышеупомянутым случаем. В случае слабой связи эти моды локализуются в запутанных вакуумных состояниях с малыми значениями квантовой энтропии. Для мод с частотами ω_3 и ω_1 запутанные состояния образуются лишь в случае сильной связи.

ЛИТЕРАТУРА

1. **S. Gevorgyan, M. Gevorgyan.** Quantum Phenomena in Simple Optical Systems. Cambridge Scholars Publishing, 2020.
2. **K. Molmer, Y. Gastin, J. Dalibard.** JOSA B, **10**, 1447 (1993).
3. **M.K. Olsen.** Phys. Rev. A, **96**, 063839 (2017).
4. **D.B. Kolker, N.Y. Kostyukova, A.A. Boyko, V.V. Badikov, D.V. Badikov, A.G. Shadrintseva, N.N. Tretyakova, K.G. Zenov, A.A. Karapuzikov, J.-J. Zondy.** J. Phys. Commun., **2**, 035039 (2018).
5. **M.K. Olsen.** Opt. Commun., **410**, 966 (2018).
6. **J. Li, M.K. Olsen.** Phys. Rev. A, **97**, 043856 (2018).
7. **J.U. Fürst, D.V. Strekalov, D. Elser, A. Aiello, U.L. Andersen, C. Marquardt,**

- G. Leuchs.** Phys. Rev. Lett., **106**, 113901 (2011).
8. **V. Peano, H.G.L. Schwefel, C. Marquardt, F. Marquardt.** Phys. Rev. Lett., **115**, 243603 (2015).
9. **U.L. Andersen, T. Gehring, C. Marquardt, G. Leuchs.** Phys. Scr., **91**, 053001 (2016).
10. **P.G. Kwiat, K. Mattle, H. Weinfurter, A. Zeilinger, A.V. Sergienko, Y. Shih.** Phys. Rev. Lett., **75**, 4337 (1995).
11. **P.G. Kwiat, E. Waks, A.G. White, I. Appelbaum, P.H. Eberhard.** Phys. Rev. A, **60**, R773 (1999).
12. **S.T. Gevorgyan, M.S. Gevorgyan.** J. Contemp. Phys., **57**, 420 (2022).

ԴԱՇՏԻ ԽՃՃՎԱԾ ՎԻՃԱԿՆԵՐԸ ՕՊՏԻԿԱԿԱՆ ՌԵԶՈՆԱՏՈՐՈՒՄ
ԶԱՅԼԱՍԵՐՎԱԾ ՊԱՐԱՄԵՏՐԻԿԱԿԱՆ ՏՐՈՂՄԱՆ ԵՐԵՎՈՒՅԹՈՒՄ

Ս. Թ. ԳԵՎՈՐԳՅԱՆ, Մ.Ս. ԳԵՎՈՐԳՅԱՆ

Օպտիկական ռեզոնատորում չայլասերված պարամետրիկական տրոհման երևույթի համար, որում $\hbar\omega_3$ էներգիայով քվանտը տրոհվում է $\hbar\omega_2$ և $\hbar\omega_1$ էներգիաներով երկու քվանտի, որտեղ $\hbar\omega_3 = \hbar\omega_2 + \hbar\omega_1$, հետազոտված է փոխազդող մոդերի միջև ֆոտոնների թվերի փոփոխականներով դաշտի խճճված վիճակների ստացման հնարավորությունը: Ցույց է տրված, որ ω_2 և ω_1 հաճախություններով մոդերի միջև դաշտի ուժեղ խճճված վիճակներ են առաջանում փոխազդող մոդերի միջև ուժեղ կապի պարագայում, իսկ թույլ, կամ էլ շատ անգամ ուժեղ կապի պարագայում նույն մոդերի միջև առաջանում են վերոհիշյալ դեպքից համեմատաբար թույլ խճճված վիճակներ: Թույլ կապի պարագայում այդ մոդերը լոկալացվում փոքր քվանտային էնտրոպիա ունեցող խճճված վակուումային վիճակներում: Իսկ ω_3 և ω_1 հաճախություններով մոդերի միջև խճճված վիճակներ են արաջանում միայն ուժեղ կապի պարագայում:

ENTANGLED FIELD STATES IN THE PROCESS OF NONDEGENERATE
PARAMETRIC DECAY IN AN OPTICAL CAVITY

S.T. GEVORGYAN, M.S. GEVORGYAN

For the process of non-degenerate parametric decay in an optical cavity, where a photon with energy $\hbar\omega_3$ decays into two photons with energies $\hbar\omega_2$ and $\hbar\omega_1$, where $\hbar\omega_3 = \hbar\omega_2 + \hbar\omega_1$, the possibility of formation of entangled field states in terms of photon number variables between interacting modes of the optical system is investigated. It is shown that strongly entangled states are obtained between the modes with frequencies ω_2 and ω_1 in the case of strong coupling between interacting modes. In the case of weak and very strong coupling between these modes, relatively weak entangled states are formed. In the case of weak coupling, these modes are localized in entangled vacuum states with low values of quantum entropy. For modes with frequencies ω_3 and ω_1 entangled states are formed only in the case of strong coupling.

ЭКВИЭЛЛИПТИЧЕСКИЕ СОСТОЯНИЯ ПОЛЯРИЗАЦИИ СВЕТА В ТВИСТ-ОРИЕНТИРОВАННОМ НЕМАТИЧЕСКОМ ЖИДКОМ КРИСТАЛЛЕ

Л.С. АСЛАНЯН*, А.Э. АЙВАЗЯН

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

*e-mail: leon@ysu.am

(Поступила в редакцию 7 сентября 2022 г.)

На сфере Пуанкаре выполнен систематический анализ пространственной динамики состояния эллиптически поляризованного света в среде с локальной неоднородностью оптической оси. В качестве такой среды рассматривался нематический жидкий кристалл с твист-ориентацией. Показано существование двух специальных типов эллиптически поляризованных волн, которые распространяются в такой среде с постоянным значением эллиптичности, а азимутальный угол отслеживает поворот оптической оси. Выявлены основные особенности зависимости от толщины образца. Для анализа использовано аналитическое решение системы связанных уравнений относительно декартовых компонент электрической составляющей световой волны, полученное путем перехода во вращающуюся систему координат.

1. Введение

Явление оптической активности было открыто Араго в 1811 году [1], а спустя 100 лет Моген обнаружил, что жидкокристаллическая (ЖК) среда обладает очень большим оптическим вращением, обычно порядка нескольких тысяч градусов на миллиметр [2,3]. Однако, это явление все еще является объектом многочисленных исследований. Примером служит работа [4], где рассмотрены особенности оптической активности в различных средах (фотонные кристаллы, метаматериалы, жидкие кристаллы), обсуждается связь оптической активности со структурой кристалла, а также приведены примеры проявления оптической активности в рентгеновской области спектра. Мотивацией таких исследований, как показывают недавние работы [5–7] является широкое применение этого явления в оптоэлектронике и фотонике.

Анизотропные среды с регулируемой неоднородностью (с помощью внешних полей различной природы) способны управляемо изменять поляризацию световых полей. В первую очередь это разного рода ахроматические волновые пластины (модуляторы, компенсаторы, полу- и четвертьволновые пластины и т.д), которые используются для управления состоянием поляризации излучения [8,9], а в [10] рассмотрены поляризаторы и фазовые пластины на основе

полимерно-диспергированных ЖК, в которых управление осуществлялось с помощью создания регулируемых микроструктур.

Очевидно, создание управляющих элементов требует подробного анализа задач распространения излучения в средах с различными оптическими характеристиками. Эта задача всегда представляла большой интерес в различных областях физики [11,12]. Одним из широко применяемых методов анализа распространения поляризованной волны в средах с пространственной неоднородностью анизотропии является метод связанных волн, рассмотренный в [13]. Этот метод успешно применялся для анализа распространения поляризованного излучения и в неоднородно-анизотропных средах, и в неоднородно-намагниченной плазме с диссипацией [14–18].

В работе [19] с помощью метода связанных волн анализировалось распространение линейно-поляризованной волны через слой твист-ориентированного нематического жидкого кристалла (НЖК). Были получены основные уравнения и найдено аналитическое решение, что позволило детально анализировать явление адиабатического отслеживания [3,20].

Целью настоящей работы является теоретическое рассмотрение пространственной эволюции эллиптически-поляризованного света в анизотропной среде с кручением локальной оптической оси. Основой анализа является система уравнений связанных волн, полученных в приближении геометрической оптики, и их решение посредством перехода во вращающуюся систему координат.

2. Система укороченных уравнений и методика решения

Кратко обсудим вопрос получения системы связанных уравнений и методики их решения. Более подробное описание можно найти в работе [19].

Пусть, в общем случае, эллиптически-поляризованная плоская монохроматическая волна распространяется в оптически неоднородной анизотропной среде с локальным поворотом оптической оси. В качестве такой среды далее рассматривается твист-ориентированный НЖК. Лабораторную систему координат выберем так, чтобы ось z совпадала с направлением распространения волны, а x, y – сонаправлены главным осям одноосной анизотропной среды на входе. При такой ориентации координатных осей диэлектрическую проницаемость среды можно представить в виде [3]

$$\varepsilon_{ij}(z) = \varepsilon_{\perp} \delta_{ij} + \varepsilon_a m_i(z) m_j(z). \quad (1)$$

Здесь $\mathbf{m}(z)$ – единичный вектор, описывающий локальную ориентацию оптической оси (в ЖК его принято называть директором), δ_{ij} – символ Кронекера, $\varepsilon_a = \varepsilon_e - \varepsilon_o$ – анизотропия, а $\varepsilon_e, \varepsilon_o$ – главные значения диэлектрической проницаемости ЖК среды. Заметим, здесь принято, что в рассматриваемой задаче по x, y координатам среда однородна, т.е. $\partial/\partial x = \partial/\partial y = 0$. Для удобства диэлектрическую проницаемость можно преобразовать к виду

$$\hat{\varepsilon}(z) = \frac{\varepsilon_e + \varepsilon_o}{2} \hat{\sigma}_0 + \frac{\varepsilon_a}{2} \cos 2\psi(z) \hat{\sigma}_1 + \frac{\varepsilon_a}{2} \sin 2\psi(z) \hat{\sigma}_2. \quad (2)$$

Здесь $\psi(z)$ – азимутальный угол между директором ЖК и координатной осью x ,

а $\hat{\sigma}_i$ – матрицы Паули [21]

$$\hat{\sigma}_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Во многих работах (см., например, работы [14,15,22] и ссылки в них) было показано, что волновое уравнение для двумерного вектора Джонса

$$\mathbf{E} = \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix},$$

описывающего эволюцию состояния поляризации световой волны в случае нормального падения световой волны на среду, можно свести к виду

$$\frac{d^2 \mathbf{E}(z)}{dz^2} + \frac{\omega^2}{c^2} \hat{\varepsilon}(z) \mathbf{E}(z) = 0, \quad (4)$$

где $\hat{\varepsilon}(z)$ – тензор диэлектрической проницаемости (2) для ЖК.

В рассматриваемых далее толщинах ЖК слоя неоднородность анизотропии на длине волны мала и вполне оправдано применение метода геометрической оптики [23]. Действительно, геометрооптическое приближение применимо, если $\lambda d\varepsilon/dz \ll \varepsilon$. Нетрудно проверить, например, для НЖК МВВА ($\varepsilon_e = 3,22$; $\varepsilon_0 = 2.43$), что это условие удовлетворяется в случае $L \gg 0.4$ мкм, где L – толщина слоя ЖК. Обычно это условие выполняется всегда. С учетом сказанного решение уравнения (4) ищется в виде

$$E_i(z) = F_i(z) e^{i\Phi(z)}, \quad (5)$$

где $\mathbf{F}(z)$ – медленно меняющаяся комплексная амплитуда, а фазовый множитель $\Phi(z)$ в условиях данной задачи составляет

$$\Phi(z) = \frac{\omega}{c} \int n(z) dz, \quad (6)$$

где

$$n(z) = \sqrt{\frac{\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}}{2}}. \quad (6a)$$

Такая подстановка позволяет при распространении света в среде разделить относительно медленные и быстрые изменения параметров волны, связанные с неоднородностью среды. Учитывая медленность изменения $\mathbf{F}(z)$ (то есть пренебрегая малыми величинами $\mathbf{F}''(z)$), из выражений (4) и (5) получим векторное уравнение

$$\frac{d\mathbf{J}(z)}{dz} = i\hat{H}(z) \mathbf{J}(z). \quad (7)$$

Здесь введены следующие обозначения

$$\mathbf{J}(z) = \mathbf{F}(z) \sqrt{\Phi'(z)}, \quad (7a)$$

$$\hat{H}(z) = \frac{\omega}{c} \left\{ \frac{\hat{\varepsilon}(z)}{2n(z)} - \frac{1}{2} n(z) \hat{1} \right\}. \quad (7b)$$

Это – окончательная система уравнений, которая описывает пространственную эволюцию поляризации света в среде. С формальной точки зрения уравнение (7) аналогично уравнению Шредингера в квантовой механике. В случае такой интерпретации матрица $\hat{H}(z)$, фактически, есть аналог гамильтониана, которая характеризует свойства среды (в том числе и при наличии внешних однородных и неоднородных полей) (см. работу [22] и ссылки в ней), а собственные поляризации среды выступают в роли двух энергетических уровней. Следует

отметить, что существование такой аналогии позволяет развитые здесь методы аналитического решения применить и при исследовании других (не только оптических) задач.

Рассмотрим среду, в которой имеется неоднородность оптической анизотропии. Учитывая (2), после несложных преобразований (7b) можно представить в более удобной форме

$$\hat{H}(z) = \frac{\omega}{2cn(z)} \left\{ \frac{\varepsilon_{xx}(z) - \varepsilon_{yy}(z)}{2} \hat{\sigma}_1 + \varepsilon_{xy}(z) \hat{\sigma}_2 \right\}, \quad (8)$$

или с помощью (2) окончательно имеем

$$\hat{H}(z) = \frac{\omega}{2cn(z)} \left\{ \frac{\varepsilon_a}{2} \cos 2\psi \hat{\sigma}_1 + \frac{\varepsilon_a}{2} \sin 2\psi \hat{\sigma}_2 \right\}. \quad (8a)$$

Однако аналитическое решение даже такой упрощенной системы уравнений (7) с (8a) не всегда удастся найти. Как было показано в ряде работ (см., например, работу [19] и ссылки в ней), в случае линейного закона изменения азимутального угла директора решение этой системы можно найти путем перехода во вращающуюся систему координат. Перейдем во вращающуюся систему координат посредством замены

$$\mathbf{J}(z) = \hat{R}^{-1} \mathbf{A}(z), \quad \hat{H}(z) = \hat{R}^{-1} \hat{H}_0 \hat{R}, \quad (9)$$

где $\mathbf{A} = (A_\xi, A_\eta)^T$ – вектор Джонса во вращающейся системе координат, а $\hat{R}(\psi)$ – матрица поворота координатных осей:

$$\hat{R}(\psi) = \begin{pmatrix} \cos \psi(z) & \sin \psi(z) \\ -\sin \psi(z) & \cos \psi(z) \end{pmatrix}.$$

Здесь $\hat{H}_0$ – «гамильтониан» неоднородно-анизотропной среды в локальной системе координат. Окончательно получим систему связанных уравнений относительно $\mathbf{A}(z)$

$$\frac{d\mathbf{A}(z)}{dz} - i\omega_a \hat{\sigma}_1 \mathbf{A}(z) = i\psi' \hat{\sigma}_3 \mathbf{A}(z). \quad (10)$$

Здесь введено обозначение $\omega_a = \pi \varepsilon_a / 2\lambda n_0$. В случае $\psi(z) = \alpha z$ это – система уравнений с постоянными коэффициентами, решение которой нетрудно найти [24]. Решим эту систему уравнений с граничными условиями

$$E_x(0) = \frac{1}{\sqrt{\Phi'(0)}} J_x(0) = A_0 = \cos \beta; \quad E_y(0) = \frac{1}{\sqrt{\Phi'(0)}} J_y(0) = B_0 = \sin \beta e^{i\delta}.$$

Здесь β – угол между осью x и большой осью эллипса поляризации входящей волны, а δ определяет начальное смещение фазы между $E_x(z=0)$ и $E_y(z=0)$. Осуществив обратный переход в лабораторную систему координат, окончательно получим:

$$\begin{aligned} E_i(z) &= \frac{i}{2\Omega} [A_i(z) e^{-i\Omega z} + B_i(z) e^{i\Omega z}] e^{i\frac{2\pi}{\lambda} n_0 z}, \\ A_x(z) &= \left(B_0 - i \frac{\alpha}{\omega_a + \Omega} A_0 \right) [\alpha \cos \psi(z) + i(\omega_a + \Omega) \sin \psi(z)], \\ B_x(z) &= [-i(\omega_a + \Omega) A_0 - \alpha B_0] \left[\cos \psi(z) - i \frac{\alpha}{\omega_a + \Omega} \sin \psi(z) \right], \\ A_y(z) &= \left(B_0 - i \frac{\alpha}{\omega_a + \Omega} A_0 \right) [\alpha \sin \psi(z) - i(\omega_a + \Omega) \cos \psi(z)], \\ B_y(z) &= [-i(\omega_a + \Omega) A_0 - \alpha B_0] \left[\sin \psi(z) + i \frac{\alpha}{\omega_a + \Omega} \cos \psi(z) \right]. \end{aligned} \quad (11)$$

Для сокращения записи введено обозначение $\Omega^2 = \omega_a^2 + \alpha^2$. Эта величина практически является пространственным аналогом ларморовой частоты. Полученные аналитические выражения (11) позволяют полностью количественно объяснить поведение поляризованного (как линейного, так и эллиптического) света в анизотропных средах с поворотом локальной оптической оси. Нетрудно проверить, что они в пределе $\alpha \rightarrow 0$ переходят в хорошо известные выражения [15,16].

3. Обсуждение результатов

Для наглядного представления результатов последующий анализ проведем на сфере Пуанкаре, построенной с помощью найденного решения (11). Об удобстве и наглядности применения вектор-параметра Стокса упоминалось во многих работах (например, [20,25]) и применительно к жидким кристаллам [14,21,26]. В связи с этим определим также параметры Стокса с помощью соотношений [14,19]

$$\mathbf{S}(z) = \mathbf{E}^+(z)\hat{\sigma}\mathbf{E}(z),$$

где $\mathbf{E}(z)$ определяется выражениями (11), а «+» означает эрмитовое сопряжение.

3.1. Линейно-поляризованная входящая волна

Для целостности работы обсудим прежде прохождение линейно-поляризованной волны через слой НЖК с твист-ориентацией (более подробно см. в [19]). Как известно, в такой среде наблюдается явление адиабатического отслеживания [3], т. е., если падающая волна на входе в среду линейно-поляризована вдоль одной из нормальных волн, то вектор поляризации световой волны отслеживает вращение главных осей, при условии, что коэффициент кручения мал. Однако подробный анализ показывает, что эволюция поляризации внутри образца носит более сложный характер. В частности, в работе [27] качественно обсуждается поведение состояния поляризации внутри среды и указывается, что при входе в среду волна превращается в эллиптически-поляризованную, параметры которой плавно меняются при распространении, а на выходе превращается в линейно-поляризованную с повернутым азимутом, если толщина слоя удовлетворяет определенным условиям. Однако такая качественная картина не полностью отражает истинную картину эволюции состояния поляризации света в НЖК с твист ориентацией. Кроме того, остается открытым также вопрос роли толщины образца. Полученное в предыдущем пункте решение (11) позволяет полностью анализировать эту задачу. В качестве примера рассмотрим НЖК МБА, параметры которого хорошо известны [19]. Пусть волна на входе поляризована линейно вдоль оси x (в случае нормированной интенсивности $A_0 = 1; B_0 = 0$). На рис.1 представлена эволюция состояния поляризации света при трех разных значениях толщины. Видно, что в слое твист-ориентированного НЖК эволюция поляризации существенно зависит от толщины образца. При малой толщине (~ 2 мкм) это достаточно плавный переход через промежуточные эллиптически поляризованные состояния. Нетрудно оценить и минимальную толщину ЖК слоя для получения

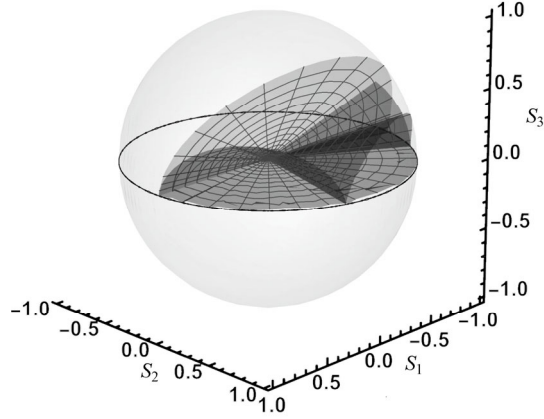


Рис.1. Эволюция поляризации в твист-ориентированном НЖК в случае, когда волна на входе линейно-поляризована. Значения параметров следующие: $\epsilon_e = 3.22$; $\epsilon_0 = 2.43$, $\lambda = 0.5$ мкм, толщина слоя составляет 2, 5 и 100 мкм.

чистой линейно-поляризованной волны. Действительно, при $\psi(L) = \pi/2$, $A_0 = 1, B_0 = 0$ из (11) получим

$$E_x(L) = \frac{\alpha}{\Omega} \sin(\Omega L) \exp \left\{ i \frac{2\pi}{\lambda} n_0 L \right\}. \quad (11a)$$

Минимальная толщина, при которой эта составляющая становится равной нулю, определяется из условия $\Omega L = \pi$. Учитывая определения Ω и α , получим

$$L = \frac{\sqrt{3}\lambda n_0}{\epsilon_a}. \quad (11b)$$

В случае ЖК МВВА эта величина составляет $L \sim 2$ мкм, что хорошо согласуется с результатом, полученным с помощью аналитического решения (11), (см. рис.1). Подчеркнем еще некоторые основные закономерности: при больших толщинах такой переход носит осцилляционный характер; при увеличении толщины число осцилляций увеличивается; при увеличении толщины амплитуда осцилляций, т.е. величина эллиптичности уменьшается; в пределе эллиптичность стремится к нулю и вектор Стокса вращается в экваториальной плоскости. Это означает, что линейно-поляризованная входящая волна отслеживает вращение оптической оси, оставаясь линейно-поляризованной.

3.2. Эллиптически-поляризованная входная волна

Пусть теперь через слой НЖК с твист-ориентацией распространяется эллиптически поляризованная световая волна.

Нетрудно заметить, что при толщине образцов, которая определяется условием (11b)

$$\frac{E_y(L)}{E_x(L)} = \frac{A_y(L) + B_y(L)}{A_x(L) + B_x(L)} = -\frac{B_0}{A_0}. \quad (12)$$

Пространственная эволюция поляризации в этом случае показана на рис.2а. Из рис.2а и соотношения (12) можно сделать следующие выводы: 1) в случае круговой поляризации выходящая волна имеет ту же поляризацию, что и входящая, несмотря на сложную пространственную динамику внутри среды; 2) максимальное значение эллиптичности внутри среды зависит от угла β между осью x

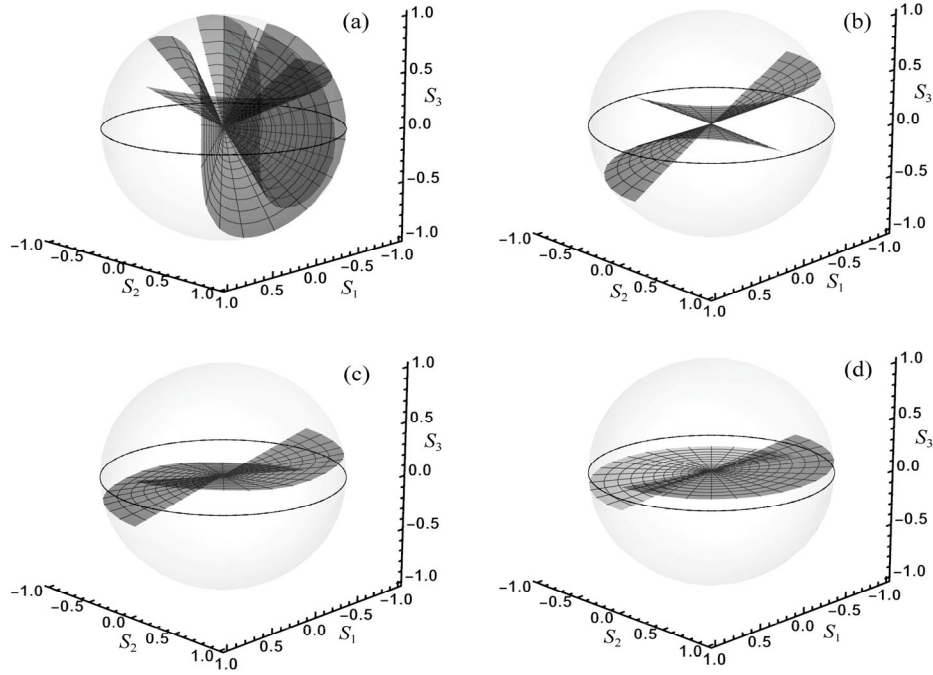


Рис.2. Эволюция поляризации в твист-ориентированном НЖК, в случае, когда волна на входе поляризована эллиптически. Значения параметров следующие: $\epsilon_e = 3.22$; $\epsilon_0 = 2.43$, $\lambda = 0.5$ мкм. (а) Толщина слоя составляет 2 мкм, $\delta = \pi/2$, $\beta = \pi/8$; 2. $\beta = \pi/4$; 3. $\beta = \pi/3$ (по возрастанию максимального значения эллиптичности). Эквиэллиптические состояния (толщина слоя составляет 2 мкм (b); 5 мкм (c); 10 мкм (d)).

и большой осью эллипса поляризации входящей волны; 3) в случае эллиптической поляризации величина эллиптичности на выходе сохраняется, а азимутальный угол на выходе повернут. Однако опять же следует подчеркнуть, что внутри среды пространственная динамика имеет сложную природу, как и в случае круговой поляризации.

Из полученных аналитических выражений (11) можно сделать важный вывод о существовании двух специальных типов волн с эллиптической поляризацией.

Первый тип. Пусть входящая волна эллиптически поляризована так, что A_0, B_0 связаны соотношением

$$B_0 - i \frac{\alpha}{\omega_a + \Omega} A_0 = 0.$$

Учитывая нормировку $|A_0|^2 + |B_0|^2 = 1$, нетрудно найти, что тогда

$$A_0 = \left\{ 1 + \left(\frac{\alpha}{\omega_a + \Omega} \right)^2 \right\}^{-1/2}.$$

При таком выборе параметров эллиптической поляризации входящей волны из выражений (11) получим

$$E_i(z) = \frac{i}{2\Omega} B_1(z) e^{iz} \exp \left[i \left(\Omega + \frac{2\pi}{\lambda} n_0 \right) z \right], i = x, y, \quad (13)$$

где

$$B_x(z) = [-i(\omega_a + \Omega)A_0 - \alpha B_0] \left[\cos\psi(z) - i \frac{\alpha}{\omega_a + \Omega} \sin\psi(z) \right],$$

$$B_y(z) = [-i(\omega_a + \Omega)A_0 - \alpha B_0] \left[\sin\psi(z) + i \frac{\alpha}{\omega_a + \Omega} \cos\psi(z) \right].$$

Второй тип. Аналогично получим второй специальный тип эллиптически-поляризованной волны $i(\omega_a + \Omega)A_0 + \alpha B_0 = 0$, а из условия $|A_0|^2 + |B_0|^2 = 1$

$$B_0 = \left\{ 1 + \left(\frac{\alpha}{\omega_a + \Omega} \right)^2 \right\}^{-1/2}.$$

Соответственно имеем

$$\begin{aligned} E_i(z) &= \frac{i}{2\Omega} A_i(z) \exp \left[i \left(-\Omega + \frac{2\pi}{\lambda} n_0 \right) z \right], i = x, y, \\ A_x(z) &= \left(B_0 - i \frac{\alpha}{\omega_a + \Omega} A_0 \right) [\alpha \cos\psi(z) + i(\omega_a + \Omega) \sin\psi(z)], \\ A_y(z) &= \left(B_0 - i \frac{\alpha}{\omega_a + \Omega} A_0 \right) [\alpha \sin\psi(z) - i(\omega_a + \Omega) \cos\psi(z)]. \end{aligned} \quad (14)$$

На рис.2b,c,d представлена пространственная динамика поляризации этих специальных волн в твист-ориентированном НЖК при трех разных толщинах. Перечислим некоторые особенности этих волн: вектор Стокса такой волны движется по изоэллиптической траектории, то есть эллиптичность световой волны внутри среды сохраняется, тогда как азимутальный угол следует за вращением оптической оси (адиабатическое отслеживание эллиптически поляризованной волны); при увеличении толщины уменьшается величина эллиптичности входящей волны.

Необходимо сделать следующее замечание. В ранних работах для решения аналогичной задачи применялось приближение стратифицированной среды [3,20,27]. Анализ показывает, что такая методика также позволяет сделать аналогичные выводы, которые представлены на рис.1 и рис.2a (см. например, [28]). В работе [29] по этой методике рассмотрены собственные поляризационные состояния для твист-ориентированного НЖК, и показано, что существуют два типа эллиптически-поляризованных волн, которые после прохождения слоя НЖК сохраняют свою эллиптичность, однако азимутальный угол меняет направление. Приведенный здесь анализ позволяет более систематично анализировать пространственную динамику и полностью выявить все характерные особенности пространственной динамики эллиптически-поляризованного света в твист-ориентированном НЖК (см. обсуждение рис.2). В частности, из рис.2a видно, что любая эллиптически-поляризованная волна на выходе сохраняет величину эллиптичности (при соответствующем выборе толщины образца), а азимутальный угол меняется. Однако внутри среды поведение эллиптичности и азимута носит комплексный характер. И только эллиптически-поляризованные волны (13) и (14) при распространении сохраняют значение эллиптичности по всей толщине образца, а азимутальный угол адиабатически отслеживает вращение оптической оси (см. рис.2b,c,d).

4. Заключение

Таким образом, обобщая проведенный анализ можно сказать, что полученные в настоящей работе выражения позволяют не только полностью – качественно и количественно, объяснить пространственную эволюцию состояния поляризации света в анизотропных средах с локальным кручением оптической оси (в частности, в твист-ориентированном НЖК), но и предсказать существование двух специально-поляризованных волн, которые сохраняют значение эллиптичности, а азимутальный угол отслеживает вращение оптической оси. Именно в связи с этим целесообразно их назвать эквиэллиптическими (или изоэллиптическими) состояниями.

ЛИТЕРАТУРА

1. **F. Arago.** *Sciences Mathematiques et Physiques*, **1**, 115 (1811).
2. **C. Mauguin.** *Bull. Soc. Fr. Miner. Crystallogr*, **34**, 71 (1911).
3. **S. Chandrasekhar.** *Liquid Crystals*. Second ed., Cambridge University Press, 1992.
4. **T.G. Golovina, A.F. Konstantinova, V.I. Timofeev.** *Crystallography Reports*, **65**, 653 (2020).
5. **M. Al-Mahmoud, V. Coda, A. Rangelov, G. Montemezzani.** *Phys. Rev. Appl.*, **13**, 014048, (2020).
6. **E. Stoyanova, S. Ivanov, A. Rangelov.** *Appl. Opt.*, **59**, 10224 (2020).
7. **E. Stoyanova, M. Al-Mahmoud, H. Hristova, A. Rangelov, E. Dimova, N.V. Vitanov.** *J. Opt.*, **21**, 105403, (2019).
8. **C.-F. Hsieh, C.-S. Yang, F.-C. Shih, R.-P. Pan, C.-L. Pan.** *Optics Express*, **27**, 9933 (2019).
9. **X. Zhang, F. Fan, C.-Y. Zhang, Y.-Y. Ji, X.-H. Wang, S.-J. Chang.** *Optical Materials Express*, **10**, 282 (2020).
10. **S.-T. Xu, F. Fan, S. Chen, Y. Xing, Y. Gao, H. Li, G. Niu, Sh.-J. Chang.** *Optical Materials Express*, **11**, 171 (2021).
11. **M. Chekhova, P. Banzer.** *Polarization of Light in Classical, Quantum, and Nonlinear Optics*. Walter de Gruyter GmbH, Berlin–Boston, 2021.
12. **B.A. Saleh, M.C. Teich.** *Fundamentals of Photonics*. John Wiley & Sons, 2019.
13. **K.G. Budden.** *Phyl. Trans. Roy. Soc. Lond.*, **290**, 405 (1979).
14. **H. Kubo, R. Nagata.** *JOSA*, **73**, 1719 (1983).
15. **E. Santamato, Y.R. Shen.** *JOSA A*, **4**, 356 (1987).
16. **S. Segre.** *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **36**, 2806 (2003).
17. **S. Segre.** *JOSA A*, **17**, 95 (2000).
18. **H. Kuratsuji, Sh. Kakigi.** *Phys. Rev. Lett.*, **80**, 1888 (1998).
19. **A.L. Aslanyan, L.S. Aslanyan, Yu.S. Chilingaryan.** *Optics and Spectroscopy*, **116**, 483 (2014).
20. **A. Yariv, P. Yeh.** *Optical Waves in Crystals: Propagation and Control of Laser Radiation*. Wiley & Sons, 1984.
21. **F. Simoni.** *NLO Properties of LC and PDLC*. Singapore: World Scientific, 1997.
22. **A.L. Aslanyan, L.S. Aslanyan, S.K. Nazaryan.** *J. Contemp. Phys.*, **47**, 23 (2012).

23. **M.I. Rabinovich, D.I. Trubetskov.** Introduction to Vibration and Wave Theory. Moscow, Hayka, 1984 [in Russian].
24. **A.A. Andronov, A.A. Vit, S.V. Khaikin.** Theory of Oscillators. Moscow: Hayka, 1981.
25. **G.W. Rosenberg.** UFN, **56**, 77 (1955).
26. **J.E. Bigelow, R.A. Kashnow.** Applied Optics, **16**, 8 (1977).
27. **P. Yeh, C. Gu.** Optics of Liquid Crystal Displays. John Wiley & Sons, 1999.
28. **A.L. Aslanyan, L.S. Aslanyan, Yu.S. Chilingaryan.** Optics and Spectroscopy, **119**, 869 (2015).
29. **J.A. Davis, I. Moreno, P. Tsai.** Applied Optics, **37**, 937 (1998).

ԼՈՒՅՍԻ ԲԵՎԵՌԱՑՄԱՆ ՀԱՎԱՍԱՐԱԷԼԻՊՏԱԿԱՆ ՎԻՃԱԿՆԵՐԸ ԹՎԻՍ
ԿՈՂՄՆՈՐՈՇՄԱՄԲ ՆԵՄԱՏԻԿ ՀԵՂՈՒԿ ԲՅՈՒՐԵՂՈՒՄ

Լ. ԱՍԼԱՆՅԱՆ, Ա. ԱՅՎԱԶՅԱՆ

Պուանկարեի սֆերայի օգնությամբ վերլուծվել է էլիպտական բևեռացված լույսի տարածական դինամիկան օպտիկական առանցքի լոկալ անհամասեռությամբ միջավայրում: Որպես օրինակ դիտարկվել է թվիստ կողմնորոշմամբ նե-մա-տիկ հեղուկ բյուրեղը: Ցույց է տրվել էլիպտական բևեռացմամբ լույսի երկու հա-տուկ տեսակների գոյությունը, որոնք նման միջավայրում տարածվում են էլիպ-տականության հաստատուն մեծությամբ, իսկ ազիմուտային անկյունը հե-տևում է օպտիկական առանցքի պտույտին: Բացահայտվել է նմուշի հաստու-թյուն-նից ունեցած կախվածության օրինաչափությունները: Վերլուծության հա-մար օգտագործվել է լուսային ալիքի էլեկտրական բաղադրիչների համար կապված հավասարումների համակարգի անալիտիկ լուծումը՝ ստացված պտտ-վող կոորդինատական համակարգին անցման մեթոդով:

EQUIELLIPTICAL STATE OF LIGHT POLARIZATION
IN TWIST ORIENTED NEMATIC LIQUID CRYSTAL

L. ASLANYAN, A. AYVAZIAN

A systematic analysis of the spatial dynamics of the elliptically polarized light in a medium with local inhomogeneity of the optical axis has been carried out on the Poincare sphere. We consider the twist oriented nematic liquid crystal as a sample of such medium. Two special types of elliptically polarized waves, propagating in this media with a constant ellipticity value, have been shown, with the azimuthal angle following the rotation of the optical axis. The main characteristics of the dependence on the sample thickness are proved. For the analysis we used the analytical solution of the system of coupled equations related to the Cartesian components of the electric component of the light wave received by transition to the rotating coordinate system.

ИССЛЕДОВАНИЕ СЕНСОРА МСУНТ/SnO₂ ДЛЯ ОБНАРУЖЕНИЯ ПАРОВ АЦЕТОНА

М.С. АЛЕКСАНИЯН, Г.А. ШАХАТУНИ*, Э.А. ХАЧАТУРЯН,
Г.Э. ШАХНАЗАРЯН, А.Г. САЮНЦ, А.Р. ОГАНЕСЯН, Д.А. КАНАНОВ

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

*e-mail: gevshahkhatuni@ysu.am

(Поступила в редакцию 26 декабря 2022 г.)

Изготовлен сенсор для обнаружения паров ацетона на основе полученного методом гидротермального синтеза нанокompозитного материала многослойные углеродные нанотрубки/оксид олова (МСУНТ/SnO₂). Исследовалась чувствительность сенсора МСУНТ/SnO₂ к воздействию паров ацетона в области рабочих температур от комнатной до 300°C. Газочувствительные характеристики сенсора МСУНТ/SnO₂ были исследованы при наличии разных концентраций (от 400 ppb до 20 ppm) паров ацетона в воздухе при рабочей температуре 250°C. При этой же температуре исследованы импедансные характеристики сенсора МСУНТ/SnO₂ как до, так и после воздействия паров ацетона. Предложена эквивалентная электрическая цепь для исследуемой сенсорной структуры. Представленные результаты свидетельствуют о том, что структура МСУНТ/SnO₂ может быть использована как сенсор для обнаружения очень низких концентраций ацетона.

1. Введение

Ацетон – органическое вещество с химической формулой CH₃–C(O)–CH₃. Это бесцветная летучая жидкость с характерным запахом, неограниченно смешивающаяся с водой и другими растворителями. Благодаря низкой токсичности ацетон широко применяется в производстве лаков, взрывчатых веществ и лекарственных средств. Он также является исходным сырьем в многочисленных химических синтезах, широко используется в лакокрасочной и текстильной промышленности. Следует отметить, что ежегодно в мире производится около 7 млн тонн ацетона и эта цифра постоянно увеличивается [1,2].

Ацетон является легко воспламеняющимся веществом, температура самовоспламенения которого равняется +465°C. Взрывоопасными считаются воздушные смеси, содержащие от 2.5% до 12.8% (по объему) ацетона [3]. Кроме того, ацетон токсичен и довольно опасен для здоровья человека. В концентрациях выше допустимых он может быть даже канцерогенным. Поэтому исследование возможности обнаружения паров ацетона в окружающем воздухе является одной из важных задач для обеспечения безопасности и здравоохранения человека. Отметим также, что мониторинг концентрации ацетона в выдыхаемом человеком

воздухе может позволить диагностировать наличие в организме некоторых заболеваний, таких как, например, сахарный диабет [4,5].

В последнее десятилетие для контроля качества пищевых продуктов предложен ряд методов, наиболее предпочтительным из которых является использование электронного носа. Эта мультисенсорная структура способна довольно быстро и точно определять качество и свежесть продуктов питания, основываясь на измерении концентраций различных газов и паров, выделяемых продуктами. В частности, одним из веществ, которые выделяются, например, в мясных продуктах, являются пары ацетона. С этой точки зрения разработка и изготовление сенсоров, позволяющих обнаруживать малые концентрации паров ацетона, также является весьма актуальной задачей [6–9].

Для создания сенсоров, способных обнаруживать пары ацетона, в основном были использованы ZnO , SnO_2 и ряд других металлоксидных структур. Существующие на сегодня сенсоры паров ацетона проявляют достаточную чувствительность при относительно высоких рабочих температурах (выше 200°C) и имеют довольно высокий порог чувствительности. Сенсоры с наиболее оптимизированными характеристиками газочувствительности были получены при использовании композитных материалов. В частности, к увеличению чувствительности и быстродействия сенсора приводит композитное сочетание металлоксидов и углеродных нанотрубок [10–16]. Применение углеродных нанотрубок, обладающих необходимыми физико-химическими свойствами и высокой механической стабильностью, позволяет обеспечить достаточной проводимостью металлоксид и резко увеличить эффективную рабочую поверхность сенсора. Наличие наноканалов для газовой диффузии в виде полых углеродных трубок также способствует повышению чувствительности нанокompозитного материала. Кроме того, известно, что на границе между углеродными трубками и оксидом олова образуется p – n переход, способствующий улучшению газочувствительных характеристик сенсора [17–21].

Целью настоящей работы было изготовление лабораторного образца сенсора для обнаружения паров ацетона на основе нанокompозитной структуры MCyHT/SnO_2 (массовое соотношение 1:600), модифицированной рутением, и исследование его характеристик под воздействием разных концентраций паров ацетона и при разных рабочих температурах.

2. Методика эксперимента

2.1. Технология изготовления сенсора на основе MCyHT/SnO_2

Нанокompозитный состав MCyHT/SnO_2 был получен с использованием гидротермального синтеза. Вначале очищенные многостенные углеродные нанотрубки (MCyHT) диспергировались в дистиллированной воде в результате ультразвуковой обработки. На рис. 1 представлено полученное с помощью сканирующего электронного микроскопа SEM-изображение MCyHT. Далее к рассчитанному количеству водного раствора $\text{SnCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ добавлялось определенное количество соляной кислоты. Затем диспергированные MCyHT и раствор $\text{SnCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ смешивались и подвергались повторной обработке ультразвуком в течение 30 минут.

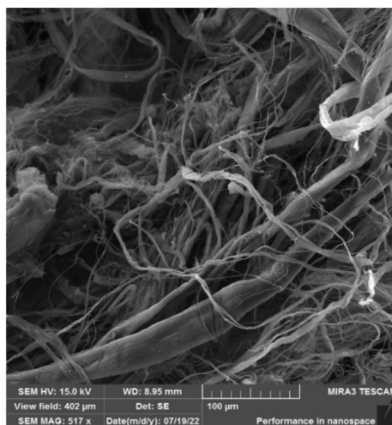


Рис.1. SEM-изображение МСУНТ.

Гидротермальный синтез нанокompозита проводился в автоклаве, куда после ультразвуковой обработки сливался раствор, при температуре 150°C в течение суток. Полученный в результате нанокompозитный порошок фильтровался и сушился при 90°C в течение 5 часов. Массовое соотношение компонентов нанокompозита МСУНТ/ SnO_2 составляло 1:600.

Полученный таким образом нанокompозит имеет аморфную структуру. Для его кристаллизации и стабилизации электрических параметров синтезированный состав отжигался в печи при 450°C в течение 5 часов. После измельчения в агатовой ступке полученный состав был использован при изготовлении пасты для нанесения толстой пленки, в качестве связующего при этом был применен раствор аммония.

В качестве подложек для нанесения пасты МСУНТ/ SnO_2 использовалась мультисенсорная платформа (TESLA BLATNA, Чехия), на которой созданы платиновые гребенчатые электроды, нагреватель и датчик температуры (Pt 1000). После нанесения поверх платиновых электродов пасты МСУНТ/ SnO_2 образцы сушились при 80°C в течение 30 минут и отжигались при температуре 340°C (со скоростью повышения температуры $1^{\circ}\text{C}/\text{мин}$) в течение 3 часов.

Улучшению чувствительности и повышению быстродействия сенсора, а также его лучшему восстановлению способствует поверхностная модификация гибридных нанокompозитов благородным металлом рутением, так как он является катализатором происходящих на поверхности пленки химических реакций. Поэтому после отжига и охлаждения до комнатной температуры образцы МСУНТ/ SnO_2 рутенировались погружением в 0.01 M Ru(OH)Cl_3 водный раствор в течение 5 минут. Затем проводилась сушка образцов при 80°C в течение 30 минут и их повторный отжиг при температуре 340°C (со скоростью повышения температуры $1^{\circ}\text{C}/\text{мин}$) в течение 3 часов.

2.2. Методика измерений

Исследования газочувствительности сенсора МСУНТ/ SnO_2 были проведены при наличии в воздухе разных концентраций паров ацетона при разных температурах нагрева рабочего тела сенсора. Изготовленный сенсор МСУНТ/ SnO_2

помещался в герметически закрывающуюся измерительную камеру. Используя устройство KEITHLEY DMM7510 7 ½ и его программный пакет KickStart 2, были проведены измерения сопротивления сенсора, регистрировалась временная зависимость сопротивления. Для нагрева сенсора на нагреватель подавалось соответствующее напряжение от источника питания KEITHLEY 2231A–30–3. После стабилизации температуры сенсора в измерительную камеру вводилось определенное количество водного раствора ацетона необходимой концентрации, которое сразу же выпаривалось с помощью горячей платформы. Исследования проводились при концентрации паров ацетона в измерительной камере в диапазоне от 400 ppb до 20 ppm, а температура нагрева сенсора варьировалась от комнатной до 300°C.

С помощью устройства Wonatech Zive SP1 и его программного пакета Smart Manager 6 были исследованы частотные зависимости комплексного импеданса сенсора МСУНТ/SnO₂. Результаты этих исследований регистрировались с помощью программы Smart Manager 6 устройства Zive SP1. Измерения комплексного импеданса проводились в диапазоне частот 1–10⁶ Гц, при этом на сенсор подавалось напряжение смещения 1 В, на которое накладывался синусоидальный сигнал с амплитудой 300 мВ. Исследования проводились при рабочей температуре сенсора 250°C как до, так и после воздействия паров ацетона с концентрацией от 4 ppm до 20 ppm.

3. Экспериментальные результаты и их обсуждение

Были проведены исследования чувствительности изготовленного нами нанокompозитного сенсора МСУНТ/SnO₂ (1:600) к воздействию паров ацетона с концентрацией 20 ppm при разных рабочих температурах (от комнатной до 300°C), результаты которых представлены на рис.2. Достаточно заметная газочувствительность и стабильность параметров сенсора МСУНТ/SnO₂ наблюдались при температурах выше 150°C (рис.2а). В диапазоне рабочих температур от комнатной до 100°C сопротивление сенсора при воздействии 20 ppm паров

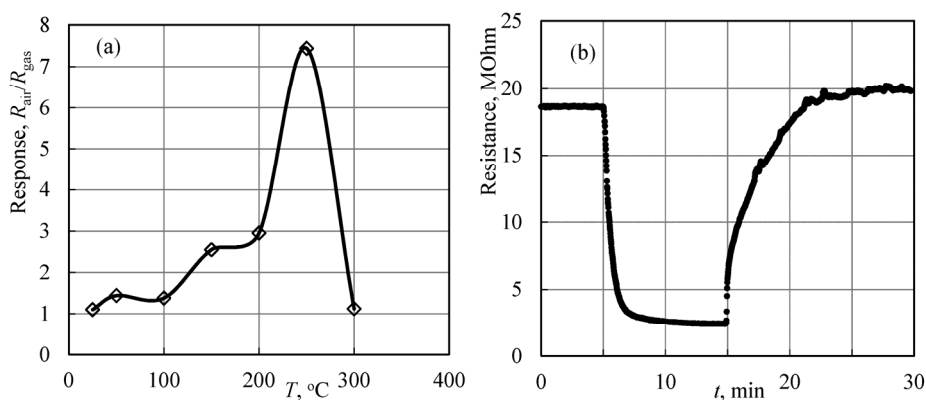


Рис.2. (а) Зависимость отклика сенсора от температуры его нагрева и (б) изменение сопротивления сенсора МСУНТ/SnO₂ под действием 20 ppm паров ацетона при рабочей температуре 250°C.

ацетона уменьшалось менее чем в два раза, а уже при 150°C было обнаружено изменение сопротивления в 2.5 раза. Максимальный отклик сенсора МСУНТ/SnO₂ наблюдался при рабочей температуре 250°C, при которой под действием 20 ppm паров ацетона сопротивление сенсора изменялось в 7.4 раза (рис.2b). При дальнейшем повышении температуры чувствительность исследуемого сенсора к парам ацетона уменьшалась, что, предположительно, обусловлено резким увеличением десорбции целевого газа. Отметим, что отклик определялся как отношение сопротивления сенсора на воздухе к его сопротивлению после воздействия паров ацетона с определенной концентрацией (R_{air}/R_{gas}).

Проведены измерения отклика сенсора МСУНТ/SnO₂ к воздействию разных концентраций паров ацетона при рабочей температуре 250°C. Даже при очень низких концентрациях паров ацетона исследуемый сенсор проявил достаточно высокую чувствительность, а также достаточно короткие времена отклика и восстановления (рис.3a). Сопротивление сенсора МСУНТ/SnO₂ даже при воздействии чрезвычайно низкой 400 ppb концентрации паров ацетона изменялось в 1.2 раза. Из результатов измерений очевидно, что независимо от концентрации паров ацетона в воздухе исследуемый сенсор имеет достаточно короткие времена отклика и восстановления (4–10 сек). Кроме того, зависимость отклика сенсора от концентрации воздействующих паров ацетона является линейной (рис.3b), что позволяет использовать изготовленный сенсор МСУНТ/SnO₂ в применяемых в реальных условиях детекторах для определения содержания паров ацетона в

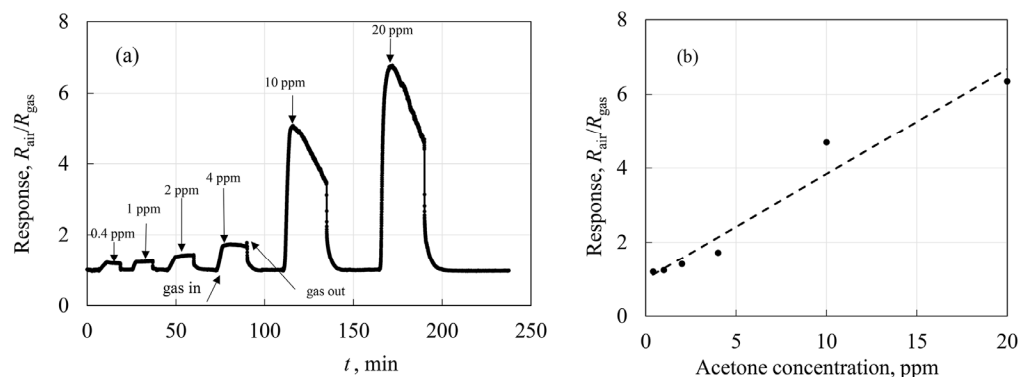


Рис.3. (a) Отклик МСУНТ/SnO₂ сенсора при воздействии разных концентраций паров ацетона (от 400 ppb до 20 ppm) и (b) зависимость отклика сенсора МСУНТ/SnO₂ от концентрации паров ацетона.

окружающей атмосфере.

Одним из важнейших условий для длительной и стабильной работы сенсора является устойчивость его параметров и воспроизводимость отклика. Поэтому при постоянных условиях были проведены циклические (повторяющиеся) измерения отклика исследуемого сенсора МСУНТ/SnO₂. При рабочей температуре 250°C в исследовательскую камеру периодически вводились пары ацетона с концентрацией 10 ppm. Каждый раз через определенное время камера открывалась для восстановления сенсора. Как видно из рис.4, изготовленный сенсор

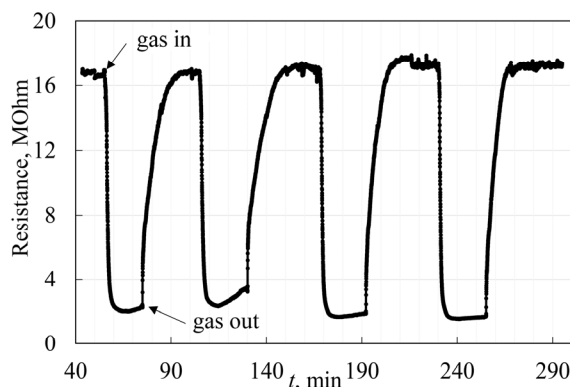


Рис.4. Изменение сопротивления сенсора МСУНТ/SnO₂ при периодическом воздействии 10 ppm паров ацетона.

МСУНТ/SnO₂ демонстрирует хорошо воспроизводимый ход кривой отклик/восстановление и почти совпадающие значения чувствительности. Времена отклика и восстановления для исследуемого сенсора в среднем составляли порядка 1 мин и 6 мин, соответственно.

Изготовленный сенсор МСУНТ/SnO₂ исследовался методом импедансной спектроскопии. Комплексный импеданс сенсора измерялся в диапазоне частот 1–10⁶ Гц при рабочей температуре 250°C в атмосфере чистого воздуха и при наличии разных концентраций паров ацетона (4 ppm, 10 ppm и 20 ppm). На рис.5а результаты импедансных измерений представлены в виде кривых Найквиста. Как видно, радиус полукруга Найквиста уменьшается под воздействием паров ацетона. Анализ полученных в результате измерений частотных зависимостей действительной и мнимой компонент комплексного импеданса позволил предположить, что исследуемую сенсорную структуру можно представить в виде эквивалентной электрической цепи, представленной на рис.5б. Представленные на эквивалентной электрической цепи сопротивление R_0 и емкость C_1 обуслов-

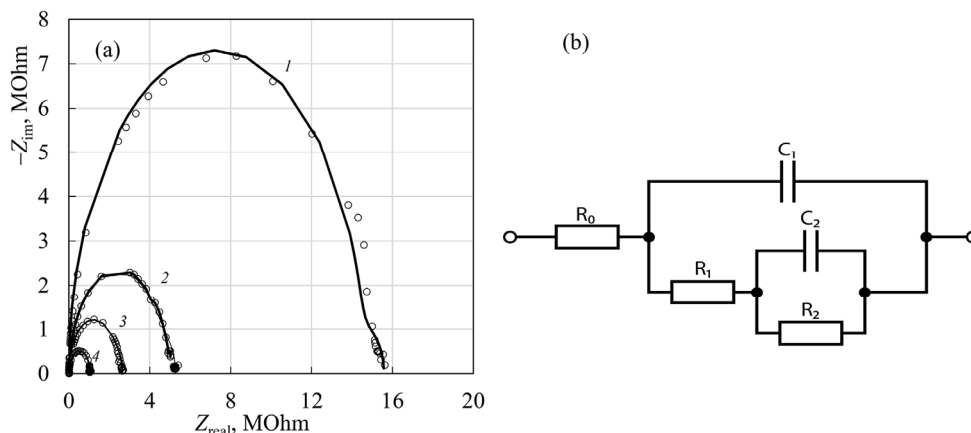


Рис.5. (а) Кривые Найквиста сенсора МСУНТ/SnO₂ при рабочей температуре 250°C: 1 – воздух, 2 – 4 ppm, 3 – 10 ppm, 4 – 20 ppm; (б) предлагаемая эквивалентная электрическая схема.

лены сложной структурой подложки сенсора и практически не меняются при воздействии паров ацетона [22]. Сопротивление R_1 и параллельно соединенная цепь R_2 – C_2 характеризуют процессы, непосредственно протекающие в пленке МСУНТ/SnO₂, и их значения зависят от содержания паров ацетона в воздухе.

С помощью пакета программ ZMan 2.3 были определены параметры элементов предложенной эквивалентной электрической цепи и рассчитаны аппроксимирующие кривые. Наблюдается достаточно хорошее соответствие между экспериментальными и аппроксимирующими зависимостями.

Сравнение результатов исследований характеристик изготовленного нами образца сенсора паров ацетона с имеющимися в литературе данными позволяет утверждать, что преимуществом рутенированного сенсора МСУНТ/SnO₂ является чувствительность к более низким концентрациям паров ацетона при более низких рабочих температурах [13,14,23].

4. Заключение

На основе композитного соединения МСУНТ/SnO₂ (1:600), модифицированного рутением, изготовлен и исследован сенсор, позволяющий обнаруживать низкие концентрации паров ацетона в атмосфере. С помощью сканирующего электронного микроскопа получено SEM- изображение МСУНТ. Изготовленный сенсор МСУНТ/SnO₂ проявляет чувствительность к парам ацетона, начиная с температуры 50°C, максимальный отклик сенсора наблюдался при рабочей температуре 250°C. При этой температуре минимальный порог чувствительности исследуемого сенсора МСУНТ/SnO₂ на пары ацетона составлял 400 ppb. Используя метод импедансной спектроскопии, предложена эквивалентная электрическая схема для сенсорной структуры МСУНТ/SnO₂ и рассчитаны аппроксимирующие импедансные зависимости. Полученные результаты могут быть использованы для создания сенсоров паров ацетона с улучшенными характеристиками.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Комитета по науке РА в рамках научного проекта № 21Т–2J062.

ЛИТЕРАТУРА

1. **G. Johanson.** Patty's Toxicology, **3**, 735 (2012).
2. **V. Amiri, H. Roshan, A. Mirzaei, G. Neri, A.I. Ayesh.** Sensors, **20**, 3096 (2020).
3. **J.S. Do, S.H. Wang.** Sens. Actuators B Chem., **185**, 39 (2013).
4. **V.M. Aroutiounian.** J. Contemp. Phys., **56**, 117 (2021).
5. **N.H. Hanh, L. van Duy, C.M. Hung, C.T. Xuan, N. van Duy, N.D. Hoa.** J. Alloys Compd., **886**, 161284 (2021).
6. **P. Zhang, H. Qin, W. Lv, H. Zhang, J. Hu.** Sens. Actuators B Chem., **246**, 9 (2017).
7. **G. Korotcenkov.** Materials Science and Engineering, B, **139**, 1 (2007).
8. **G. Korotcenkov, V. Brinzari, V. Golovanov, Y. Blinov.** Sens. Actuators B Chem., **98**, 41 (2004).
9. **N. Yamazoe.** Sens. Actuators B Chem., **108**, 2 (2005).
10. **P.P. Sahay.** J. Mater. Sci., **40**, 4383 (2005).

11. S. Cao, N. Sui, P. Zhang, T. Zhou, J. Tu, T. Zhang. J. Colloid. Interface Sci., **607**, 357 (2022).
12. X. Fan, Y. Xu, C. Ma, W. He. J Alloys Compd., **854**, 157234 (2021).
13. X. Kou, F. Meng, K. Chen, T. Wang, P. Sun, F. Liu, X. Yan, Y. Sun, F. Liu, K. Shimanoe, G. Lu. Sens. Actuators B Chem., **320**, 128292 (2020).
14. F. Li, T. Zhang, X. Gao, R. Wang, B. Li. Sens. Actuators B Chem., **252**, 822 (2017).
15. M. Narjinary, P. Rana, A. Sen, M. Pal. Mater. Des., **115**, 158 (2017).
16. M.S. Aleksanyan, A.G. Sayunts, V.M. Aroutiounian, G.E. Shahnazaryan, G.H. Shahkhatuni. J. Contemp. Phys., **56**, 109 (2021).
17. P. Cheng, L. Lv, Y. Wang, B. Zhang, Y. Zhang, Y. Zhang, Z. Lei, L. Xu. Sens. Actuators B Chem., **332**, 129212 (2021).
18. D. Han, M. Zhao. J. Alloys Compd., **815**, 152406 (2020).
19. Z.N. Adamyan, A.G. Sayunts, E.A. Khachaturyan, V.M. Arakelyan, V.M. Aroutiounian, B. Joost. J. Contemp. Phys., **54**, 57 (2019).
20. X. Kou, N. Xie, F. Chen, T. Wang, L. Guo, C. Wang, Q. Wang, J. Ma, Y. Sun, H. Zhang, G. Lu. Sens. Actuators B Chem., **256**, 861 (2018).
21. X. Fan, Y. Xu, C. Ma, W. He. J. Alloys Compd., **854**, 157234 (2021).
22. G.E. Shahnazaryan, G.A. Shahkhatuni, M.S. Aleksanyan, Z.G. Simonyan, V.M. Aroutiounian, A.G. Sayunts. J. Contemp. Phys., **57**, 254 (2022).
23. N.H. Hanh, L. van Duy, C.M. Hung, C.T. Xuan, N. van Duy, N.D. Hoa. J. Alloys Compd., **886**, 161284 (2021).

INVESTIGATION OF THE MWCNT/SnO₂ SENSOR FOR THE DETECTION OF ACETONE VAPORS

M.S. ALEKSANYAN, G.H. SHAHKHATUNI, E.A. KHACHATURYAN,
G.E. SHAHNAZARYAN, A.G. SAYUNTS, H.R. HOVHANNISYAN, D.A. KANANOV

A sensor for the detection of acetone vapors based on the nanocomposite multi-walled carbon nanotubes/tin oxide (MWCNT/SnO₂) material was manufactured by the hydrothermal synthesis method. The response of the MWCNT/SnO₂ sensor toward acetone vapors from room temperature to 300°C was investigated. The gas sensing characteristics of the MWCNT/SnO₂ sensor were investigated in the presence of different concentrations of acetone vapors (400 ppb–20 ppm) at 250°C. At the same temperature, the impedance characteristics of the MWCNT/SnO₂ sensor were investigated both with and without acetone vapors. An equivalent electrical circuit for the MWCNT/SnO₂ sensor structure was proposed. The presented results indicate that the MWCNT/SnO₂ structure can be used to detect very low concentrations of acetone.

ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИЙ УПРАВЛЯЕМЫЙ ОПТИЧЕСКИЙ ФИЛЬТР, КОМБИНИРУЕМЫЙ С УСТРОЙСТВАМИ ВИДЕОНАБЛЮДЕНИЯ

А.Л. МАРГАРЯН, П.К. ГАСПАРЯН, В.К. АБРААМЯН, Н.Г. АКОПЯН*,
А.С. ЧИЛИНГАРЯН, Д.К. ПОХСРАРЯН, Г.М. СТЕПАНЯН

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

*e-mail: nune.hakobyan@ysu.am

(Поступила в редакцию 12 декабря 2022 г.)

Описан жидкокристаллический управляемый оптический фильтр для видимой и ближней инфракрасной областей спектра, комбинируемый с устройствами видеонаблюдения, работающий в широком интервале температур. Рассмотрены конфигурации фильтра с использованием жидкокристаллических ячеек с твист, гомеотропной и планарной ориентациями. Показано, что характерное для нейтрального фильтра изменение пропускания в зависимости от приложенного управляющего напряжения демонстрирует твист-ячейка. Оценено влияние фильтра на угловое разрешение видеокамеры.

1. Введение

Качественная регистрация изображения при высоких уровнях фонового излучения в видимой и ближней инфракрасной областях спектра является серьезной проблемой. Повышение уровня фона, обусловленное солнечным излучением или искусственным источником, приводит к насыщению приемника, и четкое разделение изображений существенно усложняется. В таких случаях для обеспечения резкости изображения обычно используются механические диафрагмы, нейтральные фильтры, или уменьшается время интегрирования приемной ПЗС (прибор с зарядовой связью) матрицы. Однако эти методы не всегда обеспечивают желаемый результат. Например, диафрагмы при низких температурах (менее -10°C) часто демонстрируют непредсказуемое поведение, обусловленное сложной микромеханикой и смазочными материалами. С другой стороны, использование более одного оптического дискретного фильтра (для различных областей спектра) приводит к более жестким требованиям, предъявляемым к механике.

Сегодня, в связи с перспективами использования в различных областях, от биомедицинской визуализации и микроскопии [1,2] до обнаружения и определения дальности с помощью света (ЛИДАР) [3], особый интерес приобретают быстро перестраиваемые оптические фильтры. Наиболее перспективными

являются акустооптические (АОПФ) [4] и жидкокристаллические (ЖКПФ) [5] перестраиваемые фильтры, имеющие свои преимущества и недостатки в зависимости от применения. Несмотря на то, что АОПФ более быстродействующий, его апертура и качество изображения ниже, чем у фильтров на основе ЖК. Кроме того, АОПФ сложнее в эксплуатации и дороже в производстве. С другой стороны, температурный диапазон функционирования ЖКПФ ограничен необходимостью обеспечения нематической фазы ЖК.

В данной работе представлен комбинируемый с устройствами видеонаблюдения жидкокристаллический управляемый оптический фильтр для видимой и ближней инфракрасной областей спектра, функционирующий в широком температурном диапазоне.

2. Описание фильтра

В устройствах видеонаблюдения в зависимости от фонового излучения и погодных условий используются нейтральные фильтры с фиксированной оптической плотностью (ОП) или спектрально-селективные фильтры с фиксированной шириной пропускания. Однако, совокупность таких фильтров не всегда дает желаемый результат и часто возникает необходимость плавного варьирования значением оптической плотности и спектром пропускания.

В данной работе описан работающий в широком интервале температур (-25 — 40°C) электроуправляемый оптический фильтр, разработанный с учетом вышеперечисленных недостатков, который не содержит механических узлов и обеспечивает широкий динамический диапазон аттенюации.

Фильтр состоит из трех основных частей: жидкокристаллической ячейки, электронного блока управления и автономного блока питания. ЖК ячейка (рис.1) представляет собой помещенный между двумя стеклянными подложками, покрытыми прозрачным проводящим покрытием (ITO, Indium Tin Oxide), тонкий слой жидкокристаллического материала. Ячейка расположена между скрещенными поляризаторами, а интенсивность проходящего через систему света управляется внешним электрическим полем.

Для обеспечения нематической фазы жидкокристаллического материала в случае работы фильтра при низких температурах окружающей среды ячейка помещена в термоизолированный корпус со вмонтированным нагревательным элементом и термодатчиками для регистрации температуры вне и внутри корпуса. Стабилизация температуры осуществляется с помощью ПИД регулятора. Нагрев фильтра предотвращает также образование водных конденсатов при низких температурах окружающей среды.

После достижения заданной температуры необходимая прозрачность фильтра устанавливается приложением переменного напряжения килогерцовой частоты. Сигнал формируется с помощью специальной программы, созданной на платформе LabVIEW, и через драйвер подается на ЖК ячейку. Для обеспечения работы прибора в автономном режиме в качестве источника питания

используются перезаряжаемые литий-ионные аккумуляторы. Необходимые напряжения задаются с помощью конверторов и подаются на соответствующие драйверы.

Корпус фильтра разработан с учетом совместимости с объективами, выполненными по стандарту C-mount. Узел видеонаблюдения состоит из камеры на основе КМОП (CMOS) сенсора с разрешением 2.3 МП (производства фирмы BASLER) и объектива с фокальным расстоянием 100 мм и апертурным числом $f/2.8 - f/22$ (Edmund Optics).

3. Экспериментальная часть

В основе функционирования фильтра лежит явление переориентации молекул ЖК под воздействием электрического поля. В зависимости от типа первоначальной ориентации ЖК ячейки (планарная, гомеотропная или твист) спектр пропускания фильтра изменяется по-разному [6–9]. В связи с этим исследованы три различные конфигурации фильтра: твист ячейка между скрещенными поляризаторами, когда ориентация каждой подложки параллельна оптической оси поляризатора; гомеотропная ячейка между скрещенными поляризаторами, когда директор ЖК направлен под углом 90° к плоскости поляризатора; планарная ячейка между скрещенными поляризаторами, когда директор ЖК направлен под углом 45° к оптической оси поляризатора.

Для каждой конфигурации получены спектральные зависимости прошедшего через фильтр света при различных значениях внешнего управляющего напряжения (рис.2).

Ячейка с твист ориентацией при приложении напряжения ниже пороговых значений полностью прозрачна (рис.2а), с увеличением напряжения форма спектра не меняется, но интенсивность прошедшего света уменьшается, достигая минимального значения при $U \geq 5\text{В}$, т.е. твист-ячейка функционирует как нейтральный фильтр. Гомеотропная ячейка в отсутствие напряжения находится в закрытом состоянии (не пропускает свет), а при напряжениях больше порогового наблюдается увеличение пропускания до максимального (рис.2б). В этом случае также форма спектра не меняется.

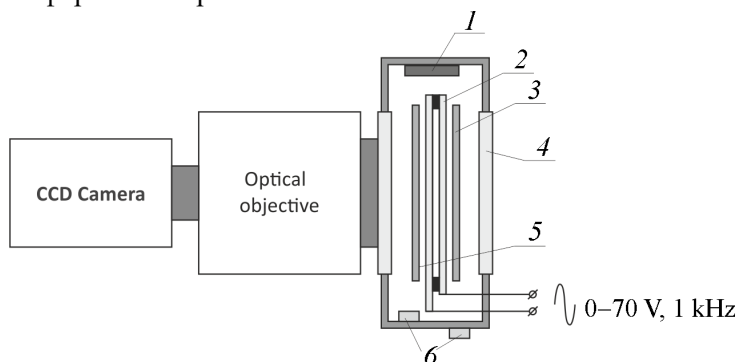


Рис.1. Схема ЖК ячейки: 1 – нагреватель, 2 – ЖК ячейка, 3 – поляризатор, 4 – оптическое окно, 5 – анализатор, 6 – термодатчики.

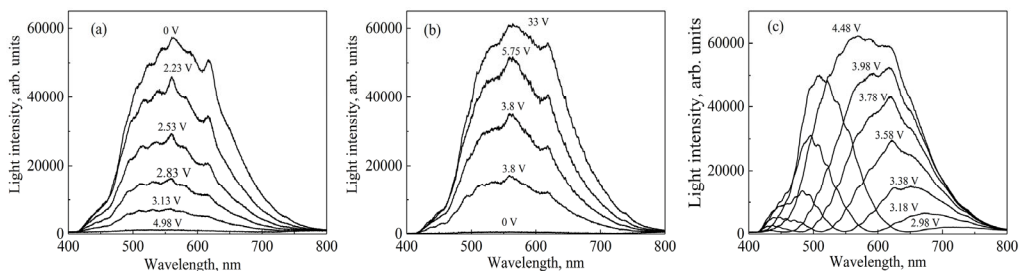


Рис.2. Спектральные зависимости прошедшего через фильтр света при различных значениях внешнего управляющего напряжения для различных конфигураций фильтра: (а) – твист ячейка между скрещенными поляризаторами; (б) – гомеотропная ячейка между скрещенными поляризаторами; (с) – планарная ячейка между скрещенными поляризаторами.

Ячейка же с планарной ориентацией имеет другое поведение (рис.2с). В этом случае можно контролировать спектральное распределение прошедшего излучения. Образование пиков на спектрах означает, что ячейка работает как полуволновая пластина на данной длине волны. При изменении напряжения изменяется набег фаз и, соответственно, изменяется длина волны характерных пиков на спектре.

Таким образом, из вышеописанного сравнительного анализа трех типов ЖК ячеек следует, что характерное для нейтрального фильтра изменение пропускания в зависимости от приложенного управляющего напряжения демонстрирует твист-ячейка.

4. Тестирование фильтра

Для оценки оптического пропускания (ОП) фильтра собран измерительный стенд, принципиальная схема которого проведена на рис.3.

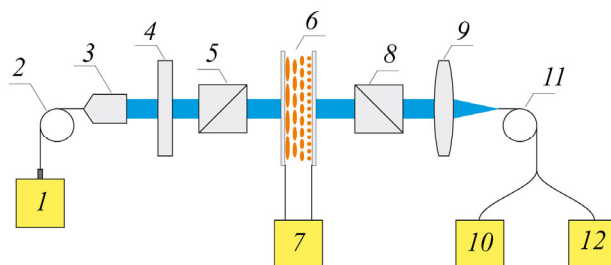


Рис.3. Схема стенда для оценки ОП фильтра: 1 – вольфрамовая галогенная лампа, 2 – световод, 3 – коллиматор, 4 – спектральный фильтр, 5,8 – поляризаторы Глана, 6 – ЖК ячейка, 7 – блок управления, 9 – собирающая линза, 10 – оптоволоконный разветвитель, 11 – измеритель мощности, 12 – спектрометр.

Световой пучок лампы (1), проходя через световод (2) с внутренним диаметром 200 мкм и коллиматор (3), направляется на спектральный фильтр (4), пропускающий область 450–750 нм из всего спектра лампы. ЖК ячейка (6)

расположена между скрещенными поляризаторами Глана (5 и 8). Блок управления (7) позволяет формировать управляющие сигналы с различной амплитудой. Каждому значению управляющего напряжения соответствует определенный фазовый набег, приводящий к изменению интенсивности света, прошедшего через поляризатор (8). Прошедший свет с помощью собирающей линзы (9) направляется на оптоволоконный разветвитель (50:50) диаметром 400 нм (10). На одной ветви световода регистрируется мощность светового пучка с помощью измерителя мощности (11), а на другой ветви осуществляются спектральные измерения с помощью спектрометра (12). Максимальное пропускание (1.3 мкВт) наблюдается при $U = 1.5$ В, а минимальное (25 пкВт) при $U = 10$ В. При этом ОП = $\lg 1/T = 4.7$. Таким образом, нематическая твист ячейка в качестве нейтрального фильтра в диапазоне 450–700 нм обеспечивает ОП от 0 до 4.7.

Оценено также влияние фильтра на угловое разрешение видеокамеры согласно методике, описанной в формуляре ОСК-2ЦЛ. Была использована мира №5. Искажения, вводимые фильтром, позволили различить штрихи первой группы элементов, т.е. угловое разрешение составляет 41.3 угл.сек. (рис.4).

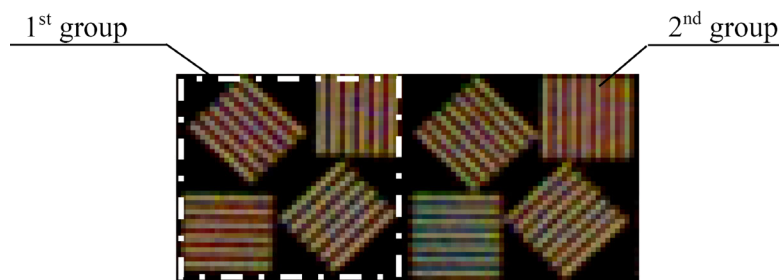


Рис.4. Изображение, зарегистрированное камерой через ЖК фильтр.

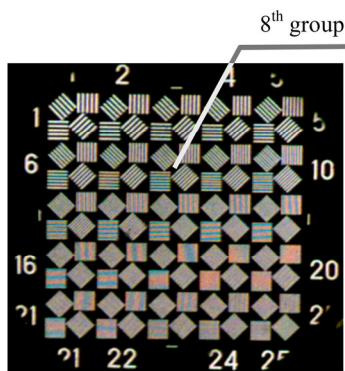


Рис.5. Изображение миры № 5 через ЖК фильтр без поляризаторов.

Низкое значение углового разрешения описанного фильтра обусловлено использованием пластиковых поляризаторов, для оценки вклада которых измерено угловое разрешение фильтра без поляризаторов (рис.5). Как видно из рисунка, различимы штрихи восьмой группы элементов. Угловое разрешение в этом случае составляет 27.4, что говорит о значительном влиянии пластиковых поляризаторов на искажение волнового фронта.

5. Заключение

В работе описан электрически управляемый нейтральный оптический фильтр на основе ЖК ячейки с твист-ориентацией. Показано, что в спектральном диапазоне 450–700 нм можно плавно изменять оптическую плотность фильтра в пределах значений от 0 до 4. Вмонтированный в корпус фильтра нагревательный элемент обеспечивает работу в температурном диапазоне от -25°C до $+40^{\circ}\text{C}$. Показано, что использование пластиковых поляризаторов приводит к искажению изображения. Во избежание этого недостатка необходимо использовать поляризаторы с искажением волнового фронта, меньшим 1λ .

Исследование выполнено при финансовой поддержке Комитета по науке Республики Армения в рамках проекта 20DP-2H02.

ЛИТЕРАТУРА

1. **M.J. Booth.** Light: Science & Applications, **3**, 165 (2014).
2. **C. Balas.** Measurement Science and Technology, **20**, 104020 (2009).
3. **G. Yang, R.I. Billmers, P.R. Herczfeld, V.M. Contarino.** Optics Letters, **22**, 414 (1997).
4. **S.E. Harris, R.W. Wallace.** Journal of the Optical Society of America, **59**, 744, (1969).
5. **S.-T. Wu.** Applied Optics, **28**, 48 (1989).
6. **V.K. Abrahamyan, N.H. Hakobyan, V.M. Aroutiounian, V.G. Babajanyan, H.L. Margaryan, D.L. Hovhannisyan, A.T. Poghosyan, D.K. Pokhsraryan.** J. Contemp. Phys., **44**, 84 (2009).
7. **C. Sun, J. Lu.** Polymers, **14**, 4898 (2022).
8. **Н.Г. Акопян, В.М. Арутюнян, А.Л. Маргарян, Д.Л. Оганесян.** Поверхность, рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, **N12**, 98 (2010).
9. **A. Solomatin, V. Mashchenko, V. Belyaev, A. Margaryan, N. Hakobyan.** Bulletin of Moscow Region State University. Series: Physics and Mathematics, **3**, 76 (2017).

CONTROLLED LIQUID CRYSTAL OPTICAL FILTER COMBINED WITH VIDEO SURVEILLANCE DEVICES

**H.L. MARGARYAN, P.K. GASPARYAN, V.K. ABRAHAMYAN, N.H. HAKOBYAN,
H.S. CHILINGARYAN, D.K. POKHSRARYAN, G.M. STEPANYAN**

Operating in a wide temperature interval controlled liquid crystal optical filter for the visible and near infrared spectral ranges, combining with video surveillance devices, is described. The configurations of the filter using liquid crystal cells with a twist, homeotropic and planar orientations are considered. It is shown that the change in the transmission depending on the attached control voltage, typical for a neutral filter, is shown by the twist cell. The effect of the filter on the angular resolution of the video camera is evaluated.

ДИФРАКЦИЯ ФРАУНГОФЕРА НА ЩЕЛИ В ОДНОРОДНУЮ АНИЗОТРОПНУЮ СРЕДУ С ОТКРЫТОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ ВОЛНОВЫХ ВЕКТОРОВ

А.А. ЛАЛАЯН^{1*}, О.С. ЕРИЦЯН²

¹Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

²Институт прикладных проблем физики НАН Армении, Ереван, Армения

*e-mail: alalayan@ysu.am

(Поступила в редакцию 28 октября 2022 г.)

Рассмотрена фраунгоферова дифракция электромагнитной волны на щели на непрозрачном экране, расположенном между вакуумом и анизотропной средой с открытой поверхностью волновых векторов (ПВВ). Получена формула дифракции в материальной среде, включающая случай дифракции в одноосную анизотропную среду, в отсутствие поглощения и исследована картина формирования дифракционных минимумов и максимумов.

1. Введение

Особенности дифракции в оптике как известно установлены достаточно давно [1–4], при этом отметим, что были исследованы в основном случаи, когда дифрагированное излучение проникает в вакуум. Однако, на наш взгляд, несомненный интерес представляют также и те случаи, когда дифрагированное излучение проникает в материальную среду, ввиду того, что среда, в которой распространяется дифрагированное излучение, несомненно должна оставлять свой отпечаток на процесс формирования дифракционной картины. Учет особенностей дифракции света в материальную среду весьма актуален в задачах создания новых микронных и наноразмерных структур с применением дифракционных оптических и рентгеновских методов, а также для дифракционного оптического анализа различных материалов, в том числе в современной наноскопии [5–9]. В наших предыдущих работах было рассмотрено явление дифракции из вакуума в материальную среду [10], и, в частности, в обычную анизотропную оптически двулучепреломляющую среду, когда формируется не одна, а две серии максимумов и минимумов [11].

Представляет интерес также случай дифракции на щели для случая проникновения излучения в анизотропную среду с открытой поверхностью волновых векторов (ПВВ). Возможность существования такой оптической среды, обладающей рядом неординарных свойств, впервые была теоретически предсказана и проанализирована в работе [12]. В дальнейшем, оптические свойства таких сред, в частности, аномально высокий коэффициент отражения, был выявлен

экспериментально для кристалла фторида магния [13]. Другое необычное свойство материала с открытой ПБВ – это возможность фокусировки светового излучения плоскопараллельной пластиной вместо стандартной линзы [14].

В настоящей работе рассматривается фраунгоферова дифракция плоской волны, падающей нормально на щель, за которой расположена анизотропная среда с открытой поверхностью волновых векторов, с оптической осью, перпендикулярной к плоскости щели.

2. Распространение излучения в среде с открытой ПБВ

Рассмотрим распространение плоской монохроматической волны

$$E = E e^{i(kr - \omega t)} \quad (1)$$

в среде, описываемой тензором диэлектрической проницаемости

$$\epsilon_{ij} = \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{zz} \end{pmatrix}, \quad \mu_{ij} = \delta_{ij} \quad (2)$$

при $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} > 0$ и $\epsilon_{zz} < 0$. В данных условиях в описываемой анизотропной среде будут распространяться две волны – обыкновенная и необыкновенная. Дисперсионное уравнение для необыкновенной волны в рассматриваемом случае имеет вид:

$$\frac{k_z^2}{\epsilon_{xx}} - \frac{k_x^2}{|\epsilon_{zz}|} = \frac{\omega^2}{c^2}, \quad (3)$$

где ϵ_{xx} и ϵ_{zz} – компоненты диэлектрической проницаемости среды соответственно в перпендикулярном и параллельном направлениях к оптической оси. Уравнение (3) описывает гиперболу, представленную на рис.1.

На рис.1 кривой линией, представляющей из себя гиперболу, показано сечение ПБВ необыкновенной волны.

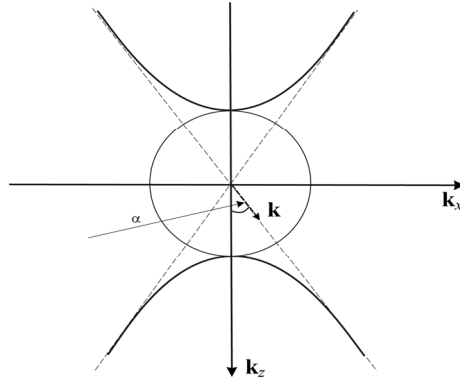


Рис.1. Схематичное представление среды с открытой ПБВ. Гиперболами представлено сечение поверхности волновых векторов необыкновенной волны с плоскостью, проходящей через ось z . Сферой представлено сечение поверхности волновых векторов обыкновенной волны с той же плоскостью.

Исходя из уравнения (3) для волнового вектора необыкновенной волны, получим выражение:

$$k^2 = \frac{\omega^2 / c^2}{\left(\frac{\cos^2 \alpha}{\epsilon_{xx}} - \frac{\sin^2 \alpha}{|\epsilon_{zz}|} \right)}. \quad (4)$$

Отметим, что согласно соотношению (4), данная волна может распространяться в интервале углов α , расположенных между касательными гипербол, и определяемом условием $0 \leq \alpha \leq \gamma$, где $\gamma = \arctan(|\epsilon_{zz}|/\epsilon_{xx})^{1/2}$. Вне этого интервала волновой вектор необыкновенной волны становится мнимой величиной, что означает затухание волны по мере распространения.

3. Фраунгоферова дифракция в непоглощающую анизотропную среду с открытой ПВВ

Рассмотрим случай плоской волны, падающей нормально на непрозрачный экран с щелью 1, за которой расположена среда с открытой ПВВ. За щелью размещен экран 2, на котором наблюдается дифракционная картина (см. рис.2). Прямая линия, соединяющая середину щели О с точкой наблюдения М отклонена на угол α от направления оптической оси z .

$$k = \frac{\omega}{c} \left(\frac{\cos^2 \alpha}{\epsilon_{xx}} - \frac{\sin^2 \alpha}{|\epsilon_{zz}|} \right)^{-1/2}. \quad (5)$$

Разность фаз между лучами, исходящими от краев щели в точку М будет равна $\delta\varphi = k_\alpha d \sin \alpha = \frac{\omega}{c} \left(\frac{\cos^2 \alpha}{\epsilon_{xx}} - \frac{\sin^2 \alpha}{|\epsilon_{zz}|} \right)^{-1/2} d \sin \alpha$, где k_α – модуль волнового вектора, составляющего угол α с нормалью к плоскости щели.

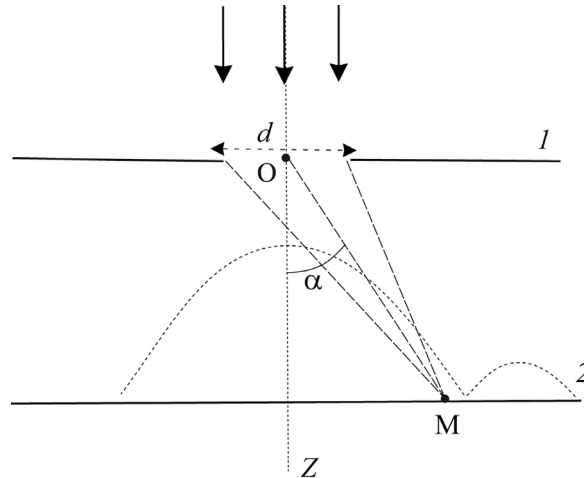


Рис.2. Схематичное представление дифракции Фраунгофера в анизотропную среду.

Так как каждый пучок, соответствующий минимуму, формируется суммированием полей элементарных пучков, которые все имеют одно и тоже направление, задаваемое углом α в фундаментальной формуле [4]

$$d \sin \alpha = m \lambda, \quad (6)$$

то условие минимумов для необыкновенной волн в анизотропной среде без поглощения на основании выражения (6) может быть записано в том же виде, однако любому направлению θ будет соответствовать своя длина волны $\lambda(\alpha)$:

$$d \sin \alpha = m \lambda(\alpha). \quad (7)$$

Приняв, как обычно, центральный дифракционный максимум нулевым, для m -ого минимума из выражений (5) и (7) получим

$$\frac{\omega d \sin \alpha}{c} \left(\frac{\cos^2 \alpha}{\varepsilon_{xx}} - \frac{\sin^2 \alpha}{|\varepsilon_{zz}|} \right)^{-1/2} = 2\pi m. \quad (8)$$

Таким образом, при $\frac{\cos^2 \alpha}{\varepsilon_{xx}} - \frac{\sin^2 \alpha}{|\varepsilon_{zz}|} = 0$ величина m стремится к бесконечности,

то есть при углах, близких к асимптотам гипербол (см. рис. 1), в которых волновой вектор стремится к бесконечности, интервал между дифракционными минимумами будет стремиться к нулю. Отметим, что обыкновенная волна ведет себя стандартно и формирует отдельную независимую картину дифракционных максимумов.

4. Заключение

Рассмотрена дифракция света на щели в анизотропной среде с открытой поверхностью волновых векторов ПВВ. В работе обобщена известная формула дифракции Фраунгофера в вакууме на случай материальной среды с открытой ПВВ, без учета поглощения. Исследована картина формирования дифракционных минимумов и максимумов, которая зависит от оптических характеристик этой среды.

ЛИТЕРАТУРА

1. **M. Born, E. Wolf.** Principles of Optics. 4-th.ed., New York, Pergamon Press, 1968.
2. **J.M. Cowley.** Diffraction Physics. Amsterdam, North-Holland Pub. Co, 1975.
3. **Р.Б. Ваганов, Б.З. Каценелбаум.** Основы теории дифракции. Москва, Наука, 1982.
4. **Д.В. Сивухин.** Общий курс физики. Оптика, т. IV, Москва, Наука, 1980.
5. **Y.E. Geints, O.V. Minin, I.V. Minin.** Annalen der Physik, **531**, 1900033 (2019).
6. **L. Yang, J. Wei, Z. Ma, P. Song, J. Ma, Y. Zhao, Z. Huang, M. Zhang, F. Yang, X. Wang.** Nanomaterials, **9**, 1789 (2019).
7. **D. Xu, K.P. Chen, K. Ohlinger, Y. Lin.** Nanotechnology, **22**, 035303 (2011).
8. **R.D. Johnson, P.G. Radaelli.** Annual Review of Material Research, **44**, 269 (2014).
9. **S. Mourdikoudis, R.M. Pallares, N.T.K. Thanh.** Nanoscale, **10**, 12871 (2018).
10. **A.R. Mkrtchyan, A.A. Lalayan, H.S. Yeritsyan, A.L. Margaryan, Sh.K. Yeritsyan, Zh.B. Khachatryan.** J. Contemp. Phys., **55**, 314 (2020).
11. **H.S. Eritsyan, A.A. Lalayan, A.L. Margaryan, A.G. Mkrtchyan, Zh.B. Khachatryan.**

- J. Contemp. Phys., **57**, 49 (2022).
12. **О.С. Ерицян**. Кристаллография, **11**, 461 (1978).
13. **O.S. Eritsyan, A.A. Lalayan, O.M. Arakelyan, A.A. Papoyan, R.B. Kostanyan**. J. Contemp. Phys., **41**, 14 (2006).
14. **O.S. Eritsyan, A.A. Lalayan, O.M. Arakelyan, A.A. Papoyan, R.B. Kostanyan**. Crystallography Reports, **55**, 938 (2010).

ՖՐԱՈՒԽԶՈՖԵՐԻ ԴԻՖՐԱԿՑԻԱՆ ՃԵՂՔԻՑ ԴԵՊԻ ԲԱՑ ԱԼԻՔԱՅԻՆ
ՎԵԿՏՈՐՆԵՐԻ ՄԱԿԵՐԵՍՈՎ ՀԱՄԱՍԵՌ ԱՆԻՉՈՏՐՈՊ ՄԻՋԱՎԱՅՐ

Ա.Ա. ԼԱԼԱՅԱՆ, Ն.Ս. ԵՐԻՅԱՆ

Դիտարկված է էլեկտրամագնիսական ալիքի Ֆրաունհոֆերյան դիֆրակցիան ճեղքից՝ անթափանց էկրանի վրա, որը գտնվում է վակուումի և բաց ալիքային վեկտորների մակերեսով (ՄՎՄ) անիզոտրոպ միջավայրի միջև: Ստացված է նյութական միջավայրում դիֆրակցիայի բանաձևը, որը ներառում է միառանգք միջավայրի դեպքը՝ երբ կլանումը բացակայում է և ուսումնասիրված է դիֆրակցիոն մինիմումների և մաքսիմումների ձևավորման օրինաչափությունը:

FRAUNHOFER DIFFRACTION BY SLIT INTO A HOMOGENEOUS
ANISOTROPIC MEDIUM WITH AN OPEN SURFACE OF WAVE VECTORS

A.A. LALAYAN, O.S. ERITSYAN

Fraunhofer diffraction of an electromagnetic wave by a slit on an opaque screen located between vacuum and an anisotropic medium with an open wave vector surface (WVS) is considered. A formula for diffraction in a material medium is obtained, including the case of diffraction into a uniaxial anisotropic medium in the absence of absorption, and the formation of diffraction minima and maxima is studied.

ПОГЛОЩЕНИЕ ГИПЕРЗВУКОВЫХ ВОЛН В МОНОКРИСТАЛЛАХ НИОБАТА ЛИТИЯ

А.В. ЕГАНЫАН^{1,2*}, Н.Э. КОКАНЯН^{3,4}, М. АЙЛЛЕРИ⁴, Э.П. КОКАНЯН^{1,2}

¹Армянский государственный педагогический университет, Ереван, Армения

²Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак, Армения

³Chaire Photonique, Laboratoire Matériaux Optiques, Photonique et Systèmes,
CentraleSupélec, Metz, France

⁴Université de Lorraine, Laboratoire Matériaux Optiques, Photonique et Systèmes,
CentraleSupélec, Metz, France

*e-mail: aveganyan@gmail.com

(Поступила в редакцию 10 сентября 2022 г.)

Получены новые простые выражения для быстрой оценки коэффициентов поглощения продольных и поперечных гиперзвуковых волн в монокристаллах ниобата лития в режиме Ахиезера. Показано, что при комнатных температурах коэффициенты затухания гиперзвуковых волн, рассчитанные по полученным выражениям, и определенные экспериментально их значения, хорошо согласуются.

1. Введение

Исследования поглощения звука различных частот (ультразвуковой диапазон – 2×10^4 – 10^9 Гц, гиперзвуковой диапазон – 10^9 – 10^{13} Гц) в акустооптических кристаллах, таких как ниобат лития (LiNbO_3 , пространственная группа – $R3c$), в настоящее время представляют как научный, так и прикладной интерес [1].

Поглощение звука (явление необратимого перехода энергии звуковой волны в другие виды энергий, в частности в тепло) характеризуется коэффициентом поглощения α (выражается в неперах на сантиметр, Неп/см, или децибелах на сантиметр: $1 \text{ дБ/см} = 0.115 \text{ Неп/см}$), определяемым как обратная величина расстояния, на котором амплитуда звуковой волны уменьшается в e раз. В предположении постоянства α при всех x (длина участка среды) имеет место соотношение [2]:

$$I(x) = I_0 e^{-\alpha x}, \quad (1)$$

где I_0 и I – интенсивности звуковой волны соответственно на входе и выходе материала. Поглощение звука характеризуется также безразмерным коэффициентом потерь ε :

$$\varepsilon = \alpha \lambda / \pi, \quad (2)$$

где λ – длина волны звуковой волны, и добротностью Q [2]:

$$Q = \frac{1}{\varepsilon} = \frac{\pi}{\alpha\lambda}. \quad (3)$$

В твердых телах механизм фонон–фононного затухания в случае сравнительно низких частот (при $\omega\tau < 1$, где τ – время термической релаксации фононов, $\omega = 2\pi f$, где f – частота звука) был предложен Ахиезером [2], который показал, что

$$\alpha \sim \frac{f^2 \gamma^2 T}{V^3}. \quad (4)$$

Здесь V – скорость акустической волны в среде, γ – параметр Грюнайзена и T – абсолютная температура. В режиме затухания Ландау–Румера ($\omega\tau > 1$) [2]:

$$\alpha \sim \frac{f \gamma^2 T^4}{V^6}. \quad (5)$$

Дальнейшее развитие теории акустического затухания [3–5] приводило к уточнению расчетных формул, а также к более точному учету параметра Грюнайзена.

2. Оценка коэффициентов затухание продольных и поперечных гиперзвуковых волн в кристаллах ниобата лития (LiNbO_3)

В работе [4] приведена следующая формула для определения коэффициента поглощения звука (α измеряется в дБ/см) в кристаллах в режиме Ахиезера (случай, который нас больше интересует в настоящей работе, когда коэффициент поглощения звука в основном определяется скоростью распространения продольных акустических волн):

$$\alpha = \frac{8.68\pi C_v \gamma^2 T \tau}{\rho V^3 \left[1 + (2\pi f \tau)^2 \right]} f^2, \quad (6)$$

где C_v – теплоемкость единицы объема, ρ – плотность среды. В этой и существующих подобных формулах (например, см. работу [3]) в основном из-за приближенного определения величины

$$\tau \approx \frac{6\chi}{CV_D^2}, \quad (7)$$

где χ [Вт/мК] – коэффициент теплопроводности, C [Дж/м³К] – удельная теплоемкость единицы объема и V_D – дебаевская скорость, расчетные значения существенно (иногда даже на порядок) отличаются от результатов измерений.

Для определения коэффициента затухания звука в кристаллах в работе [6] приведено следующее выражение:

$$\alpha = \frac{\gamma^2 \omega^2 \chi T}{\rho V^5}, \quad (8)$$

которое хотя и удобно для быстрой оценки, но дает неточные результаты особенно вблизи области перехода от режима Ахиезера к режиму Ландау–Румера. По этой причине в работе [7] были введены некоторые поправки и показано, что коэффициенты затухания продольных α_L и поперечных α_S фононов можно записать в виде

$$\alpha_L = \frac{2\gamma^2 \chi T \omega^2}{\rho V_L^3 V_D^2}, \quad (9)$$

$$\alpha_S = \frac{\gamma^2 \chi T \omega^2}{\rho V_S^3 V_D^2}, \quad (10)$$

где V_L и V_S – скорости распространения соответственно продольной и поперечной акустических волн в данной кристаллической среде. Приведем формулы (9) и (10) к более удобному для расчетов виду. Учитывая указанное выше выражение $\omega = 2\pi f$ и размерность величин, а также используя связь между дебаевской температурой T_D и скоростью V_D [7]

$$T_D = 251.2 \langle M \rangle^{-1/3} \rho^{1/3} V_D, \quad (11)$$

где $\langle M \rangle$ – средний молекулярный вес ($\langle M \rangle = M/m$, здесь m – количество ионов в соединении или в молекуле, например, для LiNbO_3 $m = 5$), получим, что

$$\alpha_L = \frac{5 \times 10^4 \gamma^2 Z \chi T f^2}{\rho^{1/3} \langle M \rangle^{2/3} V_L^3 T_D^2}, \quad (12)$$

$$\alpha_S = \frac{2.5 \times 10^4 \gamma^2 Z \chi T f^2}{\rho^{1/3} \langle M \rangle^{2/3} V_S^3 T_D^2}, \quad (13)$$

где Z – число формульных единиц, содержащихся в элементарной ячейке решетки (например, в случае LiNbO_3 $Z = 2$). Величины в приведенных формулах (12) и (13) имеют следующие размерности (ниже представлены значения соответствующих величин для кристалла ниобата лития): $[\chi] = 5.234$ Вт/мК [8], $[f] = 1$ ГГц, $[\rho] = 4.64$ г/см³ [8], $\langle M \rangle = 29.57$ г/моль, $[V_L (L[100])] = 6.57$ км/с [6], $[V_S (S[001])] = 3.59$ км/с [6], $[T_D] = 503$ К [9].

3. Результаты и обсуждение

Основное преимущество полученных выражений (12) и (13) по сравнению с выражением (6) заключается в обходе трудно определяемой величины τ , а по сравнению с выражениями (9) и (10) удобнее, так как температуру Дебая можно быстро оценить по формуле [10]

$$T_D = \frac{h v_m}{k_B} \left[\frac{3m}{4\pi} \left(\frac{N_A \rho}{M} \right) \right]^{1/3}, \quad (14)$$

где k_B – постоянная Больцмана, h – постоянная Планка, N_A – число Авогадро и ρ – плотность вещества.

Среднюю скорость звука v_m можно определить по формуле: $3/v_m^3 = 1/v_L^3 + 1/v_S^3$, а постоянная Грюнайзена связана с коэффициентом Пуассона

[11] выражением

$$\gamma = \frac{3}{2} \frac{1+\mu}{2-3\mu}. \quad (15)$$

Для ниобата лития $\mu = 0.28$ [12], следовательно $\gamma = 1.7$. Подставляя все указанные величины в формулы (12) и (13), получим следующие простые выражения для коэффициентов затухания, а также нормированных коэффициентов затухания ($\Gamma = \alpha/f^2$, измеряется в дБ/смГГц²) продольной и поперечной гиперзвуковых волн:

$$\alpha_L \cong 1.32 \times 10^{-3} T f^2, \quad (16)$$

где, как было указано выше, частота f измеряется в ГГц, а абсолютная температура T в К. Следовательно, получим, что

$$\Gamma_L \cong 1.32 \times 10^{-3} T. \quad (17)$$

Для поперечных волн

$$\alpha_S \cong 4.05 \times 10^{-3} T f^2, \quad (18)$$

$$\Gamma_S \cong 4.05 \times 10^{-3} T. \quad (19)$$

При комнатных температурах ($T = 300$ К), когда $f = 1; 2; 4.5$ ГГц из формулы (16) соответственно получим α_L (дБ/см) = 0.396; 1.584; 8.019. Для поперечных волн при комнатной температуре и частоте 1.5 ГГц из формулы (18) получается α_S (дБ/см) = 2.73. Сравнивая с результатами измерений в тех же условиях α'_L (дБ/см) = 0.4; 1.5; 8 ([4] и α'_S (дБ/см) = 2.6 [13]), видим, что имеется достаточно хорошее соответствие между значениями, оцениваемыми по полученным выражениям и измеренными в экспериментах.

4. Заключение

С учетом размерности величин и наблюдаемых между ними экспериментальных зависимостей, путем преобразования формул для определения коэффициентов затухания продольных и поперечных акустических волн в режиме Ахиезера получены удобные выражения для быстрой и более точной оценки этих коэффициентов в кристаллах. Получены также простые выражения, описывающие поглощения продольных и поперечных гиперзвуковых волн в монокристаллах ниобата лития в режиме Ахиезера. Показано, что при комнатных температурах значения коэффициентов поглощения продольных и поперечных гиперзвуковых волн, оцененные по полученным выражениями, достаточно хорошо согласуются с измеренными экспериментальными значениями.

ЛИТЕРАТУРА

1. Y. Cang, Y. Jin, B. Djafari-Rouhani, G. Fytas. J. Phys. D: Appl. Phys., **55**, 193002 (2022).
2. Р. Трузэлл, Ч. Эльбаум, Б. Чик. Ультразвуковые методы в физике твердого тела. Москва, Мир, 1972.

3. **Ю.В. Илисавский, В.М. Стернин.** ФТТ, **27**, 385 (1985).
4. **Б.П. Сорокин, А.В. Теличко, Г.М. Квашнин, В.С. Бормашов, В.Д. Бланк.** Акуст. журн., **61**, 705 (2015).
5. **А.Л. Пирозерский, Е.В. Чарная.** Акуст. журн., **52**, 87 (2006).
6. **Г.М. Григорович, Ю.В. Илисавский, М.А. Рувинский, В.П. Щетинин.** ФТТ, **25**, 3671 (1983).
7. **И.А. Андреев.** Известия Российского государственного педагогического университета им. А.И. Герцена, **6**, 15 (2006).
8. **Y. Shuhua, L. Hong, H. Xiaobo.** J. Alloys and Compounds, **455**, 501 (2008).
9. **N. Kokanyan, N. Mkhitarian, G. Demirkhanyan, A. Kumar, M. Aillerie, D. Sardar, E. Kokanyan.** Crystals, **11**, 50 (2021).
10. **A.V. Yeganyan, T.I. Butaeva, E.P. Kokanyan.** J. Contemp. Phys., **52**, 387 (2017).
11. **A.V. Yeganyan, A.S. Kuzanyan, V.N. Stathopoulos.** J. Contemp. Phys., **50**, 79 (2015).
12. **V. Saleev, A. Shipilova.** Mod. Phys. Lett. B, **32**, 1850063 (2018).

ՀԻՊԵՐՉԱՅՆԱՅԻՆ ԱԼԻՔՆԵՐԻ ԿԼԱՆՈՒՄԸ
ԼԻԹԻՈՒՄԻ ՆՈՒԲԱՏԻ ՄԻԱՔՅՈՒՐԵՂՆԵՐՈՒՄ

Ա.Վ. ԵԳԱՆՅԱՆ, Ն.Է. ԿՈԿԱՆՅԱՆ, Մ. ԱՅԼԼԵՐԻ, Է.Պ. ԿՈԿԱՆՅԱՆ

Ստացվել են լիթիումի նիոբատի միաբյուրեղներում՝ Ախիեզերի ռեժիմում երկայնական և լայնական հիպերձայնային ալիքների կլանման գործակիցների արագ գնահատման համար նոր, պարզ արտահայտություններ: Ցույց է տրված, որ սենյակային ջերմաստիճաններում հիպերձայնային ալիքների մարման գործակիցների ստացված արտահայտություններով հաշված և գիտափորձերում չափված արժեքները լավ համապատասխանության մեջ են:

ABSORPTION OF HYPERSONIC WAVES IN SINGLE CRYSTALS OF
LITHIUM NIOBATE

A.V. YEGANYAN, N.E. KOKANYAN, M. AILLERIE, E.P. KOKANYAN

New and simple expressions are obtained for a quick assessment of the absorption coefficients of longitudinal and transverse and hypersonic waves in lithium niobate single crystals in the Akhiezer regime. It is shown that at room temperature the attenuation coefficients of hypersonic waves calculated from the obtained expressions and the values determined experimentally are in good agreement.

ПОЛУЧЕНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ ВАКУУМНО- НАПЫЛЕННЫХ ПЕРОВСКИТНЫХ ПЛЕНОК $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$ НА ЧЕРНОМ КРЕМНИИ

Г.Е. АЙВАЗЯН^{1*}, Л.А. АХОЯН¹, А.Р. ДАШТОЯН¹, Л.А. МАТЕВОСЯН²

¹Национальный политехнический университет Армении, Ереван, Армения

²Институт радиопизики и электроники НАН Армении, Аштарак, Армения

*e-mail: agagarm@gmail.com

(Поступила в редакцию 6 сентября 2022 г.)

Оптимизирована технология совместного и последовательного вакуумного напыления перовскитных пленок со смешанными галогенами ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$). Продемонстрирована возможность улучшения термической стабильности пленок добавлением атомов цезия в неорганический прекурсор. Синтезированы и исследованы структурные и оптические свойства перовскитных пленок на черном кремнии. Показано, что формируются качественные по структуре и фазовому составу пленки, которые характеризуются низким коэффициентом отражения в широком диапазоне длин волн излучения. Вакуумно-напыленные перовскитные пленки на черном кремнии имеют большой потенциал для разработки высокоэффективных tandemных солнечных элементов.

1. Введение

Перовскиты имеют структуру ABX_3 , где А – катионы метиламмония (CH_3NH_3^+) или формамидиния (CN_2H_4^+), В – двухвалентный металлический катион ряда металлов, чаще всего свинца (Pb^{2+}) и олова (Sn^{2+}), X – различные анионы галогенов: хлора (Cl^-), брома (Br^-) и йода (I^-) или их смеси. Благодаря подходящей ширине запрещенной зоны, большой диффузионной длине носителей, толерантности к дефектам и высокому значению коэффициента оптического поглощения, перовскит стал основой нового поколения солнечных элементов. Эффективность перовскитных солнечных элементов демонстрирует впечатляющий рост с 3.8 % в 2009 г. до более 25 % в настоящее время [1–3]. Однако серьезной проблемой на пути широкомасштабного использования перовскитных солнечных элементов является нестабильность, когда их параметры постепенно меняются при воздействии окружающей среды, в том числе, температуры. В литературе представлены различные подходы к увеличению термической стабильности перовскитов через оптимизацию их химического состава [4–7]. В частности, добавление малого количества органического модификатора в объем или на поверхность перовскитного материала может снижать концентрацию дефектов и повышать, тем самым, температурную стабильность пленки [4].

Для солнечных элементов наиболее перспективными считаются

металлорганические перовскиты на основе свинца (Pb) и со смешанным составом галогенов, например, $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$ [8–10]. Наличие Pb обеспечивает большую защиту соединения от окисления, а перовскиты со смешанными галогенами обладают намного большей диффузионной длиной электронов и дырок, чем одногалогенные перовскиты, например, $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ [11].

Для получения пленок металлорганических перовскитов используют два исходных компонента: неорганический (йодид, бромид, хлорид свинца или олова) и органический (хлорид, йодид или бромид метиламмония или формамидиния). Перовскитная пленка образуется при их смешивании в различных соотношениях с помощью различных технологических методов: центрифугирования, термического вакуумного напыления, атомно-слоевого осаждения, химического осаждения из паровой фазы, погружения в раствор и др. [3,12–16]. Термическое вакуумное напыление наиболее качественный метод, дающий отличные результаты в аспекте кристалличности, морфологии и гомогенности получаемой перовскитной пленки. При этом напыление исходных компонентов осуществляют как последовательно (послойно) [3,17–19], так и совместно (смешанно) [14,20–22]. В первом случае сначала напыляют неорганический исходный компонент, а затем органический.

В недавних исследованиях мы экспериментально и с помощью оптического моделирования продемонстрировали перспективность создания структур типа монокристаллический кремний–черный кремний–перовскит для их возможного применения в tandemных солнечных элементах [23,24]. Было показано, что нанотекстурированная поверхность черного кремния способствует значительному снижению оптических потерь на отражение. Это стимулирует углубленные исследования свойств перовскитных пленок на кремниевой пластине с приповерхностным слоем черного кремния.

Настоящая работа посвящена разработке технологии синтеза перовскитных пленок со смешанными галогенами ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$) методами совместного и последовательного вакуумного напыления, а также изучению их структурных и оптических свойств на черном кремнии. Определенное внимание уделено возможности улучшения термической стабильности пленок.

2. Экспериментальная часть

В качестве исходных подложек использовались кремниевые пластины с поверхностным слоем черного кремния, покрытого тонкой пленкой диоксида титана (TiO_2). Отметим, что TiO_2 характеризуется необходимым расположением энергетических зон, отличными оптоэлектронными свойствами и широко используются в кремниевом-перовскитных tandemных солнечных элементах в качестве электронного транспортного слоя [25,26]. Средняя высота конусообразных нановыступов черного кремния составляла 640 нм, зазор между ними – 50 нм, диаметр основания – 100 нм, а толщина пленки TiO_2 – 30 нм. Детали параметров процесса и описание оборудования подготовки исходных подложек приведены в [24]. С целью оптимизации технологии синтеза перовскитных пленок, а также для изучения их оптического поглощения и пропускания, использовались также оптически полированные стеклянные подложки.

Напыление перовскитных пленок проводилось в вакуумной установке ВУП-

4 при давлении остаточных газов $\sim 10^{-5}$ Торр из резистивно-нагреваемых кварцевых тиглей с питанием от независимых источников. Для обеспечения равномерности осаждения и получения образцов необходимой площади подложки помещались на вращающемся держателе на расстоянии 8–10 см от испарителей. В качестве прекурсоров были использованы неорганический йодид свинца (PbI_2) и органический хлорид метиламмония ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Cl}$, MACl). Так как MACl и PbI_2 хорошо сублимируют, то температуры испарителей были выбраны ниже точек плавления обоих компонент таким образом, чтобы возможно было проводить как последовательное, так и совместное напыление без каких-либо изменений технологических режимов. При последовательном напылении сначала осаждали PbI_2 , а затем – MACl .

В ходе экспериментов были определены оптимальные температуры испарителей для MACl и PbI_2 – 180°C и 340°C соответственно, что обеспечивало скорость роста перовскитной пленки порядка $12 \text{ \AA/s}$. После осаждения полученные пленки толщиной 330 нм подвергались отжигу вне вакуумной камеры в атмосфере воздуха при температуре 100°C в течение 10–35 мин. Такой низкотемпературный отжиг практически не влияет на структурные и оптические свойства черного кремния [27].

На рис.1 представлены схематические картины процесса вакуумного напыления и поперечного сечения экспериментальных образцов со стеклянными и кремниевыми подложками.

Морфология поверхности синтезированных пленок была изучена методом атомно-силовой микроскопии (АСМ) при использовании установки Solver Pro (NT-MDT) в полуконтактном режиме. Область сканирования составляла $2 \times 2 \text{ мкм}^2$. Анализ полученных данных был выполнен при помощи специализированного программного комплекса Gwyddion, позволяющего рассчитать среднее арифметическое отклонение всех точек профиля шероховатости от средней линии на длине оценки (субшероховатость), а также количество, среднюю высоту,

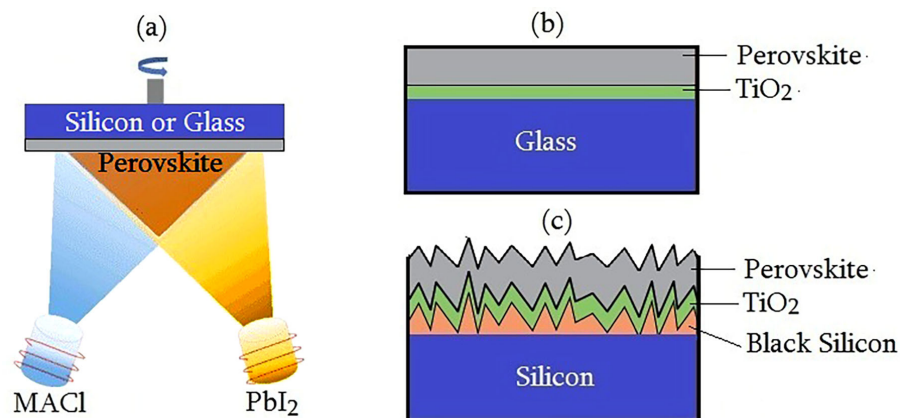


Рис.1. Схематические картины (a) процесса вакуумного напыления, поперечного сечения экспериментальных образцов со (b) стеклянными и (c) кремниевыми подложками.

диаметр и распределение по размеру отдельных структурных образований (зерен). Структурные свойства полученных образцов были исследованы с помощью сканирующего электронного микроскопа (СЭМ) JEOL JSM-6700F при напряжении 5 кВ. Структурно-фазовая диагностика перовскитных пленок проводилась на рентгеновском дифрактометре Empyrean фирмы Panalytical с возбуждающим CoKa-излучением (1.54178 Å). Изучение оптических свойств образцов осуществляли на спектрометре Filmetrics F20 в диапазоне длин волн $\lambda = 300\text{--}1100$ нм.

3. Результаты и их обсуждение

На рис.2 представлены спектры пропускания последовательно и совместно напыленных перовскитных пленок на стеклянных подложках до и после отжига.

Из рис.2 видно, что отжиг последовательно напыленных пленок приводит к значительному снижению пропускания (увеличению поглощения) в коротковолновой области спектра (рис.2а), тогда как у совместно напыленных пленок первоначальное высокое поглощение практически не меняется (рис.2б). Для первых пленок увеличение поглощения связано с улучшением качества кристаллической структуры пленки в процессе отжига, так как слоистая структура PbI_2 обеспечивает большую площадь соприкосновения с молекулами MAI и способствует их быстрому проникновению в межслойные пространства. Самое большое смещение от первоначального спектра наблюдается при отжиге в течение 35 мин, после чего последовательно напыленные перовскитные пленки практически имели такой же спектр и темно-коричневый цвет, как совместно напыленные пленки. При этом край зоны пропускания приходится на 740–760 нм, а в длинноволновой области спектров наблюдаются осцилляции, связанные с оптическими потерями на границе пленка–подложка. Отметим также, что при более низких температурах отжига (50–80°C) кристаллическая структура последовательно напыленных пленок не успевает полностью сформироваться, из-за чего улучшение поглощения незначительно.

С целью улучшения термической стабильности перовскитных пленок был опробован способ внедрения в их состав атомов цезия (Cs) путем добавлением до 2% иодида цезия (CsI) в состав прекурсора PbI_2 . Ранее этот подход был удачно продемонстрирован для пленок одналогенного перовскита $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$,

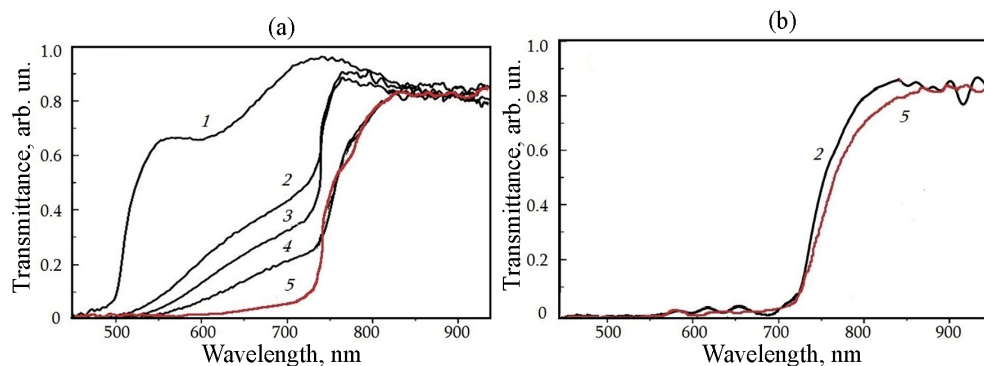


Рис.2. Спектры пропускания (а) последовательно и (б) совместно напыленных перовскитных пленок до и после отжига: 1 – PbI_2 , 2 – до отжига, 3 – отжиг 10 мин, 4 – отжиг 20 мин и 5 – отжиг 35 мин.

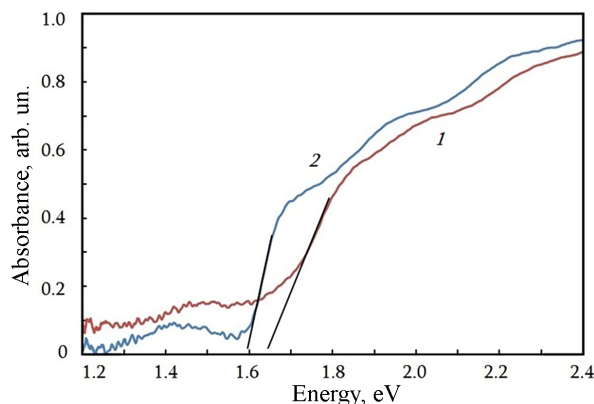


Рис.3. Спектры поглощения (1) исходных перовскитных пленок и (2) с добавкой Cs.

осажденных методом центрифугирования [7]. На рис.3 представлены спектры поглощения исходных перовскитных пленок и с добавкой атомов Cs. На них приведены касательные линии для оценки оптической ширины запрещенной зоны перовскита.

Оценочное значение ширины запрещенной зоны для пленки без добавок Cs составляет ≈ 1.6 эВ, что находится в хорошем соответствии с литературными данными [8–10]. Добавка Cs незначительно увеличивает поглощение и всего на 50 мэВ смещает край поглощения полупроводника в сторону больших энергий фотонов. Это означает, что кристаллическая структура перовскита слабо искажается при введении до 2% CsI в состав прекурсора PbI_2 . По резкой крутизне кривых спектров поглощения при 1.6–1.7 эВ можно сделать вывод, что синтезированный перовскит является полупроводником с собственным поглощением.

Более сильное влияние внедренные атомы Cs оказывают на термическую стабильность перовскитных пленок. Так, выдержка обеих пленок при температуре 120°C показала, что уже через час пленки без атомов Cs деградируют (органическая составляющая испаряется) до образования PbI_2 с характерным желтым цветом (спектр пропускания PbI_2 показан на рис.2а, кривая 1), а

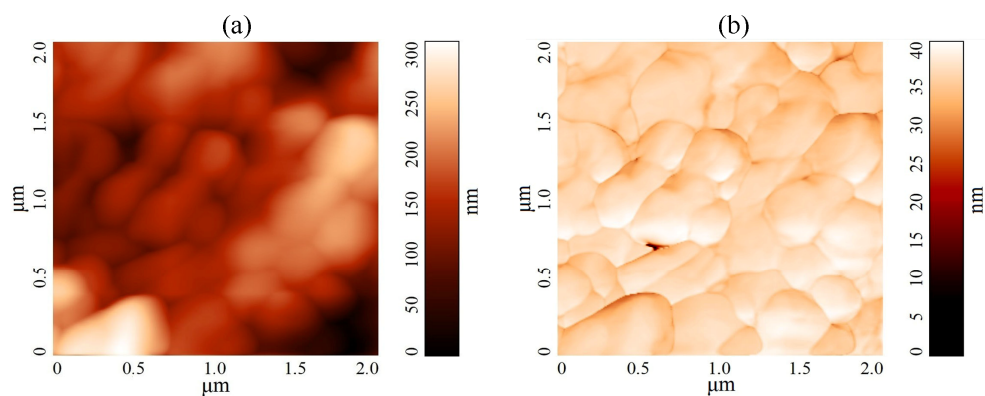


Рис.4. АСМ изображения поверхности последовательно напыленных перовскитных пленок на черном кремнии: (а) – топография, (б) – фазовый контраст.

пленка с содержанием Cs практически не меняется и сохраняет как первоначальный темно-коричневый цвет, так и исходный спектр поглощения. При обычных условиях хранения, свойства пленок не меняются в течение долгого времени.

Полученные результаты свидетельствуют о полном превращении компонент MAI и PbI_2 в перовскит во время совместного напыления, а в случае последовательного напыления формирование кристаллической решетки перовскита завершается в результате последующего длительного отжига. Именно поэтому далее эксперименты с черным кремнием проводились на свежеприготовленных совместно напыленных пленках и на последовательно напыленных пленках после отжига в течение 35 мин.

На рис.4 приведены типичные АСМ изображения (топография и фазовый контраст) поверхности последовательно напыленных перовскитных пленок на черном кремнии. Видно, что пленка имеет нанокристаллическую структуру, образована плотно-упакованными зернами сферической формы с четкими границами между ними. Характерный размер зерен составляет 164 нм при субшероховатости 42 нм. Совместно напыленные пленки имели схожую морфологию (рис.5). Однако, в этом случае размер зерен и субшероховатость несколько больше – 176 нм и 45 нм, соответственно. Для сравнения отметим, что субшероховатость перовскитных пленок на полированную поверхность подложки не превышает 7 нм [28].

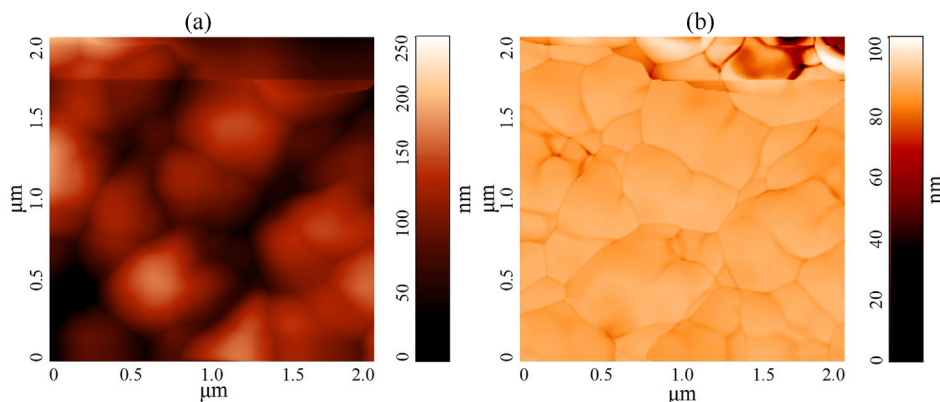


Рис.5. АСМ изображения поверхности совместно напыленных перовскитных пленок на черном кремнии: (а) – топография, (б) – фазовый контраст.

Результаты АСМ исследований полностью подтверждаются СЭМ изображениями поверхности и поперечного сечения образцов под 45° (рис.6). Видно, что пленки перовскита с высокой степенью конформности, без пор и пустот заполняют пространство между конусообразными нановыступами черного кремния (СЭМ изображения исходных слоев черного кремния без пленок приведены в работе [24]). Отметим, что перовскитные пленки, осажденные методом центрифугирования на текстурированную поверхность кремния, получаются неравномерными по толщине, содержат пустоты в зазорах и имеют разрывы на вершинах пирамидообразных выступов микронного масштаба [29,30].

На рис.7 представлена типичная рентгеновская дифрактограмма совместно напыленных перовскитных пленок на черном кремнии. Наблюдаются сильные дифракционные пики при 14.12° , 28.50° и 31.94° , которые отвечают плоскостям

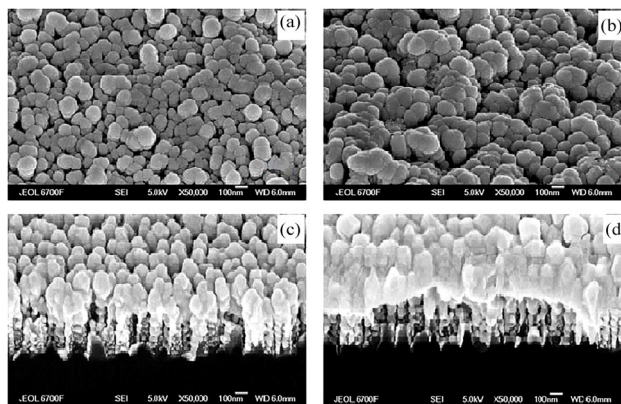


Рис.6. СЭМ изображения (a,b) поверхности и (c,d) поперечного сечения под углом 45° образцов с (a,c) послойно и (b,d) совместно напыленными перовскитными пленками на черном кремнии.

кристалла перовскита (110), (220) и (310) соответственно и указывают на тетрагональную кристаллическую структуру синтезированных пленок. Также отсутствуют дополнительные пики, принадлежащие прекурсорам перовскита, что свидетельствует о высоком уровне фазовой чистоты. Последовательно напыленные пленки имели такую же дифракционную картину, но со слабым пиком прекурсора PbI_2 при 12.65° (вставка на рис.7). По сравнению с аналогичными пиками одногалогенного перовскита $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ [11], наблюдается некоторое смещение пиков, что связано с частичным замещением атомов I атомами Cl.

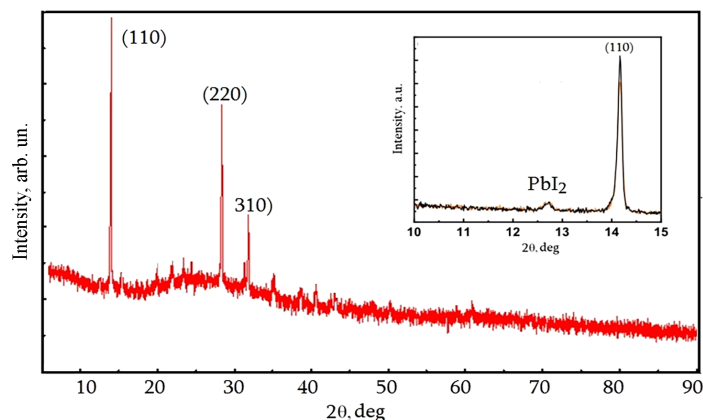


Рис.7. Типичная рентгеновская дифрактограмма совместно напыленных перовскитных пленок на черном кремнии. На вставке сегмент дифрактограммы последовательно напыленных пленок.

Спектры полного оптического отражения поверхности пленок перовскита на черном кремнии представлены на рис.8. Для сравнения там же приведен типичный спектр отражения пленок перовскита на полированной стеклянной подложке.

Из рис.8 следует, что спектры отражения совместно и последовательно напыленных перовскитных пленок на черном кремнии практически одинаковы. Некоторое отличие в ближней УФ и длинноволновой областях, по всей вероятности, обусловлено различием их шероховатостей. Важен тот факт, что черный

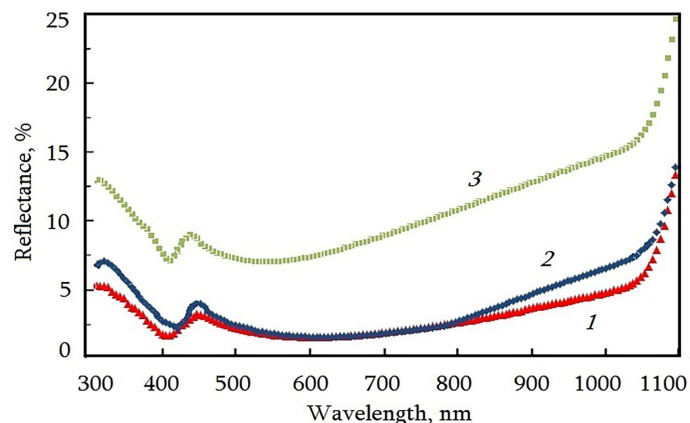


Рис.8. Спектры отражения (1) совместно и (2) последовательно напыленных перовскитных пленок на черном кремнии и (3) типичный спектр отражения пленок перовскита на стеклянной подложке.

кремний способствует существенному (почти в 3 раза) уменьшению отражения образцов по сравнению с пленками на полированной подложке. Крайне низкое отражение связано с наличием нанотекстуры как на поверхности перовскитной пленки, так и кремниевой пластины. Наноструктура может также способствовать переносу зарядов и их более эффективному разделению на границе раздела в кремниево-перовскитных солнечных элементах [31]. С другой стороны, высокая шероховатость поверхности перовскитной пленки увеличивает вероятность короткого замыкания устройства между контактным электродом и перовскитом в случае, когда дырочный или электронный транспортный слой не будут полностью покрывать перовскитную пленку. Таким образом, существует компромисс в отношении параметров черного кремния с точки зрения эффективности tandemного солнечного элемента.

Следует заметить, что несмотря на то, что совместно и последовательно напыленные перовскитные пленки на черном кремнии имеют почти одинаковые структурные и оптические свойства, однако с точки зрения технологичности предпочтительно напыление прекурсоров осуществлять одновременно (совместно) [32]. Этот аспект особенно важен при масштабировании технологии и для практического применения в производстве tandemных солнечных элементов. Однако в этом случае необходимо четко настроить и контролировать состав и скорость осаждения каждого прекурсора перовскита.

4. Заключение

Разработана технология синтеза перовскитных пленок со смешанными галогенами ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$) методом совместного и последовательного вакуумного напыления. Показано, что полное превращение органических и неорганических прекурсоров ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Cl}$ и PbI_2) в перовскит происходит во время совместного напыления, а в случае последовательного напыления – в результате последующего длительного отжига. Продemonстрировано, что добавление атомов цезия в объем пленок существенно увеличивает их термическую стабильность. Изучены структурные и оптические свойства вакуумно-напыленных перовскитных

пленок на черном кремнии. Показано, что нанотекстурированная поверхность не препятствует формированию качественного по структуре и фазовому составу обоих перовскитных пленок. Более того, черный кремний способствует существенному уменьшению отражения образцов. Полученные результаты свидетельствуют о перспективности применения вакуумно-напыленных перовскитных пленок в tandemных солнечных элементах со слоем черного кремния. Предпочтительным является синтез перовскитных пленок методом совместного вакуумного напыления.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Комитета по науке РА в рамках научного проекта №21AG-2B011.

ЛИТЕРАТУРА

1. T. Wu, Z. Qin, Y. Wang, Y. Wu, W. Chen, S. Zhang, M. Cai, S. Dai, J. Zhang, J. Liu, Z. Zhou, X. Liu, H. Segawa, H. Tan, Q. Tang, J. Fang, T. Li, L. Ding, Z. Ning, Y. Qi, Y. Zhang, L. Han. *Nano-Micro Lett.*, **13**, 152 (2021).
2. M. Green, E. Dunlop, J. Hohl-Ebinger, M. Yoshita, N. Kopidakis, K. Bothe, D. Hinken, M. Rauer, X. Hao. *Prog. Photovolt.*, **30**(7), 687 (2022).
3. J. Yan, T.J. Savenije, L. Mazzarella, O. Isabella. *Sustainable Energy Fuels*, **6**, 243 (2022).
4. Y. Li, H. Wu, W. Qi, J. Li, J. Cheng, Y. Zhao, Y. Li, X. Zhang. *Nano Energy*, **77**, 105237 (2020).
5. J. Song, Q. Qiu, X. Sun, L. Wang. *Organic Electronics*, **108**, 106598 (2022).
6. M.A. Afroz, N. Ghimire, K.M. Reza, B. Bahrami, R. Bobba, A. Gurung, A. Chowdhury, P. Iyer, Q. Qiao. *ACS Appl. Energy Mater.*, **3**(3), 2432 (2020).
7. H. Choi, J. Jeong, H.B. Kim, S. Kim, B. Walker, G.H. Kim, J.Y. Kim. *Nano Energy*, **7**, 80 (2014).
8. P. Sarkara, S.K. Tripathy, K.L. Baishnab. *Solar Energy*, **230**, 390 (2021).
9. F. Xu, T. Zhang, G. Li, Y. Zhao. *Chem. Sus. Chem.*, **10**, 2365 (2017).
10. H-P. Hsu, L-C. Li, M. Shellaiah, K.W. Sun. *Sci. Rep.*, **9**, 13311 (2019).
11. D.S. Stranks, G.E. Eperon, G. Grancini, C. Menelaou, M.J.P. Alcocer, T. Leijtens, L.M. Herz, A. Petrozza, H.J. Snaith. *Science*, **342**, 341 (2013).
12. J. Zhong, W. Wu, L. Ding, D. Kuang. *Energy Environ. Mater.*, **4**, 277 (2021).
13. N.A.N. Ouedraogo, Y. Chen, Y.Y. Xiao, Q. Meng, C.B. Han, H. Yan, Y. Zhang. *Nano Energy*, **67**, 104249 (2020).
14. M. Liu, M.B. Johnston, H.J. Snaith. *Nature*, **501**, 395 (2013).
15. N. Calisi, E. Galvanetto, F. Borgioli, S.M. Martinuzzi, T. Bacci, S. Caporali. *Mat. Sci. Semicond. Processing*, **147**, 106721 (2022).
16. Q. Guesnay, F. Sahli, C. Ballif, Q. Jeangros. *APL Materials*, **9**, 100703 (2021).
17. C.-W. Chen, H.-W. Kang, S.-Y. Hsiao. *Adv. Mater.*, **26**, 6647 (2014).
18. D. Yang, Z. Yang, W. Qin, Y. Zhang, S. Liu, C. Li. *J. Mater. Chem. A*, **3**(18), 9401 (2015).
19. J.B. Patel, R.L. Milot, A.D. Wright, L.M. Herz, M.B. Johnston. *J. Phys. Chem. Lett.*,

- 7(1), 96 (2016).
20. **C. Gao, J. Liu, C. Liao, Q. Ye, Y. Zhang, X. He, X. Guo, J. Mei, W. Lau.** *RSC Adv.*, **5**, 26175 (2015).
 21. **J. Borchert, R.L. Milot, J.B. Patel, C.L. Davies, A.D. Wright, L.M. Maestro, H.J. Snaith, L.M. Herz, M.B. Johnston.** *ACS Energy Lett.*, **2**, 2799 (2017).
 22. **R. Kottokkaran, H.A. Gaonkar, H.A. Abbas, M. Noack, V. Dala.** *J. Mater. Sci.: Mater. Electron.*, **30**, 5487 (2019).
 23. **F.V. Gasparyan, G.Y. Ayvazyan.** *J. Contemp. Phys.*, **57**, 234 (2022).
 24. **G.Y. Ayvazyan, D.S. Kovalenko, M.S. Lebedev, L.A. Matevosyan, A.V. Semchenko.** *J. Contemp. Phys.*, **57**, 402 (2022).
 25. **T. Leijtens, K.A. Bush, R. Prasanna, M.D. McGehee.** *Nat. Energy*, **3**, 828 (2018).
 26. **S. Sahare, H.D. Pham, D. Angmo, P. Ghoderao, J. MacLeod, S.B. Khan, S-L. Lee, S.P. Singh, P. Sonar.** *Adv. Energy Mater.*, **11**(42), 2101085 (2021).
 27. **G.Y. Ayvazyan, A. Vaseashta, F.V. Gasparyan, S.Kh. Khudaverdyan.** *J. Mater Sci: Mater. Electron.*, **33**, 17001 (2022).
 28. **Zh. Gevorkian., L. Matevosyan, K. Avjyan, V. Harutyunyan, E. Aleksanyan, K. Manukyan.** *Mat. Res. Express*, **7**(1), 016408 (2020).
 29. **J. Burschka, N. Pellet, S.-J. Moon, R. Humphry-Baker, P. Gao, M.K. Nazeeruddin, M. Grätzel.** *Nature*, **499**, 316 (2013).
 30. **F. Sahli, J. Werner, B.A. Kamino, M. Bräuninger.** *Nat. Mater.*, **17**(9), 820 (2018).
 31. **G. Li, K.L. Ching, J.Y.L. Ho, M. Wong, H.-S. Kwok.** *Adv. Energy Mat.*, **5**(9), 1401775 (2015).
 32. **A. Vaseashta, G. Ayvazyan, S. Khudaverdyan, L. Matevosyan.** *Phys. Status Solidi RRL*, **17**, 202200482 (2023).

PREPARATION AND INVESTIGATION OF VACUUM-DEPOSITED CH₃NH₃PbI_{3-x}Cl_x PEROVSKITE FILMS ON BLACK SILICON

G.Y. AYVAZYAN, L.A. HAKHOYAN, H.R. DASHTOYAN, L.A. MATEVOSYAN

The technology of vacuum co-deposition and sequential deposition of the mixed-halide perovskite films (CH₃NH₃PbI_{3-x}Cl_x) has been optimized. The possibility of improving the thermal stability of films by adding cesium atoms to an inorganic precursor is demonstrated. The structural and optical properties of perovskite films on black silicon are synthesized and studied. It is shown that films of high quality in structure and phase composition are formed, which are characterized by a low reflection coefficient in a wide range of radiation wavelengths. Vacuum-deposited perovskite films on black silicon have great potential for the development of high-efficiency tandem solar cells.

ДИФРАКЦИОННЫЕ ПОЛЯ И ПОЛЯ ЗАРЯДОВ, ВЫРАЖЕННЫЕ ЧЕРЕЗ ВЕКТОР ГЕРЦА В ЭЛЕКТРОДИНАМИКЕ

М.К. БАЛЯН*

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

*e-mail: mbalyan@ysu.am

(Поступила в редакцию 31 октября 2022 г.)

В первой части данной работы с помощью найденной векторной функции Грина электромагнитное поле в произвольном образом выбранном объеме представлено в векторной форме с помощью поверхностных и объемных интегралов, причем поверхностные интегралы описывают дифракцию поля, создаваемого внешними к объему зарядами, а объемные интегралы описывают поля, создаваемые зарядами, движущимися внутри объема. Для функции Грина была использована одна из двух найденных форм. В этой работе получены выражения для электромагнитного поля с использованием второй формы найденной функции Грина. При использовании второй формы векторной функции Грина поля зарядов, движущихся внутри объема, выражаются через обобщенный вектор Герца. Полученные в этой работе выражения имеют свои преимущества для определения полей в выбранном объеме.

1. Введение

В электродинамике электромагнитное поле зарядов обычно определяют с помощью векторного и скалярного потенциалов [1,2]. Но есть и другой способ определения полей – с помощью вектора Герца [3,4]. Хотя вектор Герца вводится в общем случае для зависящих от времени полей [4], но обычно в явном виде определяется и используется для гармонически зависящего от времени случая. В работе [5] в зависящем от времени случае было найдено электромагнитное поле в произвольном образом выбранном объеме, когда и внутри объема, и вне его находятся движущиеся заряды. Поля зарядов вне объема выражаются через поверхностные интегралы, а заряды внутри объема создают поля, которые выражаются объемными интегралами. Поля были найдены с использованием векторной функции Грина, найденной в той же работе. Причем для векторной функции Грина были найдены два выражения. В [5] была использована первая из этих форм, что привело к выражению полей зарядов внутри объема через вектор и скалярный потенциалы.

В этой работе мы будем использовать вторую форму векторной функции Грина, что приведет к другой форме представления полей внутри объема. Именно, поля зарядов внутри объема будут выражаться через вектор Герца для негармонического случая, причем, для негармонического случая впервые найдено выражение для запаздывающего вектора Герца через интеграл от плотности тока.

2. Две формы зависящей от времени векторной функции Грина

Электромагнитное поле определяется уравнениями Максвелла [1,2], к которым мы добавим еще уравнение непрерывности, выражающее закон сохранения заряда:

$$\begin{aligned}\operatorname{rot}\mathbf{E} &= -\frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{B}}{\partial t}, \quad \operatorname{rot}\mathbf{B} = \frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{E}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c}\mathbf{j}, \\ \operatorname{div}\mathbf{B} &= 0, \quad \operatorname{div}\mathbf{E} = 4\pi\rho, \\ \frac{\partial\rho}{\partial t} + \operatorname{div}\mathbf{j} &= 0.\end{aligned}\tag{1}$$

Здесь первые четыре уравнения являются уравнениями Максвелла, а последнее уравнение – уравнение непрерывности, $\mathbf{E}$ и $\mathbf{B}$ – электрическое и магнитное поля, c – скорость света, ρ – плотность заряда, $\mathbf{j}$ – плотность тока. Согласно (1) поля удовлетворяют волновым уравнениям

$$\operatorname{rotrot}\mathbf{E} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\mathbf{E}}{\partial t^2} = -\frac{4\pi}{c^2}\frac{\partial\mathbf{j}}{\partial t}, \quad \operatorname{rotrot}\mathbf{B} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\mathbf{B}}{\partial t^2} = \frac{4\pi}{c}\operatorname{rot}\mathbf{j}.\tag{2}$$

Соответствующая векторная функция Грина удовлетворяет уравнению [5]

$$\operatorname{rotrot}\mathbf{G} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\mathbf{G}}{\partial t^2} = \mathbf{f}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_p)\delta(t-t_p).\tag{3}$$

Здесь $(\mathbf{r}, t)$ – текущая координата и время, а $(\mathbf{r}_p, t_p)$ – координата точки наблюдения p и время наблюдения, $\mathbf{f}$ – произвольный постоянный вектор, $\delta(\cdot)$ – дельта-функция Дирака. В первой части данной работы были найдены две равные друг-другу формы для запаздывающей векторной функции Грина

$$\mathbf{G}(\mathbf{r}_p - \mathbf{r}, t_p - t) = \frac{\mathbf{f}}{4\pi R}\delta\left(t_p - t - \frac{R}{c}\right) - \frac{c^2}{4\pi}\operatorname{grad}\operatorname{div}\left(\frac{\mathbf{f}}{R}\left(t_p - t - \frac{R}{c}\right)\theta\left(t_p - t - \frac{R}{c}\right)\right)\tag{4a}$$

и

$$\begin{aligned}\mathbf{G}(\mathbf{r}_p - \mathbf{r}, t_p - t) &= -\operatorname{rotrot}\left(\frac{c^2\mathbf{f}}{4\pi R}(t_p - t - R/c)\theta(t_p - t - R/c)\right) \\ &\quad + c^2\mathbf{f}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_p)(t_p - t)\theta(t_p - t).\end{aligned}\tag{4b}$$

Здесь $R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}_p|$. Используя первую форму (4a) в произвольно выбранном объеме V с поверхностью S для электромагнитного поля в [5] были найдены следующие формулы

$$\begin{aligned}\mathbf{E}(\mathbf{r}_p, t_p) &= \frac{1}{4\pi c}\frac{\partial}{\partial t_p}\oint_S \frac{[(\mathbf{n}\times\mathbf{B})]}{R}dS + \frac{1}{4\pi}\operatorname{rot}_p\oint_S \frac{[(\mathbf{E}\times\mathbf{n})]}{R}dS \\ &\quad + \frac{1}{4\pi}\nabla_p\oint_S \frac{[\mathbf{E}\mathbf{n}]}{R}dS - \frac{1}{c^2}\frac{\partial}{\partial t_p}\int_V \frac{[\mathbf{j}]}{R}dV - \operatorname{grad}_p\int_V \frac{[\rho]}{R}dV, \\ \mathbf{B}(\mathbf{r}_p, t_p) &= -\frac{1}{4\pi}\operatorname{rot}_p\oint_S \frac{[(\mathbf{n}\times\mathbf{B})]}{R}dS + \frac{1}{4\pi c}\frac{\partial}{\partial t_p}\oint_S \frac{[(\mathbf{E}\times\mathbf{n})]}{R}dS \\ &\quad + \frac{1}{4\pi}\nabla_p\oint_S \frac{[\mathbf{B}\mathbf{n}]}{R}dS + \frac{1}{c}\operatorname{rot}_p\int_V \frac{[\mathbf{j}]}{R}dV.\end{aligned}\tag{5}$$

Здесь символ $[-]$ означает, что функция берется не в момент времени t_p , а в запаздывающий момент $t_p - R/c$. Поверхностные интегралы описывают дифракционные поля, обусловленные полями движущихся вне объема зарядами, а объемные интегралы определяют поля движущихся внутри объема зарядов. Это следует из того, что объемные члены исчезают при отсутствии зарядов внутри объема и, следовательно, являются решениями неоднородных уравнений (2), в то время как поверхностные интегралы не зависят от присутствия зарядов внутри объема и являются решениями однородных уравнений, соответствующих уравнениям (2). Хотя выражения (5) были получены как решения уравнений (2), не используя понятия векторного и скалярного потенциалов [1,2], нетрудно в выражении (5) увидеть хорошо известные вектор и скалярные потенциалы $\mathbf{A} = c^{-1} \int_V [\mathbf{j}] / R dV$, $\phi = \int_V [\rho] / R dV$. Поля зарядов, движущихся внутри объема, как видно из (5) (объемные интегралы), выражаются через вектор и скалярные потенциалы как (соответственно электрическое и магнитное поля) $-c^{-1} \partial \mathbf{A} / \partial t_p - \text{grad}_p \phi$ и $\text{rot}_p \mathbf{A}$. В этой работе вторая форма векторной функции Грина (4b) будет использована для получения формул для электромагнитного поля в произвольным образом выбранном объеме V .

3. Электрическое и магнитное поля

В работе [5] для нахождения электромагнитного поля были получены следующие формулы

$$\begin{aligned} \mathbf{fE}(\mathbf{r}_p, t_p) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \oint_S (\mathbf{G} \times \text{rot} \mathbf{E} - \mathbf{E} \times \text{rot} \mathbf{G}) d\mathbf{S} dt - \frac{4\pi}{c^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_V \mathbf{G} \frac{\partial \mathbf{j}}{\partial t} dV dt, \\ \mathbf{fB}(\mathbf{r}_p, t_p) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \oint_S (\mathbf{G} \times \text{rot} \mathbf{B} - \mathbf{B} \times \text{rot} \mathbf{G}) d\mathbf{S} dt + \frac{4\pi}{c} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_V \mathbf{G} \text{rot} \mathbf{j} dV dt. \end{aligned} \quad (6)$$

Найдем формулы для полей исходя из выражений (6) и для векторной функции Грина используя формулу (4b), а не (4a), как в работе [5].

3.1. Электрическое поле

Сначала обратимся к нахождению электрического поля по первой формуле (6). Рассмотрим член $-(4\pi / c^2) \int_{-\infty}^{+\infty} \int_V \mathbf{G} \partial \mathbf{j} / \partial t dV dt$. Согласно (4b) вторая форма векторной функции Грина состоит из двух слагаемых. Обозначим первый из них через $\mathbf{G}_1$, а второй – через $\mathbf{G}_2$. Рассматриваемый член для первого слагаемого имеет вид $-(4\pi / c^2) \int_{-\infty}^{+\infty} \int_V \mathbf{G}_1 \partial \mathbf{j} / \partial t dV dt$. Подставляя из (4b) $\mathbf{G}_1$ и выполняя интегрирование по времени по частям, получим

$$-\frac{4\pi}{c^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_V \mathbf{G}_1 \partial \mathbf{j} / \partial t dV dt = \text{frot}_p \text{rot}_p \int_{-\infty}^{+\infty} \int_V \frac{\mathbf{j} \theta(t_p - t - R/c)}{R} dV dt. \quad (7)$$

Индекс « p » у знаков дифференцирования означает дифференцирование по координатам точки наблюдения. В (7) мы учли, что в силу того, что $R = |\mathbf{r}_p - \mathbf{r}|$,

дифференцирование функций от R по текущим координатам равно со знаком минус дифференцированию по соответствующим координатам точки наблюдения и как следствие $\text{rotrot}\left(\left(\mathbf{f}/R\right)\theta(t_p - t - R/c)\right) = \text{rot}_p \text{rot}_p\left(\left(\mathbf{f}/R\right)\theta(t_p - t - R/c)\right)$. При интегрировании по частям мы учли, что члены, получающиеся на бесконечных пределах, равны нулю. Это является следствием обращения в нуль на бесконечностях векторной функции $\text{rotrot}(\mathbf{f}(t_p - t - R/c)\theta(t_p - t - R/c)/R)$ и было доказано в первой части работы [5]. Кроме того, мы учли, что $(t_p - t - R/c)\delta(t_p - t - R/c) = 0$. Перейдем к слагаемому, связанной с $\mathbf{G}_2$:

$$-\frac{4\pi}{c^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_V \mathbf{f} c^2 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_p)(t_p - t) \theta(t_p - t) \frac{\partial \mathbf{j}}{\partial t} dV dt = -4\pi \mathbf{f} \int_{-\infty}^{+\infty} \theta(t_p - t) \mathbf{j}(\mathbf{r}_p, t) dt. \quad (8)$$

Здесь опять же мы выполнили интегрирование по времени по частям, причем член при $t = -\infty$ исчезает при предположении $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)|_{t \rightarrow -\infty} \rightarrow 0$. Это означает предположение, что заряды в бесконечном прошлом были неподвижны, а затем пришли в движение [6]. Член при $t = +\infty$ исчезает из-за обращения в нуль функции $\theta(t_p - t)$ при $t = +\infty$.

Теперь, согласно (6), рассмотрим член $\int_{-\infty}^{+\infty} \oint_S (\mathbf{G} \times \text{rot} \mathbf{E} - \mathbf{E} \times \text{rot} \mathbf{G}) d\mathbf{S} dt$. В этом члене дает вклад только $\mathbf{G}_1$, так как $\mathbf{G}_2$ содержит пространственную дельта функцию, которая обращается в нуль на поверхности, так как точка наблюдения лежит внутри объема. Для первого слагаемого этого члена имеем

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{+\infty} \oint_S \mathbf{G} \times \text{rot} \mathbf{E} d\mathbf{S} dt \\ &= \frac{c}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \oint_S \text{rotrot} \left(\frac{\mathbf{f}}{R} (t_p - t - R/c) \theta(t_p - t - R/c) \right) \times \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} d\mathbf{S} dt \\ &= -\frac{c\mathbf{f}}{4\pi} \text{rot}_p \text{rot}_p \int_{-\infty}^{+\infty} \oint_S \frac{\mathbf{n} \times \mathbf{B} \theta(t_p - t - R/c)}{R} d\mathbf{S} dt, \end{aligned} \quad (9)$$

где $\mathbf{n}$ – внешняя нормаль элемента поверхности $d\mathbf{S}$. Здесь мы использовали первое уравнение (1), выполнили интегрирование по времени по частям, причем на бесконечных пределах по времени при интегрировании по частям полученные члены исчезают в силу свойств функции $\text{rotrot}(\mathbf{f}(t_p - t - R/c)\theta(t_p - t - R/c)/R)$ [5]. Для второго слагаемого этого члена имеем

$$\begin{aligned} & -\int_{-\infty}^{+\infty} \oint_S \mathbf{E} \times \text{rot} \mathbf{G} d\mathbf{S} dt = -\frac{c^2}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \oint_S (\mathbf{n} \times \mathbf{E}) \text{rot} \Delta \left(\frac{\mathbf{f}}{R} (t_p - t - R/c) \theta(t_p - t - R/c) \right) d\mathbf{S} dt \\ &= -\int_{-\infty}^{+\infty} \oint_S (\mathbf{n} \times \mathbf{E}) \text{rot} \frac{\mathbf{f}}{4\pi R} \delta(t_p - t - R/c) d\mathbf{S} dt = -\frac{\mathbf{f}}{4\pi} \text{rot}_p \oint_S \frac{[(\mathbf{n} \times \mathbf{E})]}{R} d\mathbf{S}. \end{aligned} \quad (10)$$

Здесь мы воспользовались формулой $\text{rotrot} = \text{graddiv} - \Delta$, а также доказанной в работе [5] формулой

$$\begin{aligned} & \frac{c^2}{4\pi} \Delta \left(\frac{(t_p - t - R/c)\theta(t_p - t - R/c)}{R} \right) + c^2 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_p)(t_p - t)\theta(t_p - t) \\ &= \frac{1}{4\pi R} \delta(t_p - t - R/c), \end{aligned} \quad (11)$$

и учли, что член $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_p)(t_p - t)\theta(t_p - t)$ дает нуль на поверхности из-за пространственной дельта функции (точка наблюдения находится внутри объема). Объединяя формулы (7)–(10), согласно (6), для электрического поля получим

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}_p, t_p) &= -\frac{c}{4\pi} \text{rot}_p \text{rot}_p \int_{-\infty}^{+\infty} \oint_S \frac{\mathbf{n} \times \mathbf{B} \theta(t_p - t - R/c)}{R} dS dt \\ &- \frac{1}{4\pi} \text{rot}_p \oint_S \frac{[(\mathbf{n} \times \mathbf{E})]}{R} dS + \text{rot}_p \text{rot}_p \int_{-\infty}^{+\infty} \int_V \frac{\mathbf{j} \theta(t_p - t - R/c)}{R} dV dt \\ &- 4\pi \int_{-\infty}^{+\infty} \theta(t_p - t) \mathbf{j}(\mathbf{r}_p, t) dt. \end{aligned} \quad (12)$$

Здесь поверхностные интегралы представляют дифракционные поля, обусловленные полями заряженных частиц, находящиеся за пределами рассматриваемого объема, объемный интеграл представляет поле движущихся внутри объема зарядов, а последний член связан с тем, что мы поле вычисляем также в местах, где находятся заряды. В (12) нужно выделить особое внимание вектору

$$\mathbf{Z} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_V \frac{\mathbf{j} \theta(t_p - t - R/c)}{R} dV dt. \quad (13)$$

Этот вектор является вектором Герца [4] в общем случае зависящего от времени плотности тока. Чтобы это показать, поступим как в [4] и представим плотность тока и плотность заряда одним вектором $\mathbf{P}$ в виде

$$\mathbf{j} = \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t}, \quad \rho = -\text{div} \mathbf{P}. \quad (14)$$

Подставляя плотность тока из (14) в (13) и выполняя интегрирование по времени по частям, находим

$$\mathbf{Z} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_V \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} \frac{\theta(t_p - t - R/c)}{R} dV dt = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_V \frac{\mathbf{P} \delta(t_p - t - R/c)}{R} dV dt = \int_V \frac{[\mathbf{P}]}{R} dV. \quad (15)$$

Это выражение совпадает с выражением запаздывающего электрического вектора Герца [3]. Как уже было сказано, обычно используется вектор Герца для гармонического случая. Считая $\mathbf{P} = \mathbf{P}_0(\mathbf{r})e^{-i\omega t}$ и подставляя в (15), получим

$$\mathbf{Z} = e^{-i\omega t_p} \int_V \mathbf{P}_0(\mathbf{r}) \frac{e^{i\omega R/c}}{R} dV, \quad (16)$$

что совпадает с выражением вектора Герца в гармоническом случае [4]. Кроме того, выражение электрического поля $\text{rot}_p \text{rot}_p \mathbf{Z}$ заряженных частиц, движущихся внутри объема через вектор $\mathbf{Z}$ совпадает с выражением электрического поля через вектор Герца [3]. Вводя вектор Герца (13), выражение электрического поля (12) запишем в виде

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}_p, t_p) = & -\frac{c}{4\pi} \text{rot}_p \text{rot}_p \int_{-\infty}^{+\infty} \oint_S \frac{\mathbf{n} \times \mathbf{B} \theta(t_p - t - R/c)}{R} dS dt \\ & - \frac{1}{4\pi} \text{rot}_p \oint_S \frac{[(\mathbf{n} \times \mathbf{E})]}{R} dS + \text{rot}_p \text{rot}_p \mathbf{Z} - 4\pi \int_{-\infty}^{+\infty} \theta(t_p - t) \mathbf{j}(\mathbf{r}_p, t) dt. \end{aligned} \quad (17)$$

3.2. Магнитное поле

Перейдем к магнитному полю. Мы должны исходить из второго уравнения (6). Первый из поверхностных интегралов приводит к выражению

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \oint_S \mathbf{G} \times \text{rot} \mathbf{B} dS dt = -\frac{c^2}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \oint_S \text{rot} \text{rot} \left(\frac{\mathbf{f}}{R} \left(t_p - t - \frac{R}{c} \right) \theta \left(t_p - t - \frac{R}{c} \right) \right) \times \left(\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} \right) dS dt. \quad (18)$$

Для первого из этих членов имеем

$$\begin{aligned} & -\frac{c}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \oint_S \text{rot} \text{rot} \left(\frac{\mathbf{f}}{R} (t_p - t - R/c) \theta(t_p - t - R/c) \right) \times \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} dS dt \\ & = -\frac{c}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \oint_S \mathbf{n} \times \text{rot} \text{rot} \left(\frac{\mathbf{f}}{R} (t_p - t - R/c) \theta(t_p - t - R/c) \right) \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} dS dt \\ & = \frac{c\mathbf{f}}{4\pi} \text{rot}_p \text{rot}_p \int_{-\infty}^{+\infty} \oint_S \frac{(\mathbf{n} \times \mathbf{E})}{R} \theta(t_p - t - R/c) dS dt. \end{aligned} \quad (19)$$

Здесь было выполнено интегрирование по времени по частям. Для второго члена получим

$$\begin{aligned} & -\frac{c^2}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \oint_S \text{rot} \text{rot} \left(\frac{\mathbf{f}}{R} (t_p - t - R/c) \theta(t_p - t - R/c) \right) \times \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} dS dt \\ & = -c \int_{-\infty}^{+\infty} \int_V \text{div} \left(\text{rot} \text{rot} \left(\frac{\mathbf{f}}{R} (t_p - t - R/c) \theta(t_p - t - R/c) \right) \times \mathbf{j} \right) dV dt \\ & = -c \int_{-\infty}^{+\infty} \int_V \left(\mathbf{j} \text{rot} \text{rot} \left(\frac{\mathbf{f}}{R} (t_p - t - R/c) \theta(t_p - t - R/c) \right) \right. \\ & \quad \left. - \text{rot} \text{rot} \left(\frac{\mathbf{f}}{R} (t_p - t - R/c) \theta(t_p - t - R/c) \right) \text{rot} \mathbf{j} \right) dV dt. \end{aligned} \quad (20)$$

Рассмотрим первое слагаемое (20) (второе слагаемое в (20), оставим так как есть):

$$\begin{aligned} & -c \int_{-\infty}^{+\infty} \int_V \mathbf{j} \text{rot} \text{rot} \left(\frac{\mathbf{f}}{R} \left(t_p - t - \frac{R}{c} \right) \theta \left(t_p - t - \frac{R}{c} \right) \right) dV dt \\ & = c \int_{-\infty}^{+\infty} \int_V \mathbf{j} \text{rot} \Delta \left(\frac{\mathbf{f}}{R} \left(t_p - t - \frac{R}{c} \right) \theta \left(t_p - t - \frac{R}{c} \right) \right) dV dt \\ & = -\frac{1}{c} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_V \mathbf{j} \text{rot}_p \left(\frac{\mathbf{f}}{R} \delta \left(t_p - t - \frac{R}{c} \right) \right) dV dt - 4\pi c \int_{-\infty}^{+\infty} \int_V \mathbf{j} \text{rot} (\mathbf{f} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_p) (t_p - t) \theta(t_p - t)) dV dt. \end{aligned} \quad (21)$$

Имеем далее

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{c} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_V \mathbf{j} \operatorname{rot}_p \left(\frac{\mathbf{f}}{R} \delta \left(t_p - t - \frac{R}{c} \right) \right) dV dt - 4\pi c \int_{-\infty}^{+\infty} \int_V \mathbf{j} \operatorname{rot} \mathbf{f} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_p) (t_p - t) \theta(t_p - t) dV dt \\
& = \frac{\mathbf{f}}{c} \operatorname{rot}_p \int_{-\infty}^{+\infty} \int_V \frac{\mathbf{j}}{R} \delta \left(t_p - t - \frac{R}{c} \right) dV dt - 4\pi c \int_{-\infty}^{+\infty} \int_V \mathbf{j} \operatorname{rot} (\mathbf{f} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_p) (t_p - t) \theta(t_p - t)) dV dt \\
& = \frac{\mathbf{f}}{c} \operatorname{rot}_p \frac{\partial}{\partial t_p} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_V \frac{\mathbf{j}}{R} \theta \left(t_p - t - \frac{R}{c} \right) dV dt - 4\pi c \int_{-\infty}^{+\infty} \int_V \mathbf{j} \operatorname{rot} (\mathbf{f} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_p) (t_p - t) \theta(t_p - t)) dV dt \\
& = \frac{\mathbf{f}}{c} \operatorname{rot}_p \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial t_p} - 4\pi c \int_{-\infty}^{+\infty} \int_V \mathbf{j} \operatorname{rot} (\mathbf{f} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_p) (t_p - t) \theta(t_p - t)) dV dt.
\end{aligned} \tag{22}$$

Здесь мы воспользовались формулой (11). Рассмотрим теперь объемный интеграл во второй формуле (6):

$$\begin{aligned}
\frac{4\pi}{c} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_V \mathbf{G} \operatorname{rot} \mathbf{j} dV dt & = -c \int_{-\infty}^{+\infty} \int_V \operatorname{rot} \operatorname{rot} \left(\frac{\mathbf{f}}{R} \left(t_p - t - \frac{R}{c} \right) \theta \left(t_p - t - \frac{R}{c} \right) \right) \operatorname{rot} \mathbf{j} dV dt \\
& + 4\pi c \int_{-\infty}^{+\infty} \int_V \operatorname{div} (\mathbf{j} \times \mathbf{f} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_p) (t_p - t) \theta(t_p - t)) dV dt \\
& + 4\pi c \int_{-\infty}^{+\infty} \int_V \mathbf{j} \operatorname{rot} (\mathbf{f} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_p) (t_p - t) \theta(t_p - t)) dV dt \\
& = -c \int_{-\infty}^{+\infty} \int_V \operatorname{rot} \operatorname{rot} \left(\frac{\mathbf{f}}{R} \left(t_p - t - \frac{R}{c} \right) \theta \left(t_p - t - \frac{R}{c} \right) \right) \operatorname{rot} \mathbf{j} dV dt \\
& + 4\pi c \int_{-\infty}^{+\infty} \int_V \mathbf{j} \operatorname{rot} (\mathbf{f} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_p) (t_p - t) \theta(t_p - t)) dV dt
\end{aligned} \tag{23}$$

Теперь собирая члены (19), второе слагаемое (20), (21), (22) и (23), получим

$$\frac{c\mathbf{f}}{4\pi} \operatorname{rot}_p \operatorname{rot}_p \int_{-\infty}^{+\infty} \oint_S \frac{(\mathbf{n} \times \mathbf{E})}{R} \theta(t_p - t - R/c) dS dt + \frac{\mathbf{f}}{c} \operatorname{rot}_p \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial t_p}. \tag{24}$$

Осталось рассмотреть второй поверхностный интеграл во второй формуле (6). Для этого члена имеем

$$\begin{aligned}
-\int_{-\infty}^{+\infty} \int_V \mathbf{B} \times \operatorname{rot} \mathbf{G} dS dt & = -\int_{-\infty}^{+\infty} \oint_S \mathbf{B} \times \operatorname{rot} \Delta \left(\frac{c^2}{4\pi} \frac{\mathbf{f}}{R} \left(t_p - t - \frac{R}{c} \right) \theta \left(t_p - t - \frac{R}{c} \right) \right) dS dt \\
& = -\int_{-\infty}^{+\infty} \oint_S \mathbf{B} \times \operatorname{rot} \left(\frac{\mathbf{f}}{4\pi R} \delta \left(t_p - t - \frac{R}{c} \right) \right) dS dt = -\frac{\mathbf{f}}{4\pi} \operatorname{rot}_p \oint_S \frac{[\mathbf{n} \times \mathbf{B}]}{R} dS.
\end{aligned} \tag{25}$$

Комбинируя (24) и (25), для магнитного поля окончательно получаем

$$\begin{aligned}
\mathbf{B}(\mathbf{r}_p, t_p) & = -\frac{1}{4\pi} \operatorname{rot}_p \oint_S \frac{[\mathbf{n} \times \mathbf{B}]}{R} dS \\
& + \frac{c}{4\pi} \operatorname{rot}_p \operatorname{rot}_p \int_{-\infty}^{+\infty} \oint_S \frac{(\mathbf{n} \times \mathbf{E})}{R} \theta \left(t_p - t - \frac{R}{c} \right) dS dt + \frac{1}{c} \operatorname{rot}_p \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial t_p}.
\end{aligned} \tag{26}$$

Здесь также, как и для электрического поля имеются поверхностные интегралы,

выражающие дифракционные поля внешних источников и последний член, который через вектор Герца выражает магнитное поле движущихся внутри объема зарядов. Таким образом, для определения электромагнитного поля имеем

$$\begin{aligned}
\mathbf{E}(\mathbf{r}_p, t_p) = & -\frac{c}{4\pi} \text{rot}_p \text{rot}_p \int_{-\infty}^{+\infty} \oint_S \frac{\mathbf{n} \times \mathbf{B} \theta(t_p - t - R/c)}{R} dS dt \\
& - \frac{1}{4\pi} \text{rot}_p \oint_S \frac{[(\mathbf{n} \times \mathbf{E})]}{R} dS + \text{rot}_p \text{rot}_p \mathbf{Z} - 4\pi \int_{-\infty}^{+\infty} \theta(t_p - t) \mathbf{j}(\mathbf{r}_p, t) dt, \\
\mathbf{B}(\mathbf{r}_p, t_p) = & -\frac{1}{4\pi} \text{rot}_p \oint_S \frac{[\mathbf{n} \times \mathbf{B}]}{R} dS + \frac{c}{4\pi} \text{rot}_p \text{rot}_p \int_{-\infty}^{+\infty} \oint_S \frac{(\mathbf{n} \times \mathbf{E})}{R} \theta\left(t_p - t - \frac{R}{c}\right) dS dt \\
& + \frac{1}{c} \text{rot}_p \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial t_p}.
\end{aligned} \tag{27}$$

Как уже было сказано, последний член в выражении электрического поля в (27) связан с тем, что мы вычисляем поле также в тех точках, где имеются заряды. Действительно, если точка наблюдения лежит в точке, где нет зарядов, то $\mathbf{j}(\mathbf{r}_p, t) = 0$ и этот член исчезает. Но в общем случае он обеспечивает выполнение уравнения Максвелла $\text{div}_p \mathbf{E}(\mathbf{r}_p, t_p) = 4\pi \rho(\mathbf{r}_p, t_p)$. Это можно доказать, беря дивергенцию от обеих частей формулы для электрического поля в (27)

$$\begin{aligned}
\text{div}_p \mathbf{E}(\mathbf{r}_p, t_p) = & -4\pi \int_{-\infty}^{+\infty} \theta(t_p - t) \text{div}_p \mathbf{j}(\mathbf{r}_p, t) dt = 4\pi \int_{-\infty}^{+\infty} \theta(t_p - t) \frac{\partial \rho(\mathbf{r}_p, t)}{\partial t} dt \\
= & 4\pi \theta(t_p - t) \rho(\mathbf{r}_p, t) \Big|_{-\infty}^{+\infty} + 4\pi \rho(\mathbf{r}_p, t_p) = 4\pi \rho(\mathbf{r}_p, t_p).
\end{aligned} \tag{28}$$

Здесь мы воспользовались уравнением непрерывности, проинтегрировали по частям по времени и полученные на бесконечностях члены представили равными нулю, налагая условие $\rho(\mathbf{r}, t) \Big|_{t \rightarrow -\infty} \rightarrow 0$, что согласуется с использованным ранее условием $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \Big|_{t \rightarrow -\infty} \rightarrow 0$.

4. Заключение

В этой работе, являющейся продолжением работы [5], исследуется зависящая от времени векторная теория дифракции и полей заряженных частиц. В [5] получены выражения для электромагнитного поля с использованием векторной функции Грина, причем получены две формы векторной функции Грина. В работе [5] использована одна из этих форм, что привело к выражениям электромагнитных полей через поверхностные интегралы, представляющие дифракционные поля зарядов движущихся вне рассматриваемого объема, и через объемные интегралы, представляющие поля движущихся внутри объема зарядов. Причем для этих последних полученные выражения совпадают с выражениями через векторный и скалярный потенциалы. В данной работе использована вторая форма векторной функции Грина, что привело к другому интегральному представлению полей. Здесь объемные интегралы, представляющие поля движущихся внутри объема зарядов, выражаются через обобщенный вектор Герца. В данной работе для вектора Герца получено выражение через плотность тока.

ЛИТЕРАТУРА

1. **J.D. Jackson.** Classical Electrodynamics. 3rd ed., New York: Wiley, 1998.
2. **L.D. Landau, E.M. Lifshits.** Course of Theoretical Physics, v. 2. The Classical Theory of Fields, 4th rev. engl. Ed., London: Athenaum Press LTD, 1996.
3. **M. Born, E. Wolf.** Principles of Optics, Oxford: Pergamon Press, 1980.
4. **U.J.A. Stratton.** Electromagnetic theory, New York: McGraw-Hill Book Company, 1941.
5. **M.K. Balyan.** J. Contemp. Phys., **57**, 331 (2022).
6. **B.G. Levich.** Theoretical Physics, an Advanced Text, vol. 1, Theory of the Electromagnetic Field, Theory of Relativity, Amsterdam, London: North-Holland Publishing Company, 1970.

ԴԻՖՐԱԿՑԻՈՆ ԴԱՇՏԵՐԸ ԵՎ ԼԻՑՔԵՐԻ ԴԱՇՏԵՐԸ ՆԵՐԿԱՅԱՑՎԱԾ ՀԵՐՑԻ ՎԵԿՏՈՐԻ ՄԻՋՈՑՈՎ ԷԼԵԿՏՐԱԴԻՆԱՄԻԿԱՅՈՒՄ

Մ.Կ. ԲԱԼՅԱՆ

Նախորդ աշխատանքում, օգտագործելով գտնված վեկտորական Գրինի ֆունկցիան, էլեկտրամագնիսական դաշտերը կամայական վերցված ծավալում ներկայացված են վեկտորական տեսքով՝ օգտագործելով մակերևութային և ծավալային ինտեգրալներ, ընդ որում մակերևութային ինտեգրալները նկարագրում են դիֆրակցված դաշտը, որը ստեղծվել է ծավալից դուրս գտնվող լիցքերով, իսկ ծավալային ինտեգրալները նկարագրում են ծավալում շարժվող լիցքերի կողմից ստեղծված դաշտերը: Գրինի ֆունկցիայի համար օգտագործվել է գտնված երկու ձևերից մեկը: Այս աշխատանքում էլեկտրամագնիսական դաշտերի արտահայտություններն ստացվում են՝ օգտագործելով գտնված Գրինի ֆունկցիայի երկրորդ ձևը: Վեկտորական Գրինի ֆունկցիայի երկրորդ ձևն օգտագործելիս ծավալի ներսում շարժվող լիցքերի դաշտերն արտահայտվում են ընդհանրացված Հերցի վեկտորով: Աշխատանքում ստացված արտահայտություններն ունեն իրենց առավելությունները ընտրված ծավալում դաշտերը որոշելու համար:

DIFFRACTION FIELDS AND FIELDS OF CHARGES, EXPRESSED IN TERMS OF HERTZ VECTOR IN ELECTRODYNAMICS

M.K. BALYAN

In the first part of this work, using the found vector Green's function, the electromagnetic fields in an arbitrary chosen volume are presented in vector form using surface and volume integrals, at that the surface integrals describe the diffraction of the field of charges external to the volume, and the volume integrals describe the fields of the charges, moving within the volume. For the Green's function, one of the two found forms was used. In this work, expressions for the electromagnetic fields are obtained using the second form of the found Green's function. When using the second form of the vector Green's function, the fields of charges moving inside the volume are expressed in terms of the generalized Hertz vector. The expressions obtained in this work have their advantages for determining the fields in a selected volume.

СПЕКТРАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СВЯЗЫВАНИЯ TMetAlPyP3 И ZnTMetAlPyP3 ПОРФИРИНОВ С ДНК

Л.Р. АЛОЯН*, А.А. АВЕТИСЯН

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

*e-mail: aloyan@ysu.am

(Поступила в редакцию 16 мая 2022 г.)

Из полученных индуцированных спектров кругового дихроизма выявлено, что исследуемый порфирин связывается с ДНК методом интеркаляции, а его Zn-содержащий аналог методом внешнего упорядоченного взаимодействия. Получены спектры поглощения исследуемых комплексов при разных концентрациях ДНК, и по данным этих спектров вычислены параметры связывания (K_b , n) порфиринов с ДНК при двух значениях ионной силы раствора. Показано, что места для связывания порфиринов становятся менее доступны при более высоком значении ионной силы раствора. Наблюдаются также увеличение температуры плавления ДНК в присутствии метал-содержащего порфирина, а также уменьшение стабилизирующего эффекта порфиринов при увеличении ионной силы раствора.

1. Введение

В настоящее время для исследования структурных деталей комплексов лиганд-рецептор и понимания механизмов взаимодействия между двумя объектами используется довольно много экспериментальных методов. Известно, что такие “косвенные” экспериментальные методы исследования как спектроскопия поглощения и кругового дихроизма (CD) позволяют получить структурную информацию о комплексах лиганд-рецептор.

Исследование порфиринов, металлопорфиринов и их взаимодействие с биополимерами, в частности с ДНК, до сих пор остается предметом исследований многих научных центров. Известно, что катионные порфирины действуют как ингибиторы активности теломеразы человека, рецепторы для пептидов, расщепители ДНК и специфические зонды структуры ДНК. Было выявлено три основных способа связывания катионных порфиринов с ДНК: интеркаляция, связывание в большой бороздке и внешнее упорядоченное связывание, при которой порфирины укладываются вдоль спирали ДНК [1]. Было показано, что способ связывания порфирина с двойной спиралью нуклеиновых кислот, т.е. интеркаляционное или внешнее связывание можно предугадать, варьируя типом центрального металла в порфиринах [2]. Ионная сила раствора (количество

ионов в растворе), в котором происходит взаимодействие, и соотношение молекул порфирина и ДНК также являются факторами, влияющими на способ связывания [3,4]. Термодинамическая характеристика связывания лекарственных средств как лиганда может использоваться вместе со структурными исследованиями для полного понимания взаимодействия лиганда с ДНК. Термодинамические исследования ДНК–лиганд комплексов также является важным для эффективной разработки лекарственных препаратов [5,6].

В настоящей работе был использован комбинированный подход спектроскопии поглощения в видимой области и кругового дихроизма. Для расчета параметров связывания были использованы кривые титрования ДНК–порфириноккомплексов, полученные как функция увеличения концентрации ДНК, и проанализированы в рамках модели Мак-Ги и Хиппеля [7].

2. Материалы и методы исследований

В работе была использована сверхчистая высокомолекулярная ДНК тимуса теленка, белок <0.1 %, РНК <0.2 %, М.м.> 30 МДа). Структура водорастворимого катионного мезо-тетра-(3N-металлилпиридил) порфирина и его цинк содержащего аналога представлена на рис.1. Эти соединения были синтезированы на кафедре фармакологической химии Ереванского государственного медицинского университета. Концентрацию ДНК и порфиринов определяли спектрофотометрически. Исследования проводились в буферном растворе 1 BPSE и 0.1 BPSE (1 BPSE = 6 mM Na₂HPO₄+2 mM NaH₂PO₄+185 mM NaCl+1mM EDTA), pH 7.2, ионная сила μ = 0.2 и 0.02 (моль/л).

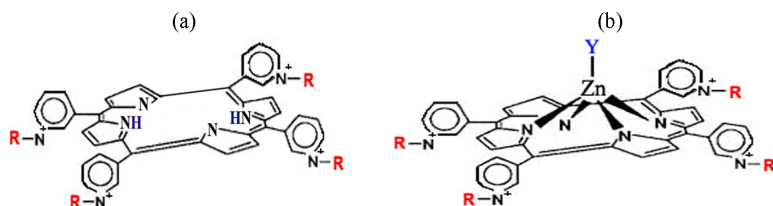


Рис.1. Структура мезо-тетра-(3N-металлилпиридил) порфирина и его Zn(II)-содержащего аналога. R = CH₂-C(-CH₃)=CH₂ (MetAl)

Информацию о конформационных изменениях ДНК, вызванных взаимодействием с порфиринами, можно получить из спектров кругового дихроизма (КД) комплексов порфиринов/ДНК. Различают две области спектров КД: область 220–310 нм, соответствующую полосе КД спектра природной ДНК, и область Соре 400–470 нм, соответствующую поглощающей области порфиринов. ДНК не имеет КД спектр в видимой области спектра. Порфирины, исследуемые в данной работе, как плоские симметричные соединения не обладают природной оптической активностью, фактически они обладают нулевым дихроизмом во всей спектральной области их электронных переходов. А полоса КД, наблюдаемая для

комплексов порфирина/ДНК в видимой области, часто называемой индуцированным КД спектром, является следствием связывания порфиринов и образования соответствующих структур с молекулой ДНК. Спектры кругового дихроизма получены на приборе спектрометр DSM-20 (OLIS). Спектрофотометрические измерения проводили на спектрофотометре Lambda 800 UV-VIS.

3. Результаты и их обсуждение

Многочисленными исследованиями на тетра-метил-пиридил-порфирине (ТМРyP) показано, что отрицательное значение индуцированного КД есть показатель интеркаляции порфиринов, а положительное значение – внешнего связывания. Следовательно, знак индуцированного КД спектра в видимой области может служить индикатором типа связывания порфирина с ДНК [8]. На рис.2 приведены спектры индуцированного КД.

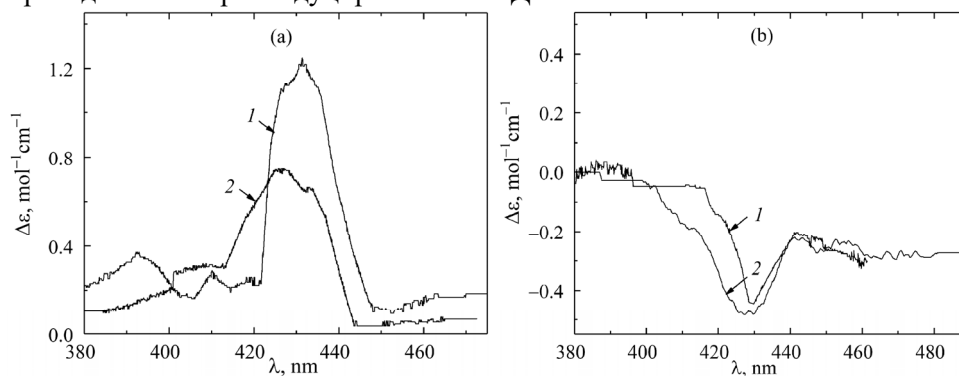


Рис.2 Индуцированные КД спектры (a) ZnTMeAlPyP3 и (b) TMeAlPyP3 комплексов с ДНК при $\mu = 0.2$ (1) и $\mu = 0.02$ (2), относительная концентрация [porphyrin]/[ДНК] = 0.1.

В присутствии TMeAlPyP3 порфирина индуцирует отрицательную полосу ИКД в видимой области спектров, что соответствует интеркаляционному способу связывания. Присутствие Zn-содержащего металла дает положительный сигнал индуцированного КД, что позволяет сделать вывод о внешнем связывании порфиринов. Это можно объяснить наличием в Zn-металлокомплексе аксиального лиганда (см. рис.1), что делает интеркаляцию этого металлопорфирина стерически невозможной.

Увеличение сигнала ИКД комплекса ZnTMeAlPyP3/ДНК, по-видимому, является результатом более высокой ионной силы (рис.2a). Увеличение сигнала ИКД предполагает, что стэкинг-взаимодействие между порфиринами и ДНК увеличивается, поскольку сигнал ИКД является результатом стэкинга порфиринов на ДНК. Другими словами, при увеличении ионной силы связанные порфирины в результате конформационных изменений ДНК располагаются близко друг к другу, создавая более протяженные участки на поверхности ДНК.

Другие результаты были получены для TMeAlPyP3/ДНК комплексов. При более высокой ионной силе наблюдается уменьшение индуцированного КД сигнала (рис.2b), что можно объяснить ослаблением стэкинг-взаимодействия между

порфиринами. Как упоминалось выше, порфирин ТМeAlPyP3 встраивается в ДНК. Более высокая ионная сила приводит к увеличению расстояния между порфиринами и, следовательно, к ослаблению взаимодействия между соседними порфиринами.

Взаимодействие порфиринов с ДНК исследовались также с помощью спектров поглощения в видимой области (полоса Соре порфиринов, около 430 нм). На растворы порфиринов с постоянной концентрацией (10^{-6} М) малыми порциями по 2 мкл добавлялся раствор ДНК и регистрировались спектры поглощения, так называемые спектры титрования. Результаты, полученные в ходе экспериментов по титрованию, использовались для расчета параметров связывания (константа связывания – K_b и число занятых пар оснований ДНК одной молекулой порфирина – n).

Расчеты выполнены с помощью модели, предложенной МакГи и фон Хиппелем с использованием уравнения (1) Корреа с сотрудниками [7]:

$$C_f = -\frac{r}{K_b} \left[\frac{nr-1}{nr-r-1} \right]^{-n} (nr-r-1), \quad (1)$$

где C_f – концентрация свободных порфиринов в растворе, $r = C_b/C_{bp}$, где C_b – концентрация связанных порфиринов, C_{bp} – концентрация пар оснований ДНК, K_b – константа связывания, а n – число занятых пар оснований ДНК одной молекулой порфирина. При более высокой концентрации ДНК в растворе, содержащем постоянную концентрацию порфиринов, для всех четырех комплексов возникает гипохромный эффект и сдвиг этой полосы поглощения в красную область. Гипохромный эффект можно объяснить стекингом взаимодействия между порфиринами, поскольку эти порфирины посредством стэкинг-взаимодействия упакованы на ДНК (как упоминалось выше). Изменение оптической плотности зависит от ионной силы раствора. После добавления ДНК спектры ZnTMeAlPyP3 при низкой ионной силе и при высокой ионной силе в области Соре изменяются, как показано соответственно на рис.3а и 3б.

Спектральные изменения TMeAlPyP3 в присутствии ДНК соответственно при низкой (а) и высокой (б) ионной силе приведены на рис.4. Параметры связывания были рассчитаны с использованием этих результатов и уравнения (1) и представлены в табл.1.

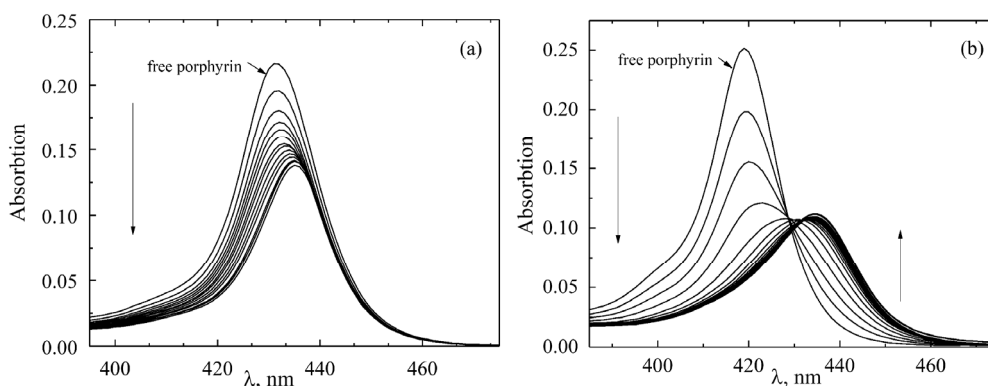


Рис.3 Спектры поглощения порфирина ZnTMeAlPyP3 (а) $\mu = 0.2$ и (б) $\mu = 0.02$ при отсутствии и в присутствии ДНК. Начальная концентрация порфирина равна 10^{-3} М.

Табл.1. Параметры связывания порфирина–ДНК при ионной силе $\mu = 0.02$ и $\mu = 0.2$

порфирины	$\mu = 0.02$		$\mu = 0.2$	
	$K_b, \times 10^{-7} \text{ M}^{-1}$	N	$K_b, \times 10^{-5} \text{ M}^{-1}$	n
TMetAlPyP3	2.1	2.2	2.3	15
ZnTMetAlPyP3	13.9	1.2	0.9	3.14

Увеличение ионной силы вызвало уменьшение констант связывания порфирина ZnTMetAlPyP3 с ДНК. Это наблюдение позволяет предположить, что электростатическое взаимодействие играет важную роль в связывании исследованных порфиринов с дуплексом ДНК. Изучение рис.3 и рис.4 показывает, что каждое связывание порфирина с ДНК, характеризуется определенной величиной гипохромного эффекта.

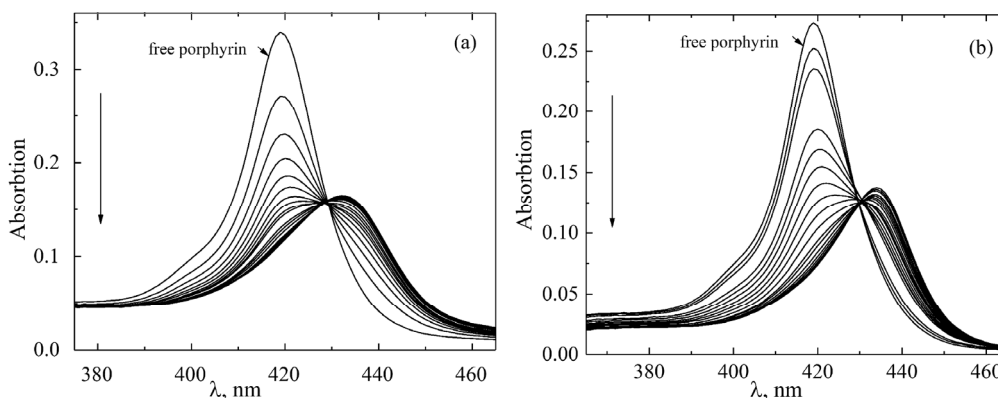


Рис.4 Спектры поглощения порфирина TMeAlPyP3 при $\mu = 0.2$ (а) и при $\mu = 0.02$ (б) при отсутствии и в присутствии ДНК. Начальная концентрация порфирина равна 10^{-3} M .

Гипохромный эффект уменьшается с увеличением ионной силы, что означает уменьшение стэкинга. Поскольку внешняя упаковка стабилизируется за счет электростатического взаимодействия между катионными порфиринами и отрицательно заряженными фосфатными группами ДНК, а при более высокой ионной силе экранирование фосфатных групп ДНК больше, чем при более низкой ионной силе, мы делаем вывод, что при высокой ионной силе места связывания на ДНК становятся менее доступными для порфиринов.

Для подтверждения полученных результатов, были проведены также термодинамические исследования комплексообразования порфиринов с ДНК. Изучение перехода спираль-клубок молекулы ДНК можно исследовать, измеряя поглощение в УФ области (260 нм) раствора ДНК, где количество поглощенного УФ света пропорционально доле несвязанных пар оснований. Поглощение в УФ области связано с электронными переходами $\pi-\pi^*$ как в пуриновых, так и в пиримидиновых основаниях ДНК, что отражает изменение электронной конфигурации оснований из-за уменьшения двуспиральной упаковки и разделения

оснований при плавлении. При повышении температуры инициируется плавление двухцепочечной ДНК, и поглощение УФ-света увеличивается. Поглощение увеличивается на 30–40% в зависимости от образца ДНК. На процесс перехода спираль-клубок влияет как свойства раствора, так и присутствие других молекул (лигандов, взаимодействующих с молекулой ДНК исключительно ван-дер-ваальсовыми силами) [9,10].

Кривые плавления ДНК были получены на спектрофотометре Perkin Elmer Lambda 800 UV/VIS, оснащенного регулятором температуры Perkin (PTR-6). Метод УФ-плавления был использован для определения температуры плавления чистой ДНК и ДНК/порфиринов комплексов с относительной концентрацией $\nu = 0.01$ ($\nu = C_{\text{порф}}/C_{\text{[base pairs]}}$) при разных значениях ионной силы раствора μ . Полученные профили плавления показаны на рис.5.

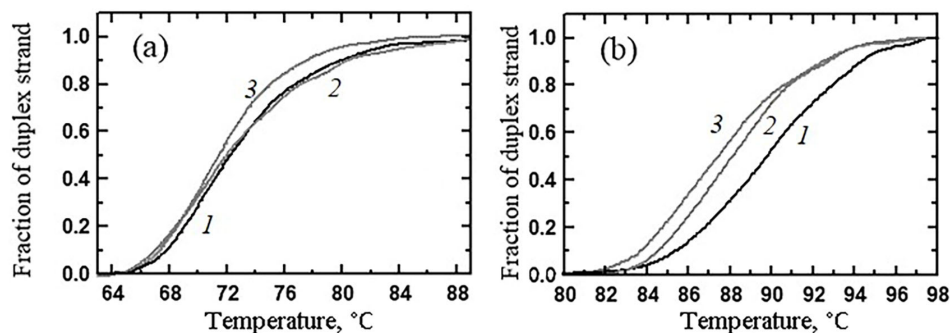


Рис.5 Денатурация чистой ДНК (1), в присутствии порфиринов TMetAlPyP3 (3) и ZnTMetAlPyP3 (2): (a) $\mu = 0.02$, (b) $\mu = 0.2$.

При отсутствии порфиринов температура плавления (T_m) ДНК при $\mu = 0.02$ и $\mu = 0.2$ были равны соответственно 71.82°C и 89.9°C . При низкой ионной силе в присутствии TMetAlPyP3 температура плавления ДНК снижалась до 71.4°C , а в присутствии ZnTMetAlPyP3 T_m повышалась до 72.24°C . Различие между дестабилизирующим свойством без металлического порфирина и стабилизирующим свойством его цинксодержащего аналога обусловлено различием способов связывания. Интеркалирование без металлического порфирина в ДНК приводит к дестабилизации ДНК в местах связывания и, следовательно, к снижению температуры плавления. Увеличение T_m в присутствии ZnTMetAlPyP3 связано с дополнительной энергией, необходимой для разрушения внешней упаковки этих порфиринов. При высокой ионной силе присутствие обоих порфиринов приводит к снижению T_m .

Очевидно, что при плавлении при более высокой ионной силе с поверхности ДНК освобождается больше противоионов, чем при низкой ионной силе, и при этих относительных концентрациях порфирины не обеспечивают эквивалентной стабилизации.

4. Заключение

По данным из полученных индуцированных спектров кругового дихроизма выявлено, что исследуемый порфирин связывается с ДНК методом интеркаляции, а его Zn-содержащий аналог методом внешнего упорядоченного взаимодействия.

Получены спектры поглощения исследуемых комплексов при разных концентрациях ДНК, и по данным из этих спектров вычислены параметры связывания порфиринов с ДНК при двух значениях ионной силы раствора. Показано, что места для связывания порфиринов становятся менее доступны при более высоком значении ионной силы раствора. Наблюдаются также увеличение температуры плавления ДНК в присутствии метал-содержащего порфирина, а также уменьшение стабилизирующего эффекта порфиринов при увеличении ионной силы раствора.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Комитета по науке РА в рамках научного проекта № 21T-1F144.

ЛИТЕРАТУРА

1. **H.T. Daryono, A. Takehiro, Y. Naoki, I. Hidenari.** *Biochimica et Biophysica Acta*, **1472**, 333 (1999).
2. **A.A. Avetisyan, I.V. Vardanyan, Y.B. Dalyan.** *JPP*, **21**, 731 (2017).
3. **L.R. Aloyan, Y.B. Dalyan.** *JBSD*, **31**, 56 (2013).
4. **L.R. Aloyan, G.V. Ananyan, V.I. Vardanyan, Y.B. Dalyan.** *Vestnik SPSU*, **4**, 48 (2007).
5. **I. Haq.** *Archives of Biochemistry and Biophysics*, **403**, 1 (2002).
6. **A.A. Ghazaryan, Y.B. Dalyan, S.G. Haroutiunian, A. Tikhomirova, N. Taulier, J.W. Wells, T.V. Chalikian.** *J. Am. Chem. Soc.*, **128**, 1914 (2006).
7. **J.J. Correia, J.B. Chaires.** *Methods in Enzymology*, **240**, 593 (1994).
8. **S.Z. Bathaiea, D. Ajloobc, M. Daraieib, M. Ghadamgah.** *JBSD*, **33**, 1598 (2014).
9. **Y.S. Mamasakhlisov, A.P. Antonyan, A.Y. Mamasakhlisov, Sh.A. Tonoyan, P.H. Vardevanyan.** *J. Contemp. Phys.*, **52**, 173 (2017).
10. **A.K. Andriasyan.** *J. Contemp. Phys.*, **53**, 95 (2018).

SPECTRAL STUDY OF THE BINDING OF TMetAlPyP3 AND ZnTMetAlPyP3 PORPHYRINS TO DNA

L.R. ALOYAN, A.A. AVETISYAN

In this work, according to the data obtained from the induced circular dichroism spectra, it were revealed the studied porphyrin binds to DNA by the intercalation method and its Zn-containing analogue by the external ordered interaction. The absorption spectra of the studied complexes were obtained at different DNA concentrations, and the binding parameters (K_b , n) of porphyrins with DNA were calculated from the data from these spectra at two values of the ionic strength of the solution. It is shown that sites for binding porphyrins become less accessible at a higher ionic strength of the solution. An increase in the melting temperature of DNA in the presence of a metal-containing porphyrin is also observed, as well as a decrease in the stabilizing effect of porphyrins with an increase in the ionic strength of the solution.