

ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ՀԱՆՐԱՊԵՏՈՒԹՅԱՆ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԶԳԱՅԻՆ ԱԿԱԴԵՄԻԱ

НАЦИОНАЛЬНАЯ АКАДЕМИЯ НАУК РЕСПУБЛИКИ АРМЕНИЯ

Տ Ե Ղ Ե Վ Ա Գ Ի Դ    ИЗВЕСТИЯ

Ֆ Ի Չ Ի Վ Ա    ФИЗИКА

Հ Ա Տ Ո Ր    Т О М

**61**

**№ 1**

Հ Հ Գ Ա Ա "Գ Ի Տ Ո Ւ Թ Յ Ո Ւ Ն" Հ Ր Ա Տ Ա Ր Ա Վ Չ Ո Ւ Թ Յ Ո Ւ Ն

ИЗДАТЕЛЬСТВО "ГИТУТЮН" НАН РА

Ե Ր Ե Վ Ա Ն

ЕРЕВАН

2026

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. Неркарарян, 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.Վ. 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. Mamasakhlisov. A.H. Melikyan, A.H. Mkrтчyan, 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](mailto:izvestiya-fizika@sci.am)

## РЕДКИЕ ПРОЦЕССЫ КЛАСТЕРИЗАЦИИ ЯДЕР В ОБЛАСТИ СРЕДНИХ МАСС

А.Р. БАЛАБЕКЯН<sup>1\*</sup>, Г.О. ОГАННИСЯН<sup>1</sup>, С.В. ГАГИНЯН<sup>1</sup>, С.Г. ПОГОСЯН<sup>1</sup>,  
М.А. ХАЧАТРЯН<sup>1</sup>, Э.Л. КАРАПЕТЯН<sup>1</sup>, Д.Р. ДРНОЯН<sup>1</sup>, К. КАТОВСКИЙ<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

<sup>2</sup>Технологический университет Брно, Брно, Чехия

\*e-mail: balabekyan@ysu.am

(Поступила в редакцию 12 ноября 2025 г.)

Исследованы редкие процессы кластеризации в ядрах ванадия и обогащённого никеля. В частности, рассмотрены реакции с вылетом одной и двух  $\alpha$ -частиц, а также процессы деления в данных мишенях. Выполнены расчёты с использованием программы TALYS 1.97. Показано, что методом наведённой активности возможно исследовать вероятность реакции  ${}^{64}\text{Ni}(p, 2\alpha n){}^{56}\text{Mn}$ . Расчёты показывают, что существует реальная возможность регистрации и более тяжёлых фрагментов, например изотопа  ${}^{48}\text{Sc}$ , образующегося при взаимодействии протонов с обогащённым никелем.

### 1. Введение

Структура и свойства атомного ядра имеют ключевое значение для понимания происхождения и эволюции Вселенной. Возможность существования кластеров в ядре представляет собой важный инструмент для объяснения механизмов синтеза различных элементов. Природа ядерных сил, связывающих нуклоны, определяет сферическую форму и энергетический баланс ядра. Отклонение возбужденного состояния ядра от сферической формы может быть обусловлено изменением протонно-нейтронной структуры ядерного вещества или образованием нуклонных ассоциаций. Вопрос о том, существуют ли кластеры в ядре изначально или формируются в процессе ядерного возбуждения, остаётся недостаточно изученным. Исследование процессов кластеризации и последующего распада кластеров является одной из актуальных задач современной ядерной физики. Кластерные структуры можно изучать в ядерных реакциях, инициируемых различными частицами — протонами,  $\gamma$ -квантами и др.

Образование  $\alpha$ -частиц в ядрах также относится к процессам кластеризации. В ряде экспериментальных и теоретических работ образование  $\alpha$ -частиц рассматривается как формирование структур, постоянно или временно существующих в ядре [1–5]. Особый интерес представляют реакции типа  $(p, \alpha)$  на изотопах никеля.

Реакции  $(p, \alpha)$  на изотопах никеля имеют практическое значение в различных областях. В ядерной астрофизике изучение таких реакций позволяет глубже понять механизмы нуклеосинтеза в звёздах и процессы образования элементов. В медицинской радиофармацевтике продукты реакций, включая изотопы кобальта, находят применение в диагностике и терапии, например в позитронно-

эмиссионной томографии (ПЭТ). В ядерной энергетике знание особенностей этих реакций необходимо для оценки радиационной стойкости материалов и разработки новых конструкционных материалов для ядерных реакторов.

В настоящей работе исследуются реакции с образованием одной или двух  $\alpha$ -частиц при взаимодействии с протонами низких энергий. Кроме того, рассматривается вероятность делимости и образования фрагментов более тяжёлых, чем  $\alpha$ -частица, в ядрах со средними массовыми числами.

## 2. Реакции ( $p, \alpha$ ) и ( $p, 2\alpha$ )

Исследование  $\alpha$ -кластеризации ядер находится в центре внимания как теоретиков, так и экспериментаторов-ядерщиков [6–8]. В работе [9] показано, что вероятность  $\alpha$ -кластеризации в ядрах свинца мала, однако она значительно возрастает в области ядер кальция, что может иметь важные последствия для ограничения энергии симметрии ядра.

На рис.1 приведены экспериментальные значения сечений реакций ( $p, \alpha$ ), взятые из базы данных EXFOR [1–4], в зависимости от энергии для мишеней  $^{64}\text{Ni}$  и  $^{58}\text{Ni}$ . На рисунке также показаны теоретические расчёты, выполненные с использованием программы TALYS 1.97 [10].

Как видно из рисунков, недостаток экспериментальных данных для мишени  $^{58}\text{Ni}$  не позволяет уточнять теоретические модели. В области энергий 10–18 МэВ для мишени  $^{64}\text{Ni}$  наблюдается значительный разброс экспериментальных значений, что также требует уточнения.

Были выполнены расчёты сечений реакций ( $p, \alpha$ ) для мишени  $^{64}\text{Ni}$  с использованием программы FLUKA. Расчёты проведены для четырёх энергий протонов, и получены следующие результаты: при энергии 17 МэВ  $\sigma = 5.74$  мб; 16 —  $\sigma = 5.27$ ; 14 —  $\sigma = 4.78$ ; 13 МэВ —  $\sigma = 4.99$ . Как видно из приведённых данных и рис.1, теоретические предсказания программы FLUKA существенно ниже как экспериментальных данных, так и расчётов, выполненных с использованием программы TALYS.

Особый интерес представляют реакции с испусканием нескольких  $\alpha$ -частиц,

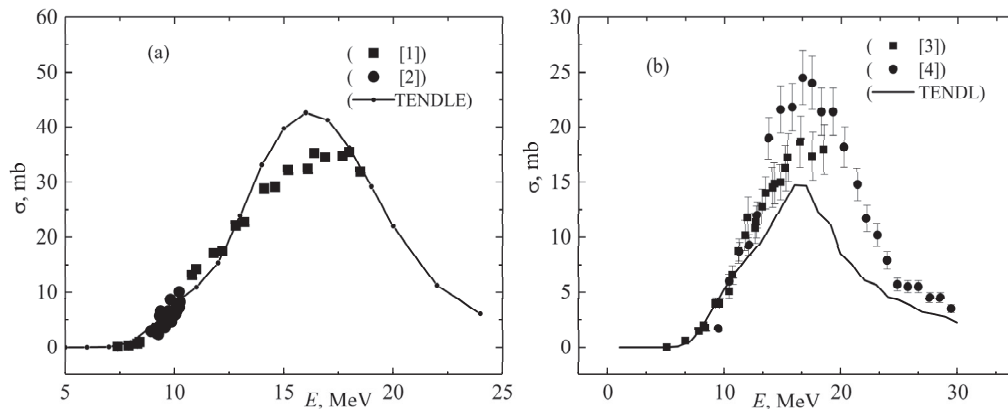


Рис.1. Зависимость сечений реакций ( $p, \alpha$ ) от энергии протонов для мишеней: (a)  $^{58}\text{Ni}$ : ■ — точки из работы [1], • — точки из работы [2]; (b)  $^{64}\text{Ni}$ : ■ — точки из работы [3], • — точки из работы [4]. Сплошные кривые — расчёты, выполненные с использованием программы TALYS.

в частности  $(p, 2\alpha)$ ,  $(p, 2\alpha n)$  и  $(p, 2\alpha p)$ . На рис.2 приведены зависимости сечений реакций  $(p, 2\alpha)$  от энергии протонов, рассчитанные по программе TALYS.

Исследование реакций  $(p, 2\alpha)$  представляет интерес с точки зрения выяснения механизма их протекания. Остаются открытыми вопросы: вылетают ли две  $\alpha$ -частицы одновременно или последовательно? Коррелированы ли они, то есть образуются ли в виде кластера  ${}^8\text{Be}$ , или же испускаются как независимые частицы? Ответы на эти вопросы можно получить либо путём прямой регистрации вылетающих  $\alpha$ -частиц, либо методом наведённой активности [11], регистрируя ядро-остаток.

На рис.2 приведены только теоретические оценки этих реакций, поскольку в реакции  ${}^{64}\text{Ni}(p, 2\alpha)$  образуется изотоп  ${}^{57}\text{Mn}$  с периодом полураспада  $T_{1/2} = 85.4$  с, и из-за столь короткого времени полураспада метод наведённой активности оказывается непригодным для его регистрации. В случае реакции  ${}^{58}\text{Ni}(p, 2\alpha)$  образуется  ${}^{51}\text{Mn}$  с  $T_{1/2} = 45.84$  мин. Однако, наиболее интенсивная  $\gamma$ -линия этого изотопа — 511 кэВ, что делает невозможной оценку сечения его образования из-за вклада аннигиляционных фотонов.

Прямая регистрация  $\alpha$ -частиц, образующихся в процессе реакции, позволяет получить ответы на указанные вопросы. При последовательном механизме, например,  $p + {}^{64}\text{Ni} \rightarrow \alpha + {}^{61}\text{Co}^*$  (возможно, возбужденное)  $\rightarrow \alpha + {}^{57}\text{Mn}$ , возникает промежуточное состояние  ${}^{61}\text{Co}^*$ , которое проявляется в виде характерных  $\gamma$ -пииков, связанных со второй  $\alpha$ -частицей, и в специфических особенностях суммарной кинематики. Одновременный (коррелированный, кластерный) распад имеет место в случае, когда две  $\alpha$ -частицы выбрасываются как коррелированная пара, без ярко выраженного промежуточного уровня. Такой механизм проявляется в непрерывных распределениях относительной энергии частиц и характерных угловых корреляциях.

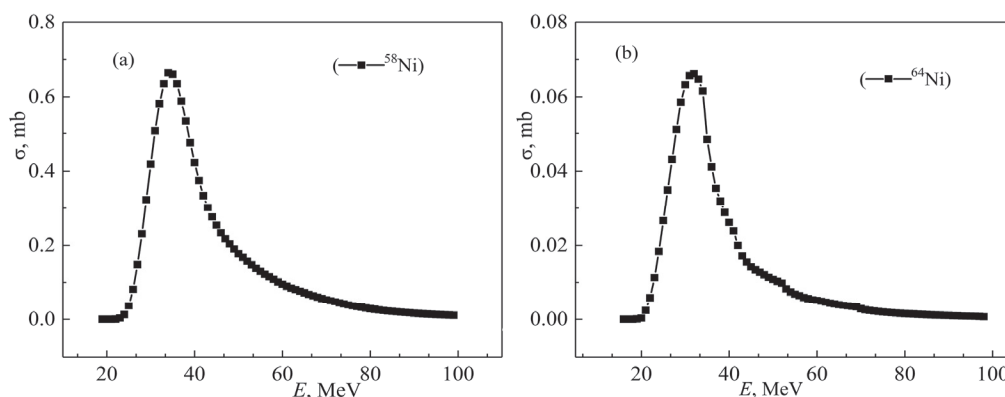


Рис.2. Зависимость сечений реакций  $(p, 2\alpha)$  от энергии протонов для мишеней: (a)  ${}^{58}\text{Ni}$  и (b)  ${}^{64}\text{Ni}$ , рассчитанные по программе TALYS.

### 3. Реакции деления

В области ядерной физики процесс деления является одним из наиболее фундаментальных и интересных явлений. Хотя деление тяжёлых ядер при низких энергиях изучено достаточно хорошо, деление ядер промежуточной массы в тех

же условиях исследовано значительно слабее и представляет собой область, где теоретические предсказания и экспериментальные данные только начинают согласовываться, раскрывая сложность ядерной динамики.

В процессе деления высвобождается значительное количество энергии, и этот процесс играет важную роль в широком спектре областей — от ядерной энергетики до астрофизики. Хотя деление традиционно ассоциируется с тяжёлыми ядрами, такими как уран и плутоний, оно также наблюдается в ядрах средней массы, обычно в диапазоне массовых чисел от 60 до 140. В отличие от более тяжёлых систем, ядра промежуточной массы обладают специфическими особенностями, которые ставят под сомнение существующие теоретические модели и требуют новых подходов к описанию механизма распада. Для ядер средней массы процесс деления включает сложное взаимодействие ядерных сил, оболочечной структуры и коллективных движений. В отличие от тяжёлых ядер, где барьер деления хорошо определён и играет ключевую роль, в ядрах со средними массами доминируют поверхностные барьеры, что приводит к увеличению вероятности распада при относительно низких энергиях возбуждения. Кроме того, взаимодействие отдельных нуклонов с коллективными степенями свободы влияет на динамику деления, формируя характерные угловые распределения и спектры осколков.

В работе [12] показано, что расщепление ядер при развитии внутриядерного каскада приводит к тому, что увеличение делимости, отражающее уменьшение высоты барьера деления лёгких ядер, должно наблюдаться при значениях  $Z^2/A < 15$ . Этот вывод основан на экстраполяции модели жидкой капли в область лёгких ядер. Между тем данная модель предсказывает, что при определённом критическом значении  $(Z^2/A)_{cr}$  процесс деления должен уступить процессу фрагментации ([6] и ссылки в нём). Обнаружение резкого уменьшения делимости при малых значениях  $Z^2/A$  по сравнению с расчётами, приведёнными в [12], подтвердило бы справедливость одного из ключевых предсказаний модели жидкой капли.

В ряде работ [13, 14] исследована зависимость делимости от коэффициента делимости  $Z^2/A$ . На рис. 3 работы [13] и рисунке 2 работы [14] показаны, что делимость возрастает в массовой области, где  $Z^2/A < 17$ . Из этих рисунков видно, что в указанной области массовых чисел наблюдается существенное расхождение между теоретическими предсказаниями и экспериментальными данными. В диапазоне ядер с массами  $A \leq 50$  и при энергиях взаимодействующих фотонов  $\leq 100$  МэВ [8] отмечается увеличение коэффициента делимости, что в целом согласуется с результатами расчётов в рамках капельной модели. Пороги деления лёгких ядер находятся в области энергий 20–50 МэВ. С ростом энергии увеличивается вклад процессов испарения нуклонов, вследствие чего становится невозможным надёжно выделить вклад именно деления.

Исходя из этих соображений, подобные процессы наиболее удобно изучать в области энергий, близких к пороговым. Однако, поскольку выходы деления ядер промежуточных масс в этом энергетическом диапазоне крайне малы, имеющихся экспериментальных данных недостаточно для детального сравнения с модельными расчётами.

#### 4. Экспериментальная методика

Экспериментально методом наведённой активности можно исследовать реакции, в которых образуются  $\alpha$ -частицы, а также фрагменты, более тяжёлые, чем  $\alpha$ -частица.

В табл.1 приведены реакции деления и образования  $\alpha$ -частиц на изотопах никеля и ванадия в протон-ядерных взаимодействиях. В таблице также указаны пороги соответствующих реакций.

В таб.1 приведены также остаточные ядра с их характерными параметрами, которые могут быть зарегистрированы методом наведённой активности. Как видно из таблицы, периоды полураспада и характерные энергии излучения остаточных радиоактивных ядер позволяют исследовать вероятность их образования активационным методом.

Табл.1. Реакции деления и образования  $\alpha$ -частиц на изотопах никеля и ванадия

Мишень	Реакция	Образованные фрагменты	Остаточные ядра	Период полураспада	Характерные энергии, кэВ, интенсивность, %	Пороговая энергия, МэВ
$^{64}\text{Ni}$	$(p,\alpha)$	$^4\text{He}+^{61}\text{Co}$	$^{61}\text{Co}$	1.65 час	64.41(84.7) 917.5(3.6)	0
$^{64}\text{Ni}$	$(p,2\alpha n)$	$^{56}\text{Mn}+2^4\text{He}+n$	$^{56}\text{Mn}$	2.58 час	846.76(88.85) 1810.73(26.9) 2113.09(14.2)	16.068
$^{64}\text{Ni}$	$(p,f)$	$^{47}\text{Ca}+^{18}\text{F}$	$^{47}\text{Ca}$	4.536 день	489.23(5.9) 807.86(5.9) 1297.09(67)	18.627
$^{64}\text{Ni}$	$(p,f)$	$^{48}\text{Sc}+^{17}\text{O}$	$^{48}\text{Sc}$	43.71 час	175.36(7.47) 983.53(100) 1037.52(97.5) 1212.88(2.38) 1312.12(100)	14.726
$^{51}\text{V}$	$(p,f)$	$^{24}\text{Na}+^{28}\text{Al}$	$^{24}\text{Na}$	14.956 час	1368.62(99.99) 2754.91(99.87)	20.034
$^{51}\text{V}$	$(p,f)$	$^{22}\text{Na}+^{30}\text{Al}$	$^{22}\text{Na}$	2.6 год	1274.54(99.94)	24.34

Используя метод улавливающих фольг [15], можно определить сечения образования указанных остаточных ядер для нескольких энергий падающих протонов. По программе SRIM [16] были рассчитаны потери энергии в обогащённой мишени  $^{64}\text{Ni}$ . Для мониторинга интенсивности пучка планируется использовать медную фольгу. На рис.3 представлен набор мишеней и рассчитанные по программе SRIM потери энергии в этих мишенях.

В результате расчётов получены следующие значения энергий протонов в обогащённых мишенях никеля: 17.31, 15.92, 14.32 и 12.77 МэВ. Число используемых фольг в мишени сборке обусловлено доступным количеством обогащённого изотопа  $^{64}\text{Ni}$ . В табл.2 приведены толщины мишеней.

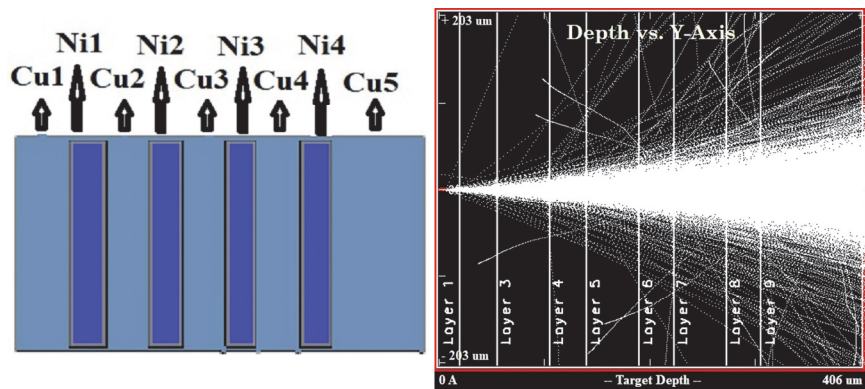


Рис.3. Набор мишеней и общий вид взаимодействия пучка с набором мишеней, рассчитанный по программе SRIM.

Эксперименты будут проводиться на протонном пучке циклотронной установки CYCLON 18 при энергиях до 18 МэВ (Армения). Поскольку сечения редких процессов очень малы, регистрация характерных  $\gamma$ -спектров будет выполняться в низкофоновой лаборатории, расположенной в соляном руднике.

В табл.1 также приведены реакции с пороговыми энергиями выше 18 МэВ. Планируется провести их исследование на протонных пучках установки BM@N, ОИЯИ (Дубна, РФ)

Табл.2. Толщины мишеней

Мишени	Cu1	Ni1	Cu2	Ni2	Cu3	Ni3	Cu4	Ni4	Cu5
Толщины, мкм	20	35	50	35	50	33	50	30	100

## 5. Заключение

Исследованы реакции, приводящие к вылету одной или двух  $\alpha$ -частиц из обогащённых изотопов  $^{64}\text{Ni}$  и  $^{51}\text{V}$ . Проведённый анализ показал, что методом наведённой активности возможно изучать реакцию  $^{64}\text{Ni}(p,2\alpha n)^{56}\text{Mn}$  на циклотроне CYCLON-18, поскольку период полураспада и спектральные характеристики образующегося ядра  $^{56}\text{Mn}$  позволяют надёжно регистрировать его образование.

Кроме того, расчёты показывают, что существует реальная возможность регистрации и более тяжёлых фрагментов, например изотопа  $^{48}\text{Sc}$ , образующегося при взаимодействии протонов с обогащённым никелем. Его характерные  $\gamma$ -линии и сравнительно удобный период полураспада создают условия для применения активационного метода с использованием набора улавливающих фольг.

Полученные результаты подтверждают перспективность метода наведённой активности для исследования редких процессов, включающих многократный вылет  $\alpha$ -частиц и образование тяжёлых фрагментов. Проведение экспериментов при нескольких энергиях протонов позволит уточнить энергетическую зависимость сечений и уменьшить существующие расхождения между теоретическими расчётами и экспериментальными данными.

Такой подход в дальнейшем даст возможность более глубоко исследовать механизм кластеризации в ядрах средней массы и проверить предсказания современных моделей ядерной динамики.

Исследование выполнено при поддержке Комитета по высшему образованию и науке МОНКС РА (научный проект № 25RG-1C067).

#### ЛИТЕРАТУРА

1. **S. Kaufman.** Phys. Rev., **117**, 1532 (1960).
2. **I. Kumabe, H. Ogata, T. Komatuzaki, N. Inoue, S. Tomita, Y. Yamada, T. Yamaki, S. Matsumoto.** Nuclear Physics, **46**, 437 (1963).
3. **S.M. Qaim, M. Uhl, F. Rosch, F. Szelecsenyi.** Phys. Rev., C, Nuclear Physics, **52**, 733 (1995).
4. **V.N. Levkovski.** Cross sections of medium mass nuclide activation ( $A=40-100$ ) by medium energy protons and alpha-particles ( $E=10-50$  MeV). Inter-Vesti: Moscow, Russia, (1991).
5. **A.R. Balabekyan, N.A. Demekhina, E. Melyan, S. Faltajanyan, A. Aleksanyan, S. Amirkhanyan, H. Gulkanyan, T. Kotanjyan, A.S. Hakobyan.** J. Contemp. Phys. (Armenian Academy of Sciences), **55**, 1 (2020).
6. **T. Otsuka, T. Abe, T. Yoshida, Y. Tsunoda, N. Shimizu, N. Itagaki, Y. Utsuno, J. Vary, P. Maris, H. Ueno.** Nature Communications, **13**, 2234 (2022).
7. **J. Tanaka, C. Bertulani, S. Type.** European Physics Journal, Web of Conferences **227**, 01001 (2020).
8. **D.S. Delione, A. Dimitriescu.** European Physics Journal A, **59**, 210 (2023).
9. **S. Yang, R. Li, Chang Xu.** Phys. Rev. C, **108**, L021303 (2023).
10. GitHub - arjankoning1/talys: The nuclear reaction model code .
11. **A.R. Balabekyan, S.V. Gaginyan, J.R. Drnoyan.** J. Contemp. Phys., **51**, 211 (2016).
12. **A.S. Iljinov, E.A. Cherepanov, S.F. Chigrinov.** Z. Physick, **A287**, 37 (1978).
13. **D.A. de Lima.** Nuovo. Cim., **103**, 701 (1990).
14. **V. Emma, S. Lo Nigro, C. Milone.** Nuclear Physics, **A257**, 438 (1976).
15. **M. Choudhary, A. Sharma, N. Singh, A. Gandhi, S. Dasgupta, J. Datta, K. Katovsky, A. Kumar.** Nuclear Physics, **A1038**, 122720 (2023).
16. **J.F. Ziegler.** Nucl. Instr. Methods, **B 219–220**, 1027 (2004).

#### RARE CLUSTERING PROCESSES IN NUCLEI IN THE INTERMEDIATE MASS RANGE

A.R. BALABEKYAN, G.H. HOVHANNISYAN, S.V. GAGINYAN, S.G. POGHOSYAN,  
M.A. KHACHATRYAN, E.L. KARAPETYAN, J.R. DRNOYAN, K. KATOVSKY

Rare clustering processes in vanadium and enriched nickel nuclei were investigated. In particular, reactions involving the emission of one or two alpha particles, as well as fission processes in these targets, were studied. Calculations were performed using the TALYS code. It was found that the induced activity method can be used to investigate the probability of the  $^{64}\text{Ni}(p, 2\alpha n)^{56}\text{Mn}$  reaction, Calculations show that there is a real possibility of registering heavier fragments, for example the isotope  $^{48}\text{Sc}$ , which is formed during the interaction of protons with enriched nickel.

## **ВКЛАД ОТДЕЛЬНЫХ ГАРМОНИК В МОЩНОСТЬ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ КРУГОВОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ**

**С.Е. БОЙЧЕНКО\***

Адыгейский государственный университет,  
Кавказский математический центр, Майкоп, Россия

\*e-mail: boychenkos@mail.ru

(Поступила в редакцию 5 декабря 2025 г.)

Теоретически и численно исследованы характеристики синхротронного излучения круговой поляризации. Получены аналитические выражения для парциальных вкладов в мощность синхротронного излучения как в нерелятивистском, так и в ультрарелятивистском случаях. Показано, что для каждой гармоники наблюдается максимум её парциального вклада. Как и в случае линейной поляризации, для каждой пары соседних гармоник существует пороговая скорость частицы, при которой вклад гармоники с большим номером становится более существенным.

### **1. Введение**

Недавние обзорные статьи [1–5] свидетельствуют о том, что синхротронное излучение (СИ), благодаря своим уникальным свойствам, продолжает играть важную роль как в фундаментальных исследованиях, так и в прикладных областях – от традиционной астрофизики [1, 2] до современных медицинских приложений [5]. Постоянно открываются новые возможности и обнаруживаются ранее неизученные свойства СИ. Среди многочисленных направлений исследований особое место занимает новый эффект, теоретически предсказанный, как это часто бывает в физике, и ожидающий экспериментального подтверждения. Таким эффектом, открытым в начале XXI века, является эффект деконцентрации [6]. Эффект заключается в отклонении максимальной мощности в угловом распределении каждой гармоники СИ от плоскости орбиты. Это принципиально противоречит известному поведению угловых профилей для полной мощности СИ.

Подробный обзор важных достижений в теоретических исследованиях СИ и обширный список литературы приведены в [7]. Результаты этих работ побудили к более детальному изучению поведения спектрального максимума излучения, а также справедливости этого утверждения для отдельных компонент поляризации [8]. В частности, в [9] рассмотрено спектральное распределение мощности синхротронного излучения круговой поляризации в верхней полуплоскости. В [10] обосновано введение нового понятия эффективной спектральной ширины для точного количественного описания спектральных свойств (СП). Эти характеристики позволяют получить новую физически важную количественную информацию о структуре спектральных распределений. Следует отметить, что описанное

поведение угловых профилей с точки зрения квантовой теории не меняется и подтверждает классический результат [11, 12].

С другой стороны, при исследовании влияния спина электрона на эффект деконцентрации было выявлено различие в приближениях между выводами квантовой и классической теорий. Кроме того, в недавних работах [13] была обоснована новая угловая характеристика для более точного анализа СИ.

Для более глубокого анализа свойств СИ были введены новые параметры, такие как парциальные вклады отдельных гармоник в мощность СИ и точные количественные характеристики степени угловой концентрации СИ (например, эффективный угол излучения и угол отклонения). Поскольку исследования, описанные в [7], были сосредоточены преимущественно на линейной поляризации СИ, ряд вопросов остался нерешённым. В частности, не исследовался вопрос о парциальных вкладах отдельных спектральных гармоник в мощность СИ круговой поляризации. Изучению этого вопроса и посвящена данная работа.

## 2. Теория

Как известно из классической теории СИ, спектральное распределение мощности излучения круговой поляризации можно представить следующим образом:

$$W_l^{(+)}(v, \beta) = \frac{Q_0}{4\beta^3} \Psi_l(v, \beta), \quad Q_0 = \frac{ce^2\beta^4}{R^2}, \quad (1)$$

$$\Psi_l(v, \beta) = v \left[ 2\beta^2 J'_{2v}(2v\beta) - (1 - \beta^2) \int_0^{2v\beta} J_{2v}(y) dy + 2l\beta J_v^2(v\beta) \right], \quad (2)$$

$$W_0^{(+)}(v, \beta) = \frac{Q_0}{2\beta^3} \Psi_0(v, \beta), \quad \Psi_0(v, \beta) = \frac{1}{2} (\Psi_{+1}(v, \beta) + \Psi_{-1}(v, \beta)), \quad (3)$$

где  $e$  – заряд частицы,  $v = \beta c$  – ее скорость,  $c$  – скорость света,  $R$  – радиус орбиты,  $v$  – номер гармоники. Индекс  $l$  характеризует поляризацию излучения  $l = +1$  соответствует правой круговой поляризации,  $l = -1$  – левой круговой поляризации.

После суммирования по спектру из (1)–(3) можно получить выражения для поляризационных компонент и полной мощности СИ как функции скорости:

$$W_l^{(+)}(\beta) = \sum_{v=1}^{\infty} W_l^{(+)}(v, \beta), \quad l = 0, +1, -1, \quad (4)$$

$$W_l^{(+)}(\beta) = \frac{1}{2} W_0(\beta) \eta_l(\beta), \quad W_0(\beta) = \frac{2Q_0}{3(1-\beta^2)^2},$$

$$\eta_l(\beta) = \frac{1}{2} + l \frac{3}{8} \chi_1(\beta), \quad \chi_1(x) = \frac{4(1-x^2)}{x^2} \sum_{v=1}^{\infty} v J_v^2(vx), \quad (5)$$

$$W_0^{(+)}(\beta) = W_{+1}^{(+)}(\beta) + W_{-1}^{(+)}(\beta) = \frac{1}{2} W_0(\beta) \quad (6)$$

Также как и в [7] будем определять парциальный вклад гармоники  $v$  в мощность излучения по формуле:

$$P_v^{(l)}(\beta) = W_l(v)/W_l, \quad l = 0, +1, -1. \quad (7)$$

Парциальный вклад представляет собой долю, вносимую излучением на  $v$ -гармонике в общую излучаемую мощность при заданном значении  $\beta$ . Очевидно, что для фиксированного номера гармоники  $v$  парциальный вклад левой и правой круговой поляризации синхротронного излучения  $P_v^{(l)}(\beta)$  является функцией скорости.

Имеет место следующее равенство:

$$\sum_{v=1}^{\infty} P_v^{(l)}(\beta) = 1. \quad (8)$$

В работе [14] проведен полный анализ зависимости парциального вклада линейной составляющей СИ от номера гармоники  $\nu$ , поляризации излучения и энергии частицы. В частности, численно исследован парциальный вклад основной и высших гармоник. При этом обнаружены новые особенности, а именно, скорости  $\beta_\nu^{(l)}$ , в которых достигаются максимальные значения парциального вклада, существенно отличаются от тех значений скоростей, при которых в сумме  $W_i = \sum_{\nu=1}^{\infty} W_i(\nu)$  максимальным является слагаемое  $W_i(\nu)$ . Здесь индекс  $i$  характеризует линейную поляризацию СИ.

Несмотря на обширное исследование в [14] не рассматривался вопрос о поведении парциального вклада в мощность синхротронного излучения для круговой поляризации. Поэтому, следуя логике работы [14], имеет смысл рассматривать СИ круговой поляризации только в верхней (нижней) полуплоскости.

Изучим поведение функции  $P_\nu^{(l)}(\beta)$  во всей области изменения параметров  $1 \leq \nu < \infty$ ,  $0 \leq \beta \leq 1$  для круговой поляризации излучения.

Для этого будем использовать обозначения, принятые в [14]

$$P_\nu^{(l)}(\beta) = (1 - \beta^2)q_\nu^{(l)}(\beta), \quad l = 0, \pm 1. \quad (9)$$

Тогда из (1) и (3) получим, что

$$q_\nu^{(l)}(\beta) = \frac{3\Psi_l(\nu, \beta)}{4\beta^3 \eta_l(\beta)}, \quad l = \pm 1, \quad q_\nu^{(0)}(\beta) = \frac{3\Psi_0(\nu, \beta)}{2\beta^3}. \quad (10)$$

Используя представления функций Бесселя [15] степенными рядами

$$J_\nu(x) = \left(\frac{x}{2}\right)^\nu \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k! \Gamma(\nu+k+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2k}, \quad (11)$$

$$J_\nu^2(x) = \left(\frac{x}{2}\right)^{2\nu} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k \Gamma(2\nu+2k+1)}{\Gamma(2\nu+k+1) \Gamma^2(\nu+k+1) k!} \left(\frac{x}{2}\right)^{2k},$$

а также то, что выражение  $q_\nu^{(0)}(\beta)$  из (10) совпадает с выражением (7) работы [14]

$$q_\nu^{(0)}(\beta) = 3\nu^2 \left(\frac{x}{2}\right)^{2\nu-2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k [2(\nu+k)^3 - (\nu+k)^2 - \nu - k + 2\nu^2]}{[4(\nu+k)^2 - 1] k! \Gamma(2\nu+k+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2k}, \quad x = 2\nu\beta \quad (12)$$

получим следующие разложения в ряд для функций  $\psi_l(\nu, \beta)$ ,  $l = 0, \pm 1$ :

$$\psi_0(\nu, \beta) = \frac{2\beta^3}{3} q_\nu^{(0)}, \quad \psi_l(\nu, \beta) = \psi_0(\nu, \beta) + 2l\nu\beta J_\nu^2(\nu\beta) \quad (13)$$

$$\psi_0(\nu, \beta) = 2\beta \left(\frac{x}{2}\right)^{2\nu} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k! \Gamma(2\nu+k+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2k} M_0, \quad M_0 = \frac{2(\nu+k)^3 - (\nu+k)^2 - \nu - k + 2\nu^2}{4(\nu+k)^2 - 1}.$$

$$2\nu\beta J_\nu^2(\nu\beta) = \frac{1}{2^{2\nu-1}} \left(\frac{x}{2}\right)^{2\nu} \nu\beta \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k! \Gamma(2\nu+k+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2k} M_1,$$

$$M_1 = \frac{\Gamma(2\nu+2k+1)}{\Gamma^2(\nu+k+1) \cdot 2^{2k}},$$

$$\psi_l(\nu, \beta) = \beta \left(\frac{x}{2}\right)^{2\nu} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k! \Gamma(2\nu+k+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2k} \left(\frac{2^{2\nu} M_0 + l M_1 \nu}{2^{2\nu-1}}\right), \quad (14)$$

$$q_\nu^{(l)}(\beta) = \frac{3\nu^2}{4\eta_l(\beta)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2\nu-2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k! \Gamma(2\nu+k+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2k} \left(\frac{2^{2\nu} M_0 + l M_1 \nu}{2^{2\nu-1}}\right). \quad (15)$$

Так как ряды (12) и (15) сходятся абсолютно и равномерно для всех комплексных  $x$ , то их удобно использовать для качественного и численного исследования поведения функций  $q_\nu^{(l)}(\beta)$ ,  $P_\nu^{(l)}(\beta)$ .

В нерелятивистском случае ( $\beta \ll 1$ ), имеем:

$$q_v^{(l)}(\beta) = \frac{3v^2(v\beta)^{2v-2}}{\eta_l(\beta)\Gamma(v)2^{2v+1}} \left[ \frac{(v+1)\sqrt{\pi}}{2\Gamma(v+3/2)} + \frac{l}{v\Gamma(v)} \right].$$

Значение выражения  $P_v^{(0)}(\beta)$  берем из [7]

$$\begin{aligned} q_v^{(l)}(\beta) &\approx P_v^{(l)}(\beta), P_v^{(0)}(\beta) \approx \frac{3(v+1)v^2(v\beta)^{2v-2}}{2(2v+1)\Gamma(2v)}, \\ P_v^{(l)}(\beta) &\approx \frac{3v^3(v\beta)^{2v-2}(2^{2v}(v+1)\Gamma^2(v+1)+l\Gamma(2v+2))}{\eta_l(\beta)\Gamma(2v+2)\cdot 2^{2v+1}\Gamma^2(v+1)}. \end{aligned} \quad (16)$$

Из (16) следует, что в нерелятивистском случае для первой гармоники получаем такой же результат, как и при линейной поляризации СИ:  $P_1^{(l)}(0) = q_1^{(l)}(0) = 1$ , а для других гармоник ( $v > 1$ )

$$P_v^{(l)}(0) = q_v^{(l)}(0) = 0, \quad l = \pm 1, 0. \quad (17)$$

Сравним  $q_v^{(+1)}(\beta)$ ,  $q_v^{(-1)}(\beta)$ ,  $q_v^{(0)}(\beta)$  в нерелятивистском случае. Преобразуем  $q_v^{(l)}$ ,  $l = \pm 1$  к виду:

$$q_v^{(l)}(\beta) \approx \left[ \frac{1}{2\eta_l(\beta)} + l \frac{\Gamma(2v+2)}{(v+1)2^{2v+1}\Gamma^2(v+1)\eta_l(\beta)} \right] q_v^{(0)}(\beta).$$

Для больших номеров гармоник ( $v \rightarrow \infty$ ) имеем, что  $\frac{\Gamma(2v+2)}{(v+1)2^{2v+1}\Gamma^2(v+1)\eta_l(\beta)} \rightarrow 0$ , и тогда  $q_v^{(l)} \approx \frac{q_v^{(0)}}{2\eta_l(\beta)}$ . Учитывая, что  $\eta_{+1}(0) = \frac{7}{8}$ ,  $\eta_{-1}(0) = \frac{1}{8}$ , окончательно получаем:

$$\begin{aligned} q_v^{(+)}(\beta) &\approx \frac{4}{7}q_v^{(0)}, \quad q_v^{(-)}(\beta) \approx 4q_v^{(0)} \\ q_v^{(+1)}(\beta) &< q_v^{(0)}(\beta) < q_v^{(-1)}(\beta) \Rightarrow P_v^{(+1)}(\beta) < P_v^{(0)}(\beta) < P_v^{(-1)}(\beta), \\ v &> 1, \quad 0 < \beta \ll 1. \end{aligned} \quad (18)$$

В ультрарелятивистском случае  $\gamma \gg 1$  ( $\gamma = 1/\sqrt{1-\beta^2}$ ) при нахождении асимптотики получаем такое же выражение, как и формула (12) из [7]:

$$P_v^{(l)}(\beta \leq 1) \approx \frac{q_v^{(l)}}{\gamma^4}, \quad P_v^{(l)}(1) = 0. \quad (19)$$

Как следует из (17) и (19), на концах отрезка  $[0, 1]$  неотрицательные функции  $P_v^{(l)}(\beta)$  ( $v > 1$ ) обращаются в нуль, поэтому внутри этого отрезка найдется такая точка  $\beta = \beta_v^{(l)} \left( \gamma = \gamma_v^{(l)} = 1/\sqrt{1 - (\beta_v^{(l)})^2} \right)$ , в которой всякая функция  $P_v^{(l)}(\beta)$  ( $v > 1$ ) достигает максимального значения  $\overline{P_v^{(l)}} = P_v^{(l)}(\beta_v^{(l)})$  ( $v > 1$ ).

Для больших значений номера гармоники в ультрарелятивистском случае воспользуемся аппроксимацией функций Бесселя и их производных модифицированными функциями Бесселя  $K_{2/3}$ ,  $K_{1/3}$  [15]. Тогда, с учетом обозначений, получим:

$$\begin{aligned} y = \frac{2v}{3\gamma^3} &\Rightarrow \gamma = v^{1/3}(2/3y)^{1/3}, \\ P_v^{(l)}(\beta) &\approx \frac{1}{v}\psi_l(y), \quad q_v^{(l)}(\beta) \approx (2/3)^{4/3}y^{-4/3}\psi_l(y)v^{1/3}. \end{aligned} \quad (20)$$

$$J_{2\nu}(2\nu\beta) \approx \frac{1}{\gamma\pi\sqrt{3}}K_{1/3}(\gamma), J_{2\nu}(2\nu\beta) \approx \frac{1}{\gamma^2\pi\sqrt{3}}K_{2/3}(\gamma),$$

$$\int_0^{2\nu\beta} J_{2\nu}(y)dy \approx \frac{1}{\pi\sqrt{3}} \int_y^\infty K_{1/3}(x)dx. \quad (21)$$

Отметим, что аппроксимация  $\psi_0(y)$  была получена в [7]

$$\psi_0(y) = \frac{9\sqrt{3}}{8\pi} y^2 \left[ 2K_{2/3}(y) - \int_y^\infty K_{1/3}(x)dx \right], \quad (22)$$

$$\psi_l(y) = \frac{3\sqrt{3}}{4\pi} y^2 \left( 2K_{2/3}(y) - \int_y^\infty K_{1/3}(x)dx + 2l \frac{K_{1/3}^2\left(\frac{y}{2}\right)}{\pi\sqrt{3}} \right). \quad (23)$$

Используя (22) и (23) при больших  $\nu$ , находим следующие асимптотики:

$$q_\nu^{(0)}(\beta) \approx \frac{\frac{1}{\sqrt{3}} \frac{6}{3^7} \Gamma\left(\frac{2}{3}\right)}{2\pi} \approx 0.776458\nu^{\frac{1}{3}}, \quad (24)$$

$$q_\nu^{(l)}(\beta) \approx \frac{2}{3} q_\nu^{(0)}(\beta) + l \frac{\Gamma^2\left(\frac{1}{3}\right) \sqrt[3]{36}}{6\pi^2} \nu^{\frac{1}{3}},$$

$$q_\nu^{(+)}(\beta) \approx 0.874389\nu^{\frac{1}{3}}, q_\nu^{(-)}(\beta) \approx 0.3927302\nu^{\frac{1}{3}}. \quad (25)$$

В результате при  $\gamma \gg 1$ , неравенства (18) заменяются на противоположные:

$$q_\nu^{(-)}(1) < q_\nu^{(0)}(1) < q_\nu^{(+)}(1) \Rightarrow P_\nu^{(-1)}(\beta) < P_\nu^{(0)}(\beta) < P_\nu^{(+1)}(\beta). \quad (26)$$

Определение точек максимума  $\gamma_\nu^{(l)}$  в асимптотическом случае сводится, как и в [14], к решению уравнений:

$$\psi_l'(y_l) = 0. \quad (27)$$

Вычислим производную:

$$\left( y^2 \left( 2K_{2/3}(y) - \int_y^\infty K_{1/3}(x)dx \right) \right)' =$$

$$= 4yK_{2/3}(y) + 2y^2 K_{2/3}'(y) - 2y \int_y^\infty K_{1/3}(x)dx - \left( y^2 \int_y^\infty K_{1/3}(x)dx \right)'. \quad (28)$$

При этом используем следующие формулы дифференцирования:

$$K_\nu'(x) = -\frac{\nu}{x} K_\nu(x) - K_{1-\nu}(x),$$

$$\int_y^\infty K_{1/3}(x)dx = \frac{\pi}{\sqrt{3}} - \frac{3}{2} y K_{1/3}(y) - \frac{3}{2} \int_0^y x K_{2/3}(x)dx. \quad (29)$$

Окончательно имеем:

$$\phi_0(y) = 8K_{\frac{2}{3}}(y) - 3yK_{\frac{1}{3}}(y) - 6 \int_y^\infty K_{\frac{1}{3}}(x)dx, \quad (30)$$

$$\phi_l(y) = \phi_0(y) + \frac{6l}{\pi\sqrt{3}} \left( \frac{4}{3} K_{1/3}^2\left(\frac{y}{2}\right) - y K_{1/3}\left(\frac{y}{2}\right) K_{2/3}\left(\frac{y}{2}\right) \right), l = \pm 1. \quad (31)$$

Отметим, что формула (30) полностью совпадает с выражением (17) из [14].

Определяя из уравнений  $\phi_l(y_{(l)}) = 0$  числа  $y_{(l)}$ , получим

$$\overline{P_\nu^{(l)}} \approx \frac{\psi_l(y_{(l)})}{\nu}, \gamma_\nu^{(l)} = a_l \nu^{1/3}, a_l = \left( \frac{2}{3y_{(l)}} \right)^{1/3}, l = \pm 1. \quad (32)$$

Выражение для  $\psi_0(y_0)$  имеет такой же вид, как и в работе [14]:

$$\psi_0(y_0) = \frac{3\sqrt{3}}{16\pi} y_0^2 \left( 4K_{\frac{2}{3}}(y_0) + 3y_0 K_{\frac{1}{3}}(y_0) \right). \quad (33)$$

Находим  $\psi_l(y_l)$ :

$$\psi_l(y_l) = \frac{\sqrt{3}}{8\pi} y_l^2 \times \left( 4K_{2/3}(y_l) + 3y_l K_{1/3}(y_l) + \frac{l}{\pi\sqrt{3}} \left( 4K_{1/3}^2\left(\frac{y_l}{2}\right) + 6y_l K_{1/3}\left(\frac{y_l}{2}\right) K_{2/3}\left(\frac{y_l}{2}\right) \right) \right). \quad (34)$$

Полученные выражения являются основой для последующего численного анализа.

### 3. Численный анализ парциальных вкладов гармоник

Для основной гармоники  $\nu = 1$ , результаты численного расчета величин  $P_\nu^{(l)}(\beta)$  представлены на рис. 1а. Из рисунка видно, что все функции  $P_1^{(l)}(\beta)$  являются монотонно убывающими (от 1 до 0) функциями и на всем интервале  $0 < \beta < 1$  выполняются неравенства  $P_1^{(-1)}(\beta) < P_1^{(0)}(\beta) < P_1^{(+1)}$ , которые аналогичны неравенствам (26) и обратны неравенствам (18).

Графики функций  $q_1^{(l)}(\beta)$  представлены на рис. 1б. Из рисунка видно, что все  $q_1^{(l)}(\beta)$  ( $l = \pm 1, 0, 2$ ) являются убывающими, выпуклыми вверх функциями. Для этих функций на всем полуинтервале  $0 < \beta \leq 1$  справедливо неравенство:

$$q_1^{(-)}(\beta) < q_1^{(0)}(\beta) < q_1^{(+)}(\beta).$$

В точке  $\beta = 1$  имеем  $q_1^{(+)}(1) \approx 0.807544$ ,  $q_1^{(0)}(1) \approx 0.67167$ ,  $q_1^{(-)}(1) \approx 0.202149$ .

Парциальные вклады высших гармоник представлены графиками функций  $P_\nu^{(l)}(\beta)$  ( $\nu = 2 - 10$ ) на рис. 2–3, графиками функций  $q_1^{(l)}(\beta)$  ( $\nu = 2 - 10$ ) – рис. 4–5. Численные значения параметров этих функций приведены в табл. 1.

Из этих графиков, таблицы и асимптотической формулы (32) следует, что для  $\beta \leq \beta_\nu^{(i)}$  функции  $P_\nu^{(i)}(\beta)$  с ростом  $\nu$  убывают

$$P_{\nu+1}^{(i)}(\beta) < P_\nu^{(i)}(\beta), \beta \leq \beta_\nu^{(i)}, \quad (35)$$

но при приближении  $\beta$  к правому концу интервала ( $\beta \rightarrow 1$ ) для каждого значения  $\beta$  возникает конечная область значений  $\nu < \nu_0(\beta)$ , для которых неравенство (35) меняется на противоположное:

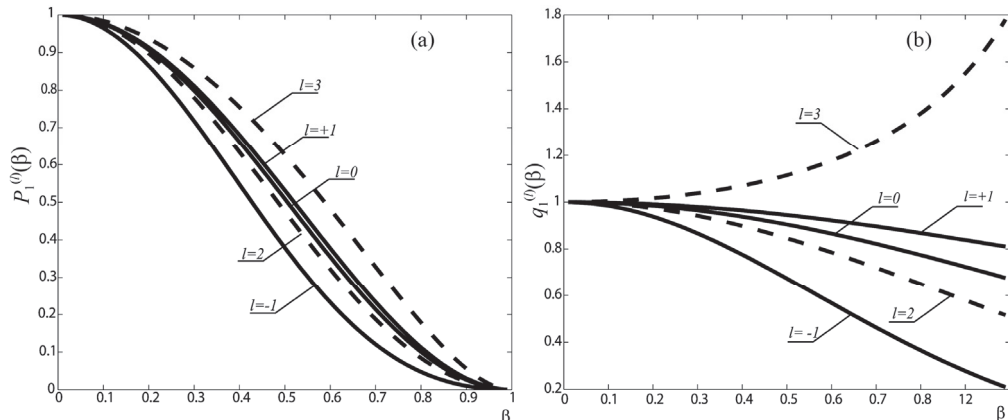


Рис.1. (а) Парциальный вклад первой гармоники в мощность СИ круговой поляризации. (б) Графики функций  $q_1^{(l)}(\beta)$ .

Табл.1. Численные значения характерных параметров функций  $\psi_l(y)$ ,  $P_v^{(l)}(\beta), l = \pm 1$

v	l = 1			l = -1		
	$\beta_v^{(+)}$	$\gamma_v^{(+)}$	$\overline{P_v^{(+)}}$	$\beta_v^{(-)}$	$\gamma_v^{(-)}$	$\overline{P_v^{(-)}}$
2	0.53197	1.18097	0.26296	0.45927	1.12575	0.29801
3	0.64799	1.31294	0.15899	0.58263	1.23041	0.18544
4	0.70999	1.42003	0.11446	0.65291	1.32024	0.13466
5	0.74988	1.51153	0.08954	0.69949	1.39930	0.10559
6	0.77818	1.59225	0.07358	0.73307	1.47026	0.08677
7	0.79952	1.66489	0.06247	0.75863	1.53487	0.07359
8	0.81631	1.73126	0.05428	0.77884	1.59433	0.06386
9	0.82994	1.79259	0.04800	0.79531	1.64961	0.05638
10	0.84126	1.84969	0.04302	0.80902	1.70131	0.05045
11	0.85085	1.90328	0.03898	0.82065	1.74999	0.04565
12	0.85910	1.95386	0.03564	0.83066	1.79604	0.04167
13	0.86629	2.00184	0.03282	0.83939	1.83983	0.03832
14	0.87262	2.04750	0.03042	0.84707	1.88153	0.03547
15	0.87824	2.09109	0.02834	0.85390	1.92146	0.03301
16	0.88327	2.13281	0.02653	0.86001	1.95972	0.03087
17	0.88782	2.17301	0.02494	0.86552	1.99651	0.02899
18	0.89194	2.21164	0.02353	0.87053	2.03204	0.02732
19	0.89570	2.24891	0.02227	0.87509	2.06629	0.02583
20	0.89914	2.28487	0.02114	0.87927	2.09941	0.02450
$y_{(+)} = 1.24806$	$\psi_{(+)}(y_{(+)}) = 0.42988$			$a_{(+)} = 0.81138$		
$y_{(-)} = 1.58365$	$\psi_{(-)}(y_{(-)}) = 0.13880$			$a_{(-)} = 0.74946$		

$$P_{v+1}^{(i)}(\beta) > P_v^{(i)}(\beta), \beta_v^{(i)} < \beta < 1. \quad (36)$$

О чем свидетельствуют также асимптотические формулы (19), (25) и графики функций  $q_v^{(l)}(\beta)$ .

Точки максимумов  $\overline{P_v^{(l)}}$  всегда расположены в следующем порядке:  
 $\overline{P_v^{(+)}} < \overline{P_v^{(-)}}, v > 1.$

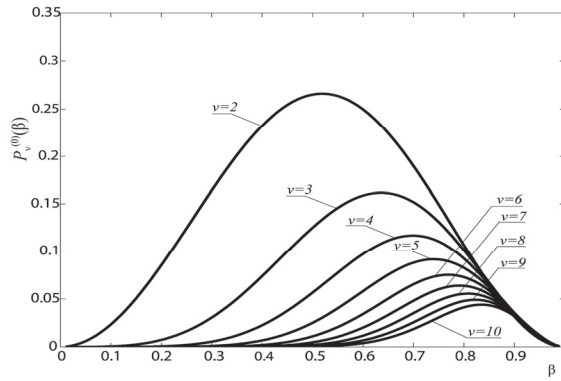


Рис.2. Парциальные вклады в полную мощность круговой поляризации СИ.

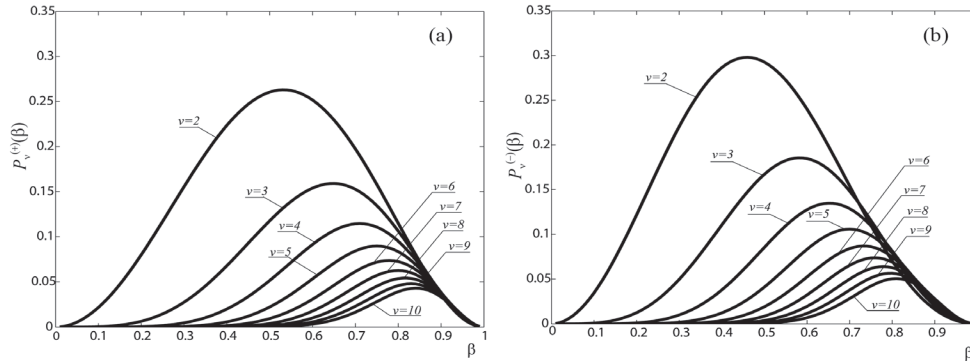


Рис.3. Парциальные вклады  $P_n^{(+)}(\beta)$  и  $P_n^{(-)}(\beta)$  в соответственно правую и левую компоненты круговой поляризации СИ.

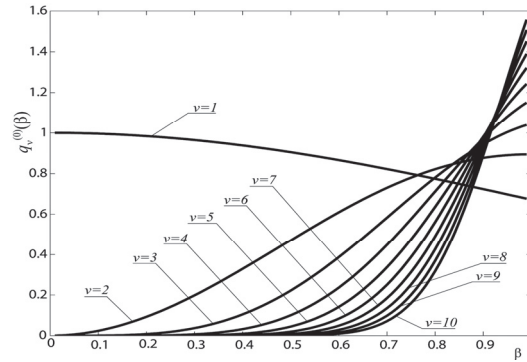


Рис.4. График функций  $q_n^{(0)}(\beta)$  для различных номеров гармоник.

#### 4. Заключение

Таким образом, в данной работе получены аналитические выражения для парциальных вкладов отдельных гармоник в мощность СИ круговой поляризации как в нерелятивистском, так и в ультрарелятивистском приближениях. Численными методами определены пороговые скорости частиц, при которых для двух соседних гармоник вклад гармоники с более высоким номером становится более существенным. Также найдены максимальные значения парциальных вкладов для гармоник с номерами от 1 до 20. При этом максимальное излучение на более высоких гармониках достигается при более высоких скоростях частиц.

Автор благодарит профессора В.Г. Багрова за полезное обсуждение и ценные замечания в ходе Ломоносовской конференции по физике элементарных частиц в Московском государственном университете.

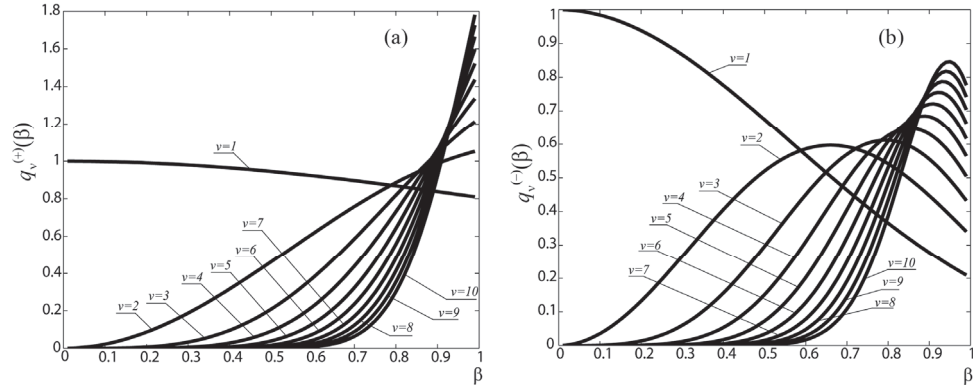


Рис.5. Графики функций  $q_V^{(+)}(\beta)$ ,  $q_V^{(-)}(\beta)$ .

#### ЛИТЕРАТУРА

1. **D. Khangulyan, F. Aharonian, C. Romoli, A. Taylor.** The Astrophysical J., **76**, 914 (2021).
2. **E. Orlando, V. Petrosian, A. Strong.** The Astrophysical J., **173**, 943 (2023).
3. **C. Xiao, J. Zhang, Y. Li, M. Xie, D. Sun.** Biomedicines, **1419**, 13 (2025). <https://doi.org/10.3390/biomedicines13061419>.
4. **W. Lu, L. Zhao, Z. Su, J. Li, Q. Hu.** J. Materials Science & Technology, **217**, 29 (2025).
5. **Q. Li, R. Xing, L. Li, H. Yao, L. Wu, L. Zhao.** Artificial Intelligence Chemistry, **2**, 100045 (2024).
6. **V. Bagrov, V. Bulenok, D. Gitman, J. Jara, V. Tlyachev, A. Jarovoi.** Phys. Rev. E, **69**, 046502 (2004).
7. **V. Bagrov.** Russ. Phys. J., **51**, 335 (2008).
8. **A. Loginov, A. Saprykin.** Russ. Phys. J., **61**, 534 (2018).
9. **S. Boychenko.** Russ. Phys. J., **54**, 822 (2011).
10. **V. Bagrov, D. Gitman, A. Levin, A. Loginov, A. Saprykin.** Eur. Phys. J., C **75**, 555 (2015).
11. **M. Dolzhin, A. Yarovoi.** Russ. Phys. J., **48**, 833 (2005).
12. **A. Burimova.** Russ. Phys. J., **55**, 1197 (2013).
13. **V. Bagrov, A. Kasatkina, A. Pecheritsyn.** Symmetry, **12**, 1095 (2020).
14. **V. Bagrov, M. Dolzhin, K. Seravkin, V. Shakhmatov.** Russ. Phys. J., **7**, 49 (2006).
15. **I. Gradshteyn, I. Ryzhik.** Table of Integrals, Series, and Products. Academic press, 2014.

#### CONTRIBUTION OF INDIVIDUAL HARMONICS TO THE POWER OF CIRCULARLY POLARIZED SYNCHROTRON RADIATION

S.E. BOICHENKO

The characteristics of circularly polarized synchrotron radiation are studied theoretically and numerically. Analytical expressions for partial contributions to the synchrotron radiation power are derived in both the non-relativistic and ultra-relativistic limits. It is demonstrated that for each harmonic exhibits a maximum in its partial contribution. As in the case of linear polarization, for each pair of adjacent harmonics, there is a threshold particle velocity at which the contribution of the harmonic with the higher number becomes more significant.

**NONLINEAR SELF-FOCUSING OF COSH-GAUSSIAN  
LASER BEAM IN RELATIVISTIC PLASMA  
WITH LINEAR ABSORPTION**

K. WALIA\*, P. SHARMA

Department of Physics, DAV University Jalandhar, India

\*e-mail: keshavwalia86@gmail.com

(Поступила в редакцию 20 октябрь 2025 г.)

The present study explores nonlinear self-focusing of Cosh–Gaussian (ChG) laser beam in relativistic plasma in presence of linear absorption. The WKB and paraxial theories are used for examining nonlinear evolution of beam spot size by obtaining 2nd order differential equation, which governs variation of beam width with normalized distance. We have incorporated linear absorption in current investigation for considering energy dissipation effects. The resultant equation is numerically solved by Runge-Kutta 4th order method and impact of key laser-plasma quantities like laser intensity, plasma density, absorption factor, decentered parameter and initial beam radius on self-focusing behavior of ChG laser beam is explored. The significant changes in beam dynamics of laser beam have been observed due to these key laser-plasma quantities.

ЛИТЕРАТУРА

1. Wilks, S.C., Dawson, J.M., Mori, W.B., Katsouleas, T., and Jones, M.E., *Phys. Rev. Lett.*, 1989, vol. 62, p. 2600.
2. Utlaut, W.F. and Cohen, R., *Science*, 1971, vol. 174, p. 245.
3. Esarey, E., Sprangle, P., Krall, J., and Ting, A., *IEEE Trans. Plasma Sci.*, 1996, vol. 24, p. 252.
4. Umstadter, D., Chen, S., Maksimchuk, A., Mourou, G., and Wagner, R., *Science*, 1996, vol. 273, p. 472.
5. Tabak, M., Hammer, J., Glinsky, M.E., Kruer, W.L., Wilks, S.C., Woodworth, J., Campbell, E.M., Perry, M.D., and Mason, R.J., *Phys. Plasmas*, 1994, vol. 1, p. 1626.
6. Hora, H., *Opto-Electronics*, 1973, vol. 5, p. 491.
7. Hughes, J.L., in “*Laser Interaction and Related Plasma Phenomena*”, edited by H. Schwarz and H. Hora, Plenum, New York, 1974, vol. 3B, p. 849.
8. Hora, H., *J. Opt. Soc. Am.*, 1975, vol. 65, p. 882.
9. Faure, J., Glinec, Y., Pukhov, A., Kiselev, S., Gordienko, S., Lefebvre, E., Rousseau, J.P., Burgy, F., Malka, V., *Nature*, 2004, vol. 431, p. 541.
10. Zhang, M., He, J.T., Chen, D.B., Z.H. et al., *Phys. Plasmas*, 2007, vol. 14, p. 072701.
11. Lalouis, P., Moustazis, S., Hora, H., and Miley, G.H., *J. Fusion Energ.*, 2015, vol. 34, p. 62.
12. Hora, H., Korn, G., Giuffrida, L., Margarone, D., et al., *Laser Part. Beams*, 2015, vol. 33, p. 607.
13. Giulietti, A. and Giulietti, D., *J. Plasma Phys.*, 2015, vol. 81, p. 495810608.

14. Gupta, D.N., Suk, H., and Hur, M.S., *Appl. Phys. Lett.*, 2007, vol. 91, p. 211101.
15. Betti, R. and Hurricane, O.A., *Nat. Phys.*, 2016, vol. 12, p. 435.
16. Khandale, K.Y., Patil, S.S., Takale, P.T., Patil, A.S., Patil, R.T., Patil, S.D., and Takale, M.V., *Laser Phys.*, 2024, vol. 34, p. 036001.
17. Takale, P., Khandale, K., Patil, S., Patil, S., and Takale, M., *Mod. Phys. Lett. B*, 2023, vol. 37, p. 1.
18. Teubner, U. and Gibbon, P., *Rev. Mod. Phys.*, 2009, vol. 81, p. 445.
19. Singh, T. and Walia, K., *J. Contemp. Phys.*, 2024, vol. 59, p. 254.
20. Walia, K., Mehra, N., and Pandit, S., *J. Contemp. Phys.*, 2024, vol. 59, p. 378.
21. Singh, K. and Walia, K., *J. Contemp. Phys.*, 2024, vol. 59, p. 154.
22. Singh, K. and Walia, K., *J. Contemp. Phys.*, 2024, vol. 59, p. 244.
23. Tripathi, D., Kaur, S., Vijay, A., and Walia, K., *J. Contemp. Phys.*, 2025, vol. 60, p. 16.
24. Sprangle, P., Esarey, E., and Krall, J., *Phys. Plasmas*, 1996, vol. 3, p. 2183.
25. Lemoff, B.E., Yin, G.Y., Gordon, C.L. III, Barty, C.P.J., and Harris, S.E., *Phys. Rev. Lett.*, 1995, vol. 74, p. 1574.
26. Deutsch, C., Bret, A., Firpo, M.C., Gremillet, L., Lefebvre, E., and Lifschitz, A., *Laser Part. Beams*, 2008, vol. 26, p. 157.
27. Shukla, P.K. and Stenflo, L., *Phys. Plasmas*, 2006, vol. 13, p. 044505.
28. Tripathi, D., Singh, T., Vijay, A., and Walia, K., *J. Contemp. Phys.*, 2025, vol. 60, p. 171.
29. Akhmanov, S.A., Sukhorukov, A.P., and Khokhlov, R.V., *Sov. Phys. Uspekhi*, 1968, vol. 10, p. 609.
30. Sodha, M.S., Ghatak, A.K., and Tripathi, V.K., *Progress in Optics*, North Holland, Amsterdam, 1976.

## **ОБРАТИМАЯ ГЕНЕРАЦИЯ КОГЕРЕНТНОСТИ МЕЖДУ МЕТАСТАБИЛЬНЫМИ КВАНТОВЫМИ СОСТОЯНИЯМИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЛАЗЕРНЫХ ИМПУЛЬСОВ С КВАДРАТИЧНЫМ ЧАСТОТНЫМ ЧИРПОМ**

Г.П. ДЖОТЯН<sup>1</sup>, А.А. АВЕТИСЯН<sup>1\*</sup>, А.П. ДЖОТЯН<sup>2</sup>

<sup>1</sup>HUN-REN Wigner Research Centre for Physics, Budapest, Hungary

<sup>2</sup>Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

\*e-mail: artakav@ysu.am

(Поступила в редакцию 11 января 2025 г.)

В настоящей работе показано, что ранее разработанная нами схема для создания в квантовой  $\Lambda$ -системе управляемой когерентной суперпозиции метастабильных состояний, при определенных условиях позволяет обратимым образом генерировать произвольную когерентность между этими состояниями. В данной схеме используются лазерные импульсы с квадратичным частотным чирпом (КЧЧ). В то время как первый лазерный импульс с КЧЧ создает необходимую суперпозицию метастабильных состояний, последующий КЧЧ лазерный импульс с теми же параметрами, что и предыдущий, но с противоположным направлением частотной модуляции, возвращает квантовую систему в исходное состояние. Это позволяет сформировать другое требуемое значение когерентности посредством действия последующего КЧЧ импульса с соответствующими параметрами. Рассматривается случай одиночного «широкополосного» КЧЧ лазерного импульса, с шириной частотного спектра, (без модуляции) превышающей частотное расстояние между метастабильными энергетическими уровнями системы.

### **1. Введение**

Когерентное управление квантовыми состояниями с помощью лазерного излучения является важной основой для применений в широком спектре различных областей науки и техники. Среди них квантовая химия [1–4], квантовая информация и обработка данных [5–10], квантовая оптика и манипулирование квантовыми состояниями многоуровневых квантовых систем [11–18], генерация высоких гармоник и повышение эффективности нелинейных процессов в резонансных газах [19–25], запись и хранение оптической фазовой информации [26] и другие области, см. обзорные статьи [27–32]. В последние годы активно изучаются различные схемы когерентного управления переносом населенности и создания когерентности между квантовыми состояниями (см., например, [11–18]). Одним из эффективных методов когерентного управления является использование частотно-чирпированных лазерных импульсов в адиабатическом режиме взаимодействия; см., например, обзорную статью [30]. В [15, 17] одиночный лазерный импульс с линейным частотным чирпом (ЛЧЧ) в адиабатическом

режиме взаимодействия был использован для создания когерентной суперпозиции метастабильных состояний в многоуровневой атомной системе. Следует отметить, что ЛЧЧ лазерные импульсы использовались также для когерентного управления квантовыми состояниями графена [33], квантовых точек [34, 35] и низших состояний мелкой примеси в монослое графена [36]. Также рассматривалось влияние процессов диссипации на когерентный перенос населенности и создание когерентности между состояниями квантовых систем, см. [37-43]. Лазерные импульсы с нелинейным частотным чирпом использовались для сверхбыстрого и селективного когерентного переноса населенности в четырехуровневых атомах в [44], а КЧЧ лазерный импульс использовался для демонстрации надежного переноса населенности между состояниями двухуровневой квантовой системы со временем переноса населенностей, значительно меньшим, чем в случае ЛЧЧ импульса, см. [45].

В нашей недавней работе [46], КЧЧ лазерные импульсы были использованы для надежного создания произвольной когерентной суперпозиции между метастабильными состояниями квантовой системы с  $\Lambda$ -конфигурацией рабочих энергетических уровней при пренебрежимо малом кратковременном возбуждении системы. Требуемое значение когерентности было достигнуто путем варьирования параметров лазерных импульсов, включая их интенсивность и центральную расстройку. Подробно были рассмотрены два случая КЧЧ: случай отрицательной центральной расстройки, когда частота лазерного импульса дважды проходит через резонанс с переходом между метастабильным и возбужденным состояниями, и случай положительной центральной расстройки, когда резонанс с системой не достигается вовсе.

Физику процесса генерации когерентности можно наиболее ясно понять, используя базис суперпозиции «светлого» и «темного» состояний для представления амплитуд метастабильных состояний квантовой системы с  $\Lambda$ -конфигурацией, взаимодействующей с «широкополосным» лазерным импульсом, который одновременно взаимодействует с обоими разрешенными переходами системы, см. [46]. В этом представлении, с лазерным импульсом взаимодействует только «светлая» компонента, в то время как «темная» остается неизменной. Рассматриваемая трехуровневая квантовая система эволюционирует в двухуровневую, где «светлая» компонента представляет собой амплитуду метастабильного состояния, а амплитуда возбужденного состояния совпадает с амплитудой возбужденного состояния квантовой  $\Lambda$ -системы. Как известно, ЛЧЧ лазерный импульс в режиме адиабатического взаимодействия переводит всю населенность основного (метастабильного) состояния двухуровневой системы в её возбужденное состояние. Однако если к двухуровневой системе вместо ЛЧЧ импульса применяется КЧЧ импульс, то населенность системы будет переведена в возбужденное состояние и обратно в основное (метастабильное) состояние в результате двойного вхождения в резонанс с импульсом с двумя противоположными направлениями чирпа (на двух крыльях квадратичного чирпа) [46]. В случае атома с  $\Lambda$ -структурой, когда широкополосный лазерный импульс взаимодействует одновременно с обоими разрешенными переходами, в результате взаимодействия с КЧЧ импульсом возбуждается и вторично возбуждается лишь «светлая» суперпозиционная компонента метастабильных состояний, в то

время как «темная» остается неизменной. Хотя амплитуда «светлой» компоненты в конце взаимодействия остается той же, что и до взаимодействия (аналогично рассмотренному выше случаю двухуровневого атома) результирующая фаза «светлой» компоненты после взаимодействия меняется в зависимости от параметров лазерного импульса. Поскольку значения амплитуды вероятности метастабильных состояний равны линейной комбинации «светлой» и «темной» компонент, конечные амплитуды вероятностей состояний, а следовательно, и когерентность между ними зависят от параметров лазерного импульса, включая его центральную частоту, пиковую интенсивность (амплитуду частоты Раби) и параметр скорости частотной модуляции.

В [46] было показано, что требуемая (произвольная) когерентность между метастабильными состояниями системы может быть надежно и устойчиво создана путем изменения параметров КЧЧ импульса. Здесь были изучены два различных случая: когда зависящая от времени частота лазерного КЧЧ импульса дважды резонирует с переходом между метастабильным и возбужденным состояниями и когда частота лазерного КЧЧ импульса имеет точку поворота вблизи резонанса, и не резонирует с переходом. В обоих случаях была продемонстрирована надежная и устойчивая реализация требуемого значения когерентности между двумя метастабильными состояниями. Как отмечалось выше, подобная схема когерентного управления населенностями и когерентностью между метастабильными состояниями может найти применение в квантовых компьютерах и обработке квантовых данных [47-49]. Однако для этих целей процесс создания необходимой когерентности должен быть обратимым: схема должна позволять системе возвращаться в исходное состояние для подготовки к следующей операции. В настоящей работе мы показываем, что при определенных условиях схема генерации когерентности, представленная в работе [46], может быть использована для обратимой генерации произвольной когерентности между метастабильными состояниями системы. В то время как первый лазерный КЧЧ импульс генерирует необходимую суперпозицию метастабильных состояний, последующий лазерный КЧЧ импульс с теми же параметрами, что и предыдущий, но с противоположным направлением частотной модуляции возвращает квантовую систему в исходное состояние. Тем самым система подготавливается к формированию следующего необходимого значения когерентности путем воздействия последующего КЧЧ импульса с соответствующими параметрами. Как показывает приведенный ниже анализ, для обеспечения обратимости, квадратичная частотная модуляция должна быть спроектирована таким образом, чтобы частота КЧЧ импульса касалась резонансной линии перехода между основным и возбужденным состояниями, не пересекая ее дважды.

## 2. Математический формализм

Рассмотрим вначале математический формализм, описанный в нашей предыдущей статье [46] для описания взаимодействия КЧЧ импульса с квантовой системой  $\Lambda$ . Затем рассмотрим действие последующего КЧЧ импульса, чтобы показать, что при определенных условиях система может быть переведена в исходное состояние, что делает процесс создания когерентности

обратимым. Рассмотрим взаимодействие КЧЧ лазерного импульса с квантовой системой, имеющей  $\Lambda$ -конфигурацию рабочих уровней (см. рис.1). Лазерный импульс предполагается «широкополосным» с шириной частотного спектра, изначально превышающей частотное расстояние между двумя метастабильными состояниями системы (что позволяет импульсу одновременно взаимодействовать с обоими разрешенными переходами системы). В предположении, что длительность импульса короче всех времен релаксации системы, для описания взаимодействия лазерного импульса с системой мы используем уравнение Шрёдингера

$$\frac{d}{dt}a = i\hat{H}a \quad (1)$$

для столбца вектора состояния

$$a = (a_1, a_2, a_3)^T = a_1(1 \ 0 \ 0)^T + a_2(0 \ 1 \ 0)^T + a_3(0 \ 0 \ 1)^T.$$

В приближении вращающейся волны гамильтониан взаимодействия имеет вид [1, 16]:

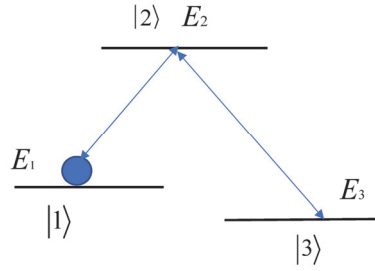


Рис.1. Схема энергетических уровней квантовой системы с  $\Lambda$ -структурой.

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} 0 & \Omega_{12} & 0 \\ \Omega_{21} & \varepsilon_{21} + t \frac{d}{dt} \varepsilon_{21} & \Omega_{23} \\ 0 & \Omega_{32} & \omega_R \end{bmatrix}, \quad (2)$$

где  $\Omega_{ij} = \Omega_{ji}^* = A(t)d_{ij}/2\hbar$  ( $i, j=1,2,3$ ) — Раби частота, а  $d_{ij}$  — матричный элемент лазерно-индуцированного дипольного перехода из состояния  $|j\rangle$  в состояние  $|i\rangle$ . Единичные векторы-столбцы  $(1 \ 0 \ 0)^T$ ,  $(0 \ 1 \ 0)^T$  и  $(0 \ 0 \ 1)^T$  описывают состояния  $|1\rangle$ ,  $|2\rangle$ , and  $|3\rangle$  с амплитудами  $a_i$  ( $I = 1,2,3$ ) для вероятностей состояний (см. рис.1).

Следует отметить, что переход между метастабильными состояниями  $|1\rangle$  и  $|3\rangle$  в дипольном приближении запрещен, в этом приближении разрешены только переходы между состояниями  $|1\rangle$ ,  $|3\rangle$  и возбужденным состоянием  $|2\rangle$ .  $A(t)$  — (реальная) огибающая лазерного импульса  $A(t) = A_0 \exp(-\frac{t^2}{2\tau_p^2})$  с гауссовой формой,  $A_0$  — его амплитуда,  $2\tau_p$  — длительность импульса по интенсивности;

$\varepsilon_{21} = \omega_L(t) - \omega_{21}$  и  $\varepsilon_{23} = \omega_L(t) - \omega_{23}$  — расстройки однофотонных резонансов, где  $\omega_L(t)$  — зависящая от времени несущая частота лазерного импульса,  $\omega_{21}$  и  $\omega_{23}$  — частоты резонансных переходов между соответствующими состояниями. Следует отметить, что в случае взаимодействия одиночного лазерного импульса с рассматриваемой квантовой системой рамановская расстройка  $\omega_R = \varepsilon_{21}(t) - \varepsilon_{23}(t) = \omega_{13}$  является параметром, не зависящим от времени и равна частотному интервалу  $\omega_{13} = (E_1 - E_3)/\hbar$  между двумя основными состояниями квантовой системы с энергиями  $E_1$  и  $E_3$  (см. рис. 1).

Предполагая, что ширина частотного спектра «широкополосного» лазерного импульса  $\Delta\omega_p$  ( $\Delta\omega_p \sim 1/\tau_p$ ) превышает частотный интервал  $\omega_{13}$  между двумя метастабильными состояниями ( $\Delta\omega_p > \omega_{13}$ ), мы можем предположить наличие рамановского резонанса при взаимодействии «широкополосного» лазерного импульса с рассматриваемой квантовой системой и считать расстройку  $\omega_R = 0$  в гамильтониане (2). В дальнейшем мы предполагаем квадратичную частотную модуляцию во времени для несущей частоты лазера:  $\omega_L(t) = \omega_{L0} + \beta t^2$ , где  $\omega_{L0}$  — центральная частота, а  $\beta$  — параметр скорости модуляции, и  $\varepsilon_{21} = \omega_L(t) - \omega_{21} = e_0 + \beta t^2$  расстройка, где  $e_0 = \omega_{L0} - \omega_{21}$  — центральная расстройка. Эффективная расстройка в уравнении Шрёдингера (1) с гамильтонианом, определяемым уравнением (2), равна  $\varepsilon_p(t) = \varepsilon_{21} + t d/dt \varepsilon_{21} = e_0 + 3\beta t^2$ . Ниже представлены результаты численного решения уравнения Шрёдингера (1) для заселенностей  $n_j = |a_j|^2$ , ( $j=1,2,3$ ) квантовых состояний и абсолютного значения когерентности  $\rho_{13} = a_1 a_3^*$  между двумя метастабильными состояниями  $|1\rangle$  и  $|3\rangle$ .

### 3. Обсуждение результатов

Вначале мы покажем обратимость взаимодействия рассматриваемой системы с КЧЧ лазерным импульсом, достигаемую воздействием последующего КЧЧ импульса, предполагая, что первоначально (до взаимодействия с импульсом) система была подготовлена (например, оптической накачкой) в одном из своих метастабильных состояний, например, в состоянии  $|1\rangle$ :  $n_1(t \rightarrow -\infty) = 1$  и  $n_2(t \rightarrow -\infty) = n_3(t \rightarrow -\infty) = 0$ . Как следует из численных результатов (см. рис. 2), эффект обратимости проявляется только в случае, когда последующий КЧЧ импульс имеет те же параметры, что и первый, за исключением параметра скорости частотной модуляции  $\beta$ , который должен иметь противоположный знак. Другим важным условием является равенство нулю центральной расстройки:  $e_0 = 0$  (см. рис.2 и рис.3). Ниже на рис.2 и рис.3 показана динамика заселенности состояний и абсолютного значения когерентности под действием первого и второго КЧЧ лазерных импульсов, полученная в результате численного решения уравнения Шрёдингера (1).

Как видно из рис.2, под действием первого КЧЧ лазерного импульса происходит перенос населенностей между метастабильными состояниями при небольшом и кратковременном возбуждении системы. В результате между метастабильными состояниями генерируется когерентность.

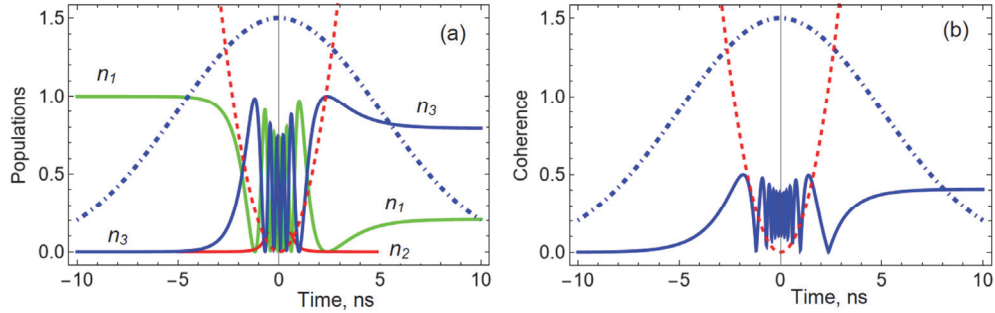


Рис.2. (а) Динамика населенности состояний и (б) абсолютное значение когерентности между двумя метастабильными состояниями системы после действия первого КЧЧ лазерного импульса. Примененные параметры:  $\tau_p = 5$  нс- половина длительности импульса,  $\Omega_0 = 15$  ГГц – амплитуда частоты Раби, параметр скорости chirpa  $\beta = 25$  ГГц<sup>3</sup>. Точечно-пунктирная линия описывает форму лазерного импульса, а точечная – расстройку  $\varepsilon_p(t) = \varepsilon_0 + 3\beta t^2$  с центральным значением  $\varepsilon_0 = 0$ .

Как следует из рис.3, квантовая система возвращается в исходное состояние ( $n_1 = 1, n_2 = n_3 = 0$ ) в результате воздействия второго КЧЧ импульса после генерации когерентной суперпозиции двух метастабильных состояний первым КЧЧ импульсом (см. рис.2).

Необходимыми условиями для такого поведения системы являются следующие: все параметры последующего КЧЧ импульса должны совпадать с параметрами первого, но с противоположным знаком параметра частотной модуляции. На следующем этапе перейдем к вычислению зависимости абсолютного значения генерируемой когерентности  $\rho_{13}$  между метастабильными состояниями от амплитуды частоты Раби  $\Omega_0$  и параметра скорости частотной модуляции  $\beta$ . Ниже на рис. 4 представлен цветовой график этой зависимости, полученный в результате численного решения уравнения Шрёдингера (1).

Как видно из рис.4, существуют области для амплитуды частоты Раби и параметра частотной модуляции, где произвольное значение когерентности устойчиво создается путем изменения пиковой интенсивности (амплитуды

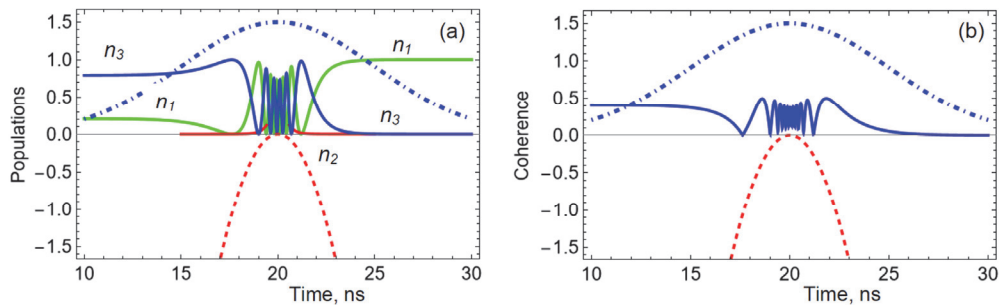


Рис.3. (а) Динамика населенности состояний и (б) абсолютное значение когерентности между двумя метастабильными состояниями системы в поле последующего КЧЧ лазерного импульса. Все параметры те же, что на рис.2 за исключением параметра скорости chirpa:  $\beta = -25$  ГГц<sup>3</sup>.

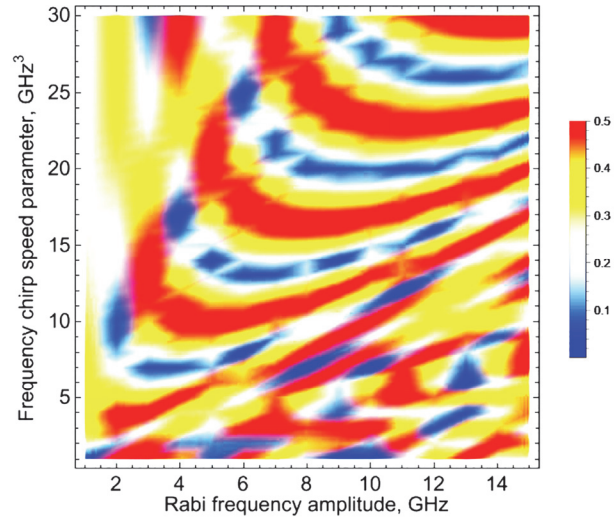


Рис.4. Зависимость абсолютного значения генерируемой когерентности от амплитуды частоты Раби  $\Omega_0$  и параметра скорости чирпа  $\beta$ , установленные в системе после воздействия КЧЧ лазерного импульса. Примененные параметры:  $\tau_p = 5$  нс,  $e_0 = 0$ .

частоты Раби) лазерного импульса КЧЧ и параметра скорости частотной модуляции. На этом рисунке наблюдается квазипериодическая зависимость величины генерируемой когерентности от амплитуды частоты Раби и параметра скорости частотной модуляции. Ниже, для удобства, эти зависимости представлены по отдельности на рис.5 и рис.6.

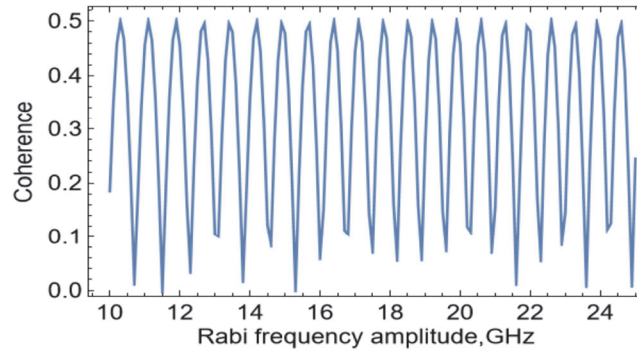


Рис.5. Зависимость абсолютного значения генерируемой когерентности  $\rho_{13}$  между метастабильными состояниями от амплитуды частоты Раби. Используемые параметры:  $\tau_p = 5$  нс; центральная расстройка  $e_0 = 0$ ; параметр скорости чирпа  $\beta = 25$  ГГц<sup>3</sup>.

#### 4. Заключение

Представлена схема обратимой генерации когерентности между метастабильными состояниями квантовой системы с  $\Lambda$ -структурой рабочих энергетических уровней с использованием КЧЧ лазерных импульсов. Показано, что КЧЧ импульс может устойчиво создавать произвольное требуемое значение

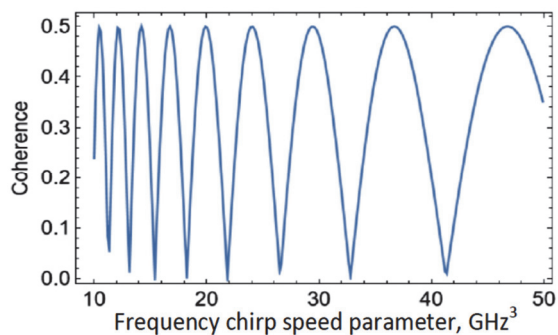


Рис.6. Зависимость абсолютного значения генерируемой когерентности от параметра скорости чирпа. Используемые параметры:  $\tau_p = 5$  нс; центральная расстройка  $e_0 = 0$ ; амплитуды частоты Раби  $\Omega_0 = 15$  ГГц.

когерентности между двумя метастабильными состояниями системы при малом и кратковременном возбуждении системы. Значение когерентности может изменяться путем изменения параметров лазерного импульса, включая его пиковую интенсивность и параметр скорости частотной модуляции.

Показано, что процесс генерации когерентности обратим, если центральная расстройка между частотой лазерного импульса и переходом между метастабильным и возбужденным состояниями системы равна нулю. Перенос квантового состояния системы в исходное осуществляется последующим лазерным КЧЧ импульсом с параметрами, аналогичными первому, но с противоположным знаком параметра скорости частотной модуляции.

Следует отметить, что возвращение системы в исходное состояние дает возможность формирования другого требуемого значения когерентности на следующем этапе путем воздействия следующего КЧЧ лазерного импульса с соответствующими параметрами.

Представленная схема создания обратимой заданной когерентности между двумя метастабильными состояниями может найти применение в области квантовых вычислений и обработки данных для генерации кубитов, когда задействованы только метастабильные состояния квантовой системы, что позволяет исключить негативные эффекты спонтанной релаксации.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Комитета по высшему образованию и науке РА в рамках проекта №21AG-1C048.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. P. Nuernberger, G. Vogt, T. Brixner, G. Gerbe. Phys. Chem. Chem. Phys., **9**, 2470 (2007).
2. X. Li, G.A. Parker. J. Chem. Phys., **128**, 184113 (2008).
3. S. Chatterjee, S.S. Bhattacharyya. J. Chem. Phys., **133**, 164313 (2010).
4. M. Shapiro, P. Brumer. Quantum Control of Molecular Processes. WILEY-CH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2012.
5. D. Bouwmeester, A. Ekert, A. Zeilinger. The Physics of Quantum Information: Quantum Cryptography, Quantum Teleportation, Quantum Computation. Springer-Verlag, 2000.

6. **C.H. Bennett, D.P. DiVincenzo.** *Nature*, **404**, 247 (2000).
7. **M. Saffman, T.G. Walker.** *Rev. Mod. Phys.*, **82**, 2313 (2010).
8. **P. Kaufmann, T.F. Gloger, D. Kaufmann, M. Johanning, C.Wunderlich.** *Phys. Rev. Lett.*, **120**, 010501 (2018).
9. **M.A. Nielsen, I.L. Chuang.** *Quantum Computation and Quantum Information.* Cambridge University Press, 2010.
10. **A.G. Radnaev, W.C. Chung, D.C. Cole et al.** *PRX QUANTUM* **6**, 030334 (2025).
11. **A.S. Parkins, P. Marte, P. Zoller, H.J. Kimble.** *Phys. Rev. Lett.*, **71**, 3095 (1993).
12. **F. Vewinger, M. Heinz, R.G. Fernandez, N.V. Vitanov, K. Bergmann.** *Phys. Rev. Lett.*, **91**, 213001 (2003).
13. **G.P. Djotyan, J.S. Bakos, Zs. Sörlei, J. Szigeti.** *Phys. Rev. A*, **70**, 063406 (2004).
14. **N. Sangouard, S. Guérin, L. P. Yatsenko, T. Halfmann.** *Phys. Rev. A*, **70**, 013415 (2004).
15. **G.P. Djotyan, J.S. Bakos, G.Demeter, Zs. Sörlei, J. Szigeti, D. Dzsotjan.** *J. Opt. Soc. Am. B.*, **25**, 166 (2008).
16. **H.K. Avetissian, A. Brown, G.F., Mkrtchian.** *Phys. Rev. A*, **80**, 033413 (2009).
17. **Z. Zhang, X. Yang, X. Yan.** *J. Opt. Soc. Am. B*, **30**, 1017 (2013).
18. **G. Liu, V. Zakharov, T. Collins, P. Gould, S.A. Malinovskaya.** *Phys. Rev. A*, **89**, 041803(R) (2014).
19. **J.B. Watson, A. Saprera, X. Chen, K. Burnett.** *Phys. Rev. A*, **53**, R1962 (1996).
20. **M.D. Lukin, P.R. Hemmer, M. Loeffler, M. Scully.** *Phys. Rev. Lett.*, **81**, 2675(1998).
21. **E. Korsunsky, T. Halfmann, J.P. Marangos, M. Fleischhauer, K. Bergmann,** *Eur. Phys. J. D* **23**, 167 (2003).
22. **T. Rickes, J.P. Marangos, T. Halfmann.** *Opt. Commun.*, **227**, 133 (2003).
23. **D.B. Milošević.** *J. Opt. Soc. Am. B*, **23**, 308 (2006).
24. **H.K. Avetissian, A.G. Markossian, G.F. Mkrtchian.** *Phys. Rev. A*, **84**, 013418 (2011).
25. **M. Shapiro, P. Brumer.** *Quantum Control of Molecular Processes.* WILEY-VCH Verlag GmbH & Co, 2012.
26. **G.P. Djotyan, J.S. Bakos, Zs. Sörlei.** *Phys. Rev. A*, **64**, 013408 (2001).
27. **K. Bergmann, H. Theuer, B.W. Shore.** *Rev. Mod. Phys.*, **70**, 1003 (1998).
28. **N.V. Vitanov, T. Halfmann, B.W. Shore, K. Bergmann.** *Annu. Rev. Phys. Chem.*, **52**, 763 (2001).
29. **V.S. Malinovsky, J.L. Krause.** *Eur. Phys. J. D*, **14**, 147 (2001).
30. **P. Král, I. Thanopoulos, M. Shapiro.** *Rev. Mod. Phys.*, **79** 53 (2007).
31. **N.V. Vitanov, A.A. Rangelov, B.W. Shore, K. Bergmann.** *Rev. Mod. Phys.*, **89**, 015006 (2017).
32. **O.V. Ivakhnenko, S.N. Shevchenko, F. Nori.** *Physics Reports*, **995**, 1 (2023).
33. **C. Ding, R. Yu, X. Hao, D. Zhang.** *Scientific Reports*, **8**, 1530 (2018).
34. **A. Debnath, C. Meier, B. Chatel, T. Amand.** *Phys. Rev. B*, **86**, 161304(R) (2012).
35. **F. Kappe, Y. Karli, G. Wilbur, R.G. Krämer, S. Ghosh, R. Schwarz, M. Kaiser, T.K. Bracht, D.E. Reiter, S. Nolte, K.C. Hall, G. Weihs, V. Remesh.** *Advanc. Quantum Tech*, **8**, 2300352 (2025).
36. **A.P. Djotyan, G.P. Djotyan, A.A. Avetisyan.** *J. Contemp. Phys.*, **59**, 272 (2024).
37. **N.Sandor, J.S. Bakos, Zs. Sörlei, G.P. Djotyan.** *JOSA B*, **28**, 2785(2011).
38. **C. Xu, A. Poudel, M.G. Vavilov.** *Phys. Rev. A*, **89**, 052102 (2014).
39. **A. Levy, E. Torrontegui, R. Kosloff.** *Phys. Rev. A*, **96**, 033417 (2017).
40. **A.A. Avetisyan, A.P. Djotyan, G.P. Djotyan, A.L. Vartanian, A.L. Asatryan.** *J.*

- Contemp. Phys., **60**, 51 (2025).
41. **S. Ashhab**. Phys. Rev. A, **90** 062120 (2014).
  42. **A. Dodin, S. Garmon, L. Simine, D. Segal**. J. Chem. Phys. **140**, 124709 (2014).
  43. **M. Hosseini, F. Sarreshtedari**. Int. J. Opt. Photon. **11**, 57 (2017).
  44. **P. Kumar, A.K. Sarma**. Phys. Rev. A, **88**, 033823 (2013).
  45. **F. Ahmadiouri, M. Hosseini, F. Sarreshtedari**, Phys. Scr., **94**, 105404 (2019).
  46. **G.P. Djotyan, A.A. Avetisyan, A.P. Djotyan**. arXiv:2511.05161 [quant-ph] (2025).
  47. **M. Saffman, T.G. Walker and K. Mølmer**, Rev. Mod. Phys. **82**, 2313 (2010).
  48. **C. H. Bennett, D.P. DiVincenzo**, Nature **404**, 247 (2000).
  49. **E. Knill**. Nature, **463**, 441 (2010).

REVERSIBLE GENERATION OF COHERENCE BETWEEN METASTABLE  
QUANTUM STATES USING LASER PULSES WITH  
QUADRATIC FREQUENCY CHIRP

G.P. DJOTYAN, A.A. AVETISYAN, A.P. DJOTYAN

In this paper, we show that the scheme we previously developed for creating a controlled coherent superposition of metastable states in a quantum system, under certain conditions, allows the reversible generation of arbitrary coherence between these states. This scheme utilizes laser pulses with a quadratic frequency chirp (QFC). While the first QFC laser pulse generates the required superposition of metastable states, a subsequent QFC laser pulse with the same parameters as the previous one, but with the opposite direction of frequency chirp, returns the quantum system to its original state, allowing another required coherence value to be formed by applying the next QFC pulse with the appropriate parameters. The case of a single “broadband” QFC laser pulse is considered, when the frequency spectrum of the pulse (without chirp) exceeds the frequency distance between the metastable energy levels of the system.

ՄԵՏԱԿԱՅՈՒՆ ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ՎԻՃԱԿՆԵՐԻ ՄԻՋԵՎ ԿՈՇԵՐԵՆՏՈՒԹՅԱՆ  
ՇՐՋԵԼԻ ԳԵՆԵՐԱՑԻԱ՝ ՀԱՃԱԽՈՒԹՅԱՆ ՔԱՌԱԿՈՒՍԱՅԻՆ ՉԻՐՊՈՎ  
ԼԱՋԵՐԱՑԻՆ ԻՄՊՈՒԼՍՆԵՐԻ ՄԻՋՈՑՈՎ

Գ.Պ. ԶՈԹՅԱՆ, Ա.Պ. ԶՈԹՅԱՆ, Ա.Ա. ԱՎԵՏԻՍՅԱՆ

Այս աշխատանքում ցույց ենք տալիս, որ  $\Lambda$ -կառուցվածքով քվանտային համակարգում մետակայուն վիճակների վերահսկվող կոհերենտ սուպերպոզիցիա ստեղծելու համար մեր կողմից նախկինում մշակված սխեման, որոշակի պայմաններում, թույլ է տալիս այդ վիճակների միջև կամայական կոհերենտության շրջելի գեներացիա: Այս սխեման օգտագործում է հաճախության քառակուսային չիրպով (ՀՔՉ) լազերային իմպուլսներ: Մինչդեռ առաջին ՀՔՉ լազերային իմպուլսը առաջացնում է մետակայուն վիճակների անհրաժեշտ սուպերպոզիցիա, հաջորդ նույն պարամետրերով բայց չիրպի հակառակ ուղղությամբ ՀՔՉ լազերային իմպուլսը վերադարձնում է քվանտային համակարգը իր սկզբնական վիճակին: Դա թույլ է տալիս ձևավորել մեկ այլ պահանջվող կոհերենտության արժեք՝ կիրառելով հաջորդ ՀՔՉ իմպուլսը համապատասխան պարամետրերով: Դիտարկվել է մեկ «լայնաշերտ» ՀՔՉ լազերային իմպուլսի դեպքը, երբ իմպուլսի հաճախային սպեկտրի լայնությունը (առանց չիրպի) գերազանցում է էներգետիկ հեռավորությունը համակարգի մետակայուն մակարդակների միջև:

## FIRST-PRINCIPLES STUDY OF $B_{1-x}Ga_xP_yBi_{1-y}$ QUATERNARY ALLOYS FOR NEAR-INFRARED OPTOELECTRONIC, SPECTROSCOPIC AND SENSING APPLICATIONS

S. Touam<sup>1,2\*</sup>, N. Mounis<sup>3</sup>, F. Guenfoud<sup>1</sup>, I. Bendjedide<sup>1</sup>, S. Chelli<sup>1,2</sup>,  
F. Z. Khelifati<sup>1</sup>, D. Lamrous<sup>1,4</sup>, O. Belaidi<sup>5</sup>, S. Ghemid<sup>2</sup>, H. Meradji<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Physico-Chemistry of Materials Laboratory (LPCM), Department of Physics, Faculty of Science and Technology, Chadli Bendjedid University (UCBET), El Tarf 36000, Algeria

<sup>2</sup>Radiation Physics Laboratory (LPR), Department of Physics, Faculty of Sciences, Badji Mokhtar University, Annaba 23000, Algeria

<sup>3</sup>Department of Physics, Faculty of Exact Sciences, Sidi Bel Abbés University, 22000 Algeria

<sup>4</sup>Laboratory of Magnetism and Solid Spectroscopy, Badji Mokhtar University, Faculty of Sciences, Department of Physics, Annaba 23000, Algeria

<sup>5</sup>Physico-Chemistry of Materials Laboratory (LPCM), Chemistry Department, Faculty of Science and Technology, Chadli Bendjedid University (UCBET), El Tarf 36000, Algeria

\*e-mail: touam-selma@univ-eltarf.dz

(Поступила в редакцию 7 января 2026 г.)

We realized an exhaustive study about structural, electronic and optical properties of the quaternary alloys  $B_{1-x}Ga_xP_yBi_{1-y}$  in zinc blend phase by applying the full-potential augmented plane wave method FP-LAPW within the scope of density functional theory DFT. Potentials were determined using modified generalized gradient GGA and Becke-Johnson approximations. We analyzed the effects of the compositions ( $x, y$ ) on the lattice parameters, bulk modulus, and band gap energy, revealing a non linear dependence of these quantities. We also investigated several optical constants, including the real and imaginary parts of the dielectric function, the absorption coefficient  $\alpha(\omega)$ , the refractive index  $n(\omega)$ , and the reflectivity. Our obtained results about lattice parameters, energetic gaps and optical constants for the binary compounds are in well correspondence with the provided experimental and theoretical values. However, for alloys, differences were observed against linearity for lattice constants and bulk modulus. Moreover, we examined the energy band of zinc-based quaternary alloys  $B_{1-x}Ga_xP_yBi_{1-y}$  those corresponding to ZnS lattice. It is worth mentioning that this study represents an innovative contribution in the domain of quaternary alloys, since it is the first theoretical analysis about these alloys.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Li, G., Zhu, M., Guo, Z., Yang, Y., Li, H., Shang, J., Feng, Y., Lu, Y., Gao, F., and Li, S., *J. Mater. Chem. C*, 2024, vol. 12, p. 12150.
2. Touam, S., Mounis, N., Boumaza, A., Ghemid, S., Meradji, H., Khenata, R., Bin Omran, S., Badi, N., and Kushwaha, A. K., *J. Mol. Model.*, 2022, vol. 28, no. 7, p. 182.
3. Gacem, M., Touam, S., Guenfoud, F., Mounis, N., Benmachiche, A., Bendjedide, I., Charef, I., Ghemid, S., and Meradji, H., *Phys. Solid State*, 2025, vol. 67, no. 4, p. 273.
4. Khelifati, F. Z., Touam, S., Semari, F., Guenfoud, F., Charef, I., Ghemid, S., Meradji, H., Khenata, R., and Ul Haq, B., *Indian J. Phys.*, 2025, vol. 99, no. 8, p. 2869.

5. Megdoud, Y., Mahdjoubi, R., Amrani, M., Bendjeddou, H., Ghemid, S., Meradji, H., and Khenata, R., *Comput. Condens. Matter*, 2020, vol. 22, p. e00434.
6. Meneceur, R., Boukhari, A., Megdoud, Y., Tairi, L. and Benkrima, Y., *Digest J. Nanomater. Biostruct.*, 2025, vol. 20, no. 1, p. 67.
7. Touam, S., Belghit, R., Mahdjoubi, R., Megdoud, Y., Meradji, H., Khan, M. S., Ahmed, R., Khenata, R., Ghemid, S., Rai, D.P., and Al Douri, Y., *Bull. Mater. Sci.*, 2020, vol. 43, p. 1.
8. Sharma, N.N., Chandra, D., Amit, A., and Singh, R.A.K., *Mater. Sci. Semicond. Process.* 2022, vol. 107, p. 107033.
9. Louafi, A., Chaouche, Y., and El Hassasna, A., *Appl. Phys. A*, 2021, vol. 127, no. 7, p. 506.
10. Abukhadra, M.R., Ibrahim, S.A., and El Maghrabi, H.H., *Braz. J. Phys.*, 2024, vol. 54, no. 1, p. 159.
11. Bandhaso, D., Lukmantoro, A., and Sholihun, S., *J. Online Phys.*, 2024, vol. 9, no. 2, p. 102.
12. Rahman, M.A., Mousumi, K., Ali, M.L., Khatun, R., Rahman, M.Z., Hasan, S.S., Hasan, W., Rasheduzzaman, M., and Hasan, M.Z., *Results Phys.*, 2023, vol. 44, p. 106141.
13. Wang, S., Song, J., and Liu, B., *Colloids Interfaces*, 2025, vol. 9, no. 3, p. 41.
14. Rahman, N., Husain, M., Tirth, V., Algahtani, A., Alqahtani, H., Al-Mughanam, T., Alghtani, A.H., Khan, R., Sohail, M., Khan, A.A., Azzouz-Rached, A., and Khan, A., *RSC Adv.*, 2023, vol. 13, p. 18934.
15. Sajid, L., Saeed, M.U., Mashadi, S.H., Abid, S.S., Pervaiz, S., Ali, Z., Alanazi, Y.M., Bacha, A.-U.-R., and Saeed, Y., *RSC Adv.*, 2024, vol. 14, p. 35348.
16. Hossain, A., Mahtab, S.S., Shahiduzzaman, M., Alharbi, H.F., and Uddin, M.M., *AIP Adv.*, 2025, vol. 15, p. 105319.
17. Hedhili, F., Khan, H., Ullah, F., Sohail, M., Khan, R., Alsalmi, O.H., Alrobei, H., Abualnaja, K.M., Alosaimi, G., and Albaqawi, H.S., *Molecules*, 2024, vol. 29, no. 5, p. 961.
18. Hu, W., Pan, M., Huang, Z., Yang, H., Wu, H., Pan, L., Cao, Z., and Zhao, Y., *Front. Mater.*, 2021, vol. 8, p. 651435.
19. Chaba, S.M., *Mater. Sci. Eng. B*, 2024, vol. 308, p. 117578.
20. Gul, B., Khan, M.S., Ahmad, B., Rahaman, M., Lolika, P.O., Wafa, G., and Ahmad, H., *Mater. Adv.*, 2023, vol. 4, p. 4204.
21. Kada, B., Karima, B., Beloufa, N., Abdelkader, B., Samir, B., Charef, A., and Souheil, B., *Ann. West Univ. Timisoara Phys.* 2024, vol. 66, no. 1, p. 62.
22. Shen, X.P., Lin, J.B., Hu, R.Y., Liu, Y.C., Xu, L.Q., Niu, H.B., Xiao, X.F., and Wang, V., *RSC Adv.*, 2024, vol. 14, p. 6752.
23. Furst, J.I., Bryant, J.T., Langlois, K.R., Myers, S.D., Rahmani, A., Fairchild, D.C., Mehta, R., Jurca, T., Benedict, J.B., and Uribe-Romo, F.J., *Inorg. Chem. Front.*, 2024, vol. 11, p. 3021.
24. Tan, H., Wu, X., Hu, S., Ren, Y., Du, Y., Zhao, Q., Sun, L., and Hu, W., *Chem. Sci.*, 2025, vol. 16, p. 21705.
25. Mamo, M.D., Zigyalew, Y., Gelan, S.E., Ntsendwana, B., and Sikhwivhilu, L., *Front. Sensors*, 2025, vol. 6, p. 1521727.
26. Lu, Y., Chen, C., Sun, Q., Zhang, N., Lv, K., Chen, Z., He, Y., Tang, H., and Chen, P., *Inorganics*, 2025, vol. 13, no. 7, p.236.
27. Argirusis, N., Achilleos, A., Alizadeh, N., Argirusis, C., and Sourkouni, G., *Sensors*, 2025, vol. 25, no. 3, p. 673.

## ОБ ОДНОЙ ИЗ ПРИЧИН ОГРАНИЧЕННОЙ ПРИМЕНИМОСТИ ПОТЕНЦИАЛА МОРЗЕ

В.А. АРУТЮНЯН<sup>1\*</sup>, А.О. МЕЛИКЯН<sup>1</sup>, А.Р. МИНАСЯН<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Национальная научная лаборатория им. А.И. Алиханяна, Ереван, Армения

<sup>2</sup>Институт прикладных проблем физики НАН Армении, Ереван, Армения

\*e-mail: vazrud@gmail.com

(Поступила в редакцию 30 января 2026 г.)

В данной работе обсуждается связь между основными параметрами, а именно, частотой гармонических колебаний  $\omega$ , параметром ангармонизма  $x$  и энергией диссоциации  $D$  для молекул водорода и его изотопов  $H_2$ ,  $D_2$ ,  $T_2$ ,  $HD$ ,  $HT$ ,  $DT$ . Показано, что для указанных молекул параметры, рассчитанные на основе потенциала Морзе, с высокой точностью согласуются с экспериментальными данными. Наибольшее отклонение результатов наблюдается у молекулы  $H_2$ . Особенности этих отклонений позволяют сделать вывод, что они возникают из-за нарушения адиабатичности, которое не учитывается потенциалом Морзе.

### 1. Введение

Изучение потенциальной кривой  $V(R)$  двухатомных молекул играет ключевую роль в описании их колебательных и вращательных уровней в различных электронных состояниях. В отличие от экспериментальных методов, которые, как правило, ограничены анализом определённого набора уровней, потенциальная кривая позволяет восстановить полную систему уровней, включая диссоциационный предел. Это особенно важно при расчётах термодинамических функций газов, используемых при изучении химических равновесий и кинетических процессов.

Определение формы и аналитического выражения потенциальной кривой  $V(R)$  является фундаментальной задачей молекулярной физики, начало которой было положено ещё в 1930-х годах и продолжается по настоящее время. Классическими в этой области являются работы Гайтлера и Лондона [1], Морзе [2] и Данхема [3]. Несмотря на значительный объём накопленных экспериментальных данных [4], проблема выбора такой формы  $V(R)$ , которая одинаково успешно описывала бы молекулярные постоянные  $x_e$ ,  $D$  и  $\omega$ , остаётся актуальной.

Построение потенциальной кривой на основе экспериментальных данных представляет собой самостоятельную задачу. Разные методы позволяют восстанавливать отдельные участки кривой при использовании ограниченного числа экспериментальных уровней. Однако сохраняется потребность в аналитической форме  $V(R)$ , которая одновременно обеспечивала бы хорошее согласие с экспериментом и корректное асимптотическое поведение при различных значениях межъядерного расстояния  $R$ .

Различные подходы к решению этой задачи были предложены ранее, включая обобщённые формы потенциала с введением новых координат и так называемую «бэджеровскую модель» двухатомной молекулы [5, 6]. В настоящее время становится всё более очевидным, что на потенциальную кривую  $V(R)$  могут быть наложены дополнительные ограничения, связанные с ростом объёма и точности экспериментальных данных.

В работе [7] показано, что потенциал Морзе может быть выведен из простой модели экспоненциально экранированного ядерного заряда. Энергия связи представляется как сумма электростатического и ковалентного вкладов, что естественно приводит к форме  $V(r) = D[1 - e^{-\beta(r-r_e)}]^2$ . Параметр  $\beta$  связан с атомным экранированием, электроотрицательностью и орбитальными экспонентами, что придаёт потенциалу Морзе физический смысл вместо чисто эмпирической интерпретации.

Также в работе [8] было показано, что при аппроксимации реальных электронных термов двухатомных молекул потенциалом Морзе возникают две альтернативные модели (M1 и M2), приводящие к различным искажениям формы потенциальной кривой и вибрационной структуры. Авторы ввели функцию отклонения  $\delta(r) = U(r) - M(r)$  и эмпирическую функцию ангармоничности  $\omega_e x_e(v)$ , позволяющие количественно оценивать точность аппроксимации. Показано, что для термов с минимальными отклонениями от формы Морзе потенциал Морзе систематически искажает энергию диссоциации и число колебательных уровней, особенно в верхней части потенциальной ямы.

Целью настоящей работы является выяснение причины существенных отклонений расчетных результатов, получаемых с применением потенциала Морзе для молекулы водорода от экспериментальных данных.

## 2. Теория

Одной из наиболее широко используемых моделей межатомного взаимодействия является потенциал Морзе, который имеет вид:

$$V(x) = A(e^{-2\alpha x} - 2e^{-\alpha x}), \quad (1)$$

где  $A$  – глубина потенциальной ямы, а параметр  $\alpha^{-1}$  её ширина,  $x$  – расстояние между ядрами. Разложив потенциал Морзе в ряд Тейлора вблизи положения равновесия до третьего порядка, получаем:

$$V(x) \approx V(x_0) + \frac{dV}{dx}(x - x_0) + \frac{1}{2} \frac{d^2V}{dx^2}(x - x_0)^2 + \frac{1}{6} \frac{d^3V}{dx^3}(x - x_0)^3, \quad (2)$$

что приводит к выражению:

$$V(x) = -A - 4A\alpha x + A\alpha^2 x^2 - \frac{10}{3}A\alpha^3 x^3. \quad (3)$$

Согласно [9], точное решение уравнения Шредингера для ПМ даёт энергетический спектр следующего вида:

$$E_{n,\text{Morse}} = -A \left[ 1 - \frac{\alpha\hbar}{\sqrt{2mA}} \left( n + \frac{1}{2} \right) \right]^2 = -A + \alpha\hbar \sqrt{\frac{2A}{m}} \left( n + \frac{1}{2} \right) - \frac{\alpha^2\hbar^2}{2m} \left( n + \frac{1}{2} \right)^2. \quad (4)$$

С другой стороны, во втором порядке теории возмущений энергетические уровни ангармонического осциллятора имеют вид:

$$E_{n,\text{pert}} = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) - \hbar\omega x \left( n + \frac{1}{2} \right)^2. \quad (5)$$

Сравнение выражений (4) и (5) позволяет установить связь между параметрами  $A$ ,  $\alpha$ ,  $\omega$  и  $x$ :

$$x = \frac{\alpha^2 \hbar^2}{2mA} \sqrt{\frac{2mA}{2\alpha\hbar}} = \frac{\alpha\hbar}{2} \frac{1}{\sqrt{2mA}} \quad (6)$$

$$\omega = \alpha \sqrt{\frac{2A}{m}}, \quad (7)$$

$$x = \alpha \sqrt{\frac{2A}{m}} * \frac{\hbar}{4A} = \frac{\hbar\omega}{4A}. \quad (8)$$

Учитывая, что  $A = D + \hbar\omega/2$ , где  $D$  – энергия диссоциации, получаем соотношение:

$$\frac{4x}{\hbar\omega} \left( D + \frac{\hbar\omega}{2} \right) = 1, \quad (9)$$

или

$$x \left( \frac{4D}{\hbar\omega} + 2 \right) = 1. \quad (10)$$

Эта связь может служить критерием применимости потенциала Морзе к молекулам, состоящим из изотопов водорода. Экспериментальные значения частоты гармонических колебаний  $\omega_e$ , константы ангармоничности  $\omega_e x_e$  и энергии диссоциации  $D_0^0$  приведены в табл.1 (данные заимствованы из работы [10]).

Табл.1. Экспериментальные данные для соединений водорода и его изотопов

Молекула	Частота гармонических колебаний $\omega_e, \text{см}^{-1}$	Константа ангармоничности $\omega_e x_e, \text{см}^{-1}$	Энергия диссоциации $D_0^0$ , ккал/моль
H <sub>2</sub>	4396.554	117.9726	103.267±0.0014
HD	3817.09	94.958	104.090±0.002
HT	3599.43	84.437	104.395±0.023
D <sub>2</sub>	3118.46	64.10	105.087±0.002
DT	2847.74	53.454	105.454±0.023
T <sub>2</sub>	2548.36	42.806	105.876±0.023

Результаты проверки соотношения (10) представлены в табл.2.

Табл.2. Результаты расчетов для соединений водорода и его изотопов

Молекула	$x \left( \frac{4D}{\hbar\omega} + 2 \right)$
H <sub>2</sub>	0.935
HD	0.999
HT	0.999
D <sub>2</sub>	1.01
DT	1.01
T <sub>2</sub>	1.01

Как видно, для всех изотопов водорода, за исключением молекулы  $H_2$ , соотношение (10) выполняется с довольно высокой точностью. В случае молекулы водорода наблюдается отклонение порядка 6.5%. На основе экспериментальных значений коэффициента ангармоничности и частоты гармонических колебаний была рассчитана энергия диссоциации и проведено сравнение с табличными данными. На основе экспериментальных значений коэффициента ангармоничности и частоты гармонических колебаний была рассчитана энергия диссоциации и проведено сравнение с табличными данными которые показаны в табл. 3

Табл.3. Сравнение экспериментальных и расчётных значений энергии диссоциации

Молекула	Энергия диссоциации $D_0^0, \text{см}^{-1}$	$\frac{\omega_e^2}{4\omega_e x_e}$	Ошибка, %
$H_2$	36141.46	40962.2	13,3
HD	36429.49	38359.52	5.2
HT	36536.24	38359.6	4.99
$D_2$	36778.42	37928.2	3.1
DT	36906.9	37928	2.7
$T_2$	37054.5	37927.7	2.3

Полученная картина аналогична предыдущей: заметное отклонение наблюдается только в случае молекулы водорода. Однако есть и другая, более важная закономерность – чем тяжелее молекула, тем меньше отклонение. Это дает основание утверждать, что отклонение вызвано нарушением адиабатичности, которое особенно сильно проявляется в легчайшей молекуле и никак не учитывается в потенциале Морзе. Для молекулы  $H_2$  разность энергий между синглетным и триплетным электронными состояниями существенно меньше частоты колебаний. Данное утверждение следует из экспериментальных данных по энергиям электронных термов синглетного и триплетного состояний [11]:

$$E_{\text{Triplet}} = 121316.7 \text{ см}^{-1}, E_{\text{Singlet}} = 120172.27 \text{ см}^{-1}, \quad (11)$$

$$E_{\text{Singlet}} - E_{\text{Triplet}} = 1144.43 \text{ см}^{-1}. \quad (12)$$

Поскольку  $1 \text{ см}^{-1} = 1.24 \times 10^{-4} \text{ эВ}$ , то энергия перехода синглет-триплет примерно в 3–4 раза меньше энергии кванта колебаний атомов в молекуле водорода, что и является причиной нарушения адиабатичности. Этот переход может реализоваться при столкновениях молекул.

В работах [12] и [13] также рассматривается потенциал Морзе для двухатомных молекул таких как  $H_2, HF, O_2$ . Используя (11) и (12) для молекул HF и HCl имеет место как ионная, так и ковалентная связь. Доля ионной связи для HF ~57.7, а для HCl ~18.7%, соответственно доля ковалентной связи для HF ~45.3, а для HCl ~81.3%. Поскольку потенциал Морзе не предназначен для описания ионной составляющей химической связи, его применение к молекулам HF и HCl не является оправданным.

### 3. Заключение

В работе благодаря соотношению (10) между параметрами  $x$ ,  $\omega$  и  $D$ , которое имеет место, если межатомное взаимодействие описывается потенциалом Морзе, показано, что для изотопов водорода ( $HD$ ,  $HT$ ,  $D_2$ ,  $DT$ ,  $T_2$ ) данное соотношение выполняется с высокой точностью, что подтверждает применимость потенциала Морзе. Однако у молекулы  $H_2$  обнаружено наибольшее отклонение для энергии диссоциации – порядка 6%. Более того, данное отклонение убывает с ростом массы атомов, входящих в состав молекулы. Здесь будет уместным напомнить, что чем меньше масса атомов, тем ближе частоты колебаний к частотам оптических переходов, что может привести к нарушению адиабатического приближения. Ярким подтверждением этого является тот факт, что разность энергий синглетного и триплетного состояний примерно в четыре раза меньше минимальной колебательной энергии [11]. Переход синглет-триплет может реализоваться вследствие столкновений молекул между собой или же со стенками сосуда. Таким образом, потенциал Морзе оказывается полезным только в тех случаях, когда адиабатическое приближение применимо. Это утверждение поддерживается тем фактом, что в формуле потенциала Морзе отсутствуют массы атомов. Полученные результаты указывают на ограничения потенциал Морзе при описании молекулы  $H_2$  и подтверждают его пригодность для более тяжёлых изотопных модификаций водорода. Кроме того, следует воздержаться от применений потенциала Морзе для описания ионной связи, так как потенциал Морзе работает только в случае нейтральных атомов.

### ЛИТЕРАТУРА

1. **W. Heitler.** Elementary Wave Mechanics. Oxford, USA, 1945.
2. **P.M. Morse.** Phys. Rev., **34**, 57 (1929).
3. **V.L. Dunham.** Phys. Rev., **41**, 721 (1932).
4. **Г. Герцберг.** Спектры и строение двухатомных молекул. Москва, Иностранная литература, 1949.
5. **В.И. Тюлин.** Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул. Москва, Изд-во МГУ, 1987.
6. **V.I. Tyulin, V.K. Matveev.** J. Phys. Chem., **71**, 502 (1997).
7. **A. Mirzanejad, S. Varganov.** Molecular Physics, **123**, e2360542 (2025).
8. **G.S. Denisov, R.E. Asfin.** Spectroscopy Lett., **57**, 553 (2024).
9. **Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц.** Квантовая механика (нерелятивистская теория). Том 3, Наука, Москва, 1989.
10. **К.С. Краснов.** Молекулярные константы неорганических соединений. Химия, Москва, 1979.
11. **А.А. Радциг, Б.М. Смирнов.** Справочник по атомной и молекулярной физике. Атомиздат, Москва, 1980.
12. **Л.В. Гурвич.** Энергии разрыва химических связей, потенциалы ионизации и сродство к электрону. Москва, Наука, 1974.
13. **L. Pauling.** The Nature of the Chemical Bond. Cornell University Press, New York, USA, 1939.

ՄՈՐՍԻ ՊՈՏԵՆՑԻԱԼԻ ՄԱՀՄԱՆԱՓԱԿ ԿԻՐԱՌԵԼԻՈՒԹՅԱՆ  
ՊԱՏՃԱՌՆԵՐԻՑ ՄԵԿԻ ՄԱՍԻՆ

Վ.Ա. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ, Ա.Հ. ՄԵԼԻԹՅԱՆ, Հ.Ռ. ՄԻՆԱՍՅԱՆ

Այս աշխատանքը քննարկում է ջրածնի մոլեկուլների և դրանց  $H_2$ ,  $D_2$ ,  $T_2$ ,  $HD$ ,  $HT$  և  $DT$  իզոտոպների համար հիմնարար պարամետրերի, մասնավորապես՝ հարմոնիկ տատանումների հաճախականության  $\omega$ , անհարմոնիկության պարամետր  $x$ -ի և դիսոցիացիայի էներգիայի  $D$  միջև եղած կապը: Ցույց է տրվել, որ այս մոլեկուլների համար Մորզեի պոտենցիալի հիման վրա հաշվարկված պարամետրերը մեծապես համապատասխանում են փորձարարական տվյալներին: Արդյունքների ամենամեծ շեղումը դիտվում է  $H_2$  մոլեկուլի համար: Այս շեղումների բնութագրերը թույլ են տալիս եզրակացնել, որ դրանք առաջանում են ադիաբատիկության խախտման պատճառով, որը Մորզեի պոտենցիալում հաշվի չի առնվում:

ON ONE REASON FOR THE LIMITED APPLICABILITY  
OF THE MORSE POTENTIAL

V.A. HARUTYUNYAN, A.H. MELIKYAN, H.R. MINASSIAN

This work discusses the relationship between the fundamental parameters, namely the frequency of harmonic vibrations  $\omega$ , the anharmonicity parameter  $x$ , and the dissociation energy  $D$  for hydrogen molecules and its isotopes  $H_2$ ,  $D_2$ ,  $T_2$ ,  $HD$ ,  $HT$ , and  $DT$ . It is shown that for these molecules, the parameters calculated on the basis of the Morse potential are in high agreement with experimental data. The largest deviation of the results is observed for the  $H_2$  molecule. The characteristics of these deviations make it possible to conclude that they arise due to a violation of adiabaticity, which is not considered in the Morse potential.

## **ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЯЧЕЙКИ НЕМАТИЧЕСКОГО ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА С ПЛАНАРНЫМ И ПЕРИОДИЧЕСКИ ОРИЕНТАЦИОННЫМ ГРАНИЧНЫМИ УСЛОВИЯМИ**

Д.С. АЛАВЕРДЯН, Р.С. АКОПЯН\*, А.А. МАКАРЯН, М.Р. АКОПЯН

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

\*e-mail: rhakob@ysu.am

(Поступила в редакцию 29 октября 2025 г.)

Теоретически исследована способность ячейки нематического жидкого кристалла (НЖК) с планарным и периодически ориентационным граничными условиями дифрагировать световой луч. Для создания непрерывно вращающейся структуры необходимо добавить в НЖК небольшое количество холестерического жидкого кристалла. В отличие от известных поляризационных решёток при дифракции на этой ячейке возможно получение отсутствия нулевого порядка дифракции, т.е.  $100\pm 1\%$  порядков право- и лево- эллиптически (или даже круговых) поляризованных пучков. Уникальные поляризационные свойства ячейки с планарным и периодически ориентационным граничными условиями могут быть использованы для разработки фотополяриметра и спектрографа кругового дихроизма в реальном времени без артефактов.

### **1. Введение**

Жидкокристаллическое (ЖК) состояние вещества позволяет создавать разнообразные структуры, чувствительные к поляризации света [1–9]. В частности, хиральные структуры с правой и левой асимметрией, к примеру, холестерические ЖК, демонстрируют диаметрально противоположное поведение по отношению к двум ортогональным круговым поляризациям [10–15]. Благодаря указанным свойствам становится возможным снижение ошибок интерфейсовых сплайсингов оптических элементов [16], улучшение качества смарт очков [17], повышение чувствительности атомных магнитометров [18], реализация управляемого оптического фильтра [19], генерация лазеров с управляемой поляризацией [20]. Преодоление неизбежной хроматической аберрации и увеличение голографического угла обзора позволяет реализовать широкоугольные и цветные голографические 3D-дисплеи [21], дифракционные решетки с различными характеристиками [22, 23] и т. д.

Создание вынужденной оптической анизотропии путём поляризационной интерференции световых пучков имеет почти полувековую историю. Оптические элементы, созданные таким образом, называются поляризационными решётками (ПР). Теоретическое объяснение записи ПР и дифракции света на них впервые было дано в [24]. В работе [25] показано, что эффективность ПР, записанной с правой и левой круговыми поляризациями, существенно выше (35%), чем эффективность ПР, записанной с линейными взаимно-перпендикулярными

поляризованными пучками (1%). Первое экспериментальное изготовление и исследование ПР было проведено в [26, 27]. Исследование, проведенное в [28], доказывает возможность получения дифракционной решетки с эффективностью 98%. Последовательная теория и детальное экспериментальное исследование ПР представлены в [29, 30]. В частности показано, что нематические жидкие кристаллы (НЖК) с поперечно-периодической ориентацией молекул способны обеспечивать очень высокую дифракционную эффективность (теоретически 100%) в тонких слоях материалов, толщина которых сравнима с длиной волны излучения. Они полностью дифрагируют линейно-поляризованный входной пучок в циркулярно-поляризованные  $+1$  и  $-1$  порядки дифракции. Экспериментальное переключение порядков дифракции таких решеток возможно при изменении поляризации падающего пучка с право-круговой на лево-круговую и наоборот с помощью электрически управляемого фазового замедлителя НЖК. Впоследствии многочисленные работы показали разнообразные возможности использования жидкокристаллических ПР [31, 32]. В частности, было показано, что право- и лево-круговые поляризованные пучки света можно разделить двойными углами, а также объединить парой ПР [33]. На основе точно контролируемых микроструктур можно повысить эффективность дифракции [34]. В работе [35] с теоретической и экспериментальной точки зрения рассматривается новый простой метод дифракционной спектрографии для измерения кругового дихроизма в реальном времени. Одним из преимуществ этого метода является то, что ПР позволяют одновременно пространственно разделять падающий луч на лучи с правой и левой круговой поляризацией одинаковой интенсивности, даже если падающий луч неполяризован.

Целью настоящей работы является исследование дифракционных свойств жидкокристаллической ячейки с планарным и периодически ориентационным или планарным и поляризационно-решеточным граничными условиями. Показано, что любой падающий на такую ячейку свет дифрагирует на три порядка. В общем случае нулевой порядок повторяет поляризацию падающего света, а порядки  $\pm 1$  представляют собой право- и лево-эллиптически поляризованные лучи. В случае толстых ячеек возможно отсутствие нулевого порядка и только присутствие право- и лево-циркулярно поляризованных лучей при произвольной фазовой задержке анизотропной ячейки. Дифракционная эффективность, близкая к 100%, позволит использовать их для объединения лазерных пучков без потерь.

## **2. Матрица Джонса для ячейки с планарным и периодически ориентационным граничными условиями**

Рассмотрим ячейку, заполненную НЖК, на одной стенке (при  $z = 0$ ) которой задано граничное условие в виде планарной ориентаций вдоль оси  $x$ , а на другой (при  $z = L$ ) – в виде периодической ориентации вдоль той же оси или поляризационной дифракционной решетки (см. рис.1). Будем называть такую структуру ячейкой с планарным и поляризационно решеточным (ППР) распределением ориентации молекул. Для точного решения задачи распространения света через такую ячейку необходимо сначала найти распределение молекул в ячейке, а затем, разделив ячейку на большое число слоев, найти матрицу пропускания (матрицу Джонса).

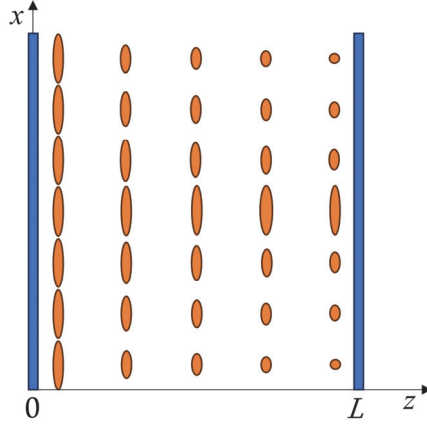


Рис.1. Схематическое изображение распределения молекул НЖК в плоскости  $(x, z)$  в конфигурации планар-поляризованная решетка. Среда однородна по  $y$  координате.

Эту задачу можно легко решить, если считать слои качественно подобными друг другу. Матрица Джонса для ПР хорошо известна [29]:

$$M_{\text{PG}}(G, qx) = \begin{bmatrix} \cos G + i \sin G \cos(2qx) & -i \sin G \sin(2qx) \\ -i \sin G \sin(2qx) & \cos G - i \sin G \cos(2qx) \end{bmatrix}. \quad (1)$$

Здесь,  $\Delta\varphi = 2G = 2\pi\Delta nL/\lambda$  – фазовая задержка анизотропной среды,  $q = 2\pi/\Lambda_0$ ,  $\Lambda_0$  – период распределения поляризации вдоль оси  $x$ ,  $L$  – толщина ячейки,  $\lambda$  – длина волны в вакууме и  $\Delta n$  – анизотропия преломления среды. При создании такой же структуры молекул НЖК методом фотоориентации периодичность структуры будет равна  $\Lambda_0/2$ , поскольку молекулы НЖК обладают зеркальной симметрией.

При любой поляризации волны, падающей на такую ПР, на выходе ПР мы можем иметь три волны: недифрагированного нулевого порядка, которая повторяет поляризацию падающей волны, и право- и лево-циркулярно поляризованные дифрагированные волны  $+1$  и  $-1$  порядков. Чтобы получить амплитуды и поляризации этих трёх волн, мы должны умножить вектор Джонса падающей волны на соответствующую матрицу Джонса. Если фазовая задержка анизотропной среды представляет собой нечётное число  $\pi$  или её половина  $G = \pi/2 + \pi m$  ( $m = 0, \pm 1, \pm 2 \dots$ ), то у нас не будут волны в 0-м порядке и дифракция будет осуществляться со 100% эффективностью (по 50% в каждом порядке) [29].

Теперь предположим, что у нас есть ячейка НЖК, на одной стенке которой задана планарная ориентация вдоль оси  $x$ , а на другой – периодическая ориентация вдоль той же оси, как упоминалось выше. Распределение директора НЖК (единичного вектора  $\mathbf{n}$  в направлении преимущественной ориентации молекул) в такой структуре ППР схематически изображено на рис.1. Чтобы описать прохождение произвольно поляризованного света через такую структуру, попробуем построить матрицу Джонса этой системы. Поскольку мы имеем дело с неоднородной скрученной структурой направления НЖК, было бы корректно разбить среду на большое количество тонких пластин ( $N \geq 20$ ), так что каждая из тонких пластин может быть представлена как среда с однородной ориентацией. Фактически, мы разобьём скрученную анизотропную среду на  $N$  пластин равной

толщины и предположим, что каждый слой представляет собой волновую пластинку со своей собственной фазовой задержкой и азимутальным углом. Тогда общая матрица Джонса может быть получена путем перемножения всех матриц, связанных с этими пластинками. Наша ячейка ограничена в пределах  $0 < z < L$ , где оптическая ось  $\mathbf{n}$  вращается поперечно в направлении  $x$  и закручивается в направлении  $z$ , поэтому периодическую структуру можно представить как

$$\mathbf{n}(x, z) = \{\cos \phi(x, z); \sin \phi(x, z); 0\}, \quad \phi(x, z) = qx \frac{z}{L}. \quad (2)$$

Напомним, что такое распределение возможно, если добавить в НЖК небольшую концентрацию право- и лево-асимметричных молекул (например, холестерического ЖК). В противном случае директор НЖК не может иметь столь многократных поворотов. Если свет падает с планарной стороны, то матрица Джонса  $M_0$  первого слоя имеет простой вид, который можно получить из (1):  $M_0 = M_{PG}(G/N, 0)$ .

Согласно известному [35] подходу, структуру ППР можно представить как ряд  $N$  тонких слоев ПР, каждый из которых имеет фазовую задержку  $2G/N$  и малый азимутальный поворот  $\Delta = \delta/N$  ( $\delta = qx$ ). Матрица Джонса такой комбинации слоев (ППР) может быть представлена в виде произведения матриц слоев. Выполняя умножение и используя свойство матриц поворота  $R(\psi)$ , можно получить матрицу Джонса ППР

$$M_{PPG} = R(-\delta)[M_0 R(\Delta)]^N, \quad R(\psi) = \begin{bmatrix} \cos \psi & \sin \psi \\ -\sin \psi & \cos \psi \end{bmatrix}. \quad (3)$$

Полученное выражение можно упростить, используя тождество Чебышева для унимодулярных матриц [36]. В результате получаем матрицу Джонса планарно-периодической структуры

$$M_{PPG} = \begin{bmatrix} \cos X \cos \delta + \delta \sin \delta \frac{\sin X}{X} + iG \frac{\sin X}{X} \cos \delta & \delta \cos \delta \frac{\sin X}{X} - \cos X \sin \delta + iG \sin \delta \frac{\sin X}{X} \\ \cos X \sin \delta - \delta \cos \delta \frac{\sin X}{X} + iG \sin \delta \frac{\sin X}{X} & \delta \sin \delta \frac{\sin X}{X} + \cos X \cos \delta - iG \cos \delta \frac{\sin X}{X} \end{bmatrix}, \quad (4)$$

где  $X = \sqrt{\delta^2 + G^2}$ . Эта матрица выглядит немного сложно, поскольку зависимость от координат  $\delta = qx$  присутствует всюду. В общем случае можно показать, что линейно-поляризованный и даже неполяризованный свет, падающий на систему ППР со стороны планарно-ориентирующей стенки, выходит в виде трёх волн: недифрагированная волна нулевого порядка, которая повторяет поляризацию падающей волны, и волн, дифрагированных в право- и лево-эллиптически поляризованных порядках  $+1$  и  $-1$  и под углами  $\pm\gamma$  ( $\gamma = \lambda/\Lambda_0$ ). Чтобы получить амплитуды и поляризации этих трёх волн, нам нужно умножить вектор Джонса падающей волны на соответствующую матрицу Джонса. Более подробные обсуждения можно провести, рассмотрев частные случаи. Например, в приближении Могена, когда  $\Delta nL \gg \lambda$ , можно считать, что  $G \gg 1$  и  $G \gg \delta$ . В этом случае мы имеем  $X \simeq G + \delta^2/2G$  и, считая  $\delta$  всюду в выражении (4) очень малым и беря  $G$  вместо  $X$  в знаменателях и показателях степеней, получаем

$$M_{PPG} = \exp(iG) \begin{bmatrix} \cos \delta & -\exp(-i2G) \sin \delta \\ \sin \delta & \exp(-i2G) \cos \delta \end{bmatrix} = M_+ + M_-, \quad (5)$$

$$M_{\pm} = \frac{1}{2} \exp(iG) \exp(\pm i\delta) \begin{bmatrix} 1 & \pm i \exp(-i2G) \\ \mp i & \exp(-i2G) \end{bmatrix}.$$

Получен неожиданный результат: при произвольной фазовой задержке дифракция нулевого порядка отсутствует, и мы имеем только дифрагированные

волны  $+1$  порядка правой и  $-1$  порядка левой циркулярных поляризации. В частности, если падающая волна является обыкновенной, то имеем

$$E_{\text{in}} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}, E_{\text{out}} = M_{\text{PPG}} E_{\text{in}} = E_+ + E_-, E_{\pm} = \pm \frac{i}{2} \exp(-iG) \exp(\pm iqx) \begin{bmatrix} 1 \\ \mp i \end{bmatrix}. \quad (6)$$

А если падающая волна необыкновенная, то

$$E_{\text{in}} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, E_{\text{out}} = M_{\text{PPG}} E_{\text{in}} = E_+ + E_-, E_{\pm} = \frac{1}{2} \exp(iG) \exp(\pm iqx) \begin{bmatrix} 1 \\ \mp i \end{bmatrix}. \quad (7)$$

Эти два луча имеют одинаковую интенсивность:

$$I_{+1} = I_{-1} = EE^* = \frac{\sin^2 G}{2}. \quad (8)$$

То есть дифракция осуществляется со 100% эффективностью (по 50% в каждом порядке). Легко убедиться, что если падает свет с правой круговой поляризацией, то на выходе будет свет с левой круговой поляризацией, и наоборот.

Для оценки,  $G = \pi \Delta n L / \lambda$ ,  $\delta_{\text{max}} = (2\pi/\lambda) d \sin \gamma$  ( $d$  – ширина ячейки по  $x$ ). Для того, чтобы  $G \gg \delta$ , необходимо чтобы  $\Delta n L \gg 2 d \sin \gamma$ . При  $\Delta n = 0.2$ , имеем  $L \gg 10 d \sin \gamma$ . Это, конечно, сложно реализовать, но возможно.

### 3. Дифракция света на ПР–планар ячейке

Теперь рассмотрим случай, когда свет падает на ячейку со стороны ПР (см. рис.1). В этом случае нам нужно перемножить матрицы в обратном порядке. Получается матрица  $M_{\text{PGP}}$ , имеющая тот же вид, что и (4), с той разницей, что в недиагональных членах нам нужно поменять знаки у  $G$  и  $\delta$ . Таким образом, мы имеем также матрицу Джонса для ячейки, на первой стенке которой задано условие поляризационной решетки, а на второй – планарное условие (ППП). Из этого общего случая можно рассмотреть частный случай приближения Могена. При  $\Delta n L \gg \lambda$  можно считать, что  $G \gg 1$  и  $G \gg \delta$ . В этом случае мы имеем  $X \simeq G + \delta^2/(2G)$  и, предполагая  $\delta$  всюду в выражении  $M_{\text{PGP}}$  очень малым и беря  $G$  вместо  $X$  в знаменателях и показателях степеней, получаем

$$M_{\text{PGP}} = \exp(iG) \begin{bmatrix} \cos \delta & \sin \delta \\ -\exp(-i2G) \sin \delta & \exp(-i2G) \cos \delta \end{bmatrix} = M_+ + M_-, \quad (9)$$

$$M_{\pm} = \frac{1}{2} \exp(iG) \exp(\pm i\delta) \begin{bmatrix} 1 & \mp i \\ \pm i \exp(-i2G) & \exp(-i2G) \end{bmatrix}.$$

В частности, если падающая волна является обыкновенной волной, то мы имеем

$$E_{\text{in}} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}, E_{\text{out}} = M_{\text{PGP}} E_{\text{in}} = E_+ + E_-, E_{\pm} = \frac{1}{2} \exp(iG) \exp(\pm i\delta) \begin{bmatrix} 1 \\ \pm i \exp(-i2G) \end{bmatrix}. \quad (10)$$

А если падающая волна необыкновенная, то

$$E_{\text{in}} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, E_{\text{out}} = M_{\text{PGP}} E_{\text{in}} = E_+ + E_-, E_{\pm} = \mp \frac{i}{2} \exp(iG) \exp(\pm i\delta) \begin{bmatrix} 1 \\ \pm i \exp(-i2G) \end{bmatrix}. \quad (11)$$

То есть, независимо от начальной поляризации света при дифракции мы имеем только право- и лево-эллиптически поляризованные волны.

Напомним, что в случае обычной тонкой поляризационной решетки после дифракции мы имеем чисто право- и лево-круговые поляризованные лучи, если фазовая задержка кратна  $\pi$  ( $G = \pi/2 + \pi m$ ). Если указанное условие не выполняется, то мы снова имеем нулевой порядок, и дифрагированные волны имеют правую и левую круговую поляризации. Как видно из полученных результатов, когда у нас есть структура ППР и свет падает с планарной стенки,

то в случае приближения Могена при дифракции мы имеем только два право- и лево-круговых поляризованных луча при любой задержке. Наконец, когда у нас есть структура ПРП, т.е. свет падает со стенки ПР, то при дифракции мы имеем только два эллиптически поляризованных луча при любой задержке, и они будут иметь правую и левую круговую поляризации, если фазовая задержка кратна  $\pi$ .

#### 4. Заключение

В настоящей работе изучены поляризационные свойства света, проходящего через жидкокристаллическую ячейку, на одной стенке которой задана обычная планарная ориентация, а на другой задано граничное условие периодической ориентации молекул или поляризационной решетки. Для того чтобы молекулы жидкого кристалла полностью следовали ходу вращения, диктуемому граничными условиями, даже в тех частях, где требуется поворот более  $90^\circ$ , необходимо смешать небольшое количество (несколько процентов) холестерического жидкого кристалла с нематическими жидкими кристаллами. Показано, что, в отличие от обычной поляризационной решетки, такая ячейка обладает той особенностью, что в случае приближения Могена мы можем иметь  $100 \pm 1\%$  порядок право- и лево-круговых поляризованных луча при любом запаздывании обыкновенных и необыкновенных лучей. Мы не рассматривали здесь случай ячейки, заполненной чистым нематическим жидким кристаллом, когда молекулы НЖК, не имея возможности вращаться на углы, большие  $90^\circ$ , создают столь сложную структуру, в которой угол поворота молекул  $\delta$  относительно  $x$  изменяется с периодом  $\Lambda_0/4$  между значениями  $\delta = \pm qx$ . В результате мы можем получить ту же матрицу Джонса (4), но со сложной зависимостью параметра  $\delta$  от  $x$ . Для получения желаемой дифракции необходимо будет заставить молекулы следовать заданному повороту дестабилизирующим электрическим полем.

Стабильность предложенных решёток и высокое индуцированное двулучепреломление материала открывают возможность интересных применений решёток в различных оптических устройствах. Современные технологии используют несколько оптических и электрооптических элементов, различные поглощающие поляризаторы, дисперсионные элементы (призмы или решётки), фазовые модуляторы, что делает их крайне неэффективными из-за присущих им ограничений при измерениях в реальном времени и без артефактов. Потенциальное применение предложенных циклоидальных ППР может рассматриваться в области поляриметрии, в частности, может быть реализован новый тип фотополя-риметра и спектрографа кругового дихроизма в реальном времени без артефактов.

Все подтверждающие данные можно получить у авторов по соответствующему запросу.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Комитета по высшему образованию и науке РА в рамках научного проекта № 21AG–1C088.

## ЛИТЕРАТУРА

1. **P.G. de Gennes, J. Prost.** The Physics of Liquid Crystals. Oxford, Oxford University Press, 1993.
2. **L.M. Blinov.** Structure and Properties of Liquid Crystals. London, New York, Springer, 2011.
3. **S. Singh.** Handbook of Liquid Crystals. V. I, II Foundations and Fundamental Aspects. London, New York, Springer, 2024.
4. **I.C. Khoo, F. Simoni, C. Umeton.** Optical Materials and Applications V.1 Novel Optical Materials. London, World Scientific, 2024.
5. **L.S. Aslanyan, H.H. Hovakimyan.** J. Contemp. Phys., **55**, 30 (2020).
6. **H.L. Margaryan, V.K. Abrahamyan, N.H. Hakobyan, V.M. Aroutiounian, P.K. Gasparyan, V.V. Belyaev, A.S. Solomatin, D.N. Chausov.** J. Contemp. Phys., **54**, 27 (2019).
7. **R.B. Alaverdyan, A.L. Aslanyan, L.S. Aslanyan, G.S. Gevorgyan, S.Ts. Nersisyan.** J. Contemp. Phys., **50**, 137 (2015).
8. **A.H. Gevorgyan, M.S. Rafayelyan.** J. Contemp. Phys., **48**, 276 (2013).
9. **A.H. Gevorgyan, M.S. Rafayelyan.** J. Contemp. Phys., **49**, 12 (2014).
10. **Z. Zha, Z. Gou, Z. Peng, Y. Liu, C. Yang, X. Lu, Q. Wang, Q. Mu.** Optics Express, **33**, 32479 (2025).
11. **A.R. Mkrtchyan, H.S. Eritsyan, A.A. Lalayan, Sh.K. Eritsyan, R.S. Hakobyan, Zh.B. Khachatryan.** J. Contemp. Phys., **55**, 199 (2020).
12. **S.K. Patil, P.B. Jire, N.G. Ahire, S.G. Patil, S.P. Pawar.** Research J. Pharmacognosy and Phytochemistry; Raipur, **17**, 179 (2025).
13. **A.E. Martirosyan.** J. Contemp. Phys., **49**, 202 (2014).
14. **A.H. Gevorgyan.** J. Contemp. Phys., **47**, 268 (2012); **48**, 75 (2013).
15. **M.S. Rafayelyan, H. Gharagulyan, T.M. Sarukhanyan, A.H. Gevorgyan, R.S. Hakobyan, R.B. Alaverdyan.** Liquid Crystals, **46**, 1079 (2019).
16. **X. Qin, K. Zhao, X. Zhang, X. Zhou, W. Huang, L. Chen.** Photonics, **350**, 1 (2024).
17. **Y. Ding, Y. Zhang, Y. Ma, Y. Huang, S.T. Wu.** Optics Express, **32**, 44425 (2024).
18. **Z. Cui, Y. Wang, Y. Liu, M. Jin, J. Sun, Y. Zhai, X. Zhou, Z. Chai.** Nanophotonics, **13**, 4255 (2024).
19. **H.L. Margaryan, P.K. Gasparyan, V.K. Abrahamyan, N.H. Hakobyan, H.S. Chilingaryan, D.K. Pokhsranyan, G.M. Stepanyan.** J. Contemp. Phys., **58** 73 (2023).
20. **T.M. Sarukhanyan.** J. Contemp. Phys., **56** 103 (2021).
21. **D. Wang, Y.-L. Li, F. Chu, N.-N. Li, Z.-S. Li, S.-D. Lee, Z.-Q. Nie, C. Liu, Q.-H. Wang.** Light: Science & Applications, **13**, 1 (2024).
22. **K.-Y. Li, Z.-H. Jiang, Sh.-J. Li, F. Chu.** Displays, **90**, 103101 (2025).
23. **D.L. Hovhannisyan, H.L. Margaryan, N.H. Hakobyan, V.M. Aroutiounian, V.V. Belyaev, A.S. Solomatin.** J. Contemp. Phys., **50**, 55 (2015).
24. **Sh.D. Kakichashvili.** Kvant. Elektron., **1**, 1435 (1974).
25. **T. Todorov, L. Nikolova, N. Tomova.** Appl. Opt., **23**, 4588 (1984).
26. **P.L. Rochon, V. Drnoyan, A. Natansohn.** Proc. SPIE, **3491**, 306 (1998).

27. **B. Saad, L. Dinescu, R.P. Lemieux, T.V. Galstyan.** Appl. Phys. Lett., **73**, 20 (1998).
28. **C. Provenzano, P. Pagliusi, G. Cipparrone.** Appl. Phys. Lett., **89**, 121105-1 (2006).
29. **H.V. Sarkissian, J.B. Park, N.V. Tabirian, B.Ya. Zeldovich.** MCLC, **451**, 1 (2006).
30. **H.V. Sarkissian, S.V. Serak, N.V. Tabirian, L.B. Glebov, V. Rotar, B.Ya. Zeldovich.** Opt. Lett., **31**, 2248 (2006).
31. **T. Lin, J. Xie, Y. Zhou, Y. Zhou, Y. Yuan, F. Fan, S. Wen.** Crystals, **11**, 900 (2021).
32. **C. Pei, J. Weng, T. Shu, L. Fang, G. Hu, Y. Liu, T. Chen, R. Wu, H. Li, X. Liu.** Laser & Photonics Reviews, **18**, 2400204 (2024).
33. **V. Muradyan, M. R. Akopyan, R. S. Akopyan.** J. Contemp. Phys., **56**, 98 (2021).
34. **Z. Liang, B.Y. Wei, W. Chen, X. Guo, S. Liu, P. Li, D. Wen, K. Gao, J. Zhao.** Appl. Opt. Mater., **2**, 1287 (2024).
35. **P. Pagliusi, C. Provenzano, A. Mazzulla, L. Giorgini, G. Cipparrone.** Appl. Spectr., **62**, 465 (2008).
36. **P. Yeh, C. Gu.** Optics of Liquid Crystal Displays. Second edition, Wiley, 2010.

ՊԼԱՆԱՐ ԵՎ ՊԱՐԲԵՐԱԿԱՆ ԿՈՂՄՆՈՐՈՇՄԱՆ ՍԱՀՄԱՆԱՅԻՆ  
ՊԱՅՄԱՆՆԵՐՈՎ ՆԵՄԱՏԻԿ ՆԵՂՈՒԿ ԲՅՈՒՐԵՂԱՅԻՆ ԲՋՋԻ  
ՕՊՏԻԿԱԿԱՆ ՀԱՏԿՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԸ

Դ.Ս. ԱԼԱՎԵՐԴՅԱՆ, Ռ.Ս. ՀԱԿՈԲՅԱՆ, Ա.Հ. ՄԱԿԱՐՅԱՆ, Մ.Ռ. ՀԱԿՈԲՅԱՆ

Տեսականորեն ուսումնասիրվել է պլանար և պարբերական կողմնորոշման սահմանային պայմաններով նեմատիկ հեղուկ բյուրեղային /ՆՀԲ/ բջջի հնարավորությունը դիֆրակտելու լուսային ճառագայթը: Անդհատ պտտական կառուցվածք ապահովելու համար ՆՀԲ - ին պետք է ավելացնել փոքր քանակությամբ խլեատերիկ հեղուկ բյուրեղ: Ի տարբերություն հայտնի բևեռացումային ցանցերի, այս բջջի կողմից դիֆրակցիայի դեպքում առկա է հնարավորություն ստանալու դիֆրակցիայի զերոյական կարգի բացակայություն, այսինքն 100% - անոց  $\pm 1$  կարգի աջ ու ձախ էլիփսական /կամ նույնիսկ շրջանային/ բևեռացված ճառագայթներ: Պլանար և պարբերական կողմնորոշման սահմանային պայմաններով ՆՀԲ բջջի եզակի բևեռացման հատկությունները կարող են օգտագործվել իրական ժամանակի և արտեֆակտներից զերծ ֆոտոպոլյարիմետր և շրջանաձև դիֆրոիզմի սպեկտրոգրաֆ մշակելու համար:

OPTICAL PROPERTIES OF A CELL OF NEMATIC LIQUID WITH PLANAR AND PERIODICAL ORIENTATIONAL BOUNDARY CONDITIONS

D.S. ALAVERDYAN, R.S. HAKOBYAN, A.H. MAKARYAN, M.R. HAKOBYAN

The ability of a nematic liquid crystal (NLC) cell with planar and periodical orientational boundary conditions to diffract a light beam has been theoretically investigated. To create a continuously rotating structure, a small amount of cholesteric liquid crystal must be added to the NLC. Unlike known polarization gratings, diffraction on this cell can result in the absence of zero-order diffraction, i.e., 100%  $\pm 1$  orders of right- and left-elliptical (or even circular) polarized beams. The unique polarization properties of the cell with planar and periodical orientational boundary conditions can be used to develop a real-time photo-polarimeter and circular dichroism spectrograph without artifacts.

## МОЛЕКУЛА ВОДОРОДА В МОДЕЛИ ГАЙТЛЕРА–ЛОНДОНА В ПЕРВОМ ПОРЯДКЕ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ

В.А. АРУТЮНЯН

Институт прикладных проблем физики НАН Армении, Ереван, Армения

\*e-mail: vazrud@gmail.com

(Поступила в редакцию 30 января 2026 г.)

В рамках модели Гайтлера—Лондона в применении к молекуле водорода в основном состоянии сравниваются вклады в энергию связи от трех видов взаимодействия: электрон-электронное с учетом обмена, межъядерное и взаимодействие каждого из электронов с соседним ядром. Показано, что в первом порядке теории возмущений обменное взаимодействие дает положительный вклад, что соответствует взаимному отталкиванию вместо ожидаемого притяжения. Дело в том, что волновая функция основного состояния атома не изменяет знак. Таким образом, притяжение между атомами в первом порядке обусловлено только лишь взаимодействием каждого из электронов с соседним ядром. Кроме того, найдено преобразование координат, которое позволяет найти аналитические выражения для нормировочного коэффициента двухэлектронной волновой функции, что позволяет сэкономить машинное время.

### 1. Введение

После того, как квантовая механика объяснила строение атома, естественным следующим шагом стало изучение межатомных взаимодействий, благодаря которым образуются молекулы. Простейшей из них является молекула водорода, которая и оказалась в центре внимания физиков-теоретиков. Первая приближенная теория молекул была развита Гайтлером и Лондоном в 1927 году [1], в рамках которой за нулевое приближение авторы взяли два невзаимодействующих атома водорода, а все взаимодействия учитывались в рамках первого порядка теории возмущений, а именно: взаимодействие каждого электрона с соседним ядром, взаимодействие электронов между собой и кулоновское взаимодействие ядер между собой. Важно отметить, что учитывалась тождественность электронов, следовательно, и обменное взаимодействие.

В 1928 году Морзе опубликовал свою замечательную формулу (потенциал Морзе) для энергии межатомного взаимодействия в случае гомоядерной двухатомной молекулы. Главные особенности этой формулы таковы: она дает весьма близкие к экспериментальным значения для параметров молекулы водорода; и уравнение Шредингера с потенциалом Морзе легко решается, если невозмущенные состояния электронов обладают нулевым орбитальным моментом. Следует отметить, что при выводе своей формулы Морзе руководствовался исключительно математическими соображениями.

Наряду с этим, в последние годы были предприняты попытки строгого тео-

ретического обоснования потенциала Морзе. В частности, показано, что он может возникать как эффективный потенциал в рамках моделей, основанных на фундаментальных физических предположениях, без введения подгоняемых эмпирических параметров [2].

В то же время в ряде работ было показано, что аппроксимация реальных электронных термов двухатомных молекул потенциалом Морзе обладает принципиальными ограничениями. Существенную роль при этом играет ангармоничность, приводящая к систематическим искажениям формы потенциальной кривой и вибрационной структуры, особенно вблизи асимптотической области [3, 4]. Для молекулы водорода и её изотопов эти ограничения проявляются особенно наглядно: в рамках приближения потенциала Морзе наблюдаются систематические отклонения, связанные с изотопическим эффектом и так называемой аномалией Герцберга, что подчёркивает ограниченность данной модели при описании реального межатомного потенциала [5].

Тогда же были предложены альтернативные теоретические подходы к описанию химической связи в двухатомных молекулах, основанные на анализе орбитального взаимодействия. Такие методы позволяют с хорошей точностью воспроизводить длины связей, дипольные моменты и энергии связи без явного введения параметрических потенциальных функций [6].

Целью настоящей работы было исследование вкладов кулоновского и обменного взаимодействий в энергию связи молекулы водорода в модели Гайтлера–Лондона в первом порядке теории возмущений.

## 2. Теория

Поскольку волновая функция в основном состоянии не меняет знак, то в первом порядке теории возмущений по обменному взаимодействию получается положительный знак, что соответствует отталкиванию. Во втором порядке теории возмущений независимо от вида потенциала взаимодействия вклад в энергию основного состояния будет отрицательным.

Формула Морзе дает хорошее согласие с экспериментальными данными, но в теории Гайтлера—Лондона используется формула первого порядка теории возмущений, поэтому в триплетном состоянии молекул притяжение между атомами обеспечивается только лишь взаимодействием электрона с соседним ядром. Для одной частицы при отсутствии магнитного поля и других релятивистских эффектов пространственная зависимость волновой функции не связана со спиновым состоянием частицы. Поэтому, в соответствии с теоремой о произведении вероятностей независимых событий, полную волновую функцию  $\Phi$  можно представить в виде произведения двух множителей:

$$\Phi = \chi(s) \psi(\mathbf{r}, t), \quad (1)$$

где функция  $\chi(s)$  зависит только от спиновой переменной  $s$ , принимающей два возможных значения  $\pm \frac{1}{2}$ , соответствующие двум проекциям спинового момента на выбранную ось (в единицах  $\hbar$ ), тогда как функция  $\psi(\mathbf{r}, t)$  зависит исключительно от пространственных координат и/или времени.

Для системы двух невзаимодействующих частиц, в соответствии с принципом Паули, волновая функция при перестановке всех координат частиц — трёх

пространственных и одной спиновой — должна менять знак. При выполнении этого условия возможны четыре формы волновой функции, удовлетворяющие принципу Паули: три из них являются симметричными по спиновым переменным и антисимметричными по пространственным координатам, тогда как одна функция антисимметрична по спиновым переменным и симметрична по координатам. Последний случай соответствует состоянию с суммарным спином, равным нулю, который показан ниже:

$$\Phi_{\text{as},0} = A \left[ \chi_1 \left( \frac{1}{2} \right) \chi_2 \left( \frac{-1}{2} \right) - \chi_1 \left( \frac{-1}{2} \right) \chi_2 \left( \frac{1}{2} \right) \right] [\psi_m(\mathbf{r}_1) \psi_n(\mathbf{r}_2) + \psi_m(\mathbf{r}_2) \psi_n(\mathbf{r}_1)], \quad (2)$$

$$E^{(1)} = \Delta E_C \pm J, \quad (3)$$

$$\Delta E_C = e^2 \int \frac{2}{r_{12}} |\psi_m(\mathbf{r}_1, t)|^2 |\psi_n(\mathbf{r}_2, t)|^2 dV_1 dV_2, \quad (4)$$

$$J = e^2 \int \frac{2}{r_{12}} \psi_m^*(\mathbf{r}_1, t) \psi_n^*(\mathbf{r}_2, t) \psi_m(\mathbf{r}_2, t) \psi_n(\mathbf{r}_1, t) dV_1 dV_2. \quad (5)$$

Для исследования рассматриваемой двухатомной системы выбрана цилиндрическая система координат с осью  $z$ , совпадающей с межъядерной осью, показанной на рис. 1. Начало координат помещено в середину между ядрами, которые расположены симметрично относительно него на расстояниях  $-L$  и  $+L$ . Данный выбор координат обусловлен аксиальной симметрией задачи и позволяет существенно упростить вид волновых функций и соответствующих интегралов.

В этих координатах пространственная часть одноэлектронной волновой функции принимает форму, зависящую от расстояний электрона до каждого из ядер

$$\psi(\rho, z) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\sqrt{\rho^2 + (z-L)^2}}. \quad (6)$$

Для упрощения последующего анализа удобно ввести новые переменные, соответствующие расстояниям электрона до каждого из ядер

$$\begin{cases} \rho^2 + (z - L)^2 = u^2 \\ \rho^2 + (z + L)^2 = v^2 \end{cases} \quad (7)$$

На основе введённой замены переменных координаты  $\rho^2$  и  $z$  могут быть представлены в виде функций переменных  $u$  и  $v$ :

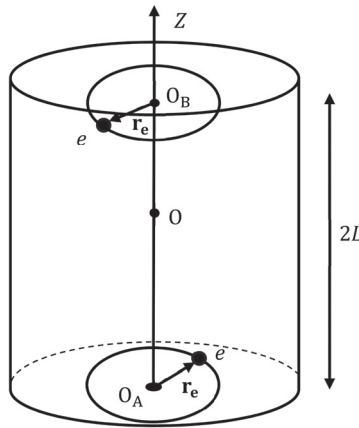


Рис.1. Геометрический вид системы двухатомной молекулы водорода.

$$\rho^2 = \frac{u^2+v^2}{2} + \left(\frac{u^2-v^2}{4L}\right)^2 - L^2, \quad (8)$$

$$z = \frac{v^2-u^2}{4L}. \quad (9)$$

После выполнения замены переменных пространственная часть волновой функции представляется в виде

$$\psi(u) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-u}. \quad (10)$$

В новых переменных интеграл для вычисления нормировочного коэффициента может быть записан в следующей форме:

$$\int_0^\infty \int_0^\infty \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-u-v} \begin{vmatrix} \frac{\partial \rho^2}{\partial u} & \frac{\partial \rho^2}{\partial v} \\ \frac{\partial z}{\partial u} & \frac{\partial z}{\partial v} \end{vmatrix} dudv, \quad (11)$$

где  $\begin{vmatrix} \frac{\partial \rho^2}{\partial u} & \frac{\partial \rho^2}{\partial v} \\ \frac{\partial z}{\partial u} & \frac{\partial z}{\partial v} \end{vmatrix}$  представляет собой якобиан перехода к переменным  $u$  и  $v$ .

В результате вычисления интеграла нормировочный коэффициент волновой функции оказывается равным

$$N(L) = 2L. \quad (12)$$

Далее рассмотрим кулоновское взаимодействие без учета обмена. Соответствующий вклад в энергию может быть записан в виде

$$E_c = \frac{e^2}{r_{AB}} - \frac{e^2}{r_{Ab}} - \frac{e^2}{r_{aB}}, \quad (13)$$

где  $r_{AB}$  — расстояние между ядрами атомов  $A$  и  $B$ ,  $r_{Ab}$  — расстояние между ядром атома  $A$  и электроном, локализованным вблизи атома  $B$ , а  $r_{aB}$  — расстояние между ядром атома  $B$  и электроном, локализованным вблизи атома  $A$ .

Подставляя явный вид волновой функции и соответствующие выражения для расстояний  $r_{Ab}$  и  $r_{aB}$  в формулу кулоновского вклада, получаем выражение для энергии взаимодействия в виде интеграла по пространственным координатам. В результате кулоновский вклад в энергию системы может быть представлен как функция межъядерного расстояния  $L$ :

$$E_c(L) = \frac{1}{2L} - \frac{1}{2} \times \left( N_1(L) \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{e^{-\sqrt{\rho^2+(z-L)^2}}}{\sqrt{\rho^2+(z+L)^2}} d\rho^2 dz + N_2(L) \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{e^{-\sqrt{\rho^2+(z+L)^2}}}{\sqrt{\rho^2+(z-L)^2}} d\rho^2 dz \right), \quad (14)$$

$$\text{где } N_1(L) = \frac{1}{\int_0^\infty \int_0^\infty e^{-2\sqrt{\rho^2+(z-L)^2}} d\rho^2 dz}, \quad N_2(L) = \frac{1}{\int_0^\infty \int_0^\infty e^{-2\sqrt{\rho^2+(z+L)^2}} d\rho^2 dz}.$$

Численные расчеты данного интеграла позволяют получить зависимость кулоновского вклада в энергию от межъядерного расстояния, представленную на рис.2.

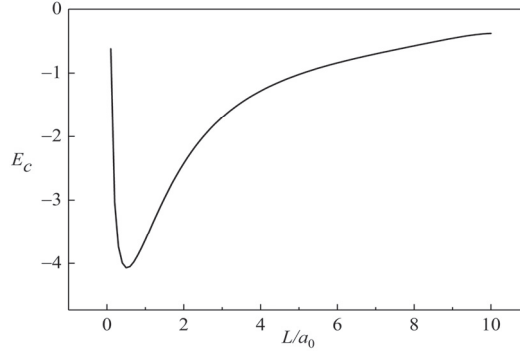


Рис.2. Зависимость энергии кулоновского взаимодействия от межъядерного расстояния  $L$  без учета обмена.

На рис.2 представлена зависимость кулоновского вклада  $E_c$  (без учета обмена, который в данном случае усиливает отталкивание) от межъядерного расстояния  $L$ . Видно, что при малых расстояниях кулоновское отталкивание между ядрами приводит к резкому уменьшению притяжения, тогда как при увеличении  $L$  вклад  $E_c$  монотонно стремится к нулю, что соответствует ослаблению взаимодействия между атомами при их удалении друг от друга.

Далее был рассмотрен вклад кулоновского и обменного взаимодействий в полную энергию системы. Обменный интеграл  $J$  и кулоновский вклад  $\Delta E_c$  были вычислены в цилиндрических координатах и имеют вид, представленный в формулах (18) и (19).

Введем новые обозначения:

$$M(\rho_1, \rho_2, z_1, z_2) = e^{-\sqrt{\rho_1^2 + (z_1 - L)^2}} e^{-\sqrt{\rho_1^2 + (z_1 + L)^2}} e^{-\sqrt{\rho_2^2 + (z_2 - L)^2}} e^{-\sqrt{\rho_2^2 + (z_2 + L)^2}}, \quad (15)$$

$$N(\rho_1, \rho_2, z_1, z_2) = e^{-2\sqrt{\rho_1^2 + (z_1 - L)^2}} e^{-2\sqrt{\rho_2^2 + (z_2 + L)^2}} + e^{-2\sqrt{\rho_1^2 + (z_1 + L)^2}} e^{-2\sqrt{\rho_2^2 + (z_2 - L)^2}}, \quad (16)$$

$$r_{12} = \sqrt{\rho_1^2 + \rho_2^2 - 2\rho_1\rho_2(\cos(\varphi_1 - \varphi_2)) + (z_1 - z_2)^2}. \quad (17)$$

Соответственно, обменный интеграл и интеграл кулоновского взаимодействия в новых обозначениях записываются в виде:

$$J = 2N_3(L) \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} \frac{M(\rho_1, \rho_2, z_1, z_2)}{r_{12}} \rho_1 \rho_2 d\rho_1 d\rho_2 d\varphi_1 d\varphi_2 dz_1 dz_2, \quad (18)$$

$$\Delta E_c = N_4(L) \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} \frac{N(\rho_1, \rho_2, z_1, z_2)}{r_{12}} \rho_1 \rho_2 d\rho_1 d\rho_2 d\varphi_1 d\varphi_2 dz_1 dz_2. \quad (19)$$

Таким образом, суммарный вклад кулоновского и обменного взаимодействий в энергию системы имеет вид:

$$\begin{aligned} \Delta E_c + J &= \\ &= A(L) \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} 2 \frac{M(\rho_1, \rho_2, z_1, z_2) + N(\rho_1, \rho_2, z_1, z_2)}{r_{12}} \\ &\quad \times \rho_1 \rho_2 d\rho_1 d\rho_2 d\varphi_1 d\varphi_2 dz_1 dz_2. \end{aligned} \quad (20)$$

Для корректной нормировки волновой функции был аналитически рассчитан нормировочный коэффициент  $A(L)$ , выражение для которого имеет вид

$$A(L) = \frac{2L}{\sqrt{1+4L}}. \quad (21)$$

Соответственно, полная энергия системы может быть рассчитана с использованием формулы (18) и приведена на рис.3:

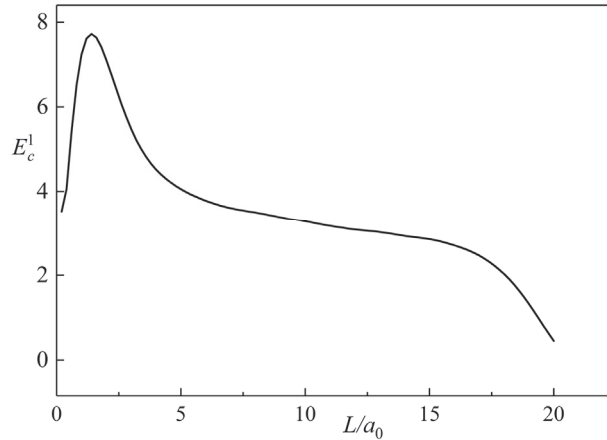


Рис.3. Зависимость полной энергии системы от межъядерного расстояния  $L$ .

$$E^1 = \Delta E_C + J + E_C. \quad (22)$$

Положительный вклад обменного взаимодействия в основном электронном состоянии приводит к усилению отталкивания, в результате чего вклад в энергию притяжения связи формируется преимущественно за счёт взаимодействия электрона с соседним ядром, что недостаточно для формирования связанного состояния атомов.

### 3. Заключение

Таким образом, большая часть расчетов в первом порядке теории возмущений для энергии межатомного взаимодействия в молекуле водорода в основном синглетном состоянии может быть выполнена аналитически. Вместе с тем, вычисления в первом порядке приводят к результатам, далеким от действительности. Дело в том, что основное состояние является синглетным по спину, поэтому координатная волновая функция симметрична относительно координат и не меняет знака при перестановке. Таким образом, обменная составляющая кулоновского взаимодействия всегда положительна, т.е. она соответствует отталкиванию атомов. Можно надеяться, что вычисления во втором порядке исправят положение, т.к. поправка к энергии во втором порядке отрицательна, т.е. соответствует притяжению независимо от характера взаимодействия. Окончательно, в первом порядке теории возмущений притяжение создается только благодаря взаимодействию каждого электрона с соседним ядром, все остальные взаимодействия приводят к отталкиванию атомов, и связанное состояние не формируется.

### ЛИТЕРАТУРА

1. **W. Heitler, F. London.** Zeitschrift für Physik, **44**, 455 (1927).
2. **R.N. Costa Filho, G. Alencar, B.S. Skagerstam, J.S. Andrade.** Europhysics Letters, **101**, 10009 (2013).
3. **G.S. Denisov, R.E. Asfin.** Spectroscopy Letters, **57**, 553 (2024).
4. **R.E. Asfin, G.S. Denisov.** Approximation of Electronic Term of Diatomic Molecule by the

- Morse Function. The Role of Anharmonicity. ChemRxiv (2023).
5. **G.S. Denisov, E.R. Chakalov, P.M. Tolstoy.** Spectr. Acta A, **327**, 125410 (2025).
6. **P. Merrithew.** The Chemical Bond in the Di-Atomics, HX, where X= F, O, N, C, B, Be: Orbital Exchange Calculations, ChemRxiv (2025).

ՋՐԱԾՆԻ ՄՈՒԼԵԿՈՒԼԻ ՆԿԱՐԱԳՐՈՒԹՅՈՒՆԸ ՀԱՅՏԼԵՐ–ԼՈՆԴՈՆԻ ՄՈՂԵԼԻ  
ՇՐՋԱՆԱԿՈՒՄ՝ ԽՈՏՈՐՈՒՄՆԵՐԻ ՏԵՍՈՒԹՅԱՆ ԱՌԱՋԻՆ ԿԱՐԳՈՒՄ

Վ.Ա. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ

Հեյտլեր–Լոնդոնի մոդելի շրջանակներում, որը կիրառվում է ջրածնի մոլեկուլի հիմնական վիճակի համար, համեմատվում են կապի էներգիայի մեջ երեք տեսակի փոխազդեցությունների ներդրումները՝ էլեկտրոն–էլեկտրոն փոխազդեցությունը՝ ներառյալ փոխանակումը, միջուկ–միջուկ փոխազդեցությունը և յուրաքանչյուր էլեկտրոնի փոխազդեցությունը հարևան միջուկի հետ: Տույց է տրվում, որ խոտորումների տեսության առաջին կարգում փոխանակային փոխազդեցությունը տալիս է դրական ներդրում, ինչը համապատասխանում է փոխադարձ վանման սպասվող ձգման փոխարեն: Դա պայմանավորված է նրանով, որ ատոմի հիմնական վիճակի ալիքային ֆունկցիան չի փոխում իր նշանը: Այսպիսով, առաջին կարգում ատոմների միջև ձգողությունը պայմանավորված է միայն յուրաքանչյուր էլեկտրոնի փոխազդեցությամբ հարևան միջուկի հետ: Բացի այդ, հայտնաբերվել է կոորդինատային համակարգի ձևափոխություն, որը հնարավորություն է տալիս ստանալ երկէլեկտրոնի ալիքային ֆունկցիայի նորմավորման գործակցի անալիտիկական արտահայտություն, ինչը թույլ է տալիս խնայել հաշվարկային ժամանակ:

THE HYDROGEN MOLECULE IN THE HEITLER–LONDON MODEL IN FIRST-  
ORDER PERTURBATION THEORY

V.A. HARUTYUNYAN

Within the framework of the Heitler–London model applied to the hydrogen molecule in its ground state, the contributions to the binding energy from three types of interactions are compared: electron–electron interaction including exchange, internuclear interaction, and the interaction of each electron with the neighboring nucleus. It is shown that, in the first order of perturbation theory, the exchange interaction gives a positive contribution, which corresponds to mutual repulsion rather than the expected attraction. This is because the ground-state wave function of the atom does not change sign. Thus, the attraction between atoms in the first order is due only to the interaction of each electron with the neighboring nucleus. In addition, a coordinate transformation is found that makes it possible to obtain analytical expressions for the normalization coefficient of the two-electron wave function, which allows saving computational time.

## ОКСИФТОРИДНЫЕ БАРИЙ-БОРОАЛЮМОСИЛИКАТНЫЕ СТЕКЛА, АКТИВИРОВАННЫЕ ИОНАМИ НЕОДИМА И ЭРБИЯ: ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

Н.Р. АГАМАЛЯН<sup>1\*</sup>, Е.А. КАФАДАРЯН<sup>1</sup>, Н.Б. КНЯЗЯН<sup>2</sup>, Г.Г. МАНУКЯН<sup>2</sup>,  
В.В. БАГРАМЯН<sup>2</sup>, А.С. СААКОВ<sup>3</sup>, С.В. МКРТЧЯН<sup>3</sup>, А.Ю. АЛЕКСАНЯН<sup>4</sup>,  
Л.А. ПОГОСЯН<sup>4</sup>, М.Н. НЕРСИСЯН<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак, Армения

<sup>2</sup>Институт общей и неорганической химии НАН Армении, Ереван, Армения

<sup>3</sup>Институт геологических наук НАН Армении, Ереван, Армения

<sup>4</sup>Национальная научная лаборатория им. Алиханяна, Ереван, Армения

\*e-mail: natagham@gmail.com

(Поступила в редакцию 23 декабря 2025 г.)

Исследованы абсорбционно-люминесцентные свойства ионов  $\text{Er}^{3+}$  и  $\text{Nd}^{3+}$  в оксифторидных барий-бороалюмосиликатных стеклах  $\text{BaO/BaF}_2\text{-SiO}_2\text{-B}_2\text{O}_3\text{-Al}_2\text{O}_3$  посредством регистрации спектров оптического поглощения и фотolumинесценции. Для возбуждения фотolumинесценции ионов неодима использовалось лазерное излучение с длиной волны 808 нм. Свечение на трёх основных переходах  ${}^4F_{3/2} \rightarrow {}^4I_J$  ионов неодима наблюдалось на длинах волн 890, 1060 и 1330 нм. Лазеры с излучением на длинах волн 808 и 980 нм использовались для возбуждения ИК-излучения ионов эрбия на длине волны  $\sim 1550$  нм, соответствующей переходу  ${}^4I_{13/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$ , а также для возбуждения УС излучения ионов эрбия в видимой области спектра полос люминесценции: синей ( ${}^2H_{9/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$ ), зеленой ( ${}^2H_{11/2}, {}^4S_{3/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$ ) и красной ( ${}^4F_{9/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$ ).

### 1. Введение

Боросиликатные стёкла находят широкое применение в микроэлектронике и фотонике благодаря их химической устойчивости, микротвердости, прозрачности в оптическом диапазоне и высокой температуре размягчения. Современные требования к материалам для оптоэлектронных устройств стимулируют разработку новых стеклообразных материалов с регулируемыми теплофизическими свойствами, высокой термической стабильностью и возможностью активирования редкоземельными ионами для создания люминофоров [1, 2].

Среди боросиликатных стекол с добавками щелочноземельных металлов боросиликаты бария имеют относительно низкие температуры стеклования и в широкой области составов сохраняют стабильность свойств, что может быть предпочтительным в зависимости от области применения, а также с точки зрения энергетических затрат при производстве [3]. Они также обладают самыми высокими показателями преломления и используются в оптических стеклах, а также для защиты от фотонного излучения [4].

Одним из подходов к модификации свойств боросиликатных стекол

является введение оксидов и фторидов двухвалентных щелочноземельных металлов, таких как Ва, в виде бинарных смесей ВаО/ВаF<sub>2</sub>. Эти добавки выполняют роль модификаторов, влияя на процессы стеклообразования, фазового разделения и кристаллизации. Введение оксида алюминия (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) затрудняет синтез по сравнению с обычным боросиликатным стеклом, но понижает кристаллизационную способность стекла, повышает его прочность и способность выдерживать более высокие температуры. При содержании менее 30 мол% Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> в основном выступает в роли сеткообразователя, тогда как увеличение концентрации Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> приводит к усилению его модифицирующей роли в исследуемом стекле [5–7]. Бороалюмосиликатные стекла находят разнообразное применение, например, в качестве матрицы для создания специальных материалов, используемых в твердотельных лазерах [8].

Целью настоящей работы было исследовать стекла системы ВаО/ВаF<sub>2</sub>–SiO<sub>2</sub>–В<sub>2</sub>O<sub>3</sub>–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, активированные по отдельности ионами неодима и эрбия, и оценить возможность получения на их основе механически и химически устойчивых стекол, пригодных для использования в качестве матрицы для получения стеклообразных люминофоров.

## 2. Методы исследований и образцы стекол

Синтезированы стекла системы ВаО/ВаF<sub>2</sub>–SiO<sub>2</sub>–В<sub>2</sub>O<sub>3</sub>–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> с соотношением 0.8ВаО/0.2ВаF<sub>2</sub>. В качестве реагентов использовались: ВаСО<sub>3</sub> и ВаF<sub>2</sub> марки “ос.ч.”, Н<sub>3</sub>ВО<sub>3</sub> марки “ч. д. а.”, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> марки “ч.д. а.”, SiO<sub>2</sub> марки “ч.” и активаторы в виде оксидов эрбия и неодима в количестве 2.5 мас% сверх 100%. Синтез стекла осуществлен традиционным методом плавления исходных компонентов в электрической печи (LHT 08/17, 77 Nabertherm) в платиновом тигле, в расчете 20 г стекла, в течение 1 ч при температуре 1350–1400°C в атмосфере воздуха. Образцы стекол получены отливанием стекломассы на предварительно подогретую графитовую форму. Стекла отжигались в электрической муфельной печи (N 11H Nabertherm) при 500°C, затем шлифовались и полировались.

Оптическая абсорбционная спектроскопия проводилась с использованием двойных спектрофотометров Cary-7000 и SHIMADZU UV-1800 в спектральной области 200–3300 нм. Образцы для исследований представляли собой полированные прямоугольные призмы для люминесцентных исследований в 90-градусной геометрии и полированные пластины для изменения оптических спектров пропускания. Возбуждение спектров ФЛ осуществляли диодными лазерами на 808 и 980 нм. Спектры излучения регистрировали с помощью модифицированного спектрометра ДФС-24 (ЛОМО) и спектрального комплекса КСВУ (ЛОМО). Сбор данных и управление экспериментом осуществляли с помощью DAQ системы фирмы National Instruments. Для регистрации сигнала использовался 8-канальный виртуальный анализатор фирмы National Instruments и специально разработанное для него программное обеспечение на основе пакета прикладных программ LabVIEW. Все измерения проводились при комнатной температуре. Исследования колебательной структуры с помощью IR-ATR спектров исследуемых стекол проводились на спектрометре Nicolet iS50 ATR spectrometer (Thermo Fisher Scientific, Waltham, MA, USA) в частотной области 600–2000 см<sup>-1</sup>.

Химический состав синтетического стекла определяли методами количественного химического анализа согласно методике НСАМ (Научный

Совет по Аналитическим Методам) №138-Х. Методика служит для определения кремния, железа, алюминия, титана, кальция, магния, марганца и фосфора в силикатных и карбонатных соединениях. Результаты химического анализа

Табл.1. Химический состав стекол BaO/BaF<sub>2</sub>-SiO<sub>2</sub>-B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (в мас%)

Основные элементы	SiO <sub>2</sub>	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	BaO	B <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	FeO	P <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	Na <sub>2</sub> O	K <sub>2</sub> O	F <sup>-</sup>	loi	CaO	MgO	Сумма
Glass-Nd	25.16	6.72	54.07	9.232	0.008	0.01	0.28	0.05	1.65	0.32	-	-	100
Glass-Er	24.54	6.84	53.48	10.153	0.007	0.02	0.28	0.05	1.89	0.24	-	-	100

приведены в табл.1.

Реальное содержание редкоземельных примесей (Nd, Eu, Pr) в полученных стеклах определяли методом гамма-активационного анализа на линейном ускорителе электронов ЛУЭ-75 Национальной научной лаборатории им. Алиханяна с использованием пучков тормозных фотонов [9]. Содержание эрбия (Er) определяли методом протонно-активационного анализа с использованием протонного пучка циклотрона С-18 [10]. Концентрация эрбия в легированном эрбием стекле составила  $3.63 \pm 0.84$  мас%. Концентрация неодима в легированном неодимом стекле составила  $1.33 \pm 0.24$  мас%. При этом в исследуемых легированных неодимом образцах зарегистрированы следующие посторонние примеси: европия  $(2.0 \pm 0.5) \times 10^{-2}$  и празеодима  $(6.1 \pm 4.0) \times 10^{-3}$  мас%, а в легированных эрбием образцах – празеодима  $(4.9 \pm 2.8) \times 10^{-2}$  мас%.

### 3. Результаты и их обсуждение

#### 3.1. Спектроскопия ионов Nd<sup>3+</sup> в стеклах BaO/BaF<sub>2</sub>-SiO<sub>2</sub>-B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

На рис.1 представлены спектры пропускания с идентифицированными межмультиплетными переходами <sup>4</sup>I<sub>15/2</sub> → J' ионов Nd<sup>3+</sup> (рис.1), лежащие в области прозрачности исследуемых стекол.

Ионы Nd<sup>3+</sup> в различных средах отличает простая схема излучательных переходов, представленная на рис.2а. В исследуемых стеклах возбуждение фотолюминесценции эффективно осуществляли излучением диодного лазера с

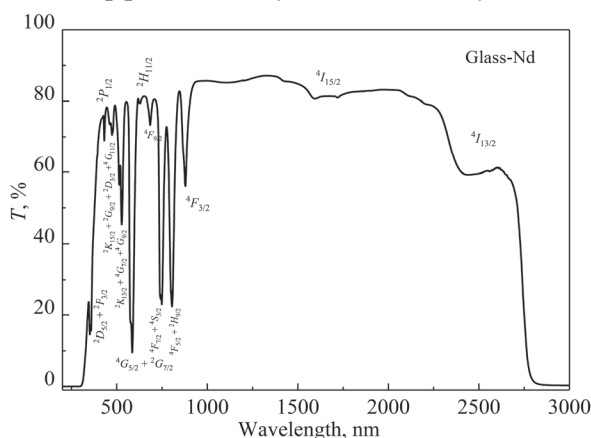


Рис.1. Спектры пропускания с идентифицированными межмультиплетными <sup>4</sup>I<sub>9/2</sub> → J' переходами ионов Nd<sup>3+</sup> в стеклах BaO/BaF<sub>2</sub>-SiO<sub>2</sub>-B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.

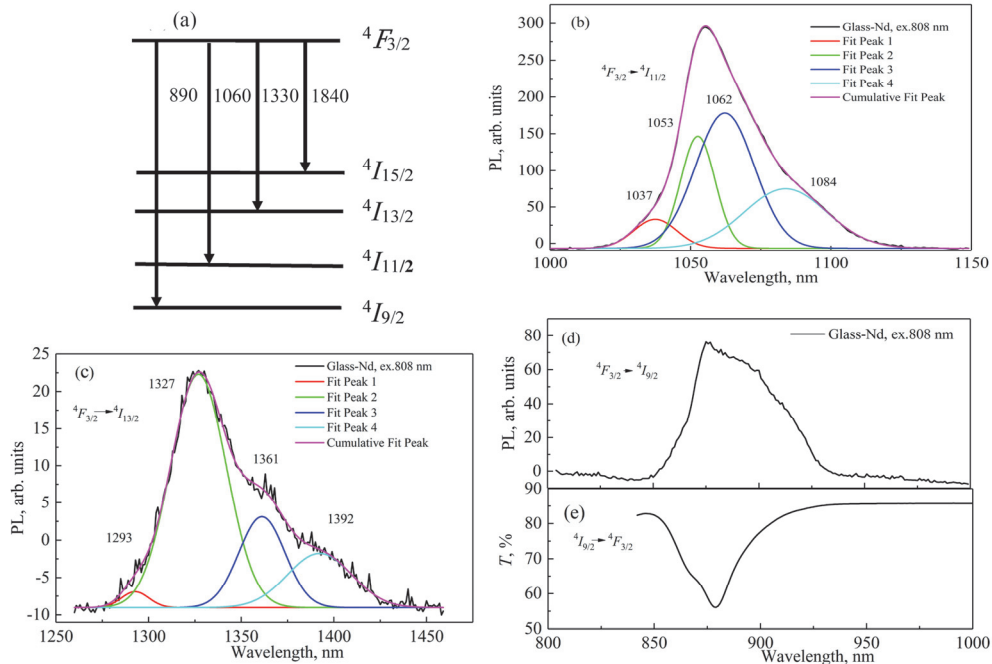


Рис.2. (а) Упрощенная схема энергетических уровней ионов  $\text{Nd}^{3+}$  и излучательные переходы  ${}^4F_{3/2} \rightarrow {}^4I_J$ . Спектры фотолюминесценции, соответствующие переходам (b)  ${}^4F_{3/2} \rightarrow {}^4I_{11/2}$ , (c)  ${}^4F_{3/2} \rightarrow {}^4I_{13/2}$ , (d)  ${}^4F_{3/2} \rightarrow {}^4I_{9/2}$  ионов  $\text{Nd}^{3+}$  в исследуемых стеклах при возбуждении излучением диодного лазера на 808 нм, а также (е) спектр поглощения на резонансном переходе  ${}^4I_{9/2} \rightarrow {}^4F_{3/2}$ .

длиной волны 808 нм.

Ионы активатора, находясь в разупорядоченной структуре стекла и его кристаллическом поле демонстрируют в спектрах излучения и поглощения широкие полосы с неоднородным уширением, поэтому расшифровка штарковских уровней не представляется возможной. На рис.2b, c для переходов  ${}^4F_{3/2} \rightarrow {}^4I_{11/2}$  и  ${}^4F_{3/2} \rightarrow {}^4I_{13/2}$  показаны спектры с гауссовским разложением полос фотолюминесценции. Для перехода  ${}^4F_{3/2} \rightarrow {}^4I_{9/2}$  из-за резонансного поглощения сделать это не удалось.

### 3.2. Спектроскопия ионов $\text{Er}^{3+}$ в стеклах $\text{BaO/BaF}_2\text{-SiO}_2\text{-B}_2\text{O}_3\text{-Al}_2\text{O}_3$

На рис.3 показаны полосы поглощения, соответствующие переходам  ${}^4I_{15/2} \rightarrow J'$  ионов  $\text{Er}^{3+}$  в оптической области прозрачности исследуемых стекол.

Ионы  $\text{Er}^{3+}$  в различных средах отличает более сложная схема энергетических уровней с возбуждающими и излучательными переходами, которая представлена на рис.4. Потери, вызванные фотонами с энергией ниже ширины запрещенной зоны, можно уменьшить, используя концепцию апконверсии (UC), при которой два или более низкоэнергетических фотона (ИК-диапазон) преобразуются в один фотон с более высокой энергией (видимый диапазон) через долгоживущее промежуточное состояние посредством антистоксовского излучения [11–14]. Представленная на рис.4 схема энергетических уровней иллюстрирует возможные механизмы возбуждения и излучательные переходы в стеклах

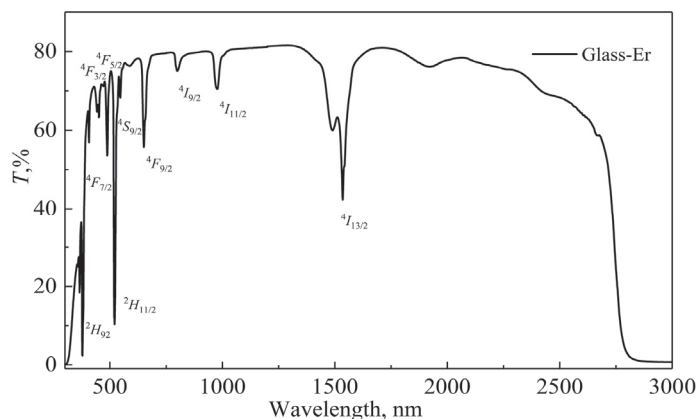


Рис.3. Спектры пропускания с идентифицированными межмультиплетными переходами ионов  $\text{Er}^{3+}$  в стеклах  $\text{BaO/BaF}_2\text{-SiO}_2\text{-B}_2\text{O}_3\text{-Al}_2\text{O}_3$ .

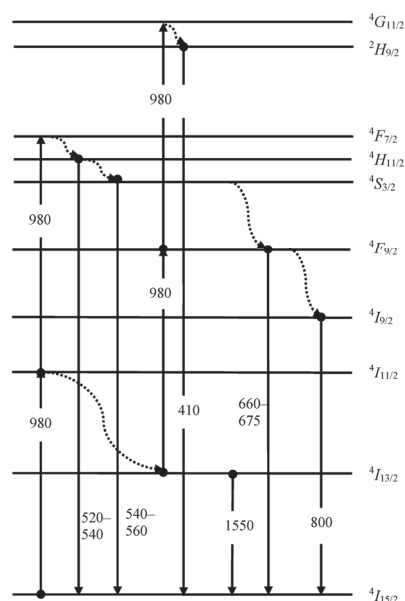


Рис.4. Схема энергетических уровней ионов  $\text{Er}^{3+}$  и переходы между ними в стеклах  $\text{BaO/BaF}_2\text{-SiO}_2\text{-B}_2\text{O}_3\text{-Al}_2\text{O}_3$ . Волнистыми линиями показаны безызлучательные переходы.

$\text{BaO/BaF}_2\text{-SiO}_2\text{-B}_2\text{O}_3\text{-Al}_2\text{O}_3$ , активированных ионами  $\text{Er}^{3+}$ . В зависимости от длины волны возбуждения, наблюдаемая люминесценция может быть обусловлена как поглощением в возбужденном состоянии (ESA), так и процессами преобразования энергии с переносом вверх (ETU).

Спектры УС фотолюминесценции искомым стеклом, активированным ионами  $\text{Er}^{3+}$ , показанные на рис.5, наблюдались при возбуждении диодным лазером на длине волны 980 нм. Они состояли из синей полосы с центром на  $\sim 440$  нм (переход  ${}^2H_{9/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$ ), двух зеленых полос на  $\sim 520$  и  $\sim 550$  нм, связанных с переходами  ${}^2H_{11/2}$ ,  ${}^4S_{3/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$ , и красной полосы на  $\sim 650$  нм (переход  ${}^2F_{9/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$ ), а также слабую по интенсивности полосу на  $\sim 820$  нм, соответствующую переходу  ${}^4I_{9/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$ .

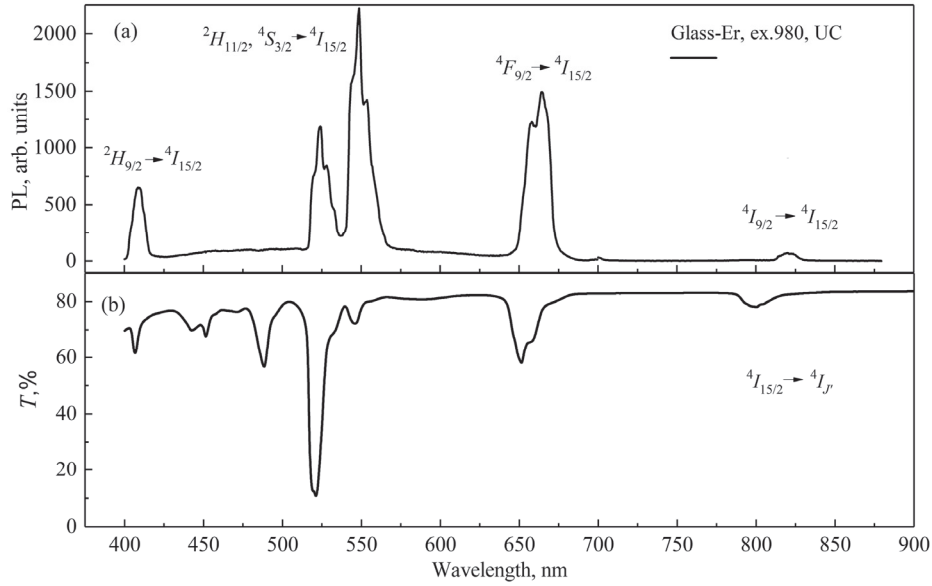


Рис.5. (а) спектры УС-фотолюминесценции и (б) спектры поглощения в той же спектральной области ионов  $\text{Er}^{3+}$  в искоемых стеклах при возбуждении лазерным излучением на 980 нм.

Кроме того, интенсивная инфракрасная полоса фотолюминесценции с основным пиком вблизи 1550 нм, соответствующая технологически важному переходу с первого возбужденного уровня  $^4I_{13/2}$  на основной  $^4I_{15/2}$  ионов  $\text{Er}^{3+}$ , наблюдалась при возбуждения излучением диодных лазеров с длиной волны 980 и 808 нм, представленных соответственно на рис.6а и рис.6б. Из-за присущему стеклообразным матрицам неоднородному уширению полос излучения эрбия зарегистрированные спектры фотолюминесценции анализировались путем разложения широкого профиля излучения на гауссовы компоненты. Этот анализ позволил выделить четыре отчетливых максимума, отражающих штарковское расщепление энергетических уровней эрбия, вызванное неупорядоченным локальным окружением стеклообразной матрицы.

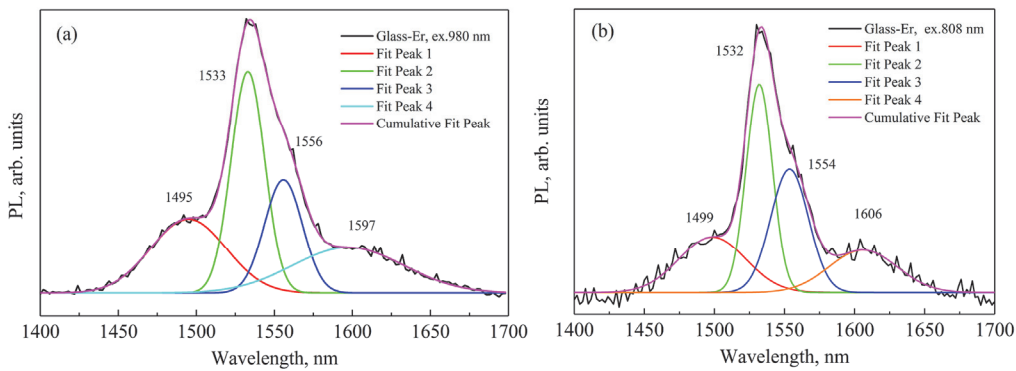
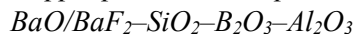


Рис.6. Спектры фотолюминесценции, соответствующие переходу  $^4I_{13/2} \rightarrow ^4I_{15/2}$  ионов  $\text{Er}^{3+}$  в исследуемых стеклах при возбуждении лазерным излучением на (а) 980 и (б) 808 нм.

### 3.3. Инфракрасные спектры поглощения АТІR в стеклах



Методом НПВО – нарушенного полного внутреннего отражения исследовались инфракрасные спектры поглощения (АТІR) приповерхностного слоя вещества для анализа колебательного спектра. На рис.7а,б показаны полученные результаты с разложением полос на гауссовские составляющие. Наблюдались 4 группы полосы поглощения с близкими значениями максимумов и с идентичной формой полос поглощения в спектральной области 600–2000  $\text{cm}^{-1}$  в стеклах  $\text{BaO/BaF}_2\text{-SiO}_2\text{-B}_2\text{O}_3\text{-Al}_2\text{O}_3$ , активированных как неодимом, так и эрбием.

В работе [15], где рассматривались тройные системы  $\text{B}_2\text{O}_3\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2$ , в которые для стабилизации стекла добавлялись в небольших количествах  $\text{BaO}$  и соотношение  $\text{B}_2\text{O}_3/\text{Al}_2\text{O}_3$  варьировалось и составляло в том числе 1.3 (в нашем случае 1.7). В частотной области 600–2000  $\text{cm}^{-1}$  наблюдали 5 ИК полос поглощения, четыре из которых с разной интенсивностью присутствуют в спектрах, представленных на рис.5. Полоса с центром 672 (673  $\text{cm}^{-1}$ ) объясняется изгибным колебанием В–О–В in треугольниках  $[\text{BO}_3]$ . Наблюдаемая нами интенсивная полоса на 850 (855  $\text{cm}^{-1}$ ) и далее на  $\sim 1000 \text{ cm}^{-1}$  приписывается продольным колебания растяжения (сжатия) В–О–В in тетраэдрах  $[\text{BO}_4]$ . Треугольники  $[\text{BO}_3]$  и тетраэдры  $[\text{BO}_4]$  являются основными структурными единицами в стеклах  $\text{B}_2\text{O}_3\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2$  glasses. Полоса на  $\sim 1370 \text{ cm}^{-1}$  связана с колебаниями колец бор–кислород.

В работе [16] изучены спектры комбинационного рассеяния боросиликатных стекол  $\text{BaO-B}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2$  с содержанием оксида щелочноземельного металла ( $\text{BaO}$ ) вплоть до 45 мол% и с различным соотношением  $\text{SiO}_2/\text{B}_2\text{O}_3$  (больше, равно и меньше 1). Полосу 675  $\text{cm}^{-1}$  связывают с колебаниями немостиковых атомов кислорода в боратных треугольниках (колебания метаборатных цепочек). Полосу на 860 приписывают валентным колебаниям связей в тетраэдрах с тремя немостиковыми атомами кислорода ( $\text{Q}^1$ ). Полоса 1360  $\text{cm}^{-1}$  в исследованиях щелочных боратных стекол приписывается антисимметричным колебаниям планарных треугольников  $\text{BO}_{3/2\text{loose}}$  в виде фрагментов неупорядоченной борокислородной сетки.

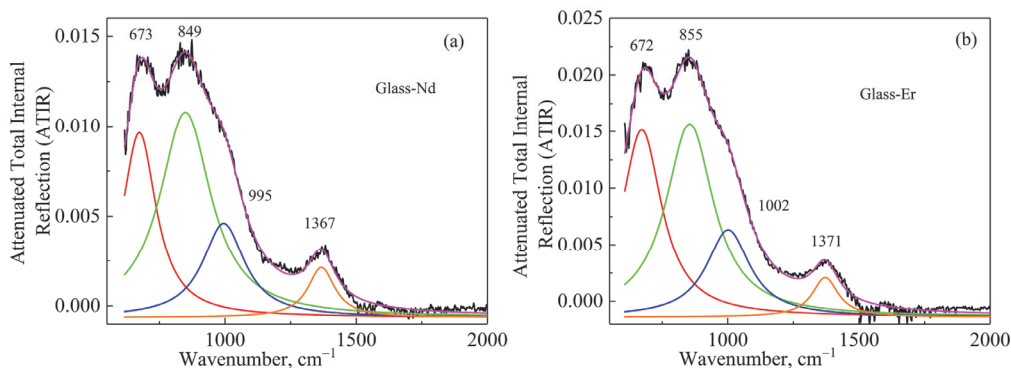


Рис.7. Колебательные спектры АТІR для исследуемых стекол с ионами (а)  $\text{Nd}^{3+}$  and (b)  $\text{Er}^{3+}$  в частотной области 600–2000  $\text{cm}^{-1}$ .

#### 4. Заключение

Синтезированы многокомпонентные стекла системы  $\text{BaO/BaF}_2\text{-SiO}_2\text{-B}_2\text{O}_3\text{-Al}_2\text{O}_3$ , активированные по отдельности ионами неодима и эрбия. Исследованы их абсорбционно-люминесцентные свойства ионов посредством регистрации спектров оптического поглощения и фотолюминесценции. Идентифицированы межмультиплетные переходы ионов  $\text{Nd}^{3+}$  и  $\text{Er}^{3+}$  в спектрах поглощения в стеклах  $\text{BaO/BaF}_2\text{-SiO}_2\text{-B}_2\text{O}_3\text{-Al}_2\text{O}_3$ . Для возбуждения фотолюминесценции использовалось излучение диодного лазера с длиной волны 808 нм для основных переходов ионов неодима (890, 1060 и 1330 нм). Для возбуждения ИК-излучения ионов эрбия на длине волны  $\sim 1550$  нм, а также для возбуждения УС излучения ионов эрбия в видимом диапазоне (синяя, зеленая и красная полосы люминесценции) использовалось излучение диодных лазеров с длинами волн 808 и 980 нм. По спектрам АТIR идентифицированы колебательные полосы в частотной области  $600\text{--}2000\text{ см}^{-1}$  для исследуемых стекол. Результаты исследований показали, что стекла состава  $\text{BaO/BaF}_2\text{-SiO}_2\text{-B}_2\text{O}_3\text{-Al}_2\text{O}_3$  могут служить эффективными матрицами для активирования редкоземельными ионами с целью создания люминофоров.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Комитета по высшему образованию и науке РА в рамках проекта N 1-6/IPR.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Д.Т. Валиев, С.А. Степанов, G. Yao, Y. Zhou. Физика твердого тела, **61**, 1879 (2019).
2. Vinod Hegde, G. Devarajulu, A.G. Pramod, S.B. Kolavekar, Dalal Abdullah Aloraini, A.H. Almuqrin, M.I. Sayyed, G. Jagannath. Photonics, **9**, 355 (2022).
3. S. Bhattacharya, H.D. Shashikala. Physica B: Condensed Matter, **571**, 76 (2019).
4. O.L.G. Alderman. Phys. Rev. Materials, **9**, 105603 (2025).
5. A.A. Osipov, V.E. Eremyashev, A.S. Mazur, P.M. Tolstoi, L.M. Osipov. Glass Physics and Chemistry, **42**, 230 (2016).
6. S.E. Lin, Y.R. Cheng, W.C.J. Wei. J. Non-Crystalline Solids, **358**, 174 (2012).
7. A. Dhara, R.K. Mishra, R. Shukla, T.P. Valsala, V. Sudarsan, A.K. Tyagi, C.P. Kaushik. J. Non-Crystalline Solids, **447**, 283 (2016).
8. S.K. Evstropiev, A.V. Shashkin, N.B. Knyazyan, G.G. Manukyan, V.V. Bagramyan, A.V. Timchuk, V.L. Stolyarova. J. Non-Crystalline Solids, **580**, 121386 (2022).
9. A.Y. Aleksanyan, S.M. Amirkhanyan, A.G. Aperyanyan, H.R. Gulkanyan, T.V. Kotanjyan, M.A. Levonyan, V.S. Pogosov, L.A. Poghosyan, A.S. Saakov, A.A. Shahinyan. J. Contemp. Phys., **58**, 326 (2023).
10. T.V. Kotanjyan, A.Y. Aleksanyan, A.O. Kechechyan, S.M. Amirkhanyan, D.A. Martiryanyan, H.R. Gulkanyan, L.A. Poghosyan. Phys. Rev. C, **109**, 065802 (2024).
11. N. Chaudhary, M. Pahuja, and K. Ghosh. Review Article, Mater. Adv., **5**, 1783 (2024).
12. Т.С. Севостьянова, Е.В. Жукова, О.Б. Петрова, А.В. Хомяков. Успехи в химии и химической технологии, **29**, 64 (2015).
13. F. Zeng, G. Ren, X. Qiu, Q. Yang, J. Chen. J. Non-Cryst. Sol., **354**, 3428 (2008).
14. A.V.S. Yeswanth, Ib Singh Deo, Anu, A.S. Rao, G. Vijaya Prakash. J. Non-Crystalline Solids, **609**, 122280 (2023).
15. Y. Cheng, H. Xiao, C. Shuguang, B. Tang. Physica B, **404**, 1230 (2009).
16. Л.А. Неволлина, О.Н. Королева, Н.Г. Тюрнина, З.Г. Тюрнина. Физика и химия стекла, **47**, 29 (2021).

OXYFLUORIDE BARIUM BOROALUMINOSILICATE GLASSES ACTIVATED  
WITH NEODYMIUM AND ERBIUM IONS: OPTICAL PROPERTIES

N.R. AGHAMALYAN, YE.A. KAFADARYAN, N.B. KNYAZYAN, G.G. MANUKYAN,  
V.V. BAGHRAMYAN, A.S. SAAKOV, S.V. MKRTCHYAN, A.Y. ALEKSANYAN,  
L.A. POGHOSYAN, M.N. NERSISYAN

The absorption and luminescence properties of  $\text{Er}^{3+}$  and  $\text{Nd}^{3+}$  ions in oxyfluoride barium boroaluminosilicate glasses of the  $\text{BaO/BaF}_2\text{-SiO}_2\text{-B}_2\text{O}_3\text{-Al}_2\text{O}_3$  system were investigated by recording optical absorption and photoluminescence spectra. Photoluminescence of neodymium ions was exciting using laser radiation at a wavelength of 808 nm. Emission on the three main  ${}^4F_{3/2} \rightarrow {}^4I_J$  transitions of  $\text{Nd}^{3+}$  ions was observed at wavelengths of 890, 1060, and 1330 nm. Laser radiation at wavelengths of 808 and 980 nm was used to excite infrared emission of erbium ions at  $\sim 1550$  nm, corresponding to the  ${}^4I_{13/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$  transition, as well as to excite upconversion (UC) emission of  $\text{Er}^{3+}$  ions in the visible range, including blue ( ${}^2H_{9/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$ ), green ( ${}^2H_{11/2}$ ,  ${}^4S_{3/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$ ), and red ( ${}^4F_{9/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$ ) luminescence bands.

ՕՔՄԻՖՏՈՐԻԴԱՅԻՆ ԲԱՐԻՈՒՄԻ ԲՈՐԱԼՅՈՒՄԻՆՈՍԻԼԻԿԱՏԱՅԻՆ ԱՊԱԿԻՆԵՐ,  
ԱԿՏԻՎԱՑՎԱԾ ՆԵՈԴԻՄԻՈՒՄԻ և ԷՐԲԻՈՒՄԻ ԻՈՆՆԵՐՈՎ. ՕՊՏԻԿԱԿԱՆ  
ՀԱՏԿՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐ

Ն.Ռ. ԱՂԱՄԱԼՅԱՆ, Ե.Ա. ԿԱՖԱԴԱՐՅԱՆ, Ն.Բ. ԿՆՅԱԶՅԱՆ, Գ.Գ. ՄԱՆՈՒԿՅԱՆ,  
Վ.Վ. ԲԱԳՐԱՄՅԱՆ, Ա.Ս. ՍԱԱԿՈՎ, Ս.Վ. ՄԿՐՏՉՅԱՆ, Ա.ՅՄ. ԱԼԵՔՍԱՆՅԱՆ,  
Լ.Ա. ՊՈԴՈՍՅԱՆ, Մ.Ն. ՆԵՐՍԻՍՅԱՆ

Ուսումնասիրվել են  $\text{Er}^{3+}$  և  $\text{Nd}^{3+}$  իոնների աբսորբցիոն և լյումինեսցենտ հատկությունները օքսիֆտորիդային բարիումի բորալյումոսիլիկատային ապակիներում  $\text{BaO/BaF}_2\text{-SiO}_2\text{-B}_2\text{O}_3\text{-Al}_2\text{O}_3$  համակարգում՝ օպտիկական կլանման և ֆոտոլյումինեսցենցիայի սպեկտրների գրանցման միջոցով: Նեոդիմի իոնների ֆոտոլյումինեսցենցիայի գրգռման համար կիրառվել է լազերային ճառագայթում 808 նմ ալիքի երկարությամբ: Նեոդիմի իոնների  ${}^4F_{3/2} \rightarrow {}^4I_J$  երեք հիմնական անցումների համապատասխան ճառագայթումը դիտվել է 890, 1060 և 1330 նմ ալիքի երկարություններում: 808 և 980 նմ ալիքի երկարություններով լազերային ճառագայթումը օգտագործվել է երբիումի իոնների ինֆրակարմիր ճառագայթման գրգռման համար մոտ 1550 նմ ալիքի երկարությունում, որը համապատասխանում է  ${}^4I_{13/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$  անցմանը, ինչպես նաև երբիումի իոնների վերափոխակերպված (UC) ճառագայթման գրգռման համար տեսանելի տիրույթում՝ ներառյալ կապույտ ( ${}^2H_{9/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$ ), կանաչ green ( ${}^2H_{11/2}$ ,  ${}^4S_{3/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$ ) և կարմիր ( ${}^4F_{9/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$ ) լյումինեսցենցիայի շերտերը:

## **РЕНТГЕНОВСКИЙ ДИНАМИЧЕСКИЙ ДИФРАКЦИОННЫЙ ИНТЕРФЕРОМЕТР С РАЗДЕЛЕНИЕМ ВОЛНОВОГО ФРОНТА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ДВУХ АСИММЕТРИЧНЫХ ОТРАЖЕНИЙ**

М.К. БАЛЯН, В.П. МКРТЧЯН\*, А.П. АЙВАЗЯН, С.А. ПЕТРОСЯН

Ереванский государственный университет, Институт Физики, Ереван, Армения

\*e-mail: vmkrtchyan@ysu.am

(Поступила в редакцию 12 ноября 2025 г.)

Для получения динамически-дифракционных интерференционных полос на двух щелях и для достижения необходимой степени коллимации и монохроматичности пучка предлагается перед двумя щелями использовать двукратное асимметричное отражение от двух кристаллов. Найдено выражение для амплитуды дифрагированной волны, полученной на выходной поверхности третьего кристалла, поставленного после двух щелей. Получено условие для коэффициентов асимметричности кристаллов, при выполнении которого интерференционные полосы будут наблюдаемы. На конкретных примерах показано, что полученное условие позволяет без труда найти много случаев асимметричных двукратных отражений, позволяющих наблюдение динамически-дифракционных интерференционных полос, используя немонохроматический протяженный источник.

### **1. Введение**

Рентгеновская динамическая дифракция на двух щелях в дифрагированном пучке была предложена и теоретически исследована в работе [1]. В ней даны оценки пространственной и временной когерентности падающего излучения, при выполнении которых будут наблюдаться полосы с высокой контрастностью. Эти требования достаточно жесткие, в связи с чем было предложено перед двумя щелями использовать асимметрично отражающий кристалл, который обеспечил бы необходимые когерентные характеристики падающего излучения [2]. В этой же работе получено условие, налагаемое на коэффициент асимметрии. Оценки показывают, что, хотя можно с трудом найти асимметричное отражение с нужным коэффициентом асимметрии, но все же достигается контрастность около тридцати процентов.

Исследования динамически-дифракционной интерференции с разделением волнового фронта были проведены в работах [3, 4], где вместо двух щелей предлагается использовать две рентгеновские фокусные точки. Были также проведены теоретические и экспериментальные исследования дифракции на двух щелях, не используя брэгговскую дифракцию [5–10]. В этом случае интерференционные полосы получаются на расстояниях в несколько метров и более. В противовес этому, интерференционные полосы от двух щелей с применением

брэгговской дифракции, получаются на глубине кристалла порядка несколько сот микронов и более.

Чтобы достичь большей контрастности интерференционных полос при интерференции на двух щелях с использованием последующей брэгговской дифракции в кристалле, а также расширить число возможных асимметричных отражений, обеспечивающих получение интерференционных полос с высоким контрастом, в данной работе предложена двухкристальная асимметрично отражающая система. Найдены выражения для выбора коэффициентов асимметрии обоих кристаллов, при которых будут получаться интерференционные полосы с большей контрастностью, чем при использовании одного асимметрично отражающего кристалла.

## 2. Схемы без и с одним асимметричным отражением

Сначала коротко рассмотрим схемы без асимметричного отражения [1] (рис. 1а) и с одним асимметричным предварительным отражением [2] (рис. 1б). На рис. 1а излученный от некогерентного протяженного источника рентгеновский пучок с волновым вектором  $\mathbf{K}_0^i$ , проходя через две щели под углом  $\theta^i$  по отношению к атомным отражающим плоскостям RP, падает на входную поверхность совершенного кристалла. Отражающие атомные плоскости перпендикулярны к входной поверхности кристалла. На выходной поверхности возникают интерференционные полосы, перпендикулярные к плоскости дифракции. Период  $D$  этих полос вдоль поверхности дается выражением [1]

$$D = \frac{\Lambda_r z \tan^2 \theta}{(c / \cos \theta)}. \quad (1)$$

Здесь  $c$  – расстояние между центрами щелей,  $\Lambda_r$  – экстинкционное расстояние,  $\theta$  – угол Брэгга,  $z$  – глубина наблюдения в кристалле. Обозначим через  $\lambda_m$  центральную длину волны падающего излучения, пусть  $\Delta\lambda = \lambda - \lambda_m$  будет разброс по длинам волн, а через  $l_s$  обозначим размеры источника в плоскости дифракции в направлении, перпендикулярном к направлению распространения падающего излучения. В работе [1] получены следующие условия на монохроматичность и размеры источника, при которых будут наблюдаться интерференционные полосы с высоким контрастом:

$$\begin{aligned} |\Delta\lambda / \lambda_m| &\ll \pi / (2kc \sin \theta), \\ l &\ll \pi L_s / (kc \cos \theta). \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь  $L_s$  – расстояние источник–кристалл,  $k = 2\pi / \lambda$ . Ось  $Ox$  выбранной системы координат параллельна входной поверхности и антипараллельна вектору дифракции  $\mathbf{h}$  для данного отражения. Ось  $Oz$  перпендикулярна к входной поверхности, а ось  $Oy$  перпендикулярна к плоскости дифракции  $xz$ .

Простые оценки показывают [1, 2], что существующие источники не удовлетворяют условиям (2). Исходя из этого, в работе [2] предложено предварительно асимметрично отражать пучок от некоторого другого кристалла (рис. 1б), причем пучок падает под малым углом относительно входной поверхности кристалла и отражается под большим углом. В этой работе найдено условие, налагаемое на

фактор асимметрии кристалла  $b = \sin(\theta - \alpha) / \sin(\theta + \alpha) \equiv \gamma_0 / \gamma_h < 1$ , которое обеспечивает наблюдение интерференционных полос, если выбрать его меньшим единицы:

$$\sqrt{b} \ll \frac{\pi \sin 2\theta}{2kc \left| \operatorname{Re} \left[ \sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}} \right] \right|}. \quad (3)$$

Здесь  $\alpha$  – угол между отражающими плоскостями и входной поверхностью,  $\theta$  – угол Брэгга асимметрично отражающего кристалла,  $\chi_h$  и  $\chi_{\bar{h}}$  – Фурье-коэффициенты его поляризуемости. Найти кристалл, отражение и соответствующий фактор асимметрии, удовлетворяющий условию (3), достаточно трудно [2]. Следует ожидать, что такие же условия будут менее жесткими, если перед двумя щелями использовать два асимметрично отражающих кристалла.

### 3. Схема с двумя асимметрично отражающими кристаллами

Рассмотрим схему с двумя асимметричными отражениями (рис.1с). Будем считать, что отражения и кристаллы одни и те же, но угол между отражающими плоскостями и входной поверхностью первого кристалла обозначим через  $\alpha_1$  и соответственно  $b_1 = \sin(\theta - \alpha_1) / \sin(\theta + \alpha_1) \equiv \gamma_{01} / \gamma_{h1} < 1$ , а во втором кристалле –  $\alpha_2$  и  $b_2 = \sin(\theta - \alpha_2) / \sin(\theta + \alpha_2) \equiv \gamma_{02} / \gamma_{h2} < 1$ . Нам следует рассчитать дифрагированное поле после прохождения пучка через две щели и дифракции в третьем кристалле в симметричной геометрии Лауэ. Отражение в третьем кристалле считается тем же самым, что и в первых двух кристаллах.

С каждым кристаллом связана координатная система –  $(x_1 z_1)$  с первым,  $(x_2 z_2)$  – со вторым и  $(xz)$  – с третьим (рис.1а, б, с). Расчеты проведены в рамках динамической теории дифракции Такаги [11–14], пренебрегая зависимостью амплитуд от  $y$ -координаты. Как показывают оценки [2], это приближение применимо для  $|y| \leq 2\text{мм}$ , что вполне достаточно для наблюдения интерференционных полос.

Рентгеновская волна с перпендикулярной к плоскости дифракции поляризацией от некоторого немонахроматического протяженного источника падает на первый кристалл:

$$E(x_1, x_s; \lambda) = E^i(x_1, x_s; \lambda) e^{i\mathbf{K}r}. \quad (4)$$

Для поляризации с направлением электрического поля, лежащим в плоскости дифракции, Фурье-коэффициенты поляризуемости умножаются на фактор поляризации  $\cos 2\theta$ . Волновой вектор  $\mathbf{K}$  имеет одно и то же направление для всех точечных источников, но его длина различна для различных длин волн. Параметр  $x_s = \xi_s / \gamma_{01}$ , причем координаты каждой точки протяженного источника задаются координатой  $\xi_s$ , меняющейся от  $-l_s / 2$  до  $l_s / 2$  в направлении, перпендикулярном к направлению распространения падающего пучка (рис.1б, с). В параксиальном приближении для амплитуды в (4) имеем

$$E^i(x_1, x_s; \lambda) = E_0^i \exp \left[ i \frac{k(x_1 - x_s)^2 \gamma_{01}^2}{2L_s} \right], \quad (5)$$

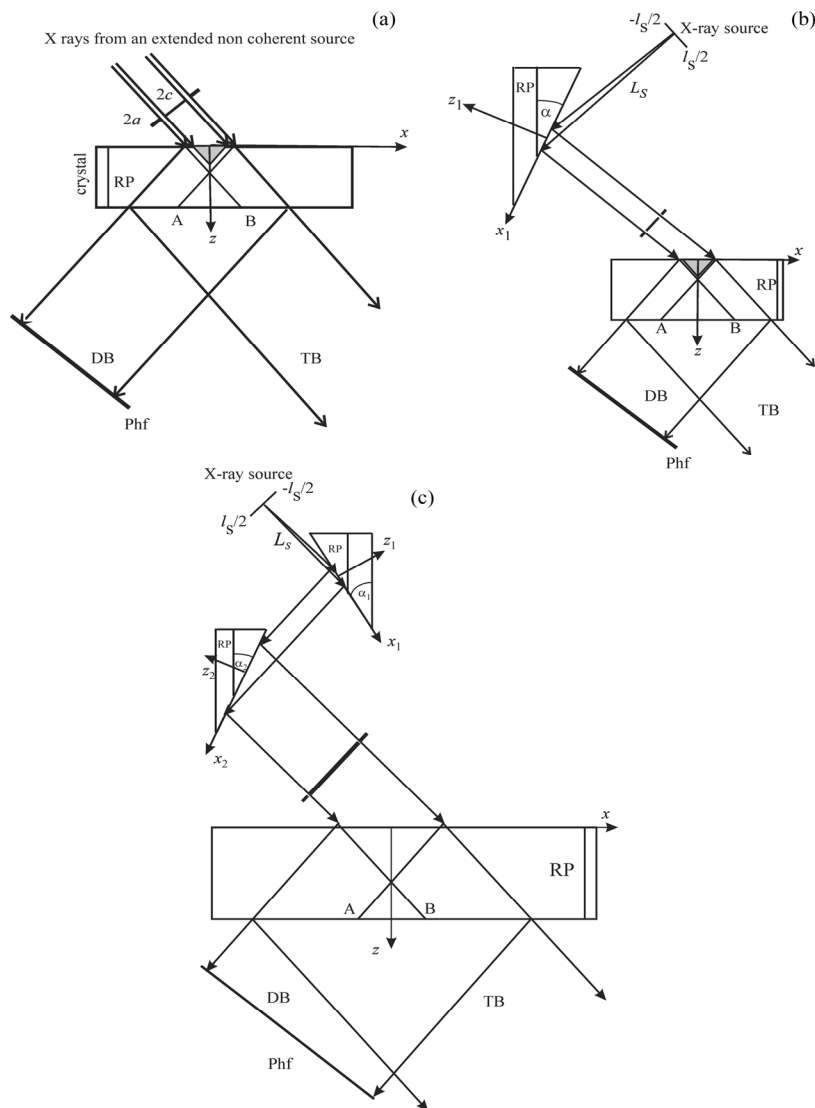


Рис.1. Схема рентгеновской динамической дифракции на двух щелях:  $L_s$  – расстояние источник–кристалл,  $2a$  – ширина щелей,  $2c$  – расстояние между их центрами, RP – отражающие атомные плоскости, ТВ – проходящий пучок, DB – дифрагированный пучок, Phf – фотопленка или другой регистрирующий излучение прибор. Интерференционное поле двух щелей занимает область АВ на выходной поверхности кристалла. (а) Проходя две щели, пучок дифрагирует в кристалле. (б) После предварительного асимметричного отражения пучок проходит через две щели и дифрагирует в кристалле. (с) Перед щелями используются два асимметрично отражающих кристалла.

причем  $E_0^i = A^i e^{ikL_s} / L_s$ ,  $A^i$  есть некоторая постоянная. Волновое поле внутри первого кристалла представится в виде

$$E_1(x_1, z_1; x_s, \lambda) = E_{01}(x_1, z_1; x_s, \lambda) \exp[i\mathbf{K}_0(\lambda)\mathbf{r}_1] + E_{h1}(x_1, z_1; x_s, \lambda) \exp[i\mathbf{K}_h(\lambda)\mathbf{r}_1], \quad (6)$$

с амплитудами  $E_{01}$  проходящей и  $E_{h1}$  отраженной волн, волновыми векторами  $\mathbf{K}_0(\lambda)$  и  $\mathbf{K}_h(\lambda) = \mathbf{K}_0(\lambda) + \mathbf{h}$ , удовлетворяющими точному условию Брэгга –  $\mathbf{K}_0^2(\lambda) = \mathbf{K}_h^2(\lambda) = (2\pi/\lambda)^2$ . Направление волнового вектора  $\mathbf{K}$  составляет угол  $\theta^i$  с отражающими плоскостями, отличный от точного угла Брэгга  $\theta$ .  $\theta^i$  не зависит от длины волны. Компоненты волновых векторов  $K_{x1} = k \cos(\theta^i - \alpha_1)$ ,  $K_{z1} = -k \sin(\theta^i - \alpha_1)$  и  $K_{0x1} = k \cos(\theta(\lambda) - \alpha_1)$ ,  $K_{0z1} = -k \sin(\theta(\lambda) - \alpha_1)$ . Здесь явно учтено, что точный угол Брэгга зависит от длины волны. Как обычно, отклонение от угла Брэгга обозначаем  $\Delta\theta(\lambda) = \theta^i - \theta(\lambda)$ .

Нахождение амплитуды дифрагированной волны проведем с помощью функции источника динамической задачи дифракции [11–14], выражая решение как свертку проходящей волны и функции точечного источника по входной поверхности кристалла. Значение проходящей волны на входной поверхности определяется из его граничного условия равенства падающей волне:

$$E_{01}(x_1, z_1 = 0; x_s, \lambda) = E^i(x_1; x_s, \lambda) \exp[-ik\gamma_0 \Delta\theta(\lambda)x_1]. \quad (7)$$

Детальный расчет, сделанный в [2], на входной поверхности для амплитуды отраженной волны, приводит к выражению

$$E_{h1}(x_1, z_1 = 0; x_s, \lambda) = E_0^i(x_s, \lambda) \exp\left[i \frac{k(x_1 - x_s)^2 \gamma_{01}^2}{2L_s}\right] \exp[-ik\gamma_{01} \Delta\theta(\lambda)x_1] \\ \times \int_0^\infty G_{h1}(x_1'') \exp\left(i \frac{kx_1''^2 \gamma_{01}^2}{2L_s}\right) \exp\left[-i \frac{k(x_1 - x_s)x_1'' \gamma_{01}^2}{L_s}\right] \exp[ik\gamma_{01} \Delta\theta(\lambda)x_1''] dx_1'', \quad (8)$$

где функция точечного источника

$$G_{h1}(x_1) = i \sqrt{\frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}}} \sqrt{\frac{\gamma_{01}}{\gamma_{h1}}} \frac{J_1(\sigma_1 x_1)}{x_1} \exp(i\sigma_1 x_1). \quad (9)$$

Здесь  $\sigma_1 = k\sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}} \gamma_{01} \gamma_{h1}} / \sin 2\theta$ ,  $J_1$  – функция Бесселя первого порядка комплексного аргумента,  $\sigma_{01} = k\chi_0(\gamma_{01} + \gamma_{h1}) / (2 \sin 2\theta)$ ,  $\chi_0$  – Фурье-коэффициент нулевого порядка поляризуемости кристалла. Между двумя отражающими кристаллами амплитуда (8) распространяется вдоль направления отраженного пучка без изменения. Следовательно, амплитуда отраженной волны в этом промежутке напишется в виде

$$E_{h1}^e(x_1, z_1; x_s, \lambda) = E_{h1}(x_1 + z_1 \cot(\theta + \alpha_1), z_1 = 0; x_s, \lambda) = E_{h1}\left(\frac{\xi_{h1}}{\gamma_{h1}}, z_1 = 0; x_s, \lambda\right). \quad (10)$$

Здесь введена переменная  $\xi_{h1} = x_1 \sin(\theta + \alpha_1) + z_1 \cos(\theta + \alpha_1)$  (рис.1b, c), которая равняется нулю в центре отраженного пучка, отсчитывает положение точки наблюдения в его поперечном сечении, принимает положительные значения от центра к положительному направлению оси  $Ox_1$ .

Волновое поле во втором кристалле представлено выражением

$$E_2(x_2, z_2; x_s, \lambda) = E_{02}(x_2, z_2; x_s, \lambda) \exp[i\mathbf{K}_{h1}(\lambda)\mathbf{r}_2] + E_{h2}(x_2, z_2; x_s, \lambda) \exp[i\mathbf{K}_{01}(\lambda)\mathbf{r}_2]. \quad (11)$$

На входной поверхности второго асимметрично отражающего кристалла

$x_2 = \xi_{h1} / \sin(\theta - \alpha_2) \equiv \xi_{h1} / \gamma_{02}$ . Граничное условие приводит к равенству

$$E_{02}(x_2, z_2 = 0; x_s, \lambda) = E_{h1}(x_2 \gamma_{02} / \gamma_{h1}; x_s, \lambda). \quad (12)$$

Расчет, аналогичный сделанному для первого отражающего кристалла, для амплитуды отраженной волны на входной поверхности второго кристалла приводит к выражению

$$E_{h2}(x_2, z_2 = 0; x_s, \lambda) = \int_0^{\infty} G_{h2}(x_2') E_{02}(x_2 - x_2', z_2 = 0; x_s, \lambda) dx_2', \quad (13)$$

причем

$$G_{h2}(x_2) = i \sqrt{\frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}}} \sqrt{\frac{\gamma_{02}}{\gamma_{h2}}} \frac{J_1(\sigma_2 x_2)}{x_2} \exp(i\sigma_{02} x_2). \quad (14)$$

Принятые здесь обозначения понятны из такого же выражения (9). В зазоре между вторым и третьим кристаллом имеем

$$E_{h2}^e(x_2, z_2; x_s, \lambda) = E_{h2}(\xi_{h2} / \gamma_{h2}, z_2 = 0; x_s, \lambda). \quad (15)$$

Здесь  $\xi_{h2}$  – такая же переменная, как  $\xi_{h1}$ , но связанная с пучком, отраженным от второго кристалла (см. рис. 1с). Поле в третьем кристалле с симметричным отражением по Лауэ, где формируются интерференционные полосы, и с теми же отражающими плоскостями, как и в первых двух, представим в виде

$$E = E_0 \exp[i\mathbf{K}_0(\lambda)\mathbf{r}] + E_h \exp[i\mathbf{K}_h(\lambda)\mathbf{r}]. \quad (16)$$

Учитывая, что на входной поверхности третьего кристалла  $\xi_{h2} = -x \cos \theta$ , из условия непрерывности проходящей и падающей волн находим

$$E_0(x, z = 0; x_s, \lambda) = E_{h2}(-x \cos \theta / \gamma_{h2}, z_2 = 0; x_s, \lambda). \quad (17)$$

Амплитуда дифрагированной волны в третьем кристалле выразится через свертку по входной поверхности амплитуды падающей волны и функции точечного источника [3–5]:

$$E_h(x, z; x_s, \lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} G_h(x - x', z) E_0(x', 0; x_s, \lambda) dx'. \quad (18)$$

Здесь

$$G_h(x, z) = \frac{ik\chi_h}{4\sin\theta} J_0(\pi \cot\theta \sqrt{z^2 \tan^2 \theta - x^2} / \Lambda) \exp\left(\frac{ik\chi_0 z}{2\cos\theta}\right) H(z \tan\theta - |x|) \quad (19)$$

есть функция точечного источника,  $\Lambda = \lambda \cos \theta / \sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}}$  – длина экстинкции,  $H$  – ступенчатая функция Хевисайда. Интеграл (18) в области АВ на выходной поверхности кристалла (рис. 1с) выразится как сумма двух интегралов, взятых по двум щелям [2].

#### 4. Выбор коэффициентов асимметричности кристаллов

Для определения коэффициентов асимметричности кристаллов будет более удобно использовать приближенные выражения для амплитуд.

Сначала обратимся к амплитуде волны, отраженной от первого кристалла. Точное выражение дается формулами (8) и (10). В большинстве случаев

под знаком интеграла в (8) можно подставить  $\exp[ikx_1'^2\gamma_{01}^2 / (2L_s)] \approx 1$ . Тогда (8) есть Фурье-образ функции точечного источника (амплитудный коэффициент отражения локально плоской волны) [2], и из (10) имеем

$$E_{h1}^e(x_1, z_1; x_s, \lambda) = E_0^i \Gamma_1 \left( p_1 \left( \frac{\xi_{h1}}{\gamma_{h1}} \right) \right) e^{-ik\gamma_{01}\Delta\theta \frac{\xi_{h1}}{\gamma_{h1}}} e^{ik \left( \frac{\xi_{h1}}{\gamma_{h1}} - x_s \right)^2 \frac{\gamma_{01}^2}{2L_s}}. \quad (20)$$

Здесь амплитудный коэффициент отражения от первого кристалла локально плоской волны

$$\Gamma_1(p_1) = -\frac{\sqrt{\chi_h} \sqrt{\gamma_{01}}}{\sqrt{\chi_{\bar{h}}} \sqrt{\gamma_{h1}}} \frac{1}{p_1 + \sqrt{p_1^2 - 1}}, \quad (21)$$

соответствующий локальный параметр отклонения

$$p_1 = \frac{\sin 2\theta}{\sqrt{\frac{\gamma_{h1}}{\gamma_{01}}} \sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}}} \left[ \Delta\varphi_1 + \frac{\chi_0}{2 \sin 2\theta} \left( 1 + \frac{1}{b_1} \right) \right] \quad (22)$$

и локальное отклонение от угла Брэгга

$$\Delta\varphi_1 = \Delta\theta - \frac{(x_1 - x_s)\gamma_{01}}{L_s}. \quad (23)$$

Для поля (12) на входной поверхности второго кристалла можно использовать приближенное выражение (20) и, следовательно, это же выражение будет использоваться в выражении для амплитуды отраженной волны в (13). Вынося  $\Gamma_1$  из под знака интеграла в точке  $x_2' = 0$ , а также используя приближение локально плоской волны, т.е. считая квадратичную по  $x_2'$  экспоненту равной единице, приходим к приближенному выражению для амплитуды, отраженной от второго кристалла волны, в зазоре между вторым и третьим кристаллом:

$$E_{h2}(x_2, z_2; x_s, \lambda) = E_0^i \Gamma_1 \left[ p_1 \left( \frac{\xi_{h2}}{\gamma_{h2}} \frac{\gamma_{02}}{\gamma_{h1}} \right) \right] \Gamma_2 \left[ p_2 \left( \frac{\xi_{h2}}{\gamma_{h2}} \right) \right] e^{ik \left( \frac{\xi_{h2}}{\gamma_{h2}} \frac{\gamma_{02}}{\gamma_{h1}} - x_s \right)^2 \frac{\gamma_{01}^2}{2L_s}} e^{-ikb_2\Delta\theta\xi_{h2}}. \quad (24)$$

Здесь  $\Gamma_2$  – амплитудный коэффициент отражения от второго кристалла и выражается через параметр  $p_2$  той же формулой (21), что и  $\Gamma_1$ , где теперь

$$p_2 = \frac{\sin 2\theta}{\sqrt{\frac{\gamma_{h2}}{\gamma_{02}}} \sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}}} \left[ \Delta\varphi_2 + \frac{\chi_0}{2 \sin 2\theta} \left( 1 + \frac{1}{b_2} \right) \right] \quad (25)$$

и

$$\Delta\varphi_2 = b_1 \left[ \Delta\theta - \frac{\gamma_{01}}{L_s} \left( x_2 \frac{\gamma_{02}}{\gamma_{h1}} - x_s \right) \right]. \quad (26)$$

Используя выражение (24) в (17) и подставляя (17) в (18), а затем в приближении бесконечно узких щелей вынося амплитуды в точках с координатами щелей, как в [2], используя также асимптотическое выражение для функции точечного источника (19) при условиях ( $z \gg |x|$ ,  $\pi z / \Lambda_r \gg 1$ ) (см. [2]), приходим

к следующему выражению для амплитуды дифрагированной волны на выходной поверхности третьего кристалла в центральной части области АВ (см. рис. 1с)

$$E_h(x, z; \xi_s, \lambda) \approx Q \left[ \Gamma_1 \left( p_1 \left( \frac{cb_2}{\gamma_{h1}} \right) \right) \Gamma_2 \left( p_2 \left( \frac{c}{\gamma_{h2}} \right) \right) e^{i\Phi_1} + \Gamma_1 \left( p_1 \left( -\frac{cb_2}{\gamma_{h1}} \right) \right) \Gamma_2 \left( p_2 \left( -\frac{c}{\gamma_{h2}} \right) \right) e^{i\Phi_2} \right], \quad (27)$$

где

$$Q = \frac{2a}{\cos \theta} E_0^i \frac{ik\chi_h}{4 \sin \theta} \sqrt{\frac{2\Lambda}{z}} e^{i\pi \frac{z}{\Lambda}} e^{ik\chi_0 \frac{z}{2 \cos \theta}} e^{ik \left( \frac{(cb_2 b_1)^2 + \xi_s^2}{2L_s} \right)}, \quad \Phi_1 = -\frac{\pi(x + c / \cos \theta)^2}{2\Lambda, z \tan^2 \theta} - kb_1 b_2 c \frac{\xi_s}{L_s} - kb_1 b_2 c \Delta \theta, \\ \Phi_2 = -\frac{\pi(x - c / \cos \theta)^2}{2\Lambda, z \tan^2 \theta} + kb_1 b_2 c \frac{\xi_s}{L_s} + kb_1 b_2 c \Delta \theta.$$

Каждое слагаемое в (27) соответствует волне, исходящей из одной из щелей и дифрагированной в третьем кристалле.

Определим зависимость  $\Delta \theta$  от длины волны. Как уже было сказано, обозначая центральную длину волны через  $\lambda_m$ , имеем

$$\Delta \theta(\lambda) = \theta^i - \theta(\lambda_m) + \theta(\lambda_m) - \theta(\lambda) = \Delta \theta(\lambda_m) - \frac{\Delta \lambda}{\lambda} \tan \theta. \quad (28)$$

Здесь  $\theta(\lambda_m) - \theta(\lambda) = \Delta \theta(\lambda_m) - \Delta \lambda \tan \theta / \lambda$  получается дифференцированием закона Брэгга. Подставляя (28) в выражение (22) для  $p_1$ , видим, что соответствующим малым поворотом первого кристалла угловое отклонение  $\Delta \theta(\lambda_m) - |\operatorname{Re}[\chi_0]|(1 + 1/b_1) / (2 \sin 2\theta)$  можно приравнять нулю. Подставляя же (28) в (25) и используя значение  $\Delta \theta(\lambda_m) = |\operatorname{Re}[\chi_0]|(1 + 1/b_1) / (2 \sin 2\theta)$ , приходим к выводу, что в выражении для  $p_1$  появляется не зависящее от длины волны угловое отклонение  $|\operatorname{Re}[\chi_0]|(1/b_1 - 1/b_2) / (2 \sin 2\theta)$ . Это угловое отклонение может быть устранено соответствующим малым поворотом второго кристалла. Наконец, если подставить выражение (28) в формулу  $kb_1 b_2 c \Delta \theta$ , которое входит в выражения для  $\Phi_1$  и  $\Phi_2$ , то появляющееся в них независимое от длины волны угловое отклонение, пропорциональное  $kcb_1 b_2 \Delta \theta(\lambda_m)$ , к которому еще добавляется угловое отклонение, пропорциональное  $|\operatorname{Re}[\chi_0]|(1/b_1 - 1/b_2) / (2 \sin 2\theta)$ , появляющееся из-за дополнительного поворота второго кристалла, может быть скомпенсировано соответствующим малым поворотом третьего кристалла.

После определения зависимости входящих величин от длины волны перейдем к изучению интерференционных полос. Интенсивность интерференционной картины определяется модулем квадрата амплитуды (27). Максимумы интенсивности определяются приравнением разности фаз интерферирующих волн к  $2\pi n$  ( $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ ).  $\Gamma_1 \Gamma_2$  – комплексная величина и разность фаз этой величины для разных щелей должна быть учтена, но эта величина намного медленнее меняется, чем экспоненты, и поэтому ее разностью можно пренебречь. Тогда условие максимумов запишется в виде

$$\frac{2\pi c x}{\Lambda, z \tan^2 \theta \cos \theta} + 2kb_1 b_2 c \left( -\frac{\Delta \lambda}{\lambda} \tan \theta + \frac{\xi_s}{L_s} \right) = 2\pi n. \quad (29)$$

Отсюда видно, что период определяется выражением (1). Видно также, что для

$\Delta\lambda=0$  и  $\xi_s = 0$  центральный максимум ( $n = 0$ ) находится в точке с координатой  $x=0$ . Для любых значений этих величин, отличных от нуля, центральный максимум смещается на

$$\Delta x = -\frac{kb_1b_2cD}{\pi} \left( -\frac{\Delta\lambda}{\lambda} \tan\theta + \frac{\xi_s}{L_s} \right). \quad (30)$$

Интерференционные полосы будут наблюдаться при условии, что модуль этого смещения меньше (точнее намного меньше) половины периода, т.е.

$kb_1b_2cD \left| -\frac{\Delta\lambda}{\lambda} \tan\theta + \frac{\xi_s}{L_s} \right| / \pi < D/2$ , и в результате получаем следующее условие

для наблюдаемости полос:

$$\left| -\frac{\Delta\lambda}{\lambda} \tan\theta + \frac{\xi_s}{L_s} \right| < \frac{\pi}{2kb_1b_2c}. \quad (31)$$

Вместе с тем, волны, для которых  $|\Gamma_1\Gamma_2| \approx 1$ , отражаются со значительной амплитудой, что равносильно тому, что  $|\Gamma_1| \approx 1$  и  $|\Gamma_2| \approx 1$ . Это условие будет удовлетворяться при  $|p_1| \leq 1$  и  $|p_2| \leq 1$ . В аргументы  $p_1$  и  $p_2$  входят координаты двух щелей  $\pm c$ , которые имеют величину порядка 40 мкм, тогда как  $|p_1|$  и  $|p_2|$  значительно меняются на расстояниях порядка поперечного сечения дважды отраженного пучка, имеющего ширину порядка сантиметра. Следовательно, аргументы  $p_1$  и  $p_2$  можно брать в центре пучка, полагая их равными нулю  $|p_1(0)| \leq 1$  и  $|p_2(0)| \leq 1$ . Это приводит к следующему условию сильного отражения от первого кристалла

$$\left| -\frac{\Delta\lambda}{\lambda} \tan\theta + \frac{\xi_s}{L_s} \right| < \frac{|\operatorname{Re}\sqrt{\chi_h\chi_{\bar{h}}}|}{\sin 2\theta\sqrt{b_1}}, \quad (32)$$

и то же от второго кристалла:

$$\left| -\frac{\Delta\lambda}{\lambda} \tan\theta + \frac{\xi_s}{L_s} \right| < \frac{|\operatorname{Re}\sqrt{\chi_h\chi_{\bar{h}}}|}{\sin 2\theta b_1\sqrt{b_2}}. \quad (33)$$

Так как предполагается, что  $b_1 < 1$  и  $b_2 < 1$ , то ясно, что условия (32) и (33) будут одновременно удовлетворены, если удовлетворяется условие (32). Вместе с тем, должно быть удовлетворено условие (31). Из требования, что волны, удовлетворяющие условию (31), должны слабо отражаться от двух кристаллов, и из (32) следует, что мы выбираем факторы асимметричности из условия

$$\sqrt{b_1} b_2 < \frac{\pi \sin 2\theta}{2kc |\operatorname{Re}\sqrt{\chi_h\chi_{\bar{h}}}|}. \quad (34)$$

По сравнению с условием (3), при использовании одного асимметричного отражения, условие (34) менее жесткое и его можно удовлетворить, используя различные отражения с различными факторами асимметричности.

Так как выбор коэффициентов асимметричности достаточно велик, можно, конечно, вместо условия (31) попробовать сильно отражать только ту часть

излучения, которая приводит к смещению полос максимум на  $|\Delta x| = \eta D$ , где  $\eta < 1/2$ . Тогда из (30) и (32) получим

$$\left| \operatorname{Re} \sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}} \right| / (\sin 2\theta \sqrt{b_1}) = \pi \eta / (k b_1 b_2 c),$$

откуда имеем

$$\sqrt{b_1} b_2 = \frac{\pi \eta \sin 2\theta}{k c \left| \operatorname{Re} \sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}} \right|}. \quad (35)$$

Например, для того, чтобы сильно отразились волны, дающие смещение полос всего на  $0.1D$ , нужно в (35) взять  $\eta = 0.1$ .

## 5. Примеры

В качестве примера рассмотрим отражение Si(220) для MoK $\alpha$  излучения ( $\lambda = 0.71 \text{ \AA}$ ,  $\theta = 10.63^\circ$ )  $\sigma$ -поляризованной волны. Для кремния  $\chi_{0r} = -3.162 \times 10^{-6}$ ,  $\chi_{0i} = 0.165 \times 10^{-7}$ ,  $\chi_{hr} = \chi_{\bar{h}r} = -1.901 \times 10^{-6}$ ,  $\chi_{hi} = \chi_{\bar{h}i} = 0.159 \times 10^{-7}$  [13]. Имеем,  $\Lambda_r = \operatorname{Re} \Lambda = 36.6$  мкм и  $\Lambda_r \tan \theta = 6.9$  мкм. Пусть щели имеют размер  $2a = 10$  мкм, а расстояние между их центрами –  $2c = 80$  мкм. Если брать толщину кристалла  $z = 3$  мм, то  $\mu z = 4.4$ , где линейный коэффициент поглощения кристалла  $\mu = k \operatorname{Im}[\chi_0]$ . При расстоянии источник–кристалл  $L_s = 10$  м, из (2) без применения асимметричных отражений получаются следующие оценки для когерентности:  $|\Delta \lambda / \lambda| \ll 2.4 \cdot 10^{-6}$ ,  $l \ll 9$  мкм. Для современных источников эти требования не могут быть выполнены. Для схемы с одним асимметричным отражением коэффициент асимметричности должен быть выбран из условия (3). Для правой части этого условия имеем значение  $\pi \sin 2\theta / (2kc \left| \operatorname{Re} \left[ \sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}} \right] \right|) \approx 0.08$ . Следовательно,  $b_1$  должно быть приблизительно меньше  $1/156$ , что практически не осуществимо. Но при использовании асимметричного отражения Si(440) для MoK $\alpha$  излучения ( $\lambda = 0.71 \text{ \AA}$ ,  $\theta = 21.6^\circ$ ), для которого  $\chi_{0r} = -3.162 \times 10^{-6}$ ,  $\chi_{0i} = 0.165 \times 10^{-7}$ ,  $\chi_{hr} = \chi_{\bar{h}r} = -1.901 \times 10^{-6}$ ,  $\chi_{hi} = \chi_{\bar{h}i} = 0.159 \times 10^{-7}$  [13], правая сторона приблизительно равна 0.25, следовательно, приблизительно должно быть  $b_1 < 1/16$ , чего можно добиться, выбирая угол асимметричности  $\alpha = \theta - \Gamma = 20.6^\circ$  (рис.1b), чему соответствует  $b_1 \approx 1/39$  и что удовлетворительно для получения интерференционных полос [2].

Положение существенно улучшается при использовании предварительных двух асимметричных отражений. Тогда коэффициенты асимметричности выбираются из условия (34). Беря, например,  $b_2 = 1/10$ , для выбора  $b_1$  имеем  $\sqrt{b_1} < 0.08 / b_2 = 0.8$ . Следовательно, приблизительно должно быть  $b_1 < 1/2$ , что очень легко осуществимо.

Наконец, остановимся на примере выбора коэффициентов асимметрично-

сти, когда ставим цель сильно отражать только ту часть излучения, которая приводит к смещению полос максимум на  $\eta D$ . В этом случае мы должны пользоваться условием (35). Беря  $\eta = 0.2$  и  $b_2 = 1/10$ , из (35) для выбора  $b_1$  получаем  $\sqrt{b_1} = 0.32$  и, следовательно,  $b_1 \approx 1/10$ , что достаточно легко осуществимо.

## 6. Заключение

В работе исследован вопрос наблюдения рентгеновских динамически-дифракционных полос на двух щелях. Для существующих ныне протяженных немонохроматических источников рентгеновского излучения наблюдение полос неосуществимо. Для этого необходимо использовать одно или два предварительных асимметричных отражений. Ранее было показано, что при одном асимметричном отражении, хотя наблюдение полос осуществимо, но требования к коэффициенту асимметричности таковы, что число возможных отражений слишком ограничено. В данной работе найдено условие, которому должны удовлетворять коэффициенты асимметричности двух предварительных отражений, при которых возможно наблюдать интерференционные полосы. Показано, что при двух асимметричных отражениях условие дает намного большие и легко осуществимые отражения для наблюдения полос, что показано на примерах.

## ЛИТЕРАТУРА

1. **M.K. Balyan.** Acta Cryst A, **66**, 660 (2020).
2. **V. Mkrtchyan, M. Balyan, S. Petrosyan, A. Aivazyan.** Acta Cryst A, **81**, 438 (2025).
3. **V.G. Kohn, V.A. Smirnova.** Crystallogr. Rep., **66**, 897 (2021).
4. **V.G. Kohn, V.A. Smirnova.** Crystallogr. Rep., **67**, 1068 (2022).
5. **W. Leitenberger, S.M. Kusnetsov, A. Snigirev.** Optics Communications, **191**, 91 (2001).
6. **W. Leitenberger, H. Wendrock, L. Bischoff, T. Weitkamp.** J. Synchrotron Rad., **11**, 190 (2004).
7. **W. Leitenberger, U. Pietch.** J. Synchrotron Rad., **14**, 196 (2007).
8. **A.F. Isakovic, A. Stein, J.B. Warren, A.R. Sandy, S. Narayanan, M. Sprung, J.M. Ablett, D. P. Siddons, M. Metzler, K. Evans-Lutterodt.** J. Synchrotron Rad., **17**, 451 (2010).
9. **A. Snigirev, I. Snigireva, V. Kohn, V. Yunkin, S. Kuznetsov, M. B. Grigoriev, T. Roth, G. Vaughan, C. Detlefs.** Phys. Rev.Lett., **103**, 064801 (2009).
10. **A. Snigirev, I. Snigireva, M. Lyubomirskiy, V. Kohn, V. Yunkin, S. Kuznetsov.** Opt. Express, **22**, 25842 (2014).
11. **S. Takagi.** J. Phys. Soc. Jpn., **26**, 1239 (1969).
12. **A. Authier.** Dynamical Theory of X-ray Diffraction. Oxford, University Press, 2001.
13. **З.Г. Пинскер.** Рентгеновская кристаллооптика. Москва, Наука, 1982.
14. **S. Takagi.** Acta cryst., **15** 1131 (1962).

ՌԵՆՏԳԵՆՅԱՆ ԴԻՆԱՄԻԿԱԿԱՆ ԴԻՖՐԱԿՏԱՅԻՆ ԱԼԻՔԱՅԻՆ ՃԱԿԱՏԻ  
ԲԱԺԱՆՈՒՄՈՎ ԻՆՏԵՐՖԵՐԱՉԱՓ ԵՐԿՈՒ ԱՄԻՍԵՏՐԻԿԱԿԱՆ  
ԱՆԴՐԱԴԱՐՁՈՒՄՆԵՐԻ ՕԳՏԱԳՈՐԾՄԱՄԲ

Մ.Կ. ԲԱԼՅԱՆ, Վ.Պ. ՄԿՐՏՉՅԱՆ\*, Ա.Պ. ԱՅՎԱԶՅԱՆ, Ս.Ա. ՊԵՏՐՈՍՅԱՆ

Երկու ճեղքի վրա դինամիկական դիֆրակտային ինտերֆերաչափային գծեր ստանալու համար և փնջի անհրաժեշտ կոլիմացման և մոնոքրոմիատիկացման նպատակով առաջարկվում է երկու ճեղքերի առջև օգտագործել երկու բյուրեղներից երկու ասիմետրիկական անդրադարձում: Գտնված է արտահայտություն երկու ճեղքից հետո տեղադրված երրորդ բյուրեղի ելքի մակերևույթի վրա դիֆրակտված ալիքի ուժգնության համար: Գտնված է բյուրեղների ասիմետրիկության գործակցի համար արտահայտություն, որի տեղի ունենալու դեպքում ինտերֆերաչափային շերտերը կդիտվեն: Կոնկրետ օրինակներով ցույց է տրված, որ ստացված պայմանը թույլ է տալիս առանց դժվարության գտնել կրկնակի ասիմետրիկական անդրադարձումների շատ դեպքեր, որոնք թույլ են տալիս դիտել դինամիկական դիֆրակտային ինտերֆերենցային շերտերն օգտագործելով ոչ մոնոքրոմատիկ և չափեր ունեցող աղբյուր:

X-RAY DYNAMICAL DIFFRACTION INTERFEROMETER WITH WAVE FRONT  
DIVISION USING TWO ASYMMETRICAL REFLECTIONS

M.K. BALYAN, V.P. MKRTCHYAN\*, A.P. AIVAZYAN, S.A. PETROSYAN

To obtain dynamical diffraction double-slit interference fringes and to achieve the necessary degree of collimation and monochromaticity of the beam, it is proposed to use double asymmetric reflection from two crystals in front of the two slits. An expression was found for the amplitude of the diffracted wave obtained on the exit surface of the third crystal placed after two slits. The condition for the asymmetry coefficients of crystals, under which the interference fringes will be observed, is obtained. On concrete examples, it is shown that the obtained condition allows without difficulty to find many cases of asymmetric double reflections, which allow observation of dynamic-diffraction interference fringes using a non-monochromatic extended source.

## **ДВУМЕРНАЯ ФОКУСИРОВКА РЕНТГЕНОВСКОГО ПУЧКА НА ВЫХОДНОЙ ПОВЕРХНОСТИ КРИСТАЛЛА С ГРАНИЦЕЙ КРУЧЕНИЯ**

Л.В. ЛЕВОНЯН, А.М. МАНУКЯН\*

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

\*e-mail: hasmikm@ysu.am

(Поступила в редакцию 10 декабря 2025 г.)

Исследован случай двумерной дифракционной фокусировки сферической рентгеновской волны при расположении фокуса на выходной поверхности кристалла. Фокусировка осуществляется с помощью кристалла с малоугловой границей кручения с применением температурного градиента. Фокусное изображение регистрируется сразу за кристаллом. Показано, что размеры фокуса в направлении, перпендикулярном плоскости дифракции, имеют порядок нанометров.

### **1. Введение**

Известно, что при дифракции сферической рентгеновской волны на монокристалле в геометрии Лауэ происходит явление фокусировки слабо поглощаемой моды дифрагированного волнового поля как внутри кристалла [1], так и за кристаллом – в вакууме [2, 3], причем эти два эффекта так связаны между собой, что при отсутствии одного из них отсутствует и второй [1].

Интересно, что при фокусировке пучка на выходной поверхности кристалла эти два фокуса (внутри и вне кристалла) сливаются в один, и в итоге получается лишь один фокус на выходной поверхности. С практической точки зрения в эксперименте удобнее всего регистрировать именно этот случай, поскольку отпадает необходимость в поиске второго фокуса. Такую возможность может предоставить применение температурного градиента, направленного перпендикулярно к входной поверхности кристалла. Как показано в работе [4], фактически наличие градиента небольшой величины (порядка  $10^2$  К см<sup>-1</sup>) дает возможность полностью контролировать фокусную глубину в кристаллической пластинке.

Отметим, что все вышесказанное относится только к фокусировке в плоскости рассеяния, т.е. получится линейный фокус, что обусловлено плоской симметрией атомных отражающих плоскостей. Поскольку получение двумерной или точечной фокусировки очень важно для создания рентгенооптических элементов, таких как рентгеновская линза, рентгеновский микроскоп и т.д., то для ограничения вертикальной расходимости дифрагированного пучка обычно используются особенности кристаллических элементов и систем под влиянием внешних воздействий, таких как упругий и пластический изгибы, температурный градиент в разных направлениях, акустические волны и другие виды деформаций.

В настоящей работе для ограничения вертикальной расходимости дифрагированного пучка предложено использовать кристалл с малоугловой границей кручения, перпендикулярной поверхности [5].

В работах [6, 7] проведено исследование двухволновой дифракции рентгеновских лучей в кристалле с малоугловой границей кручения, перпендикулярной поверхности кристалла. Методом молекулярной динамики исследованы кристаллы с границами кручения и наклона в работах [8–13]. В работе [14] исследовано влияние температурного градиента, параллельного вектору дифракции, на интерференционное поглощение рентгеновских лучей в кристалле.

## 2. Теория

Дислокационная структура малоугловой границы кручения хорошо известна [15–19]. В этом случае в кристалле образуется дислокационная стенка, перпендикулярная плоскости рассеяния, которая настолько ограничивает вертикальную расходимость дифрагированного излучения, что не только фокусное изображение, но и все изображение в этом направлении получается порядка субмикрона [5–7].

Задача отображения дислокационной стенки сводится к отображению одномерной сверхрешетки (СР) винтовых дислокаций с вектором Бюргерса  $\mathbf{b}$  [5]. При малых углах разориентации блоков период СР определяется соотношением

$$z_0 = b/\Delta\theta, \quad (1)$$

где  $b$  – модуль вектора Бюргерса,  $\Delta\theta$  – угол разориентации блоков.

Как известно при дифракции рентгеновских лучей на одномерной СР с малым периодом  $z_0 \ll \bar{\Lambda}$  ( $z_0$  – период СР,  $\bar{\Lambda}$  – усредненная по периоду СР экстинкционная длина кристалла) дифракционная картина представляет собой систему неперекрывающихся сателлитов, угловое расстояние между которыми обратно пропорционально периоду СР.

В работе [6] показано, что при малом периоде, в пределах  $m$ -го сателлита СР можно рассматривать как идеальный кристалл с модифицированным структурным фактором:

$$F_{hm} = |M_m| F_h, \quad (2)$$

где  $m$  – номер дифракционного максимума (сателлита),  $M_m$  – сверхструктурный фактор СР.

Значение сверхструктурного фактора основного максимума кристалла с малоугловой границей кручения, перпендикулярной поверхности кристалла, получено в работе [6]:

$$M_{0,n} = \exp(-\pi n y / z_0), \quad (3)$$

где  $n = \mathbf{h} \mathbf{b} \operatorname{sgn} y$ ,  $\mathbf{h}$  – вектор дифракции.

Наличие температурного градиента, перпендикулярного входной поверхности кристалла, приводит к веерообразному расположению отражающих атомных плоскостей [20]. В результате имеет место вогнутая конфигурация вместо плоской области на входной поверхности кристалла вокруг точки точной брэгговской ориентации сферической рентгеновской волны, и фокусная глубина в кристалле увеличивается. При обратном направлении градиента, наоборот, имеет место выпуклая конфигурация, и фокусная глубина в кристалле уменьшается по сравнению со случаем плоской входной поверхности [4].

Выбирая величину температурного градиента нужной величины [4], получаем ситуацию, когда единственный фокус получается на выходной поверхности кристалла, а до фокуса в кристалле получаются описанные в работе [5] эффекты каналирования. После фокуса в вакууме за кристаллом получаются подобные эффекты, поскольку эти области разделены только выходной поверхностью кристалла.

В работе [4] получено выражение для интенсивности сателлитов при наличии температурного градиента, которое для основного максимума с учетом (3) приводится к виду:

$$I_h(x, y, z) = \frac{\exp(-\pi ny/z_0) \exp\left(-\frac{\mu z}{\cos \theta} (1 - \exp(-\pi ny/z_0)) C \frac{|\chi_{hi}|}{\chi_{0i}}\right)}{4L_0 \Gamma\left(\left(\frac{L_0 \exp(-\pi ny/z_0)}{\Gamma(1 - \gamma L_0/\cos \theta)} - z\right)^2 + \left(z \frac{|\chi_{hi}|}{\chi_{hr}}\right)^2\right)^{1/2}} \times$$

$$\times \exp\left[-\pi \frac{z \exp(-\pi ny/z_0) |\chi_{hi}| C}{\lambda \cos \theta} \frac{x^2 \cot^2 \theta}{\left(\frac{L_0 \exp(-\pi ny/z_0)}{\Gamma(1 - \gamma L_0/\cos \theta)} - z\right)^2 + \left(z \frac{|\chi_{hi}|}{\chi_{hr}}\right)^2}\right], \quad (1)$$

где  $\lambda$  – длина падающей волны,  $L_0$  – расстояние между точечным источником и кристаллом,  $\theta$  – угол Брэгга,  $C$  – фактор поляризации ( $C=1$  для  $\sigma$ -поляризации и  $C = \cos 2\theta$  для  $\pi$ -поляризации),  $\mu = 2\pi\chi_{0i}/\lambda$  – коэффициент линейного поглощения рентгеновских лучей в кристалле,  $\chi_0$  и  $\chi_h$  – коэффициенты Фурье комплексной поляризуемости кристалла  $\chi = \chi_r + i\chi_i$ , величина  $\Gamma = \sin \theta \sin 2\theta / (C|\chi_{hr}|)$ ,  $\gamma = \alpha a$  – температурный фактор,  $\alpha$  – коэффициент линейного расширения,  $a$  – величина температурного градиента.

Сначала в кристалле на глубинах  $z \leq t$ , где  $t$  – толщина кристалла, удовлетворяющая условию

$$t = \frac{L_0 \exp(-\pi ny/z_0)}{\Gamma(1 - \gamma L_0/\cos \theta)}, \quad (5)$$

поле усиливается.

При распространении излучения за кристаллом выражение для интенсивности поля принимает следующий вид [4]:

$$I_h(x, y, L_h) = \frac{\exp(-\pi ny/z_0) \exp\left(-\frac{\mu t}{\cos \theta} (1 - \exp(-\pi ny/z_0)) C \frac{|\chi_{hi}|}{\chi_{0i}}\right)}{4(L_0 + L_h) \Gamma\left(\left(\frac{L_0 \exp(-\pi ny/z_0)}{\Gamma(1 - \gamma L_0/\cos \theta)} + \frac{L_h \exp(-\pi ny/z_0)}{\Gamma(1 + \gamma L_h/\cos \theta)} - t\right)^2 + \left(t \frac{|\chi_{hi}|}{\chi_{hr}}\right)^2\right)^{1/2}} \times$$

$$\times \exp\left[-\pi \frac{t \exp(-\pi ny/z_0) |\chi_{hi}| C}{\lambda \cos \theta} \frac{x^2 \cot^2 \theta}{\left(\frac{L_0 \exp(-\pi ny/z_0)}{\Gamma(1 - \gamma L_0/\cos \theta)} + \frac{L_h \exp(-\pi ny/z_0)}{\Gamma(1 + \gamma L_h/\cos \theta)} - t\right)^2 + \left(t \frac{|\chi_{hi}|}{\chi_{hr}}\right)^2}\right], \quad (6)$$

где  $L_h$  – расстояние кристалл–детектор.

Условие фокусировки в этом случае определяется следующим выражением:

$$\frac{L_0 \exp(-\pi n y / z_0)}{\Gamma(1 - \gamma L_0 / \cos \theta)} + \frac{L_h \exp(-\pi n y / z_0)}{\Gamma(1 + \gamma L_h / \cos \theta)} = t. \quad (7)$$

Интенсивность поля при удалении от кристалла постепенно уменьшается.

### 3. Численные расчеты

Распределение волнового поля внутри кристалла и сразу за кристаллом представлено на рис.1 и рис.2.

Численные расчеты проведены для кремния с границей кручения,

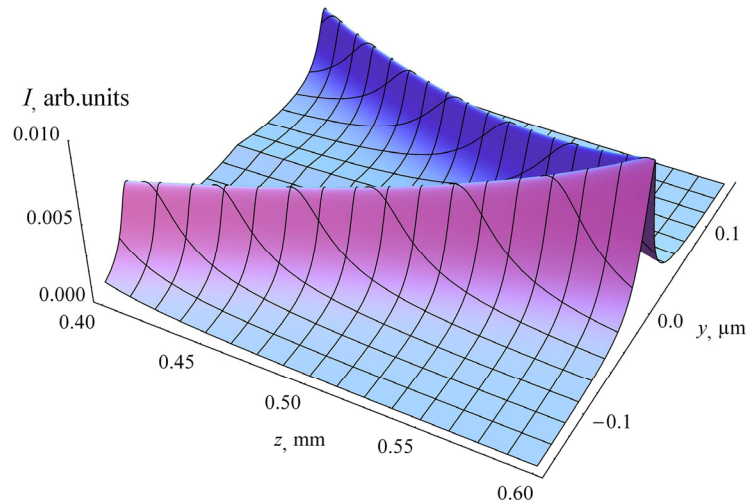


Рис.1. Распределение интенсивности дифрагированной волны в зависимости от глубины  $z$  внутри кристалла и координаты  $y$ .

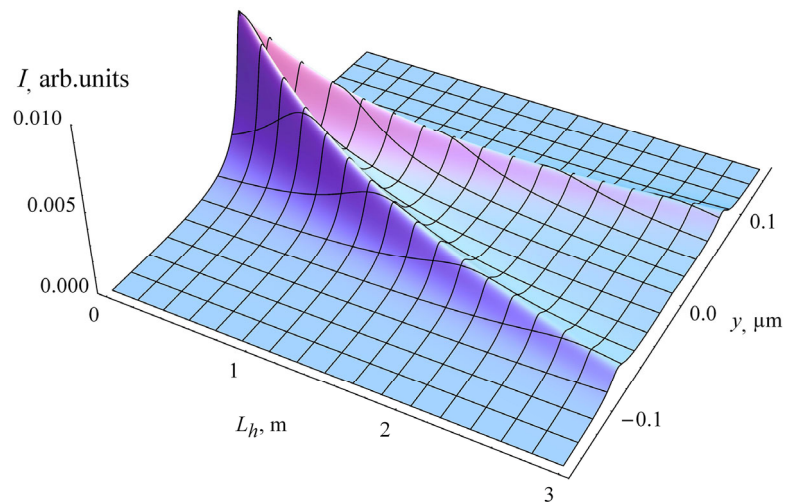


Рис.2. Распределение интенсивности дифрагированной волны в зависимости от расстояния  $L_h$  кристалл–детектор и координаты  $y$ .

перпендикулярной поверхности кристалла при  $n = 2$ . Излучение  $\text{CuK}\alpha$  ( $\lambda = 1.54056 \text{ \AA}$ ), отражение Si (111). При этом экстинкционная длина кристалла  $18.45 \text{ мкм}$ . Расстояние точечного источника от кристалла  $L_0 = 7 \text{ м}$ , период СР  $z_0 = 1.845 \text{ мкм}$ , толщина пластинки  $t = 0.6 \text{ мм}$ ,  $a_F = 5242.6 \text{ Км}^{-1}$ .

Кажущийся медленный рост интенсивности дифрагированного волнового поля в кристалле до фокуса необходимо сравнивать с влиянием поглощения кристалла. Несмотря на то, что мы имеем дело со слабо поглощаемой модой поля, с увеличением глубины в кристалле интенсивность должна уменьшаться, а наблюдаемый рост интенсивности обусловлен сходящимся характером лучей для данной моды.

Отметим, что рис.1 и рис.2 надо рассматривать как единое распределение интенсивности дифрагированной волны – сначала в зависимости от глубины  $z$  внутри кристалла, а потом, сразу за кристаллом, от расстояния  $L_h$  кристалл–детектор, поскольку имеет место непрерывность их распределения.

На рис.3 приведено распределение интенсивности дифрагированной волны на выходной поверхности кристалла.

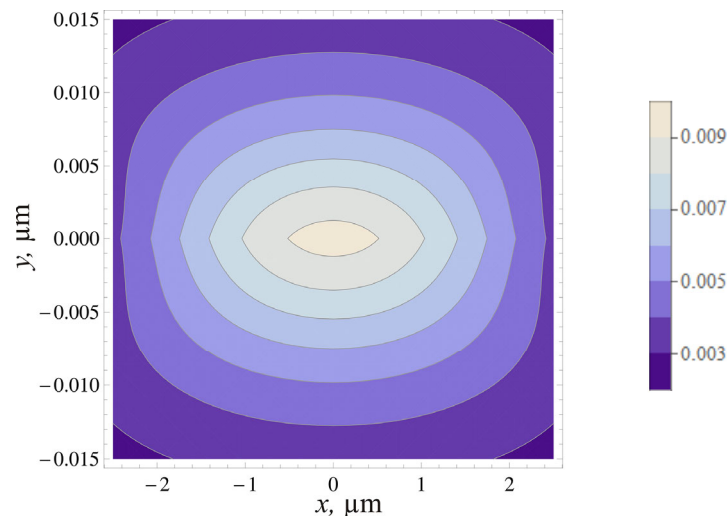


Рис.3. Распределение интенсивности дифрагированной волны на выходной поверхности кристалла.

Из рис.1 и рис.2 видно, что как внутри кристалла, так и в вакууме за кристаллом, дифрагированное волновое поле имеет вид двух расщепленных пучков, которые сливаются в едином фокусе. Такой характер дифрагированного волнового поля обусловлен наличием границы кручения.

Из рис.3 можно определить размеры фокуса на выходной поверхности кристалла. В направлении оси  $x$  размер фокуса равен приблизительно  $4 \text{ мкм}$ , а в направлении оси  $y$  – около  $20 \text{ нм}$ .

#### 4. Заключение

На примере дифракции сферической рентгеновской волны на кристалле с малоугловой границей кручения показано, что можно получить двумерный фокус на выходной поверхности кристалла. Для этого применен температурный градиент, перпендикулярный входной поверхности кристалла.

Отметим, что разные формы деформации, проводимые в плоскости дифракции, из-за ограниченности экстинкционной длины, являющейся мерой длины зоны формирования динамического дифракционного волнового поля, ограничивают размеры фокуса снизу и не могут давать значения меньше микрометра (горизонтальные размеры фокуса). В вертикальном направлении такого ограничения нет, и для размера фокуса можно получить значения порядка нанометра (вертикальные размеры фокуса). Поэтому при создании новых рентгенооптических элементов, имеющих маленький размер фокуса, следует использовать вертикальное направление, что, в частности, и рекомендовано в настоящей работе.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. **Л.В. Левонян.** Письма в ЖТФ, **7**, 269 (1981).
2. **А.М. Афанасьев, В.Г. Кон.** ФТТ, **19**, 1775 (1977).
3. **V.V. Aristov, V.I. Polovinkina, A.M. Afanas'ev, V.G. Kohn.** Acta Cryst., **A36**, 1002 (1980).
4. **L.V. Levonyan, H.M. Manukyan.** Acta Cryst., **A79**, 14 (2023).
5. **L.V. Levonyan, H.M. Manukyan.** J. Contemp. Phys., **59**, 214 (2024).
6. **D.M. Vardanyan, H.M. Petrosyan.** Acta Cryst., **A43**, 316 (1987).
7. **D.M. Vardanyan, H.M. Petrosyan.** Acta Cryst., **A43**, 322 (1987).
8. **X. Yan, H. Zhang.** Computational materials science, **48**, 773 (2010).
9. **C. Cui, X. Gong, F. Xia, W. Xu, L. Chen.** Engineering Fracture Mechanics, **243**, 107509 (2021).
10. **C. Cui, Q. Yu, W. Wang, W. Xu, L. Chen.** Vacuum, **184**, 109874 (2021).
11. **X. Long, X. Liu, W. Zhang, Y. Peng, G. Wang.** Computational Materials, **173**, 109411 (2020).
12. **G. Poletaev, Ir. Zorya, R. Rakitin.** Computational Materials Science, **148**, 184 (2018).
13. **G.M. Poletaev, I.V. Zorya, R.Y. Rakitin.** Letters on Materials, **10**, 543 (2020).
14. **V.V. Margaryan, S.N. Noreyan, V.R. Kocharyan, Yu.M. Cherepennikov, M.H. Mesropyan, A.E. Movsisyan, V.N. Aghabekyan, A.M. Mamyan, K.G. Trouni.** J. Contemp. Phys., **59**, 332 (2024).
15. **J.P. Hirth, J. Lothe.** Theory of Dislocations. New York, McGraw-Hill, 1968.
16. **D. McLean.** Grain Boundaries in Metals. Oxford, Clarendon Press, 1957.
17. **А.А. Русаков.** Рентгенография металлов. Москва, Атомиздат, 1977.
18. **А.Н. Орлов.** Введение в теорию дефектов в кристаллах. Москва, Высшая школа, 1983.
19. **S. Amelinckx, W. Dekeyser.** Solid State Phys., **8**, 325 (1959).
20. **P. Penning, D. Polder.** Philips Repts., **16**, 419 (1961).

ՌԵՆՏԳԵՆՅԱՆ ՓՆՋԻ ԵՐԿՉԱՓ ԿԻՉԱԿԵՏՈՒՄԸ ՈԼՈՐՄԱՆ ՍԱՀՄԱՆՈՎ  
ԲՅՈՒՐԵՂԻ ԵԼՔԻ ՄԱԿԵՐԵՎՈՒՅԹԻ ՎՐԱ

Լ.Վ. ԼԵՎՈՆՅԱՆ, Հ.Մ. ՄԱՆՈՒԿՅԱՆ

Հետազոտված է գնդաձև ռենտգենյան ալիքի երկչափ դիֆրակտային կիզակետման դեպք, երբ կիզակետը գտնվում է բյուրեղի ելքի մակերևույթին: Կիզակետումն իրականացված է փոքրանկյունային ոլորման սահման ունեցող բյուրեղում ջերմաստիճանային գրադիենտի կիրառմամբ: Ցույց է տրված, որ դիֆրակտային հարթությանն ուղղահայաց ուղղությամբ կիզակետի չափերը նանոմետրերի կարգի են:

TWO-DIMENSIONAL FOCUSING OF AN X-RAY BEAM ON THE EXIT SURFACE  
OF A CRYSTAL WITH A TWIST BOUNDARY

L.V. LEVONYAN, H.M. MANUKYAN

A two-dimensional diffraction focusing of a spherical X-ray wave is investigated with the focus located on the exit surface of the crystal. Focusing is achieved using a crystal with a low-angle twist boundary and a temperature gradient. The focal image is recorded immediately behind the crystal. It is shown that the focal dimensions in the direction perpendicular to the diffraction plane are of the order of nanometers.

## **АНАЛИЗ ПОВЕРХНОСТНЫХ СОСТОЯНИЙ КРИСТАЛЛА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ИДЕЙ ДИНАМИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ДИФРАКЦИИ**

**М.К. БАЛЯН\***

Ереванский государственный университет, Институт Физики, Ереван, Армения

\*e-mail: mbalyan@ysu.am

(Поступила в редакцию 12 ноября 2025 г.)

Динамическая теория дифракции электронов в искажённых кристаллах используется для анализа электронных состояний в ограниченных деформированных кристаллах. На основе представленной теории исследованы поверхностные состояния почти свободных электронов в полубесконечном кристалле. В дополнение к результатам, известным в теории блоховского волнового формализма с комплексным волновым вектором, получены некоторые новые результаты. В частности, показано, что поверхностные состояния могут реализоваться лишь при достаточно малых углах Брэгга и получена оценка этого угла. Оценена также ширина области пространственной локализации электронов вблизи поверхности, что составляет несколько десятков ангстрем.

### **1. Введение**

Известно, что волновое уравнение электрона в кристалле совпадает с волновым уравнением для внешнего электрона, дифрагирующего в кристалле. В бесконечном идеальном кристалле решением волнового уравнения для электрона внутри кристалла, как и для внешнего электрона, дифрагирующего в идеальном кристалле, является волна Блоха [1, 2]. Однако при решении волнового уравнения для внутреннего электрона энергия неизвестна и должна быть найдена с использованием соответствующих стандартных условий, налагаемых на волновую функцию электрона. Для внешнего электрона, дифрагирующего в кристалле, энергия известна, и решение должно быть найдено с использованием граничных условий на поверхности кристалла. В обоих случаях необходимо решить одно и то же волновое уравнение. Хорошо известно, что для электронов, дифрагирующих в кристалле, теория дифракции распространяется на случаи, когда кристалл деформирован, или в кристалле дифрагирует падающая волна с произвольной амплитудой. Теория динамической дифракции для искажённых кристаллов, или дифракции неплоских волн, так называемая теория модулированных волн, была разработана в работах [3, 4]. Для внутренних электронов искажённых кристаллов или кристаллов конечных размеров теория Такаги [3] может быть расширена для анализа электронных состояний и нахождения их энергий в кристалле. Таким образом, как и в динамической теории дифракции, для определения внутренних электронных состояний можно выделить следующие случаи: кристаллы, ограниченные поверхностями; кристаллы, находящиеся под внешним воздействием

(градиент температуры, изгиб кристалла и т. д.), и упругие деформации вокруг дефектов кристалла (дислокации, точечные дефекты и т. д.). Необходимо также заметить, что большой интерес представляет также исследование состояний электронов вблизи поверхности кристалла (так называемые поверхностные состояния) [5, 6], а также в кристаллических наноструктурах, которые имеют большое прикладное значение в электронике [7–9]. Причем важно изучение электронных состояний как в идеальных, так и в деформированных нанокристаллах [10, 11].

В данной работе мы применяем теорию динамической дифракции Такаги для определения состояний электрона в неидеальном кристалле, который также может иметь границы. Более подробно теория анализируется в двухволновом приближении в рамках теории почти свободных электронов. Она применяется для определения электронных состояний у поверхности кристалла [5, 6]. В настоящей статье раскрываются некоторые новые особенности поверхностных электронных состояний кристаллов.

## 2. Теория модулированных волн в неидеальных кристаллах

Волновое уравнение для электрона в кристалле имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V(\mathbf{r})\psi = \varepsilon\psi, \quad (1)$$

где  $\psi$  – волновая функция,  $V(\mathbf{r})$  – потенциальная энергия, а  $\varepsilon$  – энергия электрона. Это уравнение описывает как внешние электроны, дифрагирующие в кристалле, так и электроны самого кристалла. Для дифракции внешних электронов энергия задана, и следует найти волновую функцию, удовлетворяющую граничным условиям. Однако для внутреннего электрона необходимо найти энергию и волновую функцию. Волновая функция должна быть непрерывной с непрерывными производными и ограниченной в пространстве. В идеальных кристаллах  $V(\mathbf{r})$  – периодическая функция, которую можно разложить в ряд Фурье по векторам обратной решетки  $\mathbf{g}$ :

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}} V_{\mathbf{g}} e^{i\mathbf{g}\mathbf{r}}. \quad (2)$$

Волновая функция в таком кристалле представляет собой волну Блоха:

$$\psi = \sum_{\mathbf{g}} \psi_{\mathbf{g}} e^{i\mathbf{k}_{\mathbf{g}}\mathbf{r}}, \quad (3)$$

где  $\psi_{\mathbf{g}}$  – постоянные амплитуды,  $\mathbf{k}_{\mathbf{g}} = \mathbf{k} + \mathbf{g}$ ,  $\mathbf{k}$  – волновой вектор волны Блоха. Однако регулярность кристалла может быть нарушена, если кристалл имеет границы или кристалл не идеален. Для таких случаев разработана динамическая теория дифракции Такаги [3]. Потенциальная энергия  $V'(\mathbf{r})$  в неидеальном кристалле представляется как

$$V'(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} - \mathbf{u}(\mathbf{r})) = \sum_{\mathbf{g}} V_{\mathbf{g}} e^{-i\mathbf{g}\mathbf{u}} e^{i\mathbf{g}\mathbf{r}}, \quad (4)$$

где  $\mathbf{u}(\mathbf{r})$  – вектор смещения атомов в деформированном кристалле из положений равновесия в идеальном кристалле. Тогда вместо (3) волновую функцию можно представить в виде модулированной волны:

$$\psi = \sum_{\mathbf{g}} \psi_{\mathbf{g}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}_{\mathbf{g}}\mathbf{r}}, \quad (5)$$

где  $\psi_{\mathbf{g}}(\mathbf{r})$ , как и  $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ , являются слабо меняющимися величинами на атомных расстояниях. Подставляя (4) и (5) в (1) и разделяя члены, соответствующие каждому вектору обратной решётки, находим:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta\psi_{\mathbf{g}} + 2i\mathbf{k}_{\mathbf{g}}\nabla\psi_{\mathbf{g}} - \mathbf{k}_{\mathbf{g}}^2\psi_{\mathbf{g}}) + \sum_{\mathbf{g}'} V_{\mathbf{g}-\mathbf{g}'} e^{-i(\mathbf{g}-\mathbf{g}')\mathbf{u}} \psi_{\mathbf{g}'} = \varepsilon\psi_{\mathbf{g}}. \quad (6)$$

Это бесконечная система дифференциальных уравнений, которая обычно применяется для описания динамической дифракции электронов в неидеальных кристаллах. Однако эта система применима и к внутренним электронам и может быть использована для определения электронных состояний в деформированных кристаллах.

Амплитуды  $\psi_{\mathbf{g}}$  изменяются на макроскопических расстояниях, поэтому вторые производные амплитуд малы и ими можно пренебречь, и (6) приходит к уравнениям Такаги [3]:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(2i\mathbf{k}_{\mathbf{g}}\nabla\psi_{\mathbf{g}} - \mathbf{k}_{\mathbf{g}}^2\psi_{\mathbf{g}}) + \sum_{\mathbf{g}'} V_{\mathbf{g}-\mathbf{g}'} e^{-i(\mathbf{g}-\mathbf{g}')\mathbf{u}} \psi_{\mathbf{g}'} = \varepsilon\psi_{\mathbf{g}}. \quad (7)$$

Уравнения Такаги, как и уравнения (6), могут быть применены для описания динамической дифракции, а также для определения электронных состояний в неидеальных кристаллах.

Вводя амплитуды  $\psi_{\mathbf{g}}^e$  волновой функции в вакууме, можно записать уравнения для этих амплитуд (6) и (7) при  $V_{\mathbf{g}} = 0$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta\psi_{\mathbf{g}}^e + 2i\mathbf{k}_{\mathbf{g}}\nabla\psi_{\mathbf{g}}^e - \mathbf{k}_{\mathbf{g}}^2\psi_{\mathbf{g}}^e) = \varepsilon\psi_{\mathbf{g}}^e, \quad (8a)$$

а также в случае медленного изменения амплитуд  $\psi_{\mathbf{g}}^e$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(2i\mathbf{k}_{\mathbf{g}}\nabla\psi_{\mathbf{g}}^e - \mathbf{k}_{\mathbf{g}}^2\psi_{\mathbf{g}}^e) = \varepsilon\psi_{\mathbf{g}}^e. \quad (8b)$$

### 3. Двухволновое приближение и модель почти свободных электронов в неидеальном кристалле

Воспользуемся двухволновым приближением, когда  $\mathbf{k}_h^2 \approx \mathbf{k}^2$  для дифракционного вектора  $\mathbf{g} = \mathbf{h}$ . В этом случае существуют две сильные амплитуды: одна для  $\mathbf{g} = 0$ , а вторая для  $\mathbf{g} = \mathbf{h}$ . Уравнения для этих амплитуд в неидеальном кристалле получаются из (6):

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta\psi_0 + 2i\mathbf{k}\nabla\psi_0 - \mathbf{k}^2\psi_0) + V_0\psi_0 + V_h e^{i\mathbf{h}\mathbf{u}}\psi_h &= \varepsilon\psi_0, \\ -\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta\psi_h + 2i\mathbf{k}_h\nabla\psi_h - \mathbf{k}_h^2\psi_h) + V_0\psi_h + V_h e^{-i\mathbf{h}\mathbf{u}}\psi_0 &= \varepsilon\psi_h, \end{aligned} \quad (9)$$

и представляют собой уравнения двухволновой динамической дифракции в неидеальных кристаллах. Однако они одновременно определяют электронные

состояния и значения энергии внутренних электронов в деформированном кристалле в модели почти свободных электронов в двухволновом приближении.

Амплитуды в вакууме (потенциальная энергия равна нулю) удовлетворяют уравнениям

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta\psi_0^e + 2i\mathbf{k}\nabla\psi_0^e - \mathbf{k}^2\psi_0^e) &= \varepsilon\psi_0^e, \\ -\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta\psi_h^e + 2i\mathbf{k}_h\nabla\psi_h^e - \mathbf{k}_h^2\psi_h^e) &= \varepsilon\psi_h^e. \end{aligned} \quad (10)$$

Этот подход (т.е. учет производных второго порядка) был использован в [15] для исследования двухволновой рентгеновской динамической дифракции в симметричном по Лауэ случае в условиях зеркального отражения.

#### 4. Электронные состояния вблизи поверхности полубесконечного кристалла

Одним из неизбежных нарушений периодичности кристалла является его граница. Рассмотрим полубесконечный кристалл. Электроны вблизи поверхности кристалла могут иметь энергии, лежащие в запрещённой зоне. Соответствующие волновые функции локализованы вблизи поверхности кристалла по обе стороны. Эти состояния называются поверхностными состояниями электронов [12]. В работах [5, 6] было доказано, что в кристаллах с поверхностями одна из компонент волнового вектора (перпендикулярная поверхности) может быть комплексной. В этом случае волновая теория Блоха переписывается с использованием волнового вектора с комплексной компонентой.

Используя (9) и (10), проанализируем поверхностные состояния в полубесконечном идеальном кристалле с  $\mathbf{u} = 0$ . Рассмотрим случай, когда  $\mathbf{k}$  удовлетворяет точному условию Брэгга  $(\mathbf{k} + \mathbf{h})^2 = \mathbf{k}^2$ . Из этого условия следует что  $2\mathbf{k}\mathbf{h} + \mathbf{h}^2 = 0$ . Схема кристалла и волновых векторов, а также система координат показаны на рис.1а и рис.1б. Вектор дифракции перпендикулярен поверхности кристалла. В теории дифракции схемы, показанные на рис.1а и рис.1б, обычно называются симметричной дифракцией Брэгга [13, 14]. Потенциальная энергия электрона в кристалле имеет вид

$$V(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0, & z < 0 \\ \sum_{\mathbf{g}} V_{\mathbf{g}} e^{i\mathbf{g}\mathbf{r}}, & z > 0. \end{cases} \quad (11)$$

Фактически, в двухволновом приближении для  $z > 0$  мы используем потенциальную энергию электрона в виде

$$V(z) = V_0 + V_h e^{ihr} + V_h^- e^{-ihr}. \quad (12)$$

Вектор дифракции имеет компоненты  $h_x = 0$ ,  $h_z = \pm h$ , где  $h = 2\pi/d$ , а  $d$  – расстояние между отражающими атомными плоскостями. На рис.1а вектор  $\mathbf{h}$  направлен против оси  $z$ , так что  $h_z = -h = -2\pi/d$ , а на рис.1б вектор  $\mathbf{h}$

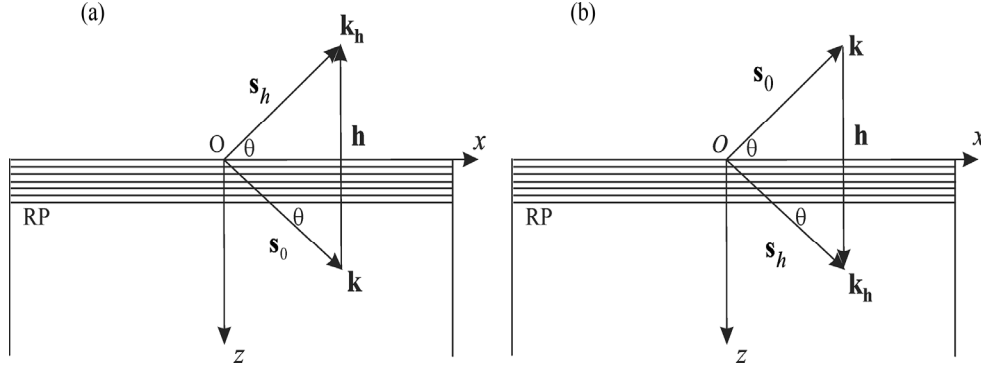


Рис.1. Схема двухволновой дифракции почти свободных электронов в полубесконечном кристалле. Показаны некоторые отражающие атомные плоскости (RP), волновые векторы  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{k}_h$ , вектор дифракции  $\mathbf{h}$ , система координат в плоскости ( $xOz$ ), образованной волновыми векторами; единичные векторы  $\mathbf{s}_0$  и  $\mathbf{s}_h$ . Ось  $Oy$  перпендикулярна плоскости дифракции. (a) Волновой вектор  $\mathbf{k}$  направлен внутрь кристалла; (b) волновой вектор  $\mathbf{k}$  направлен наружу от кристалла.

направлен вдоль оси  $z$ , так что  $h_z = h = 2\pi/d$ . Компонентами волновых векторов для первого случая являются  $k_x = k \cos\theta$ ,  $k_z = k \sin\theta$ ,  $k_{hx} = k \cos\theta$ ,  $k_{hz} = -k \sin\theta$ , а для второго случая –  $k_z = -k \sin\theta$ ,  $k_{hz} = k \sin\theta$  при тех же значениях  $x$  компонентов. Угол Брэгга  $\theta$  определяется из условия  $2\mathbf{k}\mathbf{h} + \mathbf{h}^2 = 0$  или  $2d \sin\theta = \lambda_0$ , где  $\lambda_0 = 2\pi/k$ .

Волновая функция в кристалле имеет вид

$$\psi = \psi_0(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \psi_h(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}_h\mathbf{r}} e^{i\mathbf{h}\mathbf{r}}, \quad (13)$$

а вне кристалла

$$\psi = \psi_0^e(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \psi_h^e(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}_h\mathbf{r}} e^{i\mathbf{h}\mathbf{r}}. \quad (14)$$

#### 4.1. Решение внутри кристалла

В кристалле уравнения (9) можно представить в виде

$$\Delta\psi_0 + 2ik \frac{\partial\psi_0}{\partial s_0} + \kappa^2 E\psi_0 - \kappa^2 V_h \psi_h = 0, \quad (15)$$

$$\Delta\psi_h + 2ik \frac{\partial\psi_h}{\partial s_h} + \kappa^2 E\psi_h - \kappa^2 V_h \psi_0 = 0,$$

где  $\kappa^2 = 2m/\hbar^2$  и  $E = \left( \varepsilon - V_0 - \frac{\mathbf{k}^2}{\kappa^2} \right)$ . Как и в теории дифракции [3] в (15) введены

единичные векторы  $\mathbf{s}_0 = \mathbf{k}/k$  и  $\mathbf{s}_h = \mathbf{k}_h/k$  (рис.1.a и рис.1.b), в соответствии с чем  $\mathbf{k}\nabla = k\partial/\partial s_0$  и  $\mathbf{k}_h\nabla = k\partial/\partial s_h$ . Косоугольные координаты  $s_0$  и  $s_h$  являются координатами точки в косоугольной координатной системе  $\mathbf{s}_0 O \mathbf{s}_h$ . Имеем  $k\partial/\partial s_0 = k \cos\theta \partial/\partial x + k_z \partial/\partial z$  и  $k\partial/\partial s_h = k \cos\theta \partial/\partial x + k_{hz} \partial/\partial z = k \cos\theta \partial/\partial x - k_z \partial/\partial z$ .

Будем искать решение (15) в виде

$$\Psi_{0,h} = A_{0,h} e^{i\lambda z}, \quad (16)$$

где  $A_0$ ,  $A_h$  и  $\lambda$  – некоторые константы. Подстановка (16) в систему (15) для определения  $A_0$  и  $A_h$  приводит к системе линейных алгебраических уравнений:

$$\begin{aligned} (\lambda^2 - \kappa^2 E + 2k_z \lambda) A_0 + \kappa^2 V_{\bar{h}} A_h &= 0, \\ \kappa^2 V_h A_0 + (\lambda^2 - \kappa^2 E - 2k_z \lambda) A_h &= 0. \end{aligned} \quad (17)$$

Система (17) имеет решение, отличное от нуля, если определитель системы равен нулю:

$$(\lambda^2 - \kappa^2 E)^2 - 4k_z^2 \lambda^2 \sin^2 \theta - \kappa^4 V_h V_{\bar{h}} = 0. \quad (18)$$

Отсюда находим:

$$\lambda = \pm \sqrt{2k_z^2 + \kappa^2 E \pm \sqrt{(2k_z^2 + \kappa^2 E)^2 + \kappa^4 V_h V_{\bar{h}} - \kappa^4 E^2}}. \quad (19)$$

С учетом (16) в решении  $\Psi_0(\mathbf{r}) e^{ikr}$  для  $z$  компоненты волнового вектора получим  $\pm k \sin \theta + \lambda$ . Во многих случаях  $k \sin \theta > \lambda$ . Если в (19) под знаком квадратного корня выбрать знак «+», получим  $\lambda \approx \pm 2k \sin \theta$ , а при выборе «-» получим  $\lambda \approx 0$ . Поэтому следует взять знак «-» под квадратным корнем, чтобы получить волну, распространяющуюся в глубь кристалла, или распространяющуюся из кристалла в вакуум. Подобным образом, в случае, когда  $k \sin \theta$  порядка  $\lambda$ , под знаком квадратного корня берется знак «-». Мы ищем поверхностные состояния, для которых  $\lambda = iq$  с  $q > 0$ . Поэтому перед квадратным корнем берется знак «+». В этом случае амплитуда будет уменьшаться при распространении волны вглубь кристалла. Таким образом

$$\lambda = iq = \sqrt{2k_z^2 + \kappa^2 E - \sqrt{(2k_z^2 + \kappa^2 E)^2 + \kappa^4 V_h V_{\bar{h}} - \kappa^4 E^2}}. \quad (20)$$

Кроме того, для энергии из (18) имеем

$$\kappa^2 (\varepsilon - V_0) = k^2 + \lambda^2 \pm \sqrt{\kappa^4 V_h V_{\bar{h}} + 4k_z^2 \lambda^2}. \quad (21)$$

В бесконечном кристалле  $\lambda = 0$  и значения энергии равны

$$\varepsilon = V_0 + \frac{k^2}{\kappa^2} \pm |V_h|. \quad (22)$$

В кристаллах с границами мы ищем состояния с энергиями, лежащими в запрещённой зоне, которая определяется уравнением (21). Как  $\lambda$ , так и энергия  $\varepsilon$  неизвестны и должны быть определены.

#### 4.2. Решение вне кристалла

Вне кристалла ( $z < 0$ ) потенциальная энергия электрона  $V(\mathbf{r}) = 0$ . Амплитуды волновых функций удовлетворяют уравнениям (см. (10))

$$\begin{aligned} \Delta \Psi_0^e + 2ik \frac{\partial \Psi_0^e}{\partial s_0} + \kappa^2 E \Psi_0^e &= 0, \\ \Delta \Psi_h^e + 2ik \frac{\partial \Psi_h^e}{\partial s_h} + \kappa^2 E \Psi_h^e &= 0. \end{aligned} \quad (23)$$

Решения (23) ищем в виде

$$\begin{aligned}\Psi_0^e &= A_0^e e^{i\lambda_0^{(e)}z}, \\ \Psi_h^e &= A_h^e e^{i\lambda_h^{(e)}z}.\end{aligned}\quad (24)$$

Подстановка (24) в (23) приводит к уравнениям

$$\begin{aligned}\lambda_0^{(e)2} + 2k_z\lambda_0^{(e)} - \kappa^2 E &= 0, \\ \lambda_h^{(e)2} - 2k_z\lambda_h^{(e)} - \kappa^2 E &= 0.\end{aligned}\quad (25)$$

Из (25) следует, что

$$\begin{aligned}\lambda_0^{(e)} &= -k_z \pm \sqrt{\kappa^2 \varepsilon - k^2 \cos^2 \theta}, \\ \lambda_h^{(e)} &= k_z \pm \sqrt{\kappa^2 \varepsilon - k^2 \cos^2 \theta}.\end{aligned}\quad (26)$$

Волновая функция в вакууме

$$\Psi^e = A_0^e e^{i\lambda_0^{(e)}z} e^{ikr} + A_h^e e^{i\lambda_h^{(e)}z} e^{ikr}.\quad (27)$$

Из (26) видно, что обе волны  $A_0^e e^{i\lambda_0^{(e)}z} e^{ikr}$  и  $A_h^e e^{i\lambda_h^{(e)}z} e^{ikr}$  имеют одинаковую зависимость от координат. Таким образом, волновую функцию в вакууме можно представить в форме

$$\Psi^e = A^e e^{ikx \cos \theta} e^{\pm iz \sqrt{\kappa^2 \varepsilon - k^2 \cos^2 \theta}}.\quad (28)$$

Так как мы ищем решения, которые уменьшаются в вакууме с увеличением  $|z|$ , мы должны учесть мнимые значения  $\sqrt{\kappa^2 \varepsilon - k^2 \cos^2 \theta}$ . Волна будет уменьшаться с увеличением  $|z|$ , если мы берем знак « $\leftarrow$ » впереди  $\sqrt{\kappa^2 \varepsilon - k^2 \cos^2 \theta}$  в экспоненте (28). Таким образом, решение в вакууме имеет форму

$$\Psi^e = A^e e^{ikx \cos \theta} e^{-iz \sqrt{\kappa^2 \varepsilon - k^2 \cos^2 \theta}}.\quad (29)$$

## 5. Определение поверхностных состояний с использованием граничных условий

В кристалле решение имеет вид (13) и (16), а вне кристалла – вид (29). Волновая функция и её производные по  $z$  должны быть непрерывны на поверхности кристалла  $z = 0$ , т.е.

$$\begin{aligned}\Psi(x, 0) &= \Psi^e(x, 0), \\ \left. \frac{\partial \Psi^e}{\partial z} \right|_{z=0} &= \left. \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right|_{z=0}.\end{aligned}\quad (30)$$

Используя решения (14), (16) и (29), из (30) имеем:

$$\begin{aligned}A^e &= A_0 + A_h, \\ (\lambda_0^e + k_z) A^e &= (\lambda + k_z) A_0 + (\lambda - k_z) A_h.\end{aligned}\quad (31)$$

Из первого уравнения (17) следует, что

$$A_h = a A_0,\quad (32)$$

где

$$a = -\frac{\lambda^2 - \kappa^2 E + 2k_z \lambda}{\kappa^2 V_{\bar{h}}}. \quad (33)$$

Таким образом, из (31) и (32) следует, что

$$\lambda_0^e + k_z = \lambda + k_z \left(1 - \frac{2a}{1+a}\right). \quad (34)$$

Следует отметить, что на самом деле в полупространстве  $z > 0$  мы используем выражение для потенциальной энергии

$$V = V_0 + V_h e^{ih_z z} + V_{\bar{h}} e^{-ih_z z}, \quad (35)$$

где  $V_{\bar{h}} = V_h^*$  и  $V_0 < 0$ . Потенциальная энергия (35) может быть симметрично продолжена в область полупространства  $z < 0$  [5]. В результате коэффициенты Фурье можно принять действительными величинами, т.е.  $V_h = V_{\bar{h}}$ . Из (33) следует

$$-\frac{2a}{1+a} = -1 + \frac{\kappa^2 V_h \pm \sqrt{\kappa^4 V_h^2 + 4k_z^2 \lambda^2}}{2k_z \lambda}. \quad (36)$$

Из соотношений (34), (21), (26) и (29), находим:

$$-\sqrt{-k_z^2 + \kappa^2 |V_0| + q^2} \mp \sqrt{\kappa^4 V_h^2 - 4k_z^2 q^2} = q + \frac{\kappa^2 V_h \mp \sqrt{\kappa^4 V_h^2 - 4k_z^2 q^2}}{2q}. \quad (37)$$

Рассмотрим случай  $V_h > 0$ . В правой части (37) имеем положительную величину, а в левой — отрицательную. Следовательно, в этом случае поверхностные состояния отсутствуют. Далее, рассмотрим случай  $V_h < 0$ . Возводя (37) в квадрат, находим

$$|V_0| + |V_h| = -\frac{2k_z^2 |V_h|}{-\kappa^2 |V_h| \pm \sqrt{\kappa^4 V_h^2 - 4k_z^2 q^2}}. \quad (38)$$

Из (38) следует, что

$$q = \frac{|V_h|}{|V_0| + |V_h|} \sqrt{\kappa^2 (|V_0| + |V_h|) - k_z^2}. \quad (39)$$

Значения энергии получаются подстановкой (39) в (21). В результате

$$\kappa^2 (\varepsilon + |V_0|) = k^2 \cos^2 \theta + \left( \frac{k \sin \theta |V_0|}{|V_0| + |V_h|} \right)^2 + \frac{\kappa^2 |V_0| |V_h|}{|V_0| + |V_h|}, \quad (40a)$$

$$\kappa^2 (\varepsilon + |V_0|) = k^2 \cos^2 \theta + \left( \frac{k \sin \theta (|V_0| + 2|V_h|)}{|V_0| + |V_h|} \right)^2 - \frac{\kappa^2 |V_h| (|V_0| + 2|V_h|)}{|V_0| + |V_h|}. \quad (40b)$$

В (21) значение энергии (40a) соответствует знаку «+», а значение (40b) — знаку «-». Как было показано в работе [7], прямая подстановка (40a) и (40b) в (37) показывает, что только (40a) удовлетворяет (37). Значение (40b) соответствует отрицательному значению  $q$ . Эти результаты, впервые полученные здесь в рамках теории модулированных волн, были получены в работе [6] с использованием волн Блоха с комплексной поперечной составляющей волнового вектора. Однако

здесь мы продемонстрируем некоторые новые результаты.

Ясно, что  $q$  должно быть действительным. Следовательно, в (39) под квадратным корнем должна стоять положительная величина, то есть  $|k_z| < \kappa(|V_0| + |V_h|)^{1/2}$ . Итак,

$$\sin \theta < \frac{\kappa(|V_0| + |V_h|)^{1/2}}{k}. \quad (41)$$

Кроме того, необходимо взять знак «+» в (38), поскольку только значение энергии (40а) удовлетворяет требованиям поверхностного состояния. Тогда из (38) нетрудно найти, что

$$\sqrt{\kappa^4 V_h^2 - 4k_z^2 q^2} = \kappa^2 |V_h| - \frac{2k_z^2 |V_h|}{|V_0| + |V_h|}. \quad (42)$$

Поскольку левая часть (42) положительна, то должно выполняться следующее неравенство:  $|k_z| < \kappa(|V_0| + |V_h|)^{1/2} / \sqrt{2}$ . В сочетании с (41) получаем следующее ограничение на значения угла Брэгга, при которых могут реализовываться поверхностные состояния:

$$\sin \theta < \frac{\kappa(|V_0| + |V_h|)^{1/2}}{k\sqrt{2}}. \quad (43)$$

Это означает, что поверхностное состояние может реализоваться не для всех углов Брэгга, а только для тех, которые удовлетворяют условию (43). Таким образом, угол Брэгга должен быть достаточно мал или, другими словами, модуль поперечной составляющей волнового вектора  $k \sin \theta$  должен быть достаточно мал.

Теперь можно оценить ширину области пространственной локализации электрона вблизи поверхности. Эта ширина порядка  $1/(2q)$ . Согласно (39),  $q$  имеет порядок  $\kappa|V_h|^{1/2}$ . Полагая  $|V_h| \sim 10^{-4} k^2 / \kappa^2$  ( $k^2 / \kappa^2$  – энергия свободного электрона), и с учетом  $k \sim 2\pi/d$ , из (39) приходим к следующей оценке:  $q \sim 2\pi 10^8 \text{ м}^{-1}$ , и

$$1/(2q) \sim 10 \text{ \AA}. \quad (44)$$

Для значений угла Брэгга из (43) можно найти следующую оценку:  $\theta < 0.4^\circ$ .

Амплитуды  $A^e = (1+a)A_0$  и  $A_h = aA_0$  определяются через  $A_0$ , который можно получить из условия нормировки

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dz = 1. \quad (45)$$

О нормировке волновой функции см. также [6].

## 6. Заключение

Волновое уравнение электрона внутри кристалла совпадает с волновым уравнением внешнего электрона, динамически дифрагирующего в кристалле. Динамическая дифракция электрона в деформированном

конечном кристалле описывается уравнениями Такаги. Поскольку состояния электронов в кристаллах описываются тем же волновым уравнением, динамическая теория Такаги в деформированных кристаллах может быть применена для определения электронных состояний в деформированных или идеальных конечных кристаллах. В данной работе динамическая теория дифракции, основанная на приближении модулированных волн, применяется для определения электронных состояний вблизи поверхности полубесконечного кристалла. Рассматривается двухволновое приближение в рамках модели почти свободных электронов. Этот оригинальный метод был использован для получения известных результатов в теории твердого тела, основанных на блоховской волне с волновым вектором, имеющим комплексную поперечную составляющую. Кроме того, установлено, что поверхностные состояния электронов могут реализовываться при достаточно малых углах Брэгга. Это эквивалентно тому, что поперечная компонента волнового вектора, перпендикулярная поверхности кристалла, должна быть достаточно мала. Пространственный размер области локализации электрона вблизи поверхности оценивается величиной порядка десятков ангстрем. Определено также значение энергии в запрещенной зоне электрона в поверхностном состоянии, которое уже известно в теории. Полученные результаты не зависят от знака поперечной компоненты волнового вектора (перпендикулярной поверхности кристалла).

Выражаю благодарность проф. А.А. Киракосяну за критические замечания.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. **N.W. Ashcroft, D. Mermin.** Solid State Physics, Cornell University: Harcourt College Publishers, 2004.
2. **S.G. Davidson, I.D. Levin.**, Surface States, NY and London: Academic Press, 1970.
3. **S. Takagi.** J. Phys. Soc. Jpn., **26**, 1239 (1969).
4. **D. Taupin.** Bull. Soc. Franc. Miner. Crist., **87**, 469 (1964).
5. **A.W. Maue.** Z. Phys., **94**, 717 (1935).
6. **E.T. Goodwin.** Math. Proc. Camb. Philos. Soc., **35**, 205 (1939).
7. **S.S. Vyshnava, G. Pandluru, K.D. Kumar.** Luminescence **37**, 490 (2022).
8. **J. Wang, H. Ning, J. Wang, S.V. Kershaw, L. Jing, P. Xiao.** ACS Appl. Nano Mater., **5**, 5617 (2022).
9. **V.G. Dubrovskii, R.R. Reznik, I.V. Ilkiv, K.P. Kotlyar, I.P. Soshnikov, E.V. Ubyivovk, S.V. Mikushev, G.E. Cirlin.** Phys. Stat. Sol. Rapid Res. Lett., **16** 2100401 (2022).
10. **F. Yang.** Micro and Nanostructures, **177**, 207558 (2023).
11. **D. Tumanov, N. Vaish, H.A. Nguyen, Y. Curé, J.-M. Gérard, J. Claudon, F. Donatini, J.-Ph. Poizat.** Appl. Phys. Lett., **112**, 123102 (2018).
12. **I. Tamm.** Phys. Z. Sowjet., **1**, 732 (1932).
13. **A. Authier.** Dynamical Theory of X-ray Diffraction. Oxford, University Press, 2001.
14. **З.Г. Пинскер.** Рентгеновская кристаллооптика. Москва, Наука, 1982.
15. **M.K. Balyan, L.V. Levonyan.** Izvestia NAN RA, Fizika, **35**, 309 (2000).

ԲՅՈՒՐԵՂՆԵՐԻ ՄԱԿԵՐԵՎՈՒՅԹԱՅԻՆ ՎԻՃԱԿՆԵՐԻ ՎԵՐԼՈՒԾՈՒԹՅՈՒՆ  
ԴԻՆԱՄԻԿԱԿԱՆ ԴԻՖՐԱԿՑԻԱՅԻ ՏԵՍՈՒԹՅԱՆ ԳԱՂԱՓԱՐՆԵՐԻ  
ՕԳՏԱԳՈՐԾՄԱՄԲ

Մ.Կ. ԲԱԼՅԱՆ

Դեֆորմացված բյուրեղներում էլեկտրոնային դիֆրակցիայի դինամիկ տեսությունը հարմար է դեֆորմացված և սահմաններով բյուրեղներում էլեկտրոնային վիճակների վերլուծության համար: Ներկայացված տեսության հիման վրա ուսումնասիրվում են կիսասանվերջ բյուրեղում գրեթե ազատ էլեկտրոնների մակերևութային վիճակները: Կոմպլեքս ալիքային վեկտորով Բլոխի ալիքային ֆորմալիզմի տեսության մեջ հայտնի արդյունքներից բացի, ստացվել են նաև որոշ նոր արդյունքներ: Մասնավորապես, ցույց է տրվել, որ մակերևութային վիճակները կարող են իրականացվել միայն բավականաչափ փոքր Բրեգի անկյունների դեպքում: Ստացվել է այս անկյան գնահատական: Գնահատվել է նաև մակերեսին մոտ գտնվող էլեկտրոնների տարածական տեղայնացման տիրույթի մեծությունը: Պարզվել է, որ այն մի քանի տասնյակ անգստրեմի կարգի է:

ANALYSIS OF SURFACE STATES OF CRYSTALS USING IDEAS OF  
DYNAMICAL THEORY OF DIFFRACTION

M.K. BALYAN

The dynamical theory of electron diffraction in distorted crystals is suitable for the analysis of electronic states in deformed and surface-bounded crystals. Based on the presented theory, surface states of nearly free electrons in a semi-infinite crystal are investigated. In addition to the results known in the theory of Bloch wave formalism with a complex wave vector, some new results were obtained. In particular, it is shown that surface states can be realized only at sufficiently small Bragg angles. An estimate of this angle is obtained. The width of the spatial localization region of electrons near the surface is also estimated. It is found that it is of the order of several tens angstroms.

## **ИССЛЕДОВАНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК ГИБРИДНЫХ ФОТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ И ТЕПЛОВЫХ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЕЙ СОЛНЕЧНОЙ ЭНЕРГИИ**

**Р.Р. ВАРДАНЯН\*, Н.К. БАДАЛЯН, Д.С. ДАВТЯН**

Национальный политехнический университет Армении, Ереван, Армения

\*e-mail: ruben.vardanyan@polytechnic.am

(Поступила в редакцию 30 января 2026 г.)

В работе исследуются характеристики гибридных солнечных фотоэлектрически-тепловых (ФЭТ) преобразовательных модулей, которые по сравнению с обычными солнечными фотоэлектрическими модулями являются более энергоэффективными, за счет охлаждения солнечных элементов путем отвода тепла от нагретых солнечных элементов, а также получением дополнительной тепловой энергии. Показано, что при низких температурах окружающей среды, ниже некоторого критического значения, температура солнечных элементов ФЭТ модуля может быть выше температуры элементов обычного фотоэлектрического модуля (обратный процесс). Исследуется значение критической температуры окружающей среды для различных типов конструкций ФЭТ модулей (остеклённые, неостеклённые, с теплоизолированным и без теплоизолированного заднего слоя). Экспериментально показано, что критическая температура для ФЭТ модуля для модуля без теплоизолированного слоя составляет 21°C, а с теплоизолированным слоем 25°C. Для устранения негативного эффекта нагрева солнечных элементов необходимо учитывать рабочие температуры окружающей среды и выбирать соответствующие конструкции фотоэлектрических модулей и способы отвода тепла.

### **1. Введение**

Использование солнечной энергии имеет решающее значение для сдерживания изменения климата, снижения зависимости от ограниченных запасов ископаемого топлива и достижения энергетической независимости. Основными существующими технологиями использования солнечного излучения являются фотоэлектрическое (ФЭ) преобразование света непосредственно в электричество и тепловое преобразование солнечных лучей в тепло.

Главная проблема солнечной энергии заключается в эффективном сборе этой энергии и её экономически выгодном преобразовании в другие полезные формы. Для повышения эффективности, а также для увеличения срока службы ФЭ модулей, важно снижать рабочие температуры модулей. Хорошо известно, что в фотоэлектрических солнечных элементах, в основном изготовленных из кремния, большая часть поглощённого солнечного излучения (около 80%) не преобразуется в электричество, а способствует повышению температуры солнечных элементов, тем самым снижая их электрическую эффективность. Это неотъемлемый недостаток солнечных элементов — снижение производительности из-

за температуры. Повышенная рабочая температура ФЭ модулей также снижает срок их службы.

Для решения этой проблемы были разработаны различные технологии охлаждения, среди которых разработка гибридных фотоэлектрически-тепловых (ФЭТ) систем является перспективным решением [1–4]. Солнечный гибридный ФЭТ коллектор — это новая технология с высокой вероятностью стать эффективным методом производства электрической и тепловой энергии в ближайшем будущем. Гибридный ФЭТ модуль сочетает солнечный элемент, который преобразует солнечное излучение в электричество, с солнечным тепловым коллектором, который улавливает оставшуюся тепловую энергию и отводит тепло от солнечного элемента. В гибридных ФЭТ системах за счёт охлаждения солнечных элементов увеличивается выработка электроэнергии, а отводимое тепло используется, тем самым максимизируя отдачу от доступного солнечного излучения (см. рис.1).

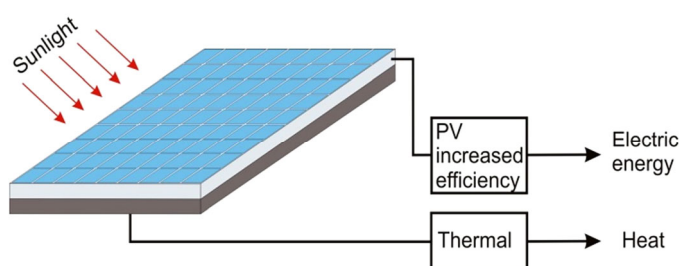


Рис.1. Гибридный фотоэлектрически-тепловой (ФЭТ) модуль.

Таким образом, фотоэлектрические и тепловые системы представляют собой двойные солнечные коллекторы с двумя полезными источниками энергии от одной системы (два в одном). По сравнению с обычными отдельными фотоэлектрическими и тепловыми системами, они обладают следующими преимуществами: улучшенная выработка электроэнергии — больше электроэнергии, чем в эквивалентной традиционной ФЭ системе; меньшая требуемая площадь крыши; повышенная эффективность системы за счёт одновременной выработки электрической и тепловой энергий; повышенная надёжность и срок службы ФЭ модулей за счёт снижения рабочей температуры модулей.

Проведено множество научных исследований, посвящённых изучению свойств солнечных гибридных ФЭТ коллекторов и систем [1–9]. Однако влияние температуры окружающей среды на характеристики ФЭТ коллекторов до конца не исследовано. Разработаны различные конструкции ФЭТ коллекторов: с покрытой (остеклённой) поверхностью, без покрытия (неостеклённые), с задним изоляционным слоем и без заднего изоляционного слоя. Во всех этих случаях тепловые возможности ФЭТ системы и её взаимодействие с окружающей средой различны. В зависимости от типа конструкции ФЭТ модуля эффект охлаждения солнечных элементов при разных температурах окружающей среды различен. Как показано в [10], существует критическая температура окружающей среды, ниже которой рабочая температура солнечных элементов гибридного ФЭТ коллектора выше по сравнению с температурой элементов обычного ФЭ модуля. Таким образом, основное преимущество ФЭТ системы при этих низких

температурах не реализуется. Значение указанной критической температуры в значительной степени зависит от конструкции ФЭТ системы, что необходимо учитывать при проектировании таких систем.

В настоящей работе исследуются характеристики различных гибридных ФЭТ систем в зависимости от температуры окружающей среды. Путём сравнения рабочих температур ФЭТ и ФЭ модулей анализируются характеристики различных гибридных ФЭТ систем.

## 2. Рабочие температуры ФЭТ и ФЭ модулей

ФЭТ системы, как правило, изготавливаются путём интеграции ФЭ модулей с тепловым коллекторным модулем с циркуляцией воды или воздуха. Существуют также системы, состоящие из материала с фазовым переходом или термоэлектрического генератора. Рассмотрим общий гибридный ФЭТ модуль, состоящий из ФЭ модуля с водяным тепловым коллектором, прикрепленным к нижней стороне ФЭ модуля (см. рис.2).

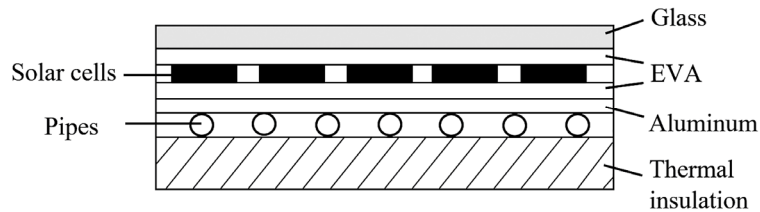


Рис.2. Гибридный ФЭТ модуль с теплоизолирующей задней панелью.

Рабочую температуру солнечных элементов гибридного ФЭТ модуля можно определить с помощью формулы [10]:

$$T_{PV/T} = \frac{1}{K1+K2} [F(\tau\alpha) + K1 T_{in} + K2 T_{amb}], \quad (1)$$

где  $K1 = 2mC / AS$ ,  $K2 = FU / G$ ,  $m$  — масса воды в накопительном баке,  $C$  — теплоёмкость жидкости,  $A$  — площадь солнечного ФЭТ коллектора, принимающего солнечные лучи,  $S$  — энергия солнечного излучения на квадратный метр,  $F$  — коэффициент отвода тепла ФЭТ коллектора,  $\tau\alpha$  — коэффициент эффективной светопрозрачности покрытия  $\tau$  и поглощательной способности коллектора  $\alpha$ ,  $U$  — общий коэффициент тепловых потерь коллектора,  $G$  — интенсивность солнечного излучения на единицу поверхности,  $T_{in}$  — температура на входе ФЭТ коллектора,  $T_{amb}$  — температура окружающей среды.

В соответствии с формулой (1), температура солнечного элемента зависит от всех тепловых параметров модуля. В свою очередь, все эти параметры зависят от конструкции ФЭТ коллектора.

Одной из основных целей применения гибридных ФЭТ коллекторов является снижение рабочей температуры солнечных элементов. Для анализа данного охлаждающего эффекта целесообразно сравнить температуру гибридного ФЭТ коллектора с температурой обычного ФЭ модуля при различных погодных условиях, то есть под воздействием различных температур окружающей среды.

Температура солнечных элементов в ФЭ модулях может быть рассчитана на основе NOCT (Nominal Operating Cell Temperature — номинальная рабочая

температура элемента). NOCT определяется как температура, достигаемая элементами модуля с разомкнутой цепью в стандартной эталонной среде, определяемой следующим образом: солнечное излучение  $800 \text{ Вт/м}^2$ , температура окружающей среды  $20^\circ\text{C}$ , скорость ветра  $1 \text{ м/с}$  и тип монтажа — с открытой тыльной стороной. Лучший модуль работает при NOCT  $33^\circ\text{C}$ , худший — при  $58^\circ\text{C}$ , а типичный модуль — при  $48^\circ\text{C}$ , соответственно. Приблизительное выражение для расчёта температуры элемента приведено в работе [11]:

$$T_{PV} = T_{amb} + G \frac{NOCT-20}{800}. \quad (2)$$

Таким образом, температура солнечного элемента в ФЭ модуле  $T_{PV}$  линейно возрастает с увеличением температуры окружающей среды, при этом наклон равен 1. Следует отметить, что в соответствии с уравнением (1) температура элементов в ФЭТ модуле также линейно возрастает с температурой окружающей среды, однако наклон меньше 1, поскольку он равен  $1 / (1 + K1 / K2)$ . Это означает, что существует точка пересечения этих двух прямых. Значение температуры окружающей среды, при котором  $T_{PV} = T_{PVТ}$ , мы называем критическим. Ниже этого значения температура элементов в гибридном ФЭТ модуле выше, чем в обычном ФЭ модуле [10].

Зависимости температуры солнечных элементов в гибридном ФЭТ модуле  $T_{PVТ}$  и ФЭ модуле  $T_{PV}$  от температуры окружающей среды, построенные по формулам (1) и (2), представлены на рис.3.

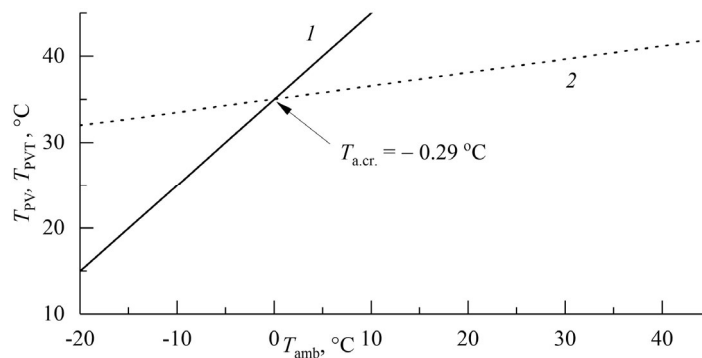


Рис.3. Зависимость температур солнечных элементов ФЭ модуля и остеклённого ФЭТ коллектора от температуры окружающей среды ( $G = 1000 \text{ Вт/м}^2$ , NOCT =  $48^\circ\text{C}$ , ёмкость бака ФЭТ системы составляет  $100 \text{ л}$ ,  $A = 2 \text{ м}^2$ ,  $T_{in} = 15^\circ\text{C}$ ,  $F(\tau\alpha) = 0.68$ ,  $FU = 4.9 \text{ Вт/м}^2\text{°C}$  [12]), 1 —  $T_{PV}$ , 2 —  $T_{PVТ}$ .

Из рис.3 видно, что из-за различных угловых коэффициентов двух прямых (1 и 0.16 для  $T_{PV}$  и  $T_{PVТ}$ , соответственно) существует точка пересечения при  $T_{amb} = -0.29^\circ\text{C}$ . Эта точка является критической ( $T_{a.cr.}$ ). Когда температура окружающей среды ниже  $T_{a.cr.}$ , элементы в ФЭТ коллекторе нагреваются сильнее, чем элементы обычного ФЭ модуля. При низких температурах окружающей среды, при  $T_{amb} < T_{a.cr.}$ , происходит обратный процесс, и электрический КПД ФЭТ коллектора становится ниже по сравнению с обычным ФЭ модулем. Эта точка пересечения определяет минимально рекомендуемую температуру для применения гибридной ФЭТ системы. Значение критической температуры зависит от тепловых параметров гибридных ФЭТ модулей, которые определяются типом конструкции ФЭТ коллекторов.

С использованием формул (1) и (2) построены зависимости рабочих температур солнечных элементов в ФЭ модуле ( $T_{PV}$ ), гибридных ФЭТ модулях без теплоизолирующего заднего слоя ( $T_{PVT}$ ) и с задней теплоизоляцией ( $T_{PVT+B.Sh.}$ ) от температуры окружающей среды (см. рис.4).

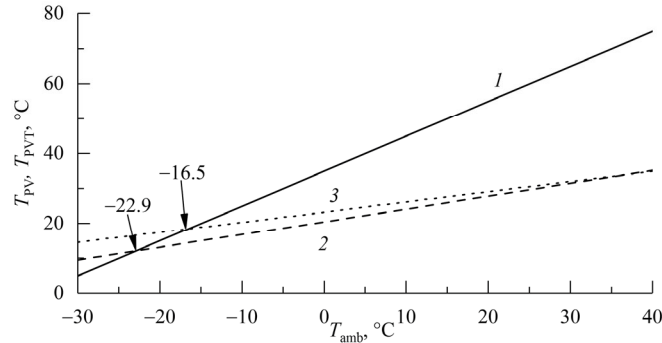


Рис.4. Температуры солнечных элементов гибридных ФЭТ модулей без теплоизолирующей задней панели ( $T_{PVT}$ ) и с теплоизолирующей задней панелью ( $T_{PVT+B.Sh.}$ ), а также температура элементов в обычном фотоэлектрическом модуле ( $T_{PV}$ ) в зависимости от температуры окружающей среды  $T_{amb}$  ( $G$ ,  $NOCT$ , емкость бака ФЭТ системы,  $A$  и  $T_{in}$  те же, что на рис.3, для неостекленной плоской поверхности без теплоизолятора  $F(\tau\alpha) = 0.45$ ,  $FU = 15 \text{ Вт/м}^2 \text{ } ^\circ\text{C}$  и для неостекленной плоской поверхности PVT+B.Sh. с теплоизолятором  $F(\tau\alpha) = 0.45$ ,  $FU = 10.15 \text{ Вт/м}^2 \text{ } ^\circ\text{C}$  [13]): 1 —  $T_{PV}$ , 2 —  $T_{PVT}$ , 3 —  $T_{PVT+B.Sh.}$ .

Из рис. 4 видно, что рабочий диапазон температуры  $T_{PVT}$  окружающей среды для солнечных элементов гибридных ФЭТ модулей без теплоизолирующего заднего слоя шире, чем для гибридных ФЭТ модулей ( $T_{PVT+B.Sh.}$ ) с теплоизолирующим задним слоем. Таким образом применение теплоизолирующего заднего слоя повышает температуру гибридного ФЭТ модуля и, следовательно, увеличивает тепловую мощность ФЭТ системы, однако электрическая эффективность солнечных элементов снижается при низких температурах окружающей среды.

Точки пересечения линий  $T_{PVT}$  (без теплоизолирующего заднего слоя) и  $T_{PVT+B.Sh.}$  (с теплоизолирующим задним слоем) с характеристикой обычного ФЭ модуля  $T_{PV}$  находятся при  $T_{amb} = -22.9^\circ\text{C}$  и  $T_{amb} = -16.5^\circ\text{C}$ , соответственно. Это критические температуры. Ниже этих температур гибридные ФЭТ модули оказываются теплее, чем обычный ФЭ модуль (обратный процесс), и, следовательно, электрическая эффективность ФЭТ модуля становится ниже эффективности ФЭ модуля. Можно сделать вывод, что ФЭТ модуль без теплоизолирующего заднего слоя может использоваться в более широком диапазоне температур окружающей среды, чем ФЭТ модуль с теплоизолирующим задним слоем.

Для сравнения рабочих температур солнечных элементов в неостеклённых и остеклённых плоских ФЭТ коллекторах, а также в ФЭТ коллекторах трубчатого вакуумного типа рассчитывались температуры этих систем по формуле (1). Для расчетов используются тепловые параметры, указанные в табл.1.

Полученные зависимости температуры, а также температура ФЭ модуля с открытой тыльной стороной в зависимости от температуры окружающей среды представлены на рис.5.

Как и ожидалось, критическая рабочая температура для неостеклённого

Табл.1. Тепловые параметры различных типов ФЭТ коллекторов, используемых для расчёта температур солнечных элементов

Тип ФЭТ коллектора	$F, \tau\alpha$	$FU, \text{Вт/м}^2 \text{ } ^\circ\text{C}$	Литература
Неостеклённый плоский	0.45	10.15	[12]
Остеклённый плоский	0.68	4.9	[11]
Вакуумная трубка	0.58	0.7	[11]

ФЭТ коллектора меньше, и, следовательно, рабочий диапазон неостеклённой ФЭТ системы является максимальным. Более высокие критические температуры имеют остеклённые ФЭТ коллекторы, а максимальное значение критической температуры имеет ФЭТ коллектор трубчатого вакуумного типа.

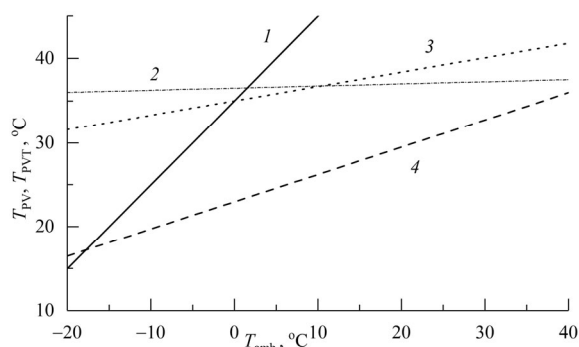


Рис.5. Зависимость температур солнечных элементов ФЭ модуля и ФЭТ коллекторов различных типов от температуры окружающей среды (условия эксперимента те же, что на рис.3 [11]), 1 —  $T_{PV}$ , 2 —  $T_{PVT}$  (вакуумная трубка), 3 —  $T_{PVT}$  (остеклённый плоский), 4 —  $T_{PVT}$  (неостеклённый плоский).

### 3. Экспериментальная установка

Влияние теплоизолирующего заднего слоя на рабочую температуру гибридного ФЭТ модуля исследовано экспериментально. Для сравнения также измерялась температура обычного ФЭ модуля в тех же условиях. Эксперименты проводились в естественных условиях, на открытой площадке исследовательской лаборатории «Полупроводниковые фотоэлектрические устройства» Национального политехнического университета Армении.

ФЭТ модуль изготовлен путём крепления теплового коллектора к задней стороне обычного ФЭ модуля (неостеклённого типа). С этой целью, а также для эталонного ФЭ модуля использовались поликристаллические ФЭ модули мощностью 275 Вт, произведённые в Армении. Гибридный ФЭТ модуль и ФЭ модуль размещались рядом друг с другом с углом наклона  $30^\circ$  к горизонту.

Измерения проводились для ФЭТ системы с теплоизолирующим задним слоем и без него на одном и том же ФЭТ модуле. Циркуляция воды в ФЭТ модуле осуществлялась с помощью принудительной циркуляции при расходе воды 1.5 л/мин. Измерялись следующие температуры:  $T_{PVT}$ ,  $T_{PVT+B.Sh.}$ ,  $T_{PV}$  и  $T_{amb}$ .

Для проведения измерений была разработана автоматизированная система.

В состав устройства входят микроконтроллер Arduino, датчики температуры типа DS18B20, модуль карты Micro SD для сохранения измеренных данных, а также блок питания.

Измерения выполнялись согласно заранее написанному программному коду для микроконтроллера. Измерения проводились с интервалом 20 с. Измеренные данные хранились на карте памяти Micro SD, откуда они импортировались в компьютер для обработки и анализа. Блок-схема экспериментальной установки с подключением датчиков температуры представлена на рис.6.

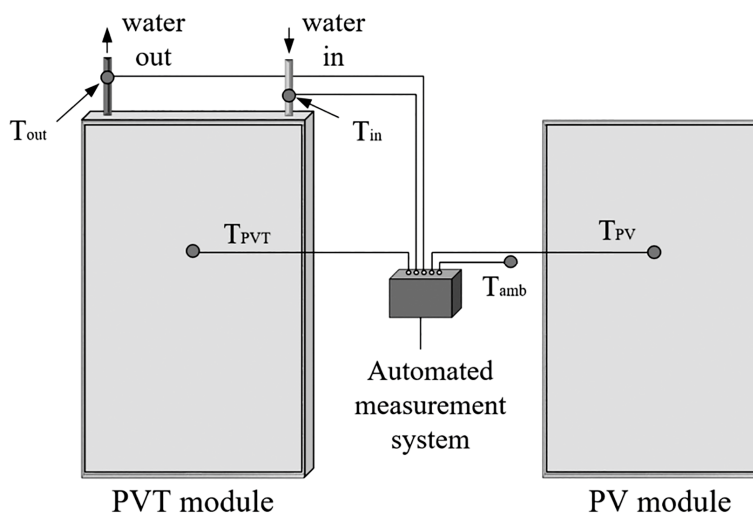


Рис.6. Блок-схема экспериментальной установки.

#### 4. Результаты измерений и их обсуждение

В течение дня было проведено 715 измерений температур ФЭТ модуля без теплоизолирующего заднего слоя, а также температуры эталонного ФЭ модуля и температуры окружающей среды. Линейные аппроксимации измеренных зависимостей температуры ФЭТ модуля без заднего слоя и эталонного ФЭ модуля от температуры окружающей среды приведены на рис.7а.

Зависимости  $T_{PV}$  и  $T_{PVT}$  от  $T_{amb}$  (линия 1 и 2 на рис.7а) показывают, что средняя температура гибридного ФЭТ модуля меньше по сравнению с температурой эталонного ФЭ модуля. Наклон линии для  $T_{PVT}$  меньше (1.116), чем угловой коэффициент линии, построенной для  $T_{PV}$  (1.6585).

Таким образом, можно сделать вывод, что в ФЭТ модуле с заданным режимом охлаждения (принудительная циркуляция воды 1.5 л/мин) средняя температура солнечных элементов меньше, чем температура эталонного ФЭ модуля. Однако при низких температурах окружающей среды, ниже примерно 21°C (критическая температура окружающей среды), температура элементов в ФЭТ модуле выше, чем в ФЭ модуле (обратный процесс). Для устранения этого негативного эффекта должен применяться соответствующий режим охлаждения для ФЭТ модуля.

Другая серия экспериментов с 740 измерениями температур проводилась,

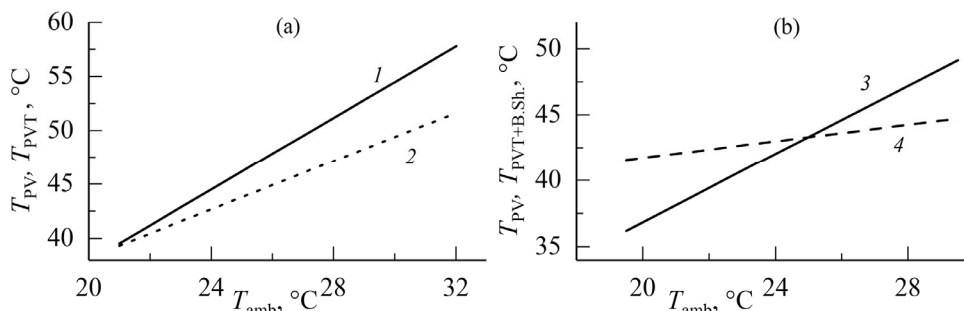


Рис.7. (а) Зависимости температур ФЭТ модуля без теплоизоляционной задней панели ( $T_{PVT} = 1.116T_{amb} + 15.918$ ) и ФЭ модуля ( $T_{PV} = 1.6585T_{amb} + 4.7267$ ) от температуры окружающей среды  $T_{amb}$ , (b) — зависимости температур ФЭТ модуля с теплоизолирующим задним слоем ( $T_{PVT+B.Sh.} = 0.3145T_{amb} + 35.449$ ) и ФЭ модуля ( $T_{PV} = 1.291T_{amb} + 11.05$ ) от температуры окружающей среды  $T_{amb}$ , 1 и 3 —  $T_{PV}$ , 2 —  $T_{PVT}$ , 4 —  $T_{PVT+B.Sh.}$ .

когда ФЭТ модуль был покрыт теплоизолирующим задним слоем. Измерялись также температуры эталонного ФЭ модуля и окружающей среды. Зависимости температуры ФЭТ модуля с задним слоем  $T_{PVT+B.Sh.}$  и эталонного ФЭ модуля  $T_{PV}$  от температуры окружающей среды представлены на рис.7б.

Линейная аппроксимация измеренных  $T_{PV}$  и  $T_{PVT+B.Sh.}$  (линия 3 и 4 на рис.7б) показывает, что в этом случае наклон линии для гибридного модуля  $T_{PVT+B.Sh.}$  меньше (0.3145), чем угловой коэффициент линии, построенной для эталонного ФЭ модуля  $T_{PV}$  (1.291).

По сравнению с ФЭТ модулем без заднего слоя (рис.7а) видно, что точка пересечения линейных аппроксимаций (критическая температура окружающей среды) происходит при более высокой температуре окружающей среды ( $T_{amb} = 25^{\circ}\text{C}$ ). Следует отметить, что аналогичный результат получен на теоретически построенной диаграмме (рис.4). Это означает, что при высоких температурах окружающей среды (выше  $25^{\circ}\text{C}$ ) средняя температура ФЭТ модуля с задним слоем меньше, чем температура эталонного ФЭ модуля. Но при температуре окружающей среды ниже  $25^{\circ}\text{C}$  ФЭТ модуль нагревается сильнее, чем эталонный ФЭ модуль (обратный процесс). Этот негативный эффект необходимо учитывать при разработке ФЭТ модулей и гибридных ФЭТ систем.

## 5. Заключение

Существует критическое значение температуры окружающей среды, ниже которого рабочая температура солнечных элементов гибридного ФЭТ коллектора выше, чем температура элементов обычного ФЭ модуля. При низких температурах окружающей среды, меньших, чем критическое значение, происходит обратный процесс, и электрическая эффективность ФЭТ коллектора становится ниже по сравнению с обычным ФЭ модулем. Критическая температура окружающей среды для гибридного ФЭТ модуля типа вакуумной трубки выше (малый диапазон рабочих температур), чем критическая температура остеклённого ФЭТ модуля (средний диапазон рабочих температур) и критическая температура неостеклённого ФЭТ модуля (широкий диапазон рабочих температур). Критическая температура для гибридного ФЭТ модуля без теплоизолирующего заднего слоя составляет  $21^{\circ}\text{C}$  и  $25^{\circ}\text{C}$  для ФЭТ модуля с теплоизолирующим слоем. Для

преодоления негативного эффекта нагрева солнечных элементов ФЭТ модулей (обратный процесс) и расширения рабочих температур необходимо учитывать рабочие температуры окружающей среды, выбрать соответствующие конструкции ФЭТ модулей и режимы отвода тепла.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. **M. Lammle, M. Herrando, G. Ryan.** Basic Concepts of PVT Collector Technologies, Applications and Markets. IEA SHC Task 60/PVT Systems, 1–25, 2020.
2. **M. Samykano.** Buildings, **13**, 1950 (2023).
3. **Z.U. Abdin, A. Rachid.** Energies, **14**, 1205 (2021).
4. **A. Mellor, D.A. Alvarez, I. Guarracino, A. Ramos, A.R. Lacasta, L.F. Llin, A.J. Murrell, D.J. Paul, D. Chemisana, C.N. Markides, N.J. Ekins-Daukes.** Solar Energy, **174**, 386 (2018).
5. **D. Zenhäusern, E. Banberger, A. Baggenstos.** Energy Systems with Photovoltaic-Thermal Solar Collectors, Final report, Swiss Energy, Bern, Switzerland, 1–89, 2017.
6. **C.A. Ramos, A.N. Alcaso, A.J. Cardoso.** IOP Conference Series: Earth and Environmental Science, **354**, 1 (2019).
7. **S.H. Bandaru, V. Becerra, S. Khanna, J. Radulovic, D. Hutchinson, R. Khusainov.** Energies, **14**, 1 (2021).
8. **M.G. Noxpanco, J. Wilkins, S. Riffat.** Future Cities and Environment, **6**, 9 (2020).
9. **S. Diwania, S. Agrawal, A. Siddiqui, S. Singh.** Intern. J. Energy and Environmental Engineering, **11**, 33 (2020).
10. **R.R. Vardanyan, V.K. Dallaqyan, M.G. Travajyan.** J. Contemp. Phys., **55**, 339 (2020).
11. **R.G. Ross.** Flat-Plate Photovoltaic Array Design Optimization, Proceedings of the 14th IEEE Photovoltaic Specialists Conference, San Diego, CA, 1126–1132, 1980.
12. RETScreen International, Clean Energy Support Center: Solar Water Heating Project Analysis, Canada. [https://unfccc.int/resource/cd\\_roms/na1/mitigation/Module\\_5/Module\\_5\\_1/b\\_tools/RETScreen/Manuals/Solar\\_Water\\_Heating.pdf](https://unfccc.int/resource/cd_roms/na1/mitigation/Module_5/Module_5_1/b_tools/RETScreen/Manuals/Solar_Water_Heating.pdf).
13. **J.H. Kim, J.T. Kim.** Intern. J. Photoenergy, **2012**, 1 (2012).

#### INVESTIGATION OF THE CHARACTERISTICS OF HYBRID PHOTOVOLTAIC-THERMAL SOLAR ENERGY CONVERTERS

R.R. VARDANYAN, N.K. BADALYAN, D.S. DAVTYAN

This paper examines the performance of hybrid solar photovoltaic-thermal (PVT) modules, which are more energy efficient than conventional solar photovoltaic modules due to the ability to cool the solar cells by removing heat from the heated solar cells and by generating additional thermal energy. It is shown that at low ambient temperatures, below a certain critical value, the temperature of the solar cells in a PVT module can be higher than that of a conventional photovoltaic module (the reverse process). The critical ambient temperature is examined for various PVT module designs (glazed, unglazed, with and without a thermally insulated back layer). It is experimentally shown that the critical temperature for a PVT module without an insulated back layer is 21°C, while for a module with an insulated back layer it is 25°C. To eliminate the negative effect of solar cell heating, it is necessary to consider the operating ambient temperatures and to select appropriate PVT module designs and heat removal modes.

## ФОРМИРОВАНИЕ СИМИЛЯРИТОНА С ФУНКЦИОНАЛЬНО ОСОБЫМ ПРОФИЛЕМ В ОПТИЧЕСКИХ ВОЛОКНАХ

В. АВETИСЯН<sup>1</sup>, М. СУКИАСЯН<sup>1,2\*</sup>, М. ПАПЯН<sup>2</sup>,  
Л. МИКАЭЛЯН<sup>2</sup>, М.КАЛАШЯН<sup>1</sup>, А. КУТУЗЯН<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

<sup>2</sup>Институт синхротронных исследований CANDLE, Ереван, Армения

\*e-mail: minas.suqiasyan@ysu.am

(Поступила в редакцию 21 январь 2026 г.)

Выявлена и подтверждена функциональная форма, наилучшим образом воспроизводящая профиль нового типа симиляритона, путём функциональной аппроксимации профилей симиляритона, полученных в результате численного моделирования. Показано, что симиляритоны нового типа, формирующиеся в одномодовом пассивном оптическом волокне под совместным воздействием нелинейности и отрицательной дисперсии, обладают временным профилем двустороннего экспоненциального импульса вида  $\exp(-|t|)$ , характеризующимся резким пиком и широким основанием, типичными для данной функции. Установлены специфические граничные условия, определяющие параметры волокна и входного импульса – в зависимости от начальной формы на входе – при которых обеспечивается самоформирование таких импульсов и их устойчивое самоподобное распространение вдоль волокна. Представленные результаты получены для трёх типов входных профилей: гауссовского, гиперболического секанса и супер-гауссовского.

### 1. Введение

Симиляритоны в волоконной оптике являются объектом интенсивных исследований, поскольку в отличие от солитонов они способны поддерживать существенно более высокие энергии импульсов, преодолевая присущие солитонным режимам энергетические ограничения. Они представляют значительный практический интерес для широкого круга приложений — от волоконных усилителей и лазеров до современных оптических систем. Теоретические и экспериментальные исследования показали, что в условиях нормальной дисперсии самоподобная эволюция импульса приводит к формированию устойчивых параболических симиляритонов, являющихся решениями нелинейного уравнения Шредингера с учётом дисперсии, сильной нелинейности и усиления [1–9]. В последние годы также активно изучаются нелинейно-дисперсионные симиляритоны, формирующиеся в пассивных оптических волокнах под совместным воздействием нелинейности и нормальной дисперсии. Показано, что такие импульсы могут эффективно использоваться для спектральной компрессии, тонкой частотной настройки и временной характеристики фемтосекундных импульсов [10–12]. Современные исследования значительно расширили практические

возможности применения симиляритонов в волоконных лазерах, что, в частности, подробно рассмотрено в обзорной статье [13] и подтверждается экспериментальными работами как в пассивных, так и в активных конфигурациях [14, 15]. Генерация симиляритонов с заданными временными и спектральными профилями имеет принципиальное значение для широкого круга научных и прикладных задач, включая оптическую обработку и управление сигналами, высокоскоростные фотонные системы и др. В этом контексте среди последних работ особый интерес представляет исследование А. Федоренко и соавторов по генерации симиляритонов в Er-легированном волоконном лазере [16], а также работа Ч. Ма и соавторов, реализовавших пространственно-временные симиляритоны с использованием спектрально-пространственного фильтра [17].

Целью настоящей работы было исследование режима формирования симиляритонов в пассивном оптическом волокне при совместном воздействии слабой нелинейности и аномальной дисперсии. Ранее было показано, что профиль импульса на выходе волокна определяется порядком солитона  $N$  и начальной формой импульса [17, 18], где  $N^2 = \gamma P_0 T_0^2 / |\beta_2|$ ,  $\gamma$  – коэффициент нелинейности,  $P_0$  – пиковая мощность на входе,  $T_0$  – начальная длительность импульса,  $\beta_2$  – коэффициент дисперсии второго порядка. В диапазоне  $N < 1$  реализуется режим спектрального самосжатия солитонной природы [19]. В этом режиме возможно самоподобное распространение импульса, приводящее к формированию нового типа симиляритона [20]. В настоящей работе основное внимание уделяется выявлению функциональной формы временного профиля данного типа симиляритона, а также установлению условий, обеспечивающих его самоформирование и устойчивое самоподобное распространение вдоль волокна.

## 2. Численный эксперимент

Численное моделирование проводилось путём решения нелинейного уравнения Шредингера методом split-step [16] с учётом дисперсии второго порядка и керровской нелинейности. В качестве начальных условий рассматривались три распространённые формы импульсов: гауссовская ( $\exp(-0.5t^2)$ ), супергауссовская ( $\exp(-0.5t^4)$ ) и гиперболический секанс ( $\text{sech}(t)$ ), где  $t = (\tau - l/u)/T_0$  – бегущее время,  $\tau$  – временная координата,  $l$  – пространственная координата,  $u$  – групповая скорость. Распространение импульсов изучалось в режиме аномальной дисперсии; влиянием высших порядков дисперсии и нелинейности пренебрегали, предполагая, что длительность импульсов превышает субпикосекундный диапазон.

Анализ проводился в рамках упрощённой двумерной системы координат ( $z, N$ ), где  $z$  представляет собой нормированную длину волокна ( $z = l|\beta_2|/T_0^2$ ). Скорость и характер формирования симиляритонного импульса в оптическом волокне существенно зависят от формы, длительности и амплитуды начального импульса. В настоящей работе начальные импульсы имели одинаковые нормированные длительности и амплитуды, в результате чего процесс формирования симиляритона определялся исключительно временной формой входного импульса.

Поскольку полученные численные результаты служат основой для последующей экспериментальной реализации, параметр  $N$  варьировался при фиксированной длине волокна. Такой подход позволил определить граничные условия

формирования симиляритонного режима. При превышении установленных пороговых значений наблюдался переход к режиму спектральной самокомпрессии. Для длины волокна  $z = 500$  соответствующие пороговые значения параметра  $N$  при использовании в качестве начальных условий гиперболического секанс-импульса, гауссовского и супергауссовского импульсов составили 0.5, 0.6 и 0.7, соответственно. Временные профили начальных импульсов и образовавшихся симиляритонных импульсов представлены на рис.1, а соответствующие спектральные характеристики – на рис.2.

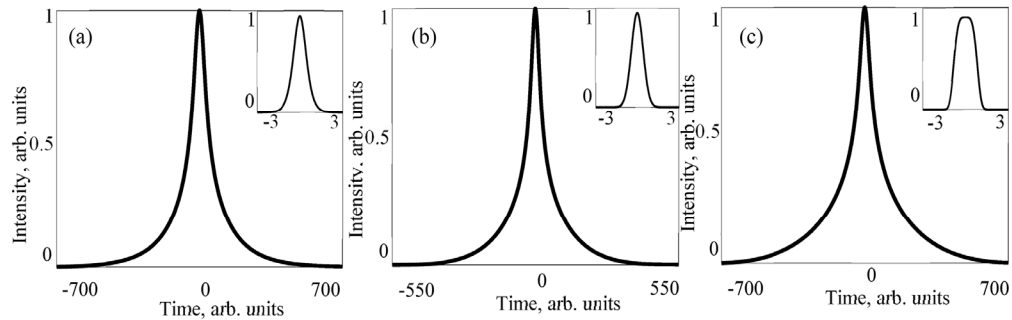


Рис.1. Временные профили импульсов на выходе оптического волокна длиной  $z = 500$  для начальных импульсов с (a) гиперболическим секансным, (b) гауссовским и (c) супергауссовским профилями. На вставках представлены начальные временные профили.

На рис.1 показаны временные профили импульса на выходе оптического волокна длиной  $z = 500$  при начальных импульсах с гиперболическим секансным (рис.1a), гауссовским (рис.1b) и супергауссовским (рис.1c) профилями. Вставки демонстрируют начальные формы импульсов. На рис.2 аналогично представлены конечные спектры; начальные спектральные профили обозначены штриховыми линиями. На обоих рисунках сплошными линиями показаны профили сформировавшихся симиляритонов. Как видно, при фиксированной длине волокна временные и спектральные формы формируемых симиляритонов не зависят от формы начального импульса. В настоящей работе площади начальных гиперболически-секансных, гауссовых и супергауссовых импульсов выбраны в соотношении 1.2 : 1.0635 : 1.0877, соответственно.

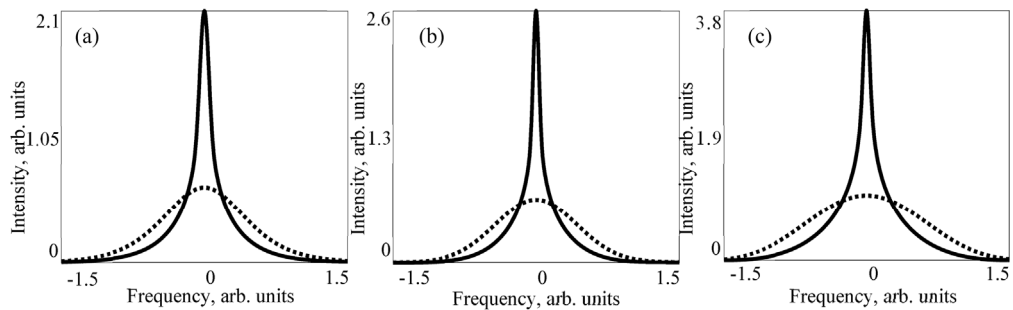


Рис.2. Спектральные профили импульсов на выходе оптического волокна длиной  $z = 500$  для начальных импульсов с (a) гиперболическим секансным, (b) гауссовским и (c) супергауссовским профилями. Начальные спектральные профили обозначены штриховыми линиями.

Для наглядной иллюстрации процесса формирования симиляритона на рис.3 показано распространение начального супергауссовского импульса в одномодовом волокне длиной  $z = 2000$  при  $N = 0.7$ .

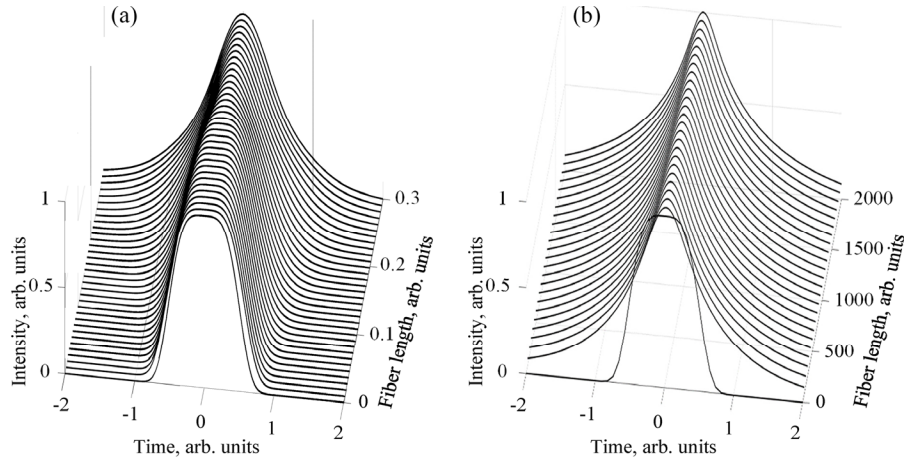


Рис.3. Временная эволюция начального супергауссовского импульса при распространении в одномодовом оптическом волокне длиной  $z = 0.3$  и  $z = 2000$  при значении параметра  $N = 0.7$ .

Поскольку переход от супергауссовского импульса к предсимиляритонному режиму происходит очень быстро, данная трансформация также показана на рис.3а при длине волокна  $z = 0.3$ . На рис.3б представлено полное распространение супергауссовского импульса в оптическом волокне при длине  $z = 2000$ .

Поскольку в процессе распространения по волокну импульс испытывает значительное временное уширение, его функциональная форма была нормирована по интенсивности и длительности на каждой длине распространения для корректной оценки.

Функциональная форма сформировавшегося симиляритона была оценена методом численной аппроксимации. Сгенерированный симиляритон сравнивался с рядом функций, визуально напоминающих его собственный функциональный профиль, что представлено на рис.4, где оцениваемая функция показана штриховой линией, а самоподобный импульс – сплошной линией; для времени и интенсивности использованы нормированные единицы.

Оцениваемыми функциями являются: гауссовская функция (рис.4а), функция гиперболического секанса (рис.4б) и двусторонняя экспоненциальная функция  $\exp(-|t|)$  (рис.4с). Параметрами, использованными для корректного сравнения этих функций, служат коэффициент детерминации  $R^2$  и среднеквадратическая ошибка (RMSE), которые определяются следующим образом:

$$R^2 = 1 - \frac{n \times (RMSE)^2}{\sum_{i=1}^n (y - \bar{y})^2}, \quad RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y - \hat{y})^2}{n}}.$$

Здесь  $n$  – количество точек данных, использованных для аппроксимации;  $\sum_{i=1}^n (y - \bar{y})^2$  – суммарная дисперсия используемых данных;  $\bar{y}$ ,  $\hat{y}$  и  $y$  обозначают соответственно среднее значение всех данных, предсказанные значения и наблюдаемые значения.

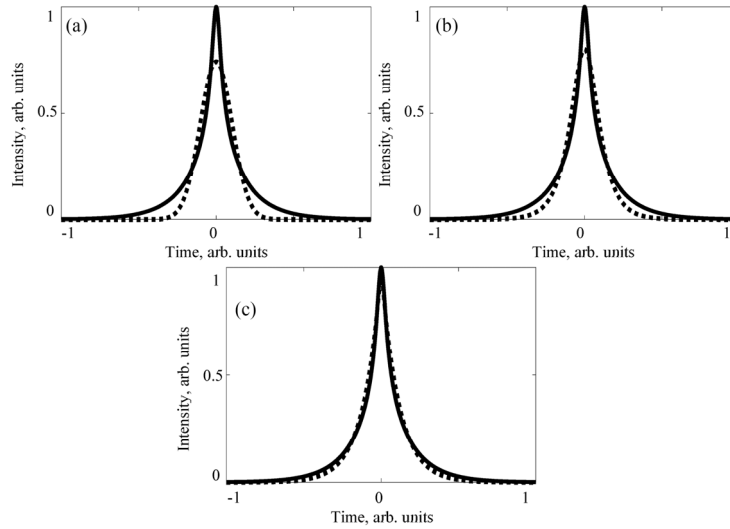


Рис.4. Кривые аппроксимации сгенерированного симиляритона (а) гауссовской функцией, функцией (b) гиперболического секанса и двусторонней (c) экспоненциальной функцией.

Результаты численного аппроксимационного анализа показывают практически полное совпадение между двусторонней экспоненциальной функцией и сформированным симиляритоном: значение RMSE составило  $2.25 \times 10^{-5}$ , тогда как для функций гауссовской и гиперболического секанса оно равно 0.031 и 0.0227, соответственно. Более того, аппроксимация сформированного симиляритона дала наилучшее значение коэффициента детерминации  $R^2 = 0.9927$  по сравнению с 0.9358 и 0.9656 для гауссовской и гиперболически-секансной функций. Это позволяет заключить, что был успешно сформирован новый тип симиляритона. Для дополнительной проверки достоверности полученных результатов была также исследована эволюция входного импульса с двусторонней экспоненциальной формой при распространении в одномодовом оптическом волокне с параметрами  $N = 0.8$  и  $z = 500$ . На рис.5 приведено сравнение функциональных профилей начального (сплошная кривая) и выходного (пунктирная кривая) импульсов, нормированных по интенсивности и длительности.

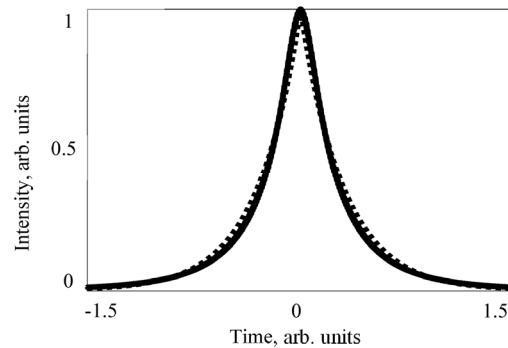


Рис.5. Входной (сплошная линия) и выходной (штриховая линия) импульсы с двусторонней экспоненциальной формой.

Результаты показывают, что начальный импульс с двусторонней экспоненциальной формой лишь расширяется во времени без изменения своей функциональной формы, что подтверждает достоверность сформированного в нашем исследовании симиляритона.

### 3. Заключение

На основе проведённых численных исследований установлены граничные условия формирования симиляритонных импульсов в пассивных одномодовых волокнах при слабой нелинейности и аномальной дисперсии. Для начальных импульсов получены следующие значения параметра  $N$ : гиперболический секанс – 0.5, гауссовский – 0.6, супергауссовский – 0.7 и двусторонний экспоненциальный – 0.8. Сформировавшиеся при этом симиляритоны имеют функциональную форму, близкую к двустороннему экспоненциальному профилю  $\exp(-|t|)$ , причём начальные импульсы с такой же формой практически не изменяют форму при распространении. Таким образом, результаты проведённых исследований позволяют предположить, что для любого начального профиля импульса, найдутся граничные условия, при которых сформируется симиляритон с двусторонним экспоненциальным профилем.

Полученные результаты расширяют представления о самоподобной эволюции импульсов в нелинейных волоконных системах и могут быть использованы при разработке новых источников ультракоротких импульсов с заданными временными и спектральными характеристиками.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Комитета по высшему образованию и науке МОНКР РА в рамках научного проекта № 25RG-1C225.

### ЛИТЕРАТУРА

1. P. A. Bélanger. Opt. Express, **15**, 11033 (2007).
2. C. Finot, G. Millot, J.M. Dudley. Opt. Lett., **29**, 2533 (2004).
3. D. Anderson, M. Desaix, M. Karlsson, M. Lisak, M.L. Quiroga-Teixeiro. J. Opt. Soc. Am. B, **10**, 1185 (1993).
4. M.E. Fermann, V.I. Kruglov, B.C. Thomsen, J.M. Dudley, J.D. Harvey. Phys. Rev. Lett. **84**, 6010 (2000).
5. C. Finot, J.M. Dudley, D.J. Richardson, G. Millot. Opt. Express, **12**, 5104 (2004).
6. C. Finot, F. Parmigiani, P. Petropoulos, D.J. Richardson. Opt. Express, **14**, 3161 (2006).
7. W.H. Renninger, A. Chong, F.W. Wise. Phys. Rev. A, **82**, 021805 (2010).
8. S. Lefrançois, Ch.Liu, M.L. Stock, Th.S. Sosnowski, A. Galvanauskas, F.W. Wise. Opt. Lett., **38**, 43 (2013).
9. H. Triki, V.I. Kruglov. Opt. Comm. **574**, 1310541 (2025).
10. M. Oberthaler R.A. Höpfel. Appl. Phys. Lett. **63**, 1017 (1993).
11. A. Zeytunyan, G. Yesayan, L. Mouradian, P. Kockaert, Ph. Emplit, F. Louradour, A. Barthélémy. J. Europ. Opt. Soc. Rap. Public., **4**, 09009 (2009).
12. A. Zeytunyan, G. Yesayan, L. Mouradian, A. Kutuzyan. Opt. Comm., **552**, 130059 (2024).
13. A. Chong, L.G. Wright, F.W. Wise. Rep. Prog. Phys., **78**, 113901 (2015).
14. B. Oktem, C. Ülgüdür, F.Ö. İday. Nat. Photonics, **4**, 307 (2010).

15. Y. Tang, Zh. Liu, W. Fu, F.W. Wise. Opt. Lett., **41**, 2290 (2016).
16. A.Y. Fedorenko, A. Ismael, I.O. Orekhov, D.A. Dvoretzkiy, S.G. Sazonkin, L.K. Denisov, V.E. Karasik. Photonics, **11**, 387 (2024).
17. C. Ma, B. Gao, G. Wu, J. Liu, Q. Na, Q. Xie, C. Zhang, X. Nie, Z. Cao, L. Wang. Opt Lett., **50**, 17, 5210 (2025).
18. M. Sukiasyan, V. Avetisyan, A. Kutuzyan. Photonics, **10**, 1207 (2023).
19. A. Kutuzyan, V. Avetisyan, M. Sukiasyan. J. Contemp. Phys., **59**, 36 (2024).
20. G.P. Agrawal. Nonlinear Fiber Optics. Elsevier, Rochester, USA, 2019.

**ՖՈՒՆԿՑԻՈՆԱԼ ԱՌՈՒՄՈՎ ԱՅԼ ԴԱՍԻ ՄԻՄԻԼԱՐԻՏՈՆՆԵՐԻ  
ՉԵՎԱՎՈՐՈՒՄԸ ՕՊՏԻԿԱԿԱՆ ԼՈՒՍԱՏԱՐԵՐՈՒՄ**

Վ. ԱՎԵՏԻՍՅԱՆ, Մ. ՍՈՒՔԻԱՍՅԱՆ, Մ. ՊԱՊՅԱՆ,  
Լ. ՄԻԿԱԵԼՅԱՆ, Մ. ՔԱԼԱՇՅԱՆ, Ա. ԿՈՒՏՈՒԶՅԱՆ

Բացահայտվել է նոր տեսակի սիմիլարիտոնի տեսքը օպտիմալ նկարագրող ֆունկցիոնալ կախումը, որը նույնականացվել և ստուգվել է թվային մոդելավորման միջոցով ստացված սիմիլարիտոնների տեսքերի ֆունկցիոնալ մոտարկման եղանակով: Ցույց է տրվել, որ միամոդ պասիվ օպտիկական մանրաթելում ոչգծայնության և բացասական դիսպերսիայի համատեղ ազդեցության տակ ձևավորվող այս սիմիլարիտոնները ցուցաբերում են ժամանակային պրոֆիլի երկկողմանի էքսպոնենցիալ իմպուլսի տեսք  $\exp(-|t|)$ , որը բնութագրվում է տվյալ ֆունկցիային բնորոշ սուր գագաթով և լայն հիմքով: Սահմանվել են մանրաթելի և մուտքային իմպուլսի բնութագրերը որոշող հատուկ սահմանային պայմաններ՝ կախված մանրաթելի մուտքում իմպուլսի սկզբնական ձևից, որոնք ապահովում են նման իմպուլսների ինքնաձևավորումը և դրանց կայուն ինքնանման տարածումը մանրաթելի երկայնքով: Արդյունքները ստացվել են իմպուլսի մուտքային պրոֆիլների երեք տեսակների համար՝ գաուսյան, սեկանս-հիպերբոլական և սուպերգաուսյան:

**EMERGENCE OF A SIMILARITON WITH A FUNCTIONALLY  
DISTINCT PROFILE IN OPTICAL FIBERS**

V. AVETISYAN, M. SUKIASYAN, M. PAPYAN,  
L. MIKAELYAN, M. KALASHYAN, A. KUTUZYAN

A functional form that best reproduces the profile of a new type of similariton has been identified and validated by functionally fitting of similariton profiles obtained through numerical simulations. It is shown that a new type of similaritons formed in a passive single-mode optical fiber under the combined influence of nonlinearity and anomalous dispersion exhibits a temporal profile of a two-sided exponential pulse of the form  $\exp(-|t|)$ , characterized by a sharp peak and a broad base typical of this function. Specific boundary conditions have been established that determine the fiber and input pulse parameters - depending on the initial input shape - ensuring the self-shaping of such pulses and their stable self-similar propagation along the fiber. The presented results were obtained for three types of input profiles: Gaussian, hyperbolic secant, and super-Gaussian.

## НЕЛИНЕЙНО-ОПТИЧЕСКИЙ МЕТОД РЕГИСТРАЦИИ ЧИРПА ФЕМТОСЕКУНДНОГО ИК ЛАЗЕРНОГО ИМПУЛЬСА

М.Л. МОВСИСЯН<sup>1\*</sup>, Д.Л. ОГАНЕСЯН<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

<sup>2</sup>«Синописис Армения», Ереван, Армения

\*e-mail: manushakmov@ysu.am

(Поступила в редакцию 10 января 2026 г.)

Предлагается новый метод регистрации чирпа фемтосекундного ИК лазерного импульса, основанный на неколлинеарной генерации суммарной гармоники спектрально-ограниченным ИК фемтосекундным импульсом и импульсом со спектральным суперконтинуумом. В работе приводятся временные зависимости мгновенной частоты ИК импульса со спектральным суперконтинуумом, полученные из двумерных распределений динамических спектрограмм. Показано, что относительная погрешность определения чирпа фемтосекундного ИК лазерного импульса предлагаемым методом не превышает 10%. Представленные результаты могут быть использованы при разработке нелинейно-оптического фазового коррелятора для определения фазы и временного профиля фемтосекундного лазерного импульса в среднем ИК диапазоне.

### 1. Введение

Применение широкополосных когерентных источников света в среднем ИК диапазоне весьма актуально в таких областях, как дистанционное зондирование атмосферы, динамическая спектроскопия, биофотоника и т. д. Для формирования таких импульсов используется процесс генерации спектрального суперконтинуума в поле фемтосекундного лазерного импульса, распространяющегося в одномодовом оптическом волокне [1]. В рамках приближения, учитывающего лишь первый порядок дисперсии материала, временное самовоздействие лазерного импульса приводит к симметричному уширению его спектра. Однако имеется ряд физических механизмов, приводящих к асимметрии спектрального уширения уже при умеренных интенсивностях лазерного импульса. Три наиболее важных механизма связаны с самовоздействием [2], образованием ударного фронта огибающей [3] и конечным временем нелинейно-оптического отклика среды [4]. Лазерный импульс, распространяющийся в среде с запаздывающей нелинейностью, испытывает низкочастотный сдвиг. За счет возбуждения молекулярных колебаний происходит перераспределение энергии в спектре импульса, а это приводит, в свою очередь, к смещению максимума спектра импульса в длинноволновую область [5].

Среди всех оптических стекол, применяемых в оптических волокнах, халькогенидные стекла обладают самой широкой полосой прозрачности и самым высоким значением показателя нелинейного преломления третьего порядка ( $n_2$ )

[6, 7]. В частности, значение  $n_2$  для стекла  $As_2S_3$  достигает  $300 \times 10^{-20}$  и  $1100 \times 10^{-20}$  м<sup>2</sup>/Вт для стекла  $As_2Se_3$ . Эти значения на 2–3 порядка больше, чем у двуокиси кремния [8]. Нелинейный отклик  $\gamma = 2\pi n_2 / (A_{\text{eff}} \lambda)$  халькогенидного стекла может достичь значения  $100$  (Вт×м)<sup>-1</sup>, где  $A_{\text{eff}}$  – поперечное сечение волокна,  $n_2$  – нелинейная добавка к показателю преломления. Экспериментально измеренные значения коэффициента двухфотонного поглощения (ДФП) для  $As_2S_3$  и  $As_2Se_3$  волокон составляют  $6.2 \times 10^{-15}$  и  $2.5 \times 10^{-12}$  м/Вт, соответственно. Значение ДФП для  $As_2S_3$  является настолько малым, что можно пренебречь его влиянием на процесс распространения импульса. Полоса прозрачности  $As_2S_3$  простирается от 0.57 до 11.8 мкм [9].

Данные характеристики делают халькогенидное стекло  $As_2S_3$  идеальным материалом для генерации ИК фемтосекундного спектрального суперконтинуума, где короткие длины образцов или низкие значения энергии импульса достаточны для обеспечения необходимой эффективности генерации новых спектральных компонент.

## 2. Схема нелинейно-оптического коррелятора для определения чирпа широкополосного фемтосекундного лазерного импульса в ИК диапазоне

В настоящей работе в качестве нелинейной среды для генерации фемтосекундного спектрального суперконтинуума предлагается использовать  $As_2S_3$ , а для неколлинеарной генерации импульсов суммарной частоты предлагается использовать  $AgGaS_2$  (тиогаллат серебра) – отрицательный одноосный кристалл точечной группы симметрии  $\bar{4}2m$  с диапазоном прозрачности от 0.5 до 13 мкм.

На рис. 1 показана схема предлагаемого нелинейно-оптического коррелятора для определения чирпа ИК лазерного импульса. В качестве источников ИК фемтосекундных импульсов можно использовать лазеры, выпускаемые компанией Q-Peak [10] на основе активного кристалла Cr:ZnSe, позволяющего генерировать, в частности, фемтосекундные импульсы длительностью 185 фс с энергией до 1 мДж на длине волны 2.5 мкм при частоте следования импульсов в 1 кГц.

ИК импульс  $A_0(t)\exp(j\omega_0 t)$ , где  $A_0(t)$  – комплексная амплитуда импульса накачки,  $\omega_0 = 2\pi c/\lambda_0$  – центральная частота,  $\lambda_0$  – центральная длина волны и  $c$  – скорость света в вакууме, с выхода лазера Q-Peak FS направляется на расщепитель пучка  $BS_1$ . Часть импульса, прошедшая через расщепитель и равная  $0.5 \times A_0(t)$ , вводится в одномодовое  $As_2S_3$  оптическое волокно, на выходе которого в результате нелинейного взаимодействия импульса с оптическим волокном формируется широкополосный частотно-модулированный фемтосекундный импульс (ЧМФИ)  $A_{SC}(t)\exp(j\omega_0 t + j\gamma(t))$ , где  $A_{SC}(t)$  – амплитуда ЧМФИ (амплитуда спектрального континуума).

Часть импульса, отраженная от расщепителя  $BS_1$  и зеркала  $M_1$ , равная  $0.5 \times A_0(t)$ , направляется на расщепитель  $BS_2$ . Часть импульса  $A''_1(t)\exp(j\omega_0 t)$ , отраженная от расщепителя  $BS_2$  и зеркала  $M_4$ , направляется на нелинейно-оптический FROG коррелятор, с помощью которого определяется фаза и временной профиль импульса  $A''_1(t)\exp(j\omega_0 t)$ . Импульс  $A_{SC}(t)\exp(j\omega_0 t + j\gamma(t))$  с выхода волокна и часть импульса, прошедшая через расщепитель  $BS_2$  –  $A'_1(t)\exp(j\omega_0 t)$ , с помощью зеркал

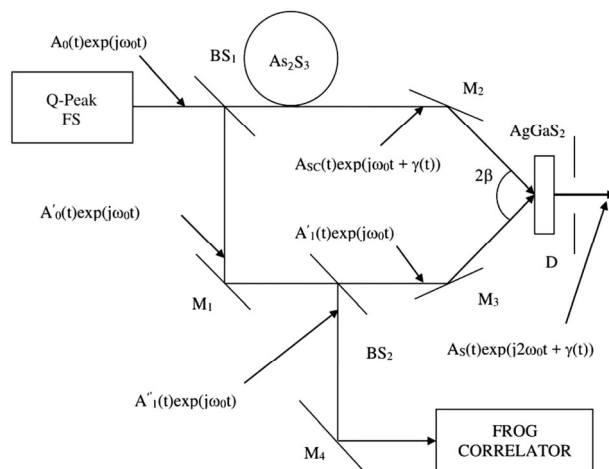


Рис.1. Схема предлагаемого нелинейно-оптического коррелятора: Q-Peak FS – источник фемтосекундного импульса ИК диапазона, BS<sub>1</sub> – расщепитель пучка с коэффициентом деления 50%, M<sub>1</sub> – M<sub>4</sub> – зеркала, BS<sub>2</sub> – расщепитель пучка с коэффициентом пропускания 70%, D – диафрагма, FROG CORRELATOR – нелинейно-оптический коррелятор.

M<sub>2</sub> и M<sub>3</sub> направляются на нелинейный кристалл AgGaS<sub>2</sub> под углом  $2\beta$ , обеспечивающим выполнение условия фазового синхронизма для неколлинеарной генерации излучения импульса суммарной частоты  $A_s(t)\exp(j2\omega_0 t + j\gamma(t))$ . Диафрагма D на выходе кристалла AgGaS<sub>2</sub> позволяет реализовать частотно-угловую пространственную фильтрацию излучения суммарной частоты.

В поперечном распределении энергии импульса суммарной частоты, соответствующем динамической спектрограмме импульса  $A_{SC}(t)\exp(j\omega_0 t + j\gamma(t))$ , содержится информация о фазе и амплитуде импульса  $A_{SC}(t)$ . Далее по заданным фазовым и временным профилям импульса  $A'_1(t)\exp(j\omega_0 t)$ , полученным из регистрируемого поперечного распределения энергии импульса суммарной частоты на выходе FROG коррелятора, можно восстановить фазу импульса  $A_s(t)$  (амплитуда импульса суммарной частоты) [11], что, в свою очередь, позволит определить чирп широкополосного частотно-модулированного фемтосекундного ИК лазерного импульса  $d\gamma(t)/dt$ . В работе [12] в приближении метода медленноменяющихся амплитуд получены результаты численного моделирования процесса генерации спектрального суперконтинуума в ИК диапазоне в поле фемтосекундного лазерного импульса, распространяющегося в одномодовом As<sub>2</sub>S<sub>3</sub> оптическом волокне.

### 3. Характеристические расстояния, описывающие процесс генерации спектрального суперконтинуума в ИК диапазоне в поле фемтосекундного лазерного импульса

В данном разделе приводятся численные оценки как характеристических расстояний, соответствующих дисперсионному расплыванию импульса, вызванному линейными дисперсионными членами второго, третьего, четвертого, пятого, шестого и седьмого порядков, так и характеристических расстояний,

соответствующих проявлению фазовой самомодуляции, укручению фронта импульса накачки, рамановскому рассеянию и укручению фронта импульса, сформированного в результате рамановского рассеяния.

Процесс распространения фемтосекундного лазерного импульса вдоль оси  $z$  в одномодовом волокне в приближении плоских волн описывается нелинейным уравнением Шредингера, которое в обозначениях [3] может быть представлено в виде

$$\frac{\partial E}{\partial \xi} = - \sum_{m=2}^M \left[ i^{m-1} \frac{\alpha_m}{m!} \frac{\partial^m E}{\partial \tau^m} + i \gamma' (1 - f_R) \left( E |E|^2 + \frac{i}{\omega_0 \tau_0} \frac{\partial}{\partial \tau} (E |E|^2) \right) \right. \\ \left. + i \gamma' f_R \left( E \int_0^\infty h'_R |E(\xi, \tau - \tau')|^2 d\tau' + \frac{i}{\omega_0 \tau_0} \frac{\partial}{\partial \tau} \left[ E \int_0^\infty h'_R |E(\xi, \tau - \tau')|^2 d\tau' \right] \right) \right], \quad (1)$$

где  $E(\xi, \tau) = A(\xi, \tau)/P_0^{1/2}$ ,  $A(\xi, \tau)$  – комплексная амплитуда линейно поляризованного ИК импульса,  $\xi = (z/|\beta_2|)/\tau_0^2$ ,  $P_0$  – мощность начального импульса,  $\alpha_m = (\beta_m/\tau_0^m)/(|\beta_2|/\tau_0^2)$ ,  $\beta_m(\omega_0) = (\partial^m k(\omega)/\partial \omega^m)|_{\omega=\omega_0}$ ,  $\beta_2$  – дисперсия групповых скоростей,  $k(\omega)$  – волновой вектор,  $\omega_0$  – несущая частота импульса,  $\tau_0$  – длительность начального импульса,  $\gamma' = \gamma P_0/(|\beta_2|/\tau_0^2)$ ,  $\gamma = n_2 \omega_0/(c A_{\text{eff}}) = 373$  (Вт×км<sup>2</sup>)<sup>-1</sup> – коэффициент нелинейности,  $c$  – скорость света в вакууме,  $\omega_0 = 2\pi c/\lambda_0$  – несущая частота ( $\lambda_0 = 2.5$  мкм),  $A_{\text{eff}} = \pi d_{\text{eff}}^2/4 = 28.274$  мкм<sup>2</sup> – эффективная площадь моды,  $d_{\text{eff}} = 2.4 \times \lambda_0$  – эффективный диаметр волокна,  $n_2 = 4.2 \times 10^{-18}$  м<sup>2</sup>/Вт – нелинейный коэффициент преломления [7],  $\tau = (t - z/v_g)/\tau_0$  – время в бегущих системах координат,  $v_g$  – групповая скорость,  $h'_R = h_R \tau_0$ ,  $\xi = (z/|\beta_2|)/\tau_0^2$ ,  $f_R(t) = ((\tau_1^2 + \tau_2^2)/\tau_1 \tau_2^2) \exp(-t/\tau_2) \sin(t/\tau_1)$  – рамановский отклик среды,  $f_R = 0.031$  – безразмерный коэффициент, определяющий вклад рамановского рассеяния по отношению к полному нелинейному вкладу в нелинейную поляризацию среды,  $\delta(t)$  – дельта функция Дирака,  $h_R(t)$  – рамановский отклик среды,  $\tau_1 = 15.2$ ,  $\tau_2 = 230.5$  фс [10]. Для данного типа волокна дисперсионные характеристики определяются в соответствии с выражением для показателя преломления [13, 14]

$$n^2 - 1 = \frac{1.8983678\lambda^2}{\lambda^2 - 0.0225} + \frac{1.9222979\lambda^2}{\lambda^2 - 0.0625} + \frac{0.8765134\lambda^2}{\lambda^2 - 0.1225} + \frac{0.1188704\lambda^2}{\lambda^2 - 0.2025} + \frac{0.9569903\lambda^2}{\lambda^2 - 750} \quad (2)$$

и равны  $\lambda_0 = 2.5$  мкм,  $\beta_2 = 261.83$  фс<sup>2</sup>/мм,  $\beta_3 = 375.17$  фс<sup>3</sup>/мм,  $\beta_4 = 116.69$  фс<sup>4</sup>/мм,  $\beta_5 = 194.46$  фс<sup>5</sup>/мм,  $\beta_6 = 177.49$  фс<sup>6</sup>/мм,  $\beta_7 = 323.77$  фс<sup>7</sup>/мм.

Характеристические расстояния, соответствующие дисперсионным расплываниям импульса, которые определяются дисперсионными членами второго, третьего, четвертого, пятого, шестого и седьмого порядков, равны  $Z_{\text{Disp}2} = \tau_0^2/|\beta_2|$ ,  $Z_{\text{Disp}3} = 3\tau_0^3/|\beta_3|$ ,  $Z_{\text{Disp}4} = 12\tau_0^4/|\beta_4|$ ,  $Z_{\text{Disp}5} = 60\tau_0^5/|\beta_5|$ ,  $Z_{\text{Disp}6} = 360\tau_0^6/|\beta_6|$ ,  $Z_{\text{Disp}7} = 2520\tau_0^7/|\beta_7|$ . Значения дисперсионных характеристических расстояний при  $\tau_0 = 50$  фс равны  $Z_{\text{Disp}2} = 9.72$ ,  $Z_{\text{Disp}3} = 998.75$ ,  $Z_{\text{Disp}4} = 64.25 \times 10^4$ ,  $Z_{\text{Disp}5} = 96.25 \times 10^6$ ,  $Z_{\text{Disp}6} = 31.68 \times 10^9$ ,  $Z_{\text{Disp}7} = 60.78 \times 10^{11}$  мм.

В настоящей работе рассматривается случай, когда центральная длина волны импульса, равная 2.5 мкм, находится в спектральном диапазоне, соответствующем аномальной дисперсии групповой скорости. Характеристические расстояния, соответствующие фазовой самомодуляции, укручению фронта импульса накачки, рамановскому рассеянию и укручению фронта импульса, сформированного в результате рамановского рассеяния, определяются как

$$\begin{aligned} Z_{\text{SPM}} &= 1/(\gamma P_0), \quad Z_{\text{SS}} = (\omega_0 \tau_0)/(\gamma P_0), \\ Z_{\text{RS}} &= 1/(\gamma P_0 h_{R0} \tau_0), \quad Z_{\text{RSSS}} = (\omega_0 \tau_0)/(\gamma P_0 h_{R0} \tau_0), \end{aligned} \quad (3)$$

где  $h_{R0} = ((\tau_1^2 + \tau_2^2)/\tau_1 \tau_2)$ ,  $Z_{\text{SPM}}$  – длина самовоздействия,  $Z_{\text{SS}}$  – длина образования ударного фронта огибающей,  $Z_{\text{RS}}$  – длина рамановского рассеяния,  $Z_{\text{RSSS}}$  – длина инерционности рамановского нелинейного отклика среды.

Значения нелинейных характеристических расстояний при  $P_0 = 280.53$  Вт,  $\tau_0 = 50$  фс равны  $Z_{\text{SPM}} = 9.72$ ,  $Z_{\text{SS}} = 359.953$ ,  $Z_{\text{RS}} = 2.890$  и  $Z_{\text{RSSS}} = 108.952$  мм.

Как видно из вышеприведенных значений характеристических дисперсионных и нелинейных расстояний, при длине волокна, равной  $Z_{\text{Disp}2}$ , и мощности импульса, равной  $P_0$ , дисперсионные члены высших порядков не влияют на эволюцию импульса. Однако роль линейных дисперсионных членов высших порядков может увеличиться по мере увеличения мощности импульса накачки, что определяется процессом уширения спектра импульса.

В данной работе рассматриваются процессы распространения импульсов с мощностями, равными  $P_0, 4P_0, 9P_0, 16P_0$  и  $25P_0$  при длине волокна, равном  $\pi Z_{\text{Disp}2}/2 = 15$  мм. Здесь приводятся результаты численного моделирования предлагаемого нелинейно-оптического метода регистрации чирпа частотно-модулированного фемтосекундного ИК лазерного импульса при максимумах мощности начального фемтосекундного импульса с выхода лазера  $P = N^2 \times P_0$ , где  $N = 1; 2; 3; 4; 5$ .

Вышеприведенные значения характеристических дисперсионных и нелинейных расстояний позволяют определить вклад линейных дисперсионных и нелинейных членов разных порядков в процесс генерации спектрального суперконтинуума, при заданных параметрах начального импульса и длине одномодового оптического волокна.

Временные профили импульсов на выходе волокна при разных значениях максимумов мощности начального фемтосекундного импульса были получены в результате численного интегрирования уравнения (1) методом расщепления по физическим процессам с использованием преобразования Фурье (Split-Step Fourier Method) [3]. Указанные в третьем разделе временные профили нами были использованы для численного моделирования процесса генерации динамической spectroграммы ЧМФИ.

Начальное условие для численного решения нелинейного уравнения (1) выбирается в виде

$$A(t, z = 0) = A_0 \exp\left(-\frac{t^2}{\tau_0^2}\right), \quad (4)$$

где  $A_0$  – амплитуда начального фемтосекундного ИК импульса,  $\tau_0 = 50$  фс – длительность спектрально-ограниченного ИК импульса,  $\lambda_0 = 2.5$  мкм – центральная длина волны ( $f_0 = c/\lambda_0$  – центральная частота).

#### 4. Неколлинеарная генерация суммарной гармоники спектрально-ограниченным и частотно-модулированным фемтосекундными ИК импульсами в среднем ИК диапазоне

С целью измерения чирпа ЧМФИ импульсы  $A_{\text{SC}}(t) \exp(j\gamma(t))$  и  $A'_1(t)$  направляются на нелинейный кристалл  $\text{AgGaS}_2$  под углом  $\beta$  к нормали, обеспечивающим

выполнение условия фазового синхронизма для неколлинеарной генерации суммарной гармоники (СГ) импульса в среднем ИК диапазоне (рис.1). На рис.2 показана взаимная ориентация кристаллографической ( $XYZ$ ) и лабораторной ( $xyz$ ) координатных систем.

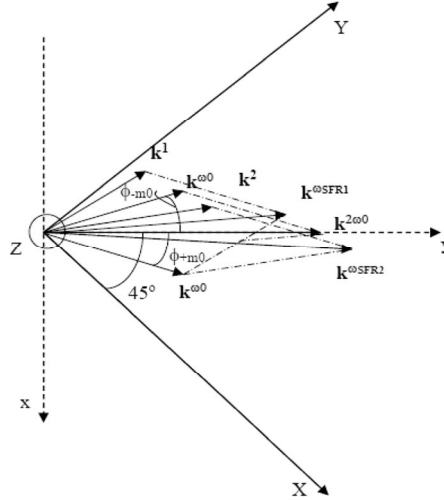


Рис.2. Взаимная ориентация кристаллографической ( $XYZ$ ) и лабораторной ( $xyz$ ) координатных систем:  $\mathbf{k}^{\omega_0}$  – волновой вектор спектрально-ограниченного импульса накачки,  $\mathbf{k}^{\omega_1}$ ,  $\mathbf{k}^{\omega_2}$  – волновые векторы фемтосекундного широкополосного импульса накачки.

Оптическая ось кристалла  $\text{AgGaS}_2$ , предназначенная для генерации СГ, перпендикулярна плоскости рисунка, импульсы  $A_{SC}(t)\exp(j\gamma(t))$  и  $A'_1(t)$  с векторами поляризации, соответствующими волнам с обыкновенной поляризацией и находящимися в плоскости рисунка, направляются на нелинейный кристалл под углом  $\beta = \arcsin(n_o(\omega_o)\sin(\phi_{\pm m_o})) = 19^\circ 44'$  к нормали, где  $\phi_{\pm m_o} = \pm \arccos(|k_{e2}|/2|k_o|) = 8^\circ 30'$ ,  $\phi_{+m_o}$  и  $\phi_{-m_o}$  – углы между спектральными компонентами  $\omega_o$  обыкновенно-поляризованных импульсов  $A'_1(t)$  и  $A_{SC}(t)\exp(j\gamma(t))$  и направлением распространения импульса СГ на частоте  $2\omega_o$  внутри нелинейного кристалла,  $k_{e2}(2\omega_o)$  – волновой вектор необыкновенно поляризованного импульса СГ,  $k_o$  – волновой вектор обыкновенно поляризованного импульса (рис.2).

Импульс СГ распространяется вдоль оси  $y$ , составляющей угол  $45^\circ$  с кристаллографической осью  $X$  и угол  $\theta_m = 90^\circ$  с оптической осью одноосного отрицательного кристалла  $\text{AgGaS}_2$ , а условие фазового синхронизма  $k_{e2} - k_o \cos(\phi_{+m_o}) - k_o \cos(\phi_{-m_o}) = 0$  выполняется для центральных длин волн  $\lambda_o$  и  $\lambda_o/2$ .

В спектре ЧМФИ импульса  $A_{SC}(t)\exp(j\gamma(t))$  содержатся длинноволновые  $\lambda_1$  и коротковолновые  $\lambda_2$  спектральные компоненты, волновые векторы  $\mathbf{k}^{\omega_1}$  и  $\mathbf{k}^{\omega_2}$  которых в нелинейном кристалле разнесены в пространстве относительно волнового вектора  $\mathbf{k}^{\omega_0}$ . В процессе нелинейного неколлинеарного взаимодействия спектральных компонент  $\omega_1$  и  $\omega_2$  с компонентой  $\omega_o$  в кристалле генерируются компоненты излучения на суммарных частотах (SFR – summary frequency radiation)  $\omega_{SFR1} = \omega_1 + \omega_o$  и  $\omega_{SFR2} = \omega_2 + \omega_o$ , которые разнесены в пространстве

вдоль оси  $x$ .

Углы между спектральными компонентами  $\omega_0$  импульса  $A_1'(t)$  и  $\omega_{1(2)}$  импульса  $A_{SC}(t)\exp(j\gamma(t))$  и направлением распространения импульса СГ на частоте  $\omega_0 + \omega_{1(2)}$  внутри нелинейного кристалла определяется из условия  $k_{e_1,(e_2)}(\omega_0 + \omega_{1(2)}) - k_o \cos(\phi_{+m_1,(2)}) - k_{o1,(o2)} \cos(\phi_{-m_1,(2)}) = 0$ , где значение угла  $\phi_{m_1,(2)}$  определяется из условия  $(\phi_{+m_1,(2)}) = (\pi + a \cos\{(k_o^2 + k_{o1,(o2)}^2 - k_{e_1,(e_2)}^2)/2k_o k_{o1,(o2)}\})/2$ .

В кристалле AgGaS<sub>2</sub>, когда поляризация импульсов  $A_{SC}(t)\exp(j\gamma(t))$  и  $A_1'(t)$  соответствует волнам с обыкновенной поляризацией, поляризация импульса СГ имеет лишь  $Z$ -компоненту:  $P_Z = 2d_{36}E_X^\omega E_X^\omega$  [16].

Угловое расхождение излучения суммарной частоты определяется шириной спектра частотно-модулированного импульса  $A_{SC}(t)\exp(j\gamma(t))$ . Как было показано в работе [15], нелинейный кристалл служит анализатором спектра импульса  $A_{SC}(t)\exp(j\gamma(t))$  с аппаратной функцией  $\text{sinc}\left\{\frac{L_x}{2}\left[a(\omega_{\text{SFR}} - \omega_{\text{SFR0}}) - \frac{\omega_{\text{SFR}}}{c} \sin(\phi(\omega_{\text{SFR}}))\right]\right\}$ , где  $L_x$  – длина кристалла вдоль оси  $x$ ,  $\phi(\omega_{\text{SFR}})$  – угол между волновым вектором  $k^{\omega_{\text{SFR1(2)}}$  и  $k^{\omega_0}$ ,  $a = \sin(\phi_{m_0})/u_0$  – при центральной частоте  $\omega_{\text{SFR0}} = 2\omega_0$  излучения СГ,  $u_0$  – групповая скорость импульса  $A_{SC}(t)\exp(j\gamma(t))$ . Пространственное разрешение анализатора обратно пропорционально  $L_x$ , а спектрально-угловое разрешение определяется как  $d\phi(\omega_{\text{SFR}})/d\omega_{\text{SFR}}$ , где  $\phi(\omega_{\text{SFR}}) = a \sin(ca(\omega_{\text{SFR}} - \omega_{\text{SFR0}})/\omega_{\text{SFR}})$ .

При  $L_x = 2.5$  мм ( $1/L_x = 0.4 \times 10^{-3}$  мкм<sup>-1</sup>) происходит пространственно-угловое разрешение волновых векторов излучения суммарной частоты в диапазоне от  $k^{\omega_{\text{SFR1}}} = 3.622$  до  $k^{\omega_{\text{SFR2}}} = 8.519$  мкм<sup>-1</sup> (рис.2). Очевидно, что с учетом дифракции количество пространственно-угловых разрешенных волновых векторов будет меньше.

Согласно результатам численного интегрирования уравнения (1), при  $N^2 = 1$  [12] ширина спектра импульса  $A_{SC}(t)\exp(j\gamma(t))$  максимальна на входе среды и простирается от  $\nu_{10} = 116.252$  ( $\lambda_{10} = 2.581$ ,  $k^{10} = 5.871$ ) до  $\nu_{20} = 123.748$  ТГц ( $\lambda_{20} = 2.424$  мкм,  $k^{20} = 6.254$  мкм<sup>-1</sup>). Углы, которые составляет волновой вектор спектральной компоненты  $\omega_0$  обыкновенно-поляризованного импульса  $A_1'(t)$  с волновыми векторами спектральных компонент  $\nu_{10} + \nu_0$  и  $\nu_{20} + \nu_0$  необыкновенно-поляризованного излучения  $A_{SC}(t)\exp(j\gamma(t))$ , составляют  $\phi_{m_1} = 8.37'$  и  $\phi_{m_2} = 8.23'$ , соответственно. При толщине кристалла AgGaS<sub>2</sub>, равной  $L_C = 0.5$  мм, частотные компоненты излучения  $\nu_{10} + \nu_0$  и  $\nu_{20} + \nu_0$  на выходном торце кристалла из-за частотно-угловой дисперсии в кристалле будут разнесены вдоль оси  $x$  на величины  $L_C \tan(\phi_{m_1} - \phi_{m_0}) = -1.108$  мкм и  $L_C \tan(\phi_{m_0} - \phi_{m_2}) = 0.967$  мкм, соответственно (рис.2). Согласно рис.2, частоте излучения  $2\nu_0$  необыкновенно-поляризованного излучения соответствует координата  $x = 0$ . В табл.1 приведены значения параметров, полученные в результате численного интегрирования уравнения (1), при  $N^2 = 4; 9; 16$  и  $25$ .

Следует отметить, что рефракция излучения на границе кристалл–воздух приведет к увеличению частотно-угловой дисперсии спектральных компонент

Табл.1. Значения параметров, полученные в результате численного интегрирования

$N^2$	$z/z_s$	$v_{SFR1}$ , ТГц	$v_{SFR2}$ , ТГц	$\lambda_{SFR1}$ , МКМ	$\lambda_{SFR2}$ , МКМ	$k^{oSFR1}$ , МКМ <sup>-1</sup>	$k^{oSFR2}$ , МКМ <sup>-1</sup>	$\phi_{m1}$	$\phi_{m2}$	$L_C \tan(\phi_{m1}-\phi_{m0})$ , МКМ	$L_C \tan(\phi_{m2}-\phi_{m0})$ , МКМ
4	0.482	106.646	133.354	2.813	2.250	5.382	6.744	8.56'	8.4'	3.734	3.704
9	0.716	92.038	147.962	3.259	2.028	4.639	7.491	9.23'	7.34'	-8.146	7.784
16	0.778	80.985	159.015	3.704	1.887	4.077	8.058	9.46'	7.8'	-11.834	11.036
25	0.113	72.028	167.972	4.165	1.786	3.622	8.519	10.5'	6.46'	-15.105	13.910

широкополосного когерентного источника света в среднем ИК диапазоне.

Очевидно, что увеличение толщины кристалла  $L_C$  приведет к увеличению линейно-частотной дисперсии нелинейно-оптического анализатора, однако толщина кристалла ограничивается дисперсионным расплыванием взаимодействующих импульсов. Длина дисперсионного расплывания импульса накачки  $L_D = \tau_0^2 / (2|\beta_2(\omega_0)|)$  составляет 4.77 мм, что приблизительно в 9.54 раза больше  $L_C = 500$  мкм, и, следовательно, при заданной толщине кристалла дисперсионным расплыванием импульсов можно пренебречь.

Поперечное распределение энергии излучения СГ вдоль оси  $x$  при определенных условиях соответствует кросскорреляционной функции (ККФ) профилей интенсивности взаимодействующих импульсов  $A_{SC}(t)\exp(j\gamma(t))$  и  $A_1'(t)$  [16–18]. Определим такие условия генерации импульса СГ, чтобы регистрируемое двумерное распределение энергии импульса СГ адекватно соответствовало динамической спектрограмме импульса  $A_{SC}(t)\exp(j\gamma(t))$ .

Процесс генерации СГ должен быть реализован в ненасыщенном режиме, т. е. энергия излучения СГ  $W_3$  на выходе из нелинейного кристалла должна удовлетворять условию  $W_3 \ll W_1, W_2$ , где  $W_1$  и  $W_2$  – энергии импульсов  $A_{SC}(t)\exp(j\gamma(t))$  и  $A_1'(t)$ , соответственно. При этом важно уменьшить влияние дисперсионных эффектов, влияние эффекта группового разбегания импульсов и дисперсии групповых скоростей, а также диафрагменно-апертурного эффекта, обусловленного угловым сносом необыкновенной волны, соответствующей импульсу СГ. Рассматриваемые условия неколлинеарной генерации СГ соответствуют режиму генерации при заданных полях импульсов накачки. При рассматриваемом 90°-синхронизме пространственный снос необыкновенной волны отсутствует. Таким образом, толщина кристалла  $L_C$  AgGaS<sub>2</sub>, предназначенная для генерации СГ в FROG корреляторе, выбирается исходя из вышеизложенного и составляет 0.5 мм.

Другим важным аспектом является точность юстировки угла фазового синхронизма. Оптимальная юстировка достигается при соблюдении условия  $(k_{e2} - k_o \cos(\phi_{+m0}) - k_o \cos(\phi_{-m0})) L_C / 2 \ll 1$  в пределах ширины спектра как импульса  $A_1'(t)$ , так и импульса  $A_{SC}(t)\exp(j\gamma(t))$ . При выполнении указанных требований измеряемая зависимость распределения энергии излучения СГ от временной задержки  $\tau = x \sin(\phi_m) / u$  пропорциональна ККФ интенсивностей взаимодействующих импульсов [17, 18]

$$W_3(\tau) \propto \int_{-\infty}^{\infty} |A_{SC}(t - \tau) \exp(j\gamma(t - \tau))|^2 |A'_1(t + \tau)|^2 dt, \quad (5)$$

где  $\sin(\phi_{m0})/u = 1.1996$  фс/мкм – коэффициент пространственно-временной развертки.

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

$$I_3(\tau, \nu) \propto \left| \int_{-\infty}^{\infty} A_{SC}(t - \tau) \exp(j\gamma(t - \tau)) A'_1(t) dt \right|^2, \quad (6)$$

где, согласно вышесказанному, временной профиль интенсивности  $|A'_1(t)|^2$  определяется отдельным FROG кросс-коррелятором (рис. 1). В качестве спектрографа, помещенного на выходе нелинейного кристалла, рассматривается дифракционная решетка с постоянной 600 шт/мм с щелями, направленными вдоль оси  $x$ , и установленная на некотором расстоянии  $L_S$  от нелинейного кристалла. Расстояние следует выбирать таким образом, чтобы дифракцией излучения СГ можно было бы пренебречь. В случае, когда излучение СГ падает на дифракционную решетку под углом  $20^\circ$  к нормали, спектральные компоненты излучения СГ  $\nu_{\omega_{SFR1}} = 72.028$  и  $\nu_{\omega_{SFR2}} = 167.972$  ТГц на расстоянии  $L_S = 0.2$  м будут разнесены вдоль оси  $z$  на величину  $\delta z = L_S (d\varphi(\omega_{SFR})/d\omega_{SFR}) \Delta\omega_{SFR} = 352.88$  мкм, где  $\Delta\omega_{SFR} = 2\pi (\nu_{SFR2} - \nu_{SFR1}) = 602.83$  ТГц ( $\Delta\omega_{SFR}$  – изменение частоты суммарного излучения). Регистрацию динамической спектрограммы  $I(\tau, \nu)$  можно реализовать с помощью CCD камеры. По зарегистрированной динамической спектрограмме определяются амплитуда и фаза импульса излучения спектрального суперконтинуума  $A_{SC}(t) \exp(j\gamma(t))$ , а чирп определяется из временной зависимости фазы импульса  $A_{SC}(t) \exp(j\gamma(t))$  [10, 11, 12, 13].

На рис.3а–е приведены двумерные распределения динамических спектрограмм импульса  $A_{SC}(t) \exp(j\gamma(t))$ , сформированные на выходе волокна при значениях мощности входного импульса, равных  $P_0 = 280.53$ ,  $4P_0 = 1120$ ,  $9P_0 = 2520$ ,  $16P_0 = 4490$  и  $25P_0 = 7010$  Вт, и рассчитанные в соответствии с (6) с учетом рамановского рассеяния ( $h_R \neq 0$ ).

На рис.4(а)–4(е) приведены восстановленные из динамических спектрограмм временные зависимости мгновенной частоты импульса  $A_{SC}(t) \exp(j\gamma(t))$ , сформированные на выходе волокна с учетом рамановского нелинейного отклика ( $f_R \neq 0$ ) и при значениях мощности начального импульса равным 280.53, 1120, 2520, 4490 и 7010 Вт, соответственно. Характеристические расстояния: (а)  $Z_{SPM} = 9.72$ ,  $Z_{SS} = 359.95$ ,  $Z_{RS} = 2.89$  и  $Z_{RSS} = 108.95$  мм; (б)  $Z_{SPM} = 2.43$ ,  $Z_{SS} = 90$ ,  $Z_{RS} = 0.72$  и  $Z_{RSS} = 27.24$  мм; (в)  $Z_{SPM} = 1.09$ ,  $Z_{SS} = 40$ ,  $Z_{RS} = 0.32$  и  $Z_{RSS} = 12.10$  мм; (д)  $Z_{SPM} = 0.61$ ,  $Z_{SS} = 22.5$ ,  $Z_{RS} = 0.18$  и  $Z_{RSS} = 6.81$  мм; (е)  $Z_{SPM} = 0.39$ ,  $Z_{SS} = 14.4$ ,  $Z_{RS} = 0.11$  и  $Z_{RSS} = 4.36$  мм. На рис.4(ф)–4(ж) приведены восстановленные из динамических спектрограмм временные зависимости мгновенной частоты импульса  $A_{SC}(t) \exp(j\gamma(t))$ , сформированные на выходе волокна без учета рамановского нелинейного отклика ( $f_R = 0$ ) и при значениях мощности начального

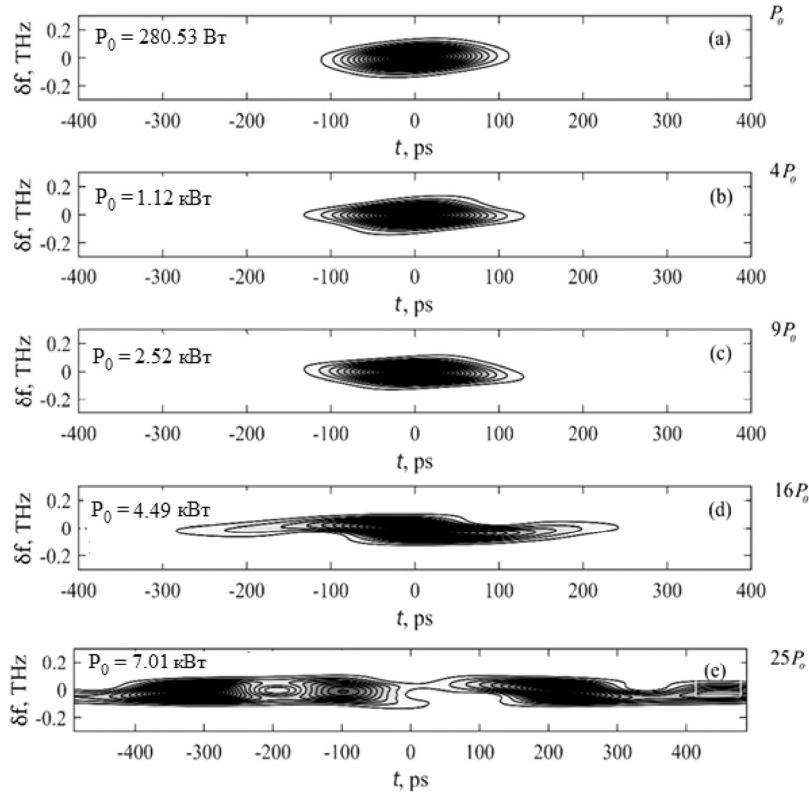


Рис.3. Двумерные распределения динамических спектрограмм импульса  $A_{SC}(t)\exp(j\gamma(t))$  на выходе волокна длиной в 15 мм с учетом рамановского нелинейного отклика ( $f_R \neq 0$ ) при значениях мощности начального импульса (а) 280.53, (b) 1120, (c) 2520, (d) 4490 и (e) 7010 Вт, соответственно.

импульса равным 280.53, 1120, 2520, 4490 и 7010 Вт, соответственно. Характеристические расстояния: (f)  $Z_{SPM} = 9.72$ ,  $Z_{SS} = 359.95$  мм; (g)  $Z_{SPM} = 2.43$ ,  $Z_{SS} = 90$  мм; (h)  $Z_{SPM} = 1.09$ ,  $Z_{SS} = 40$  мм; (i)  $Z_{SPM} = 0.61$ ,  $Z_{SS} = 22.5$  мм; (j)  $Z_{SPM} = 0.39$ ,  $Z_{SS} = 14.4$  мм.

На рис. 4(a)–4(j) пунктирными линиями показаны соответствующие зависимости мгновенных частот, полученных из результатов численного интегрирования уравнения (1).

Согласно результатам расчетов и как видно из рис.4(a)–(c) и 4(f)–(j), при значениях мощности входного импульса 280.53, 1120 и 2520 Вт временные зависимости мгновенной частоты импульса  $A_{SC}(t)\exp(j\gamma(t))$ , полученные из результатов численных интегрирований уравнения (1) совпадают с соответствующими зависимостями, полученными из двумерных распределений динамических спектрограмм импульса  $A_{SC}(t)\exp(j\gamma(t))$ , с относительной погрешностью не более 3–5% (нормированное значение средне-квадратичного отклонения).

В работе [19] приведены результаты теоретического исследования корректности восстановления временного профиля фемтосекундного импульса кросс-корреляционным методом. Показано, что относительная погрешность

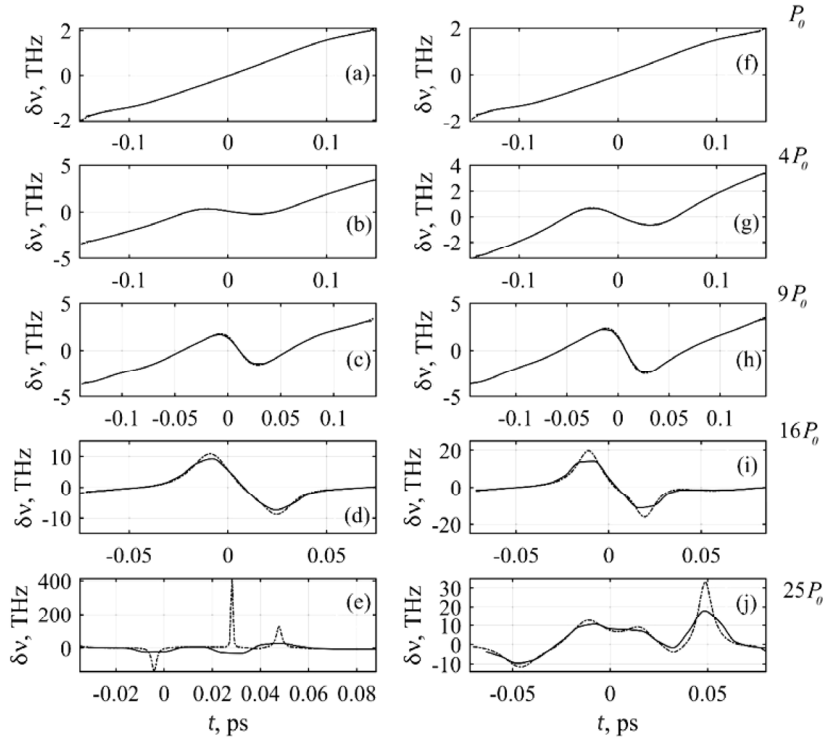


Рис.4. Восстановленные из динамических спектрограмм временные зависимости мгновенной частоты импульса  $ASC(t)\exp(j\gamma(t))$ , сформированные на выходе волокна.

восстановления временного профиля фемтосекундного импульса кросскорреляционным методом определяется корректностью обращения интеграла свертки импульса заданной формы с исследуемым импульсом.

В настоящей работе, основанная на решении интегралов свертки (5) и (6), относительная погрешность восстановления временного профиля ЧМФИ определяется как корректностью определения временной зависимости спектрально-ограниченного ИК импульса с помощью FROG – нелинейно-оптического коррелятора, так и корректностью обращения интегралов свертки (5) и (6). Способ оценки относительной погрешности предложенного нами метода соответствует способу описанной в работе [19].

При значениях мощности входного импульса 4490 и 7010 Вт временные зависимости мгновенной частоты импульса  $A_{sc}(t)\exp(j\gamma(t))$ , полученные из результатов численных интегрирований уравнения (1), совпадают с соответствующими зависимостями, полученными из двумерных распределений динамических спектрограмм с относительной погрешностью не более 10%.

Отметим некоторые особенности предлагаемого кросскорреляционного XFROG метода измерения. XFROG отлично подходит для измерения импульсов с большой фазовой модуляцией, кросс-фазовой модуляцией или импульсов в разных спектральных областях и в отличие от автокорреляционного FROG XFROG дает прямую информацию о временной форме импульса без двусмысленности относительно знака фазы или направления времени.

В кросс-корреляторе XFROG можно использовать, например, импульс от видимого лазера для измерения импульса в инфракрасной области. В то время как FROG требует высокого качества и высокой энергии для самовзаимодействия импульса, XFROG обеспечивает гибкость за счет использования внешнего опорного источника. XFROG позволяет проводить измерения на низких энергиях импульса, так как опорный импульс может быть интенсивным [11].

## 5. Заключение

Приведены результаты теоретического исследования и численного моделирования процесса генерации спектрального суперконтинуума в поле фемтосекундного лазерного импульса, распространяющегося в одномодовом режиме в волокне на основе халькогенидного стекла  $As_2S_3$ . Приводятся результаты численного решения уравнения, полученного в приближении медленноменяющихся амплитуд и описывающего процесс генерации спектрального суперконтинуума с учетом рамановского рассеяния.

В настоящей работе предлагается нелинейно-оптический метод определения chirpa широкополосного фемтосекундного лазерного импульса в ИК диапазоне, основанный на неколлинеарной генерации импульсов суммарной частоты спектрально-ограниченным фемтосекундным и широкополосным частотно-модулированным фемтосекундными импульсами. В качестве нелинейной среды для неколлинеарной генерации импульсов суммарной частоты предлагается использовать  $AgGaS_2$  (тиогаллат серебра) – отрицательный одноосный кристалл точечной группы симметрии  $\bar{4}2m$  с диапазоном прозрачности от 0.5 до 13 мкм.

Полученные результаты могут быть использованы при разработке широкополосных когерентных источников света в среднем ИК диапазоне.

## ЛИТЕРАТУРА

1. **J. Swiderski.** Appl. Sci., **12**, 4927 (2022).
2. **С.А. Ахманов В.А. Выслоух, А.С. Чиркин.** Оптика фемтосекундных лазерных импульсов. Москва, Наука, 1988.
3. **G.P. Agrawal.** Nonlinear Fiber Optics. San Diego, Academic Press, 2007.
4. **T.K. Gustafson, J.P. Taran, H.A. Haus, J.R. Lifshitz, P.L. Kelley.** Phys. Rev., **177**, 306 (1969).
5. **Y.X. Yan, E.B. Gamble, K.A. Nelson.** J. Chem. Phys., **83**, 5391 (1995).
6. **G. Tao, H. Ebendorff-Heidepriem, A.M. Stolyarov, S. Danto, J.V. Badding, Y. Fink, J. Ballato, A.F. Abouraddy.** Infrared Fibers, Adv. Opt. Photon., **7**, 379 (2015).
7. **V.S. Shiryaev, M.F. Churbanov.** Non-Crystalline Solids, **377**, 225 (2013).
8. **J.M. Dudley, J.R. Taylor.** Supercontinuum Generation in Optical Fibers. Cambridge University Press, 2010.
9. **J.S. Sanghera, L.B. Shaw, P. Pureza, V.Q. Nguyen, D. Gibson, L. Busse, I.D. Aggarwal, C.M. Florea, F.H. Kung.** Int. J. Appl. Glass Sci. **1**, 296 (2010).
10. <http://www.qpeak.com/technologies/ultrafast-lasers> .
11. **R. Trebino.** Frequency-Resolved Optical Gating: The Measurement of Ultrashort Laser Pulses. New York, Springer Science+Business Media, 2002.

12. **D.L. Hovhannisyán, A.O. Hovhannisyán, A.H. Vardanyán, G.D. Hovhannisyán.** Optical Memory and Neural Networks, **29**, 165 (2020).
13. **M.N. Polyanskiy.** Sci. Data, **11**, 94 (2024).
14. **W.S. Rodney, I.H. Malitson, T.A. King.** J. Opt. Soc. Am., **48**, 633 (1958).
15. **Е.И. Андреева, М.С. Былина, С.Ф. Глаголев, П.А. Чаймарданов.** Труды учебных заведений связи, **4**, 5 (2018).
16. **K. Yang, S. Tripathy, J. Kumar.** Mol. Cryst. Liq. Cryst. B: Nonlinear Opt., **19**, 31 (1998).
17. **Р.А. Авакян, А.О. Варданян, Д.Л. Оганесян.** Квантовая Электроника, **21**, 75 (1994).
18. **D.L. Hovhannisyán, A.H. Vardanyán, G.D. Hovhannisyán.** Contemporary Physics (Armenian Academy of Sciences), **53**, 112 (2018).
19. **А.О. Варданян, А.Э. Маилян, Д.Л. Оганесян.** Квантовая Электроника, **24**, 861 (1997).

**ՖԵՄՏՈՎԱՅՐԿՅԱՆԱՅԻՆ ԻՆՖՐԱԿԱՐՄԻՐ ԼԱԶԵՐԱՅԻՆ ԻՄՊՈՒԼՍԻ ՉԻՐՈՐ  
ԳՐԱՆՅԵԼՈՒ ՈՉ ԳԾԱՅԻՆ ՕՊՏԻԿԱԿԱՆ ՄԵԹՈՂ**

Մ.Լ. ՄՈՎՍԻՍՅԱՆ, Դ.Լ. ՀՈՎՀԱՆՆԻՍՅԱՆ

Առաջարկվում է ֆեմտովայրկյանային ինֆրակարմիր լազերային իմպուլսի չիրպը գրանցելու նոր մեթոդ, որը հիմնված է փոխակերպ - սահմանափակ ինֆրակարմիր ֆեմտովայրկյանային իմպուլսի և սպեկտրալ գերշարունակականությամբ իմպուլսի գումարային հարմոնիկի ոչ կոլինեարային առաջացման վրա: Այս հոդվածում ներկայացված են ինֆրակարմիր իմպուլսի ակնթարթային հաճախականության ժամանակային կախվածությունները սպեկտրալ գերշարունակականության հետ, որոնք ստացվել են դինամիկ սպեկտրոգրամների երկչափ բաշխումներից: Ցույց է տրվել, որ առաջարկվող մեթոդով ֆեմտովայրկյանային ինֆրակարմիր լազերային իմպուլսի չիրպը որոշելու հարաբերական սխալը չի գերազանցում 10% -ը: Ներկայացված արդյունքները կարող են օգտագործվել ոչ գծային օպտիկական փուլային կորեյաստորի զարգացման համար, որը կկիրառվի ինֆրակարմիր միջակայքում ֆեմտովայրկյանային լազերային իմպուլսի փուլային և ժամանակային պրոֆիլը որոշելու համար:

**NONLINEAR OPTICAL METHOD FOR RECORDING THE CHIRP OF A  
FEMTOSECOND INFRARED LASER PULSE**

M.L. MOVSISYAN, D.L. HOVHANNISYAN

A new method for recording the chirp of a femtosecond IR laser pulse is proposed, based on non-collinear generation of the sum harmonic by a transform-limited IR femtosecond pulse and a pulse with a spectral supercontinuum. This paper presents the time dependences of the instantaneous frequency of an IR pulse with a spectral supercontinuum, obtained from two-dimensional distributions of dynamic spectrograms. It is shown that the relative error in determining the chirp of a femtosecond IR laser pulse by the proposed method does not exceed 10%. The presented results can be used in the development of a nonlinear optical phase correlator for determining the phase and time profile of a femtosecond laser pulse in the mid-IR range.

## **ДАТЧИК ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ДЕТЕКТОРА ОДИНОЧНЫХ ФОТОНОВ СО СВЕРХПРОВОДЯЩИМ МОЛИБДЕНОВЫМ ПОГЛОТИТЕЛЕМ**

**А.А. КУЗАНЯН, В.Р. НИКОГОСЯН, А.С. КУЗАНЯН\***

Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак, Армения

\*e-mail: akuzanyan@yahoo.com

(Поступила в редакцию 27 ноября 2025 г.)

Рассмотрена возможность создания датчика однофотонного детектора с молибденовым поглотителем и теплоотводом, гексоборидом лантана-церия в качестве термоэлектрического слоя и сапфировой диэлектрической подложкой. Методом компьютерного моделирования исследовалось поглощение одиночных фотонов с энергией 0.8, 1.65 и 3.1 эВ в датчике с площадью поверхности 1 и 0.25 мкм<sup>2</sup> при рабочей температуре 0.5 и 0.8 К. Представлены результаты как распространения тепла в трехслойном датчике, так и определения мощности сигнала, эквивалентной мощности шума и отношения сигнал/шум. Исследованы временные зависимости температуры в различных областях датчика и средней температуры поверхности слоев. Определены максимальная температура, время достижения максимума, время спада температуры до уровня фона и характеристики температурного градиента на границах термоэлектрического. Систематизация полученных данных позволила определить оптимальную конструкцию сенсора для эффективной регистрации одиночных фотонов от ближней инфракрасной до ультрафиолетовой области спектра.

### **1. Введение**

Данная работа продолжает наши исследования по моделированию процессов распространения тепла в многослойных структурах для разработки термоэлектрического однофотонного детектора с высокой эффективностью регистрации фотонов в широкой области электромагнитного спектра и терагерцовой скоростью счета [1–3]. Однофотонные детекторы с высокими характеристиками используются в квантовой электронике, спектроскопии, астрономии, квантовых вычислениях, телекоммуникации, биологии, безопасности, медицине, метрологии, визуализация и бесконтактных измерениях температуры [4–15]. Для большинства перечисленных применений однофотонных детекторов положительным фактором является их малые геометрические размеры [16–21].

В предыдущих исследованиях нами рассматривались различные конструкции термоэлектрических датчиков с различной геометрией и из различных материалов. В качестве материала поглотителя и теплоотвода рассматривались и сверхпроводники. Некоторые оценки характеристик термоэлектрических датчиков, в конструкцию которых были включены сверхпроводники Nb, Pb и YBCO, были представлены в [22]. Однако, в данной работе не было определено отношение сигнал/шум (SNR), которое должно быть как минимум больше единицы,

чтобы можно было говорить об эффективной регистрации поглощенного фотона. Характеристики датчика со сверхпроводящим поглотителем Bi 2223 и антиотражающим SiO<sub>2</sub> слоем при поглощении фотонов с энергией 1–1000 эВ изучены в [23], а SNR определено в работе [24]. Установлено, что SNR возрастает с увеличением энергии фотона, но даже для фотонов с энергией 1000 эВ он значительно меньше единицы. Использование разными группами исследователей различных сверхпроводников, в том числе и высокотемпературных, в конструкции сверхпроводящих нанопроволочных однофотонных детекторов обсуждено в [25–30].

Целью настоящей работы является исследование характеристик термоэлектрических датчиков с поглотителем и теплоотводом из молибдена. Рассматриваются наноразмерные датчики с площадью поверхности 1 и 0.25 мкм<sup>2</sup> при рабочей температуре ниже критической температуры сверхпроводящего перехода молибдена ( $T_c = 0.92$  К [31]).

## 2. Методы исследований

Исследовались характеристики трехслойного датчика Mo/(La,Ce)B<sub>6</sub>/Mo/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (MLCM) с площадью поверхности  $A$ , равной  $1 \times 1$  и  $0.5 \times 0.5$  мкм<sup>2</sup>, толщинами поглотителя, термоэлектрического слоя и теплоотвода соответственно  $d_1 = 15$ ,  $d_2 = d_3 = 10$  нм. Толщина диэлектрической подложки составляла 100 нм. Рабочая температура ( $T_o$ ) принимала значения 0.5 и 0.8 К.

Шумы тепловых датчиков подробно рассмотрены различными авторами [37–41]. Расчет шумов и компьютерное моделирование процессов распространения тепла в трехслойном термоэлектрическом датчике MLCM после термализации одиночных фотонов в центре поверхности поглотителя проводилось с использованием описанных в работах [2–5] методик. Нами изучены временные зависимости температуры в зоне термализации, в центре поверхности слоев и в 10 точках с одинаковым шагом от центра к границе поверхности. Используемые при моделировании и расчете шумов значения физических параметров использованных материалов приведены в табл.1. Используя полученные временные зависимости температуры выбранных областей датчика, определялись параметры временной зависимости разности усредненной температуры на границах термоэлектрического слоя.

Табл.1. Физические параметры материалов

Параметры	Материалы		
	(La,Ce)B <sub>6</sub>	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Mo
	$T_o = 0.5$ К		
плотность, кг/м <sup>3</sup>	4720	4000	10280
теплоемкость, Дж/(кг×К)	0.196 [32]	0.001 [34]	0.011 [36]
теплопроводность, Вт/(м×К)	0.35 [32]	0.7 [35]	25 [36]
коэффициент Зеебека, мкВ/К	90 [32]		
удельное сопротивление, Ом×м	$3 \times 10^{-8}$ [33]		0
	$T_o = 0.8$ К		
теплоемкость, J/(кг×К)	0.16 [32]	0.0016 [34]	0.015 [36]
теплопроводность, W/(м×К)	0.7 [32]	2.6 [35]	40 [36]
коэффициент Зеебека, мкВ/К	100.5 [32]		
удельное сопротивление, Ом×м	$2.6 \times 10^{-8}$ [33]		0

### 3. Результаты

#### 3.1. Эквивалентная мощность шума

Для определения эффективности регистрации уже поглощенного фотона датчиком MLCM необходимо рассчитать отношение сигнал/шум, а следовательно, и мощность шума, а следовательно, и эквивалентную мощность шума, которую мы рассчитали по формулам для Джонсоновского шума

$$NEP_J^2 = 4k_B T (\rho_1 d_1 + \rho_2 d_2) (4A \varepsilon \sigma_{SB} T^3 + k_1 d_1 + k_2 d_2)^2 / A |S|^2,$$

фононного шума

$$NEP_P^2 = 4k_B T^2 (4A \varepsilon \sigma_{SB} T^3 + k_3 d_3),$$

и суммарного шума

$$NEP^2 = NEP_P^2 + NEP_J^2.$$

В этих уравнениях  $k_B$  – постоянная Больцмана,  $T$  – рабочая температура,  $A$  – площадь поверхности датчика,  $\varepsilon$  — поглощательная способность поглотителя (мы приняли ее равной 1),  $\sigma_{SB}$  – постоянная Стефана–Больцмана,  $S$  – коэффициент Зеебека термоэлектрического слоя,  $\rho_1, d_1, k_1$  обозначают удельное сопротивление, толщина и теплопроводность поглотителя,  $\rho_2, d_2, k_2$  и  $d_3, k_3$  те же параметры для термоэлектрического слоя и теплоотвода. Данные эквивалентной мощности шума датчика с различной площадью поверхности и при различной рабочей температуре приведены в табл.2. Эквивалентная мощность фононного шума увеличивается с ростом рабочей температуры и не зависит от площади поверхности датчика. Джонсоновский шум растет с увеличением рабочей температуры и уменьшением площади поверхности датчика, однако он значительно меньше фононного шума и незначительно влияет на значения суммарного шума, который несколько увеличивается с увеличением рабочей температуры от 0.5 до 0.8 К. Эквивалентная мощность шума не зависит от энергии поглощенного фотона.

Табл.2. Эквивалентная мощность шума MLCM датчика

$E, \text{эВ}$	$T_0, \text{К}$	$A, \text{мкм}^2$	$NEP_P^2, \text{Вт}^2 \Gamma_{\text{ц}}^{-1}$	$NEP_J^2, \text{Вт}^2 \Gamma_{\text{ц}}^{-1}$	$NEP, \text{фВт} \Gamma_{\text{ц}}^{-1/2}$
3.1	0.5	0.25	$3.45 \times 10^{-30}$	$5.86 \times 10^{-31}$	2.00893
3.1	0.8	0.25	$1.41 \times 10^{-29}$	$1.68 \times 10^{-30}$	3.97575
1.65	0.5	0.25	$3.45 \times 10^{-30}$	$5.86 \times 10^{-31}$	2.00893
1.65	0.8	0.25	$1.41 \times 10^{-29}$	$1.68 \times 10^{-30}$	3.97575
0.8	0.5	0.25	$3.45 \times 10^{-30}$	$5.86 \times 10^{-31}$	2.00893
0.8	0.8	0.25	$1.41 \times 10^{-29}$	$1.68 \times 10^{-30}$	3.97575
3.1	0.5	1	$3.45 \times 10^{-30}$	$1.46 \times 10^{-31}$	1.89643
3.1	0.8	1	$1.41 \times 10^{-29}$	$4.19 \times 10^{-31}$	3.81445
1.65	0.5	1	$3.45 \times 10^{-30}$	$1.46 \times 10^{-31}$	1.89643
1.65	0.8	1	$1.41 \times 10^{-29}$	$4.19 \times 10^{-31}$	3.81445
0.8	0.5	1	$3.45 \times 10^{-30}$	$1.46 \times 10^{-31}$	1.89643
0.8	0.8	1	$1.41 \times 10^{-29}$	$4.19 \times 10^{-31}$	3.81445

### 3.2. Моделирование процессов распространения тепла в MLCM датчике

Основной целью исследований процессов распространения тепла в термоэлектрическом датчике однофотонного детектора является определение параметров возникающего на нем после поглощения фотона сигнала. Сигналом термоэлектрического датчика является электрическое напряжение  $V$ , возникающее на границах термоэлектрического слоя. Значения этого напряжения задаются формулой  $V = S \times \Delta T_a$ , в которой  $S$  – коэффициент Зеебека материала термоэлектрического слоя,  $\Delta T_a$  – градиент температуры, усредненный по поверхности границ термоэлектрического слоя. Так как при всех рассматриваемых температурах материал термоэлектрического слоя имеет меньшую теплопроводность, чем материал поглотителя и теплоотвода (табл.1), усредненная температура границы поглотитель–термоэлектрический слой оказывается значительно больше усредненной температуры границы термоэлектрический слой–теплоотвод, что и определяет значения параметра  $\Delta T_a$ .

Закономерности распространения тепла в термоэлектрических датчиках со сверхпроводящим поглотителем и теплоотводом после поглощения одиночных фотонов аналогичны установленным ранее особенностям теплопередачи в многослойных сенсорах других конструкций [1–5]. Эти закономерности одинаковы для поверхности всех слоев сенсора и не изменяются с изменением энергии фотона, геометрии и рабочей температуры сенсора. Наиболее высокая температура достигается в центре поверхности слоя, непосредственно под зоной термализации. При удалении от центра значения максимума уменьшаются, а время достижения максимума увеличивается. Эти закономерности общие для поверхности всех слоев, однако чем дальше расположена поверхность от зоны термализации, тем меньшая максимальная температура на нем достигается.

Численные значения параметров, характеризующих процесс распространения тепла в рассматриваемом датчике, а именно: значения максимальной температуры в зоне термализации фотона ( $T_{ta}$ ), максимальной усредненной температуры поверхности первого слоя ( $T_{a1}$ ), максимума градиента усредненной температуры на термоэлектрическом слое ( $\Delta T_a$ ) и ширины на полувысоте

Табл.3. Параметры процесса распространения тепла в MLCM датчике

$E$ , эВ	$T_o$ , К	$T_{ta}$ , К	$T_{a1}$ , К	$\Delta T_a$ , мК	FWHM, фс
		$A = 0.25 \text{ мкм}^2$			
3.1	0.5	11.213	2.303	1346.369	356
	0.8	8.603	2.121	981.411	146
1.65	0.5	6.202	1.459	716.616	356
	0.8	4.953	1.503	522.364	146
0.8	0.5	3.264	0.965	347.450	356
	0.8	2.813	1.141	253.268	146
$A = 1 \text{ мкм}^2$					
3.1	0.5	3.178	0.951	336.592	347
	0.8	2.751	1.130	245.356	143
1.65	0.5	1.926	0.740	179.154	347
	0.8	1.838	0.976	130.591	143
0.8	0.5	1.191	0.616	86.862	347
	0.8	1.303	0.885	63.317	143

зависимости  $\Delta T_a(t)$  (FWHM), приведены в табл.3. Можно видеть, что с увеличением рабочей температуры датчика  $T_o$  происходит уменьшение параметров  $\Delta T_a$  и FWHM. Это имеет место при обоих рассмотренных значениях площади поверхности датчика, причем, с уменьшением  $A$  градиент  $\Delta T_a$  увеличивается значительно, а параметр FWHM увеличивается незначительно. Интересно, что увеличение энергии фотона приводит к росту градиент  $\Delta T_a$ , а параметр FWHM не меняется.

### 3.3. Расчет мощности сигнала, мощности шума и отношения сигнал/шум

Здесь определены параметры датчика WLCM для случая поглощения фотонов с энергией 0.8, 1.65 и 3.1 эВ. Возможность регистрации электрического сигнала определяется параметром SNR, а именно, отношением мощности сигнала  $P_S$  к мощности шума  $P_N$ , которые измерены в одной и той же полосе частот регистрирующей системы  $\Delta f$ . Мощность шума определяется уравнением  $P_N = NEP \times \Delta f^{1/2}$ . Мгновенная мощность электрического сигнала системы равна  $P(t) = V^2/R$ , где  $V$  это возникающее в системе с сопротивлением  $R$  электрическое напряжение. Активная мощность, усредненная за период  $\tau$ , равна  $P = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau P(t) dt$ . Мгновенное напряжение на датчике равно произведению коэффициента Зеебека термоэлектрического слоя на разность усредненных температур на его границах. Разделив интеграл мгновенной мощности на время интегрирования сигнала, которое в нашем случае является временем спада сигнала до фонового значения, получим мощность сигнала  $P_S$ .

Зависимость параметров  $\tau$ ,  $P_N$ ,  $P_S$  и SNR от энергии поглощенного фотона приведена на рис.1–4. Нумерация кривых на всех рисунках соответствует следующим значениям рабочей температуры и площади поверхности датчика: 1 –  $T_o = 0.5$  К,  $A = 0.25$  мкм<sup>2</sup>; 2 –  $T_o = 0.8$  К,  $A = 0.25$  мкм<sup>2</sup>; 3 –  $T_o = 0.5$  К,  $A = 1$  мкм<sup>2</sup>; 4 –  $T_o = 0.8$  К,  $A = 1$  мкм<sup>2</sup>. На рис.1 приведена зависимость времени спада градиента усредненной температуры до фонового значения, отличающегося от рабочей температуры на 0.1 мК, от энергии фотона. Можно видеть, что параметр  $\tau$  увеличивается с ростом энергии фотона больше для датчика с меньшей площадью поверхности и большей рабочей температурой. Очевидно, что обратная ей

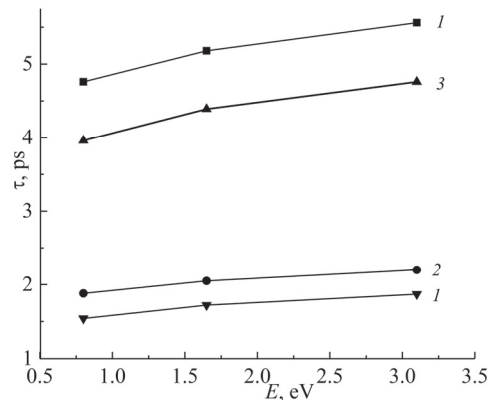


Рис.1. Зависимость параметра  $\tau$  от энергии фотона при различной рабочей температуре и площади поверхности сенсора.

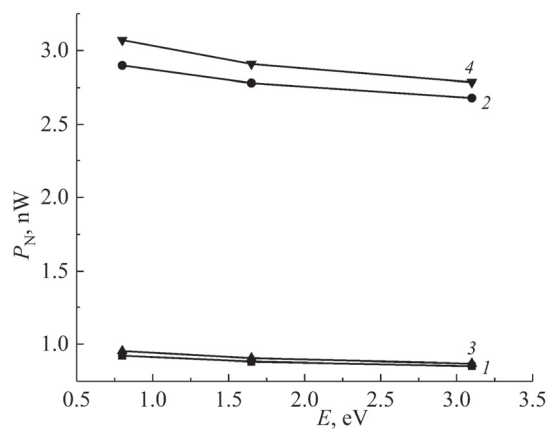


Рис.2. Зависимость мощности шума от энергии фотона.

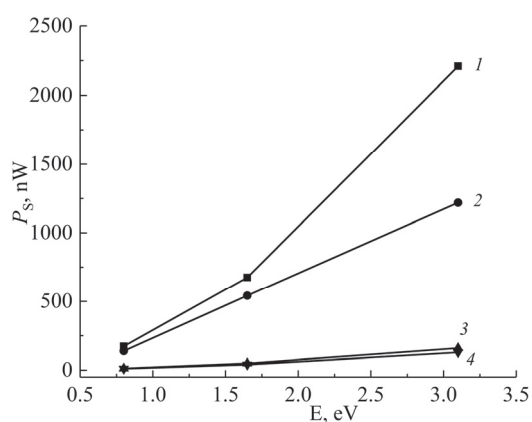


Рис.3. Зависимость мощности сигнала от энергии фотона.

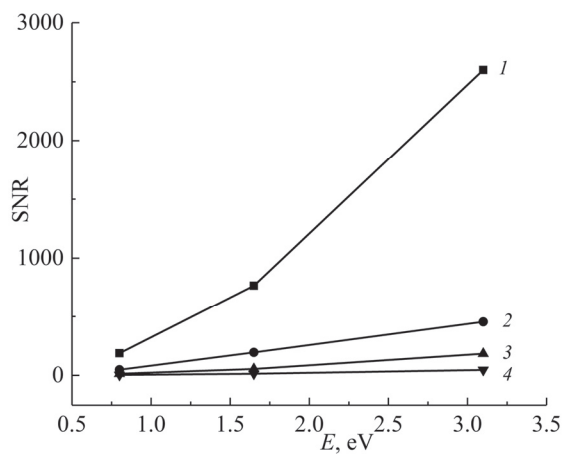


Рис.4. Зависимость отношения сигнал/шум от энергии фотона.

величина, полоса частот регистрирующей системы  $\Delta f$ , с увеличением энергии фотона будет уменьшаться. Для рассмотренных значений энергий фотона, площади поверхности и рабочей температуры датчика параметр  $\Delta f$ , который можно рассматривать и как скорость счета детектора, изменяется в пределах 180–650 ГГц.

Мощность шума слегка убывает с увеличением энергии фотона, слегка возрастает с увеличением площади поверхности сенсора и возрастает значительно с увеличением рабочей температуры (рис.2). Мощность сигнала возрастает с увеличением энергии фотона. При одинаковой площади поверхности сенсора она больше в случае меньшей рабочей температуры, а при одинаковой рабочей температуре больше в случае меньшей площади поверхности сенсора (рис.3). Отношение сигнал/шум возрастает с увеличением энергии фотона, при одинаковой энергии фотона больше в случае меньшей рабочей температуры и площади поверхности сенсора (рис.4). Параметр SNR изменяется в пределах от 3.4 до 2600. Он больше 1 при всех рассмотренных случаях, что особенно важно для однофотонного детектирования в ближней инфракрасной области.

#### 4. Заключение

Предложена конструкция датчика термоэлектрического детектора с поглотителем и теплоотводом из сверхпроводящего материала. Датчик состоит из сапфировой подложки, на которой последовательно расположены молибденовый теплоотвод, термоэлектрически слой из гексаборида лантана-церия и молибденовый поглотитель. Получены результаты моделирования процессов распространения тепла в датчике с рабочей температурой 0.5 и 0.8 К, которые ниже критической температуры сверхпроводящего перехода молибдена 0.92 К. Рассмотрено поглощение одиночных фотонов с энергией 0.8, 1.65 и 3.1 эВ в датчике с площадью поверхности 0.25 и 1 мкм<sup>2</sup>. Рассчитана эквивалентная мощность джонсоновского и фононного шума. Определены мощность возникающего на датчике сигнала и отношение сигнал/шум. Основным полученным результатом является то, что предложенная конструкция датчика с поглотителем и теплоотводом из сверхпроводящего молибдена обеспечивает SNR > 1, следовательно, эффективную регистрацию уже поглощенного фотона. SNR значительно выше для датчика с площадью поверхности 0.25 мкм<sup>2</sup> и рабочей температурой 0.5 К. Этот результат особенно важен для однофотонного детектирования в ближней ИК области.

Авторы благодарны А.М. Гуляну за интерес к работе и полезные дискуссии.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Комитета по высшему образованию и науке РА в рамках научного проекта № 25RG-1C065 «Разработка новой конструкции датчика термоэлектрического детектора одиночных ИК-фотонов».

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. A.A. Kuzanyan, V.R. Nikoghosyan, A.S. Kuzanyan. *IEEE Sens. J.*, **20**, 12776 (2020).
2. A.A. Kuzanyan, V.R. Nikoghosyan, A.S. Kuzanyan. *IEEE Sens. J.*, **25**, 34558 (2025).
3. A. Kuzanyan, V. Nikoghosyan, A. Davoyan, A.S. Kuzanyan. *Applied Optics*, **64**, 1 (2025).
4. R. Hadfield. *Nat. Photon.*, **3**, 696 (2009).
5. P. Križan. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A*, **1065**, 169482 (2024).
6. R.H. Hadfield, J. Leach, J.F. Fleming, D.J. Paul, C.H. Tan, J.S. Ng, R.K. Henderson, G.S. Buller. *Optica*, **10**, 1124 (2023).
7. R. Foord, R. Jones, C. Oliver, E. Pike. *Appl. Opt.*, **8**, 1975 (1969).

8. **H. Shibata, K. Shimizu, H. Takesue, Y. Tokura**, *Opt. Lett.*, **40**, 3428 (2015).
9. **D. Cornwell**. *Opt. Photonics N.*, **27**, 24 (2016).
10. **G. Tessier, M. Bardoux, C. Filloy, C. Boue, D. Fournier**. *Sensor Review*, **27**, 291 (2007).
11. **M. Mecklenburg, W.A. Hubbard, E.R. White, R. Dhall, S.B. Cronin, S. Aloni, B.C. Regan**. *Science*, **347**, 629 (2015).
12. **H. Xue, R. Qian, W. Lu, X. Gong, L. Qin, Z. Zhong, Z. An, L. Chen, W. Lu**. *Nat Commun*, **14**, 3731 (2023).
13. **D. Halbertal, J. Cuppens, M. Ben Shalom, L. Embon, N. Shadmi, Y. Anahory, H.R. Naren, J. Sarkar, A. Uri, Y. Ronen, Y. Myasoedov, L.S. Levitov, E. Joselevich, A.K. Geim, E. Zeldov**. *Nature*, **539**, 407 (2016).
14. **L. Caesar, S. Rahmstorf, A. Robinson, G. Feulner, V. Saba**. *Nature*, **556**, 191 (2018).
15. **S.C. Riser, H.J. Freeland, D. Roemmich, S. Wijffels, A. Troisi, M. Belbéoch, D. Gilbert, J. Xu, S. Pouliquen, A. Thresher, P-Y. Le Traon, G. Maze, B. Klein, M. Ravichandran, F. Grant, P-M. Poulain, T. Suga, B. Lim, A. Sterl, P. Sutton, K.-A. -Mork, P.J. Vélez-Belchí, I. Ansonge, B. King, J. Turton, M. Baringer, S.R. Jayne**. *Nat Clim Change*, **6**, 145 (2016).
16. **S. Dello Russo, A. Elefante, D. Dequal, D.K. Pallotti, L.S. Amato, F. Sgobba, M.S. de Cumis**. *Photonics*, **9**, 470, (2022).
17. **D. Cozzolino, D., Bacco, B. da Lio**. *Phys. Rev. Appl.*, **11**, 064058, (2019).
18. **F. Galeotti, M. Pisco, A. Cusano**. *Nanoscale*, **10**, 22673 (2018).
19. **Y. Dai, K. Jia, G. Zhu, H. Li, Y. Fei, Y. Guo, H. Yuan, H. Wang, L. Zhang**. *Photonix*, **4**, 7, (2023).
20. **B.G. Oripov, D.S. Rampini, J. Allmaras, M.D. Shaw, S.W. Nam, B. Korzh, A.N. McCaughan**. *Nature*, **622**, 730 (2023).
21. **H. Hao, QY. Zhao, YH. Huang, J. Deng, F. Yang, SY. Ru, Z. Liu, C. Wan, H. Liu, ZJ. Li, HB. Wang, XC. Tu, LB. Zhang, XQ. Jia, XL. Wu, J. Chen, L. Kang, PH. Wu**. *Light Sci Appl*, **13**, 25 (2024).
22. **A.A. Kuzanyan, V.R. Nikoghosyan, A.S. Kuzanyan**. *J. Contemp. Phys.*, **53**, 73 (2018).
23. **A.A. Kuzanyan, V.R. Nikoghosyan, N.G. Margiani, G.A. Mumladze, S.R. Harutyunyan, A.S. Kuzanyan**. *J. Contemp. Phys.*, **57**, 174 (2022).
24. **A.A. Kuzanyan, A.S. Kuzanyan, V.R. Nikoghosyan, L.G. Mheryan, V.T. Tatoyan, V.S. Kuzanyan, G.R. Badalyan**. *J. Contemp. Phys.*, **60**, 62 (2025).
25. **S. Tripathy, K. Tyagi, P. Pratap**. *iScience*, **27**, 110779 (2024).
26. **J. Chang, I.E. Zadeh**. *Nat. Nanotechnol.* **18**, 322 (2023).
27. **I. Charaev, D.A. Bandurin, A.T. Bollinger, I.Y. Phinney, I. Drozdov, M. Colangelo, B.A. Butters, T. Taniguchi, K. Watanabe, X. He, O. Medeiros, I. Bozovic, P. Jarillo-Herrero, K.K. Berggren**. *Nat. Nanotechnol.* **18**, 343 (2023).
28. **I. Charaev, E.K. Batson, S. Cherednichenko, K. Reidy, V. Drakinsky, Y. Yu, S. Lara-Avela, J.D. Thomsen, M. Colandelo, F. Incalza, K. Ilin, A. Schilling, K.K. Berggren**. *Nat Commun*, **15**, 3973 (2024).
29. **H. Shibata, T. Akazaki, Y. Tokura**. *Appl. Phys. Express*, **6**, 023101 (2013).
30. **S. Cherednichenko, N. Acharya, E. Novoselov, V. Drakinskiy**. *Supercond. Sci. Technol.*, **34**, 044001 (2021).
31. **K. Bhaskar, A. Narayan**. *J. Supercond. Nov. Magn.*, **36**, 1 (2023).
32. **A. Gulian, A.M. Gulian**. *Mod. Phys. Lett. B*, **34**, 2050403 (2020).
33. **K. Samwer, K. Winzer**. *Z Phys. B.*, **25**, 269 (1976).
34. **G.T. Furukawa, T.B. Douglas, R.E. McCoskey, D.C. Ginnings**. *J. Res. Natl. Bur. Stand.*, **57**, 67 (1956).

35. **M.W. Wolfmeyer, J.R. Dillinger.** Phys. Lett., **34A**, 247 (1971).
36. **W. Duffy, S. Dalal, M. Quiazon.** J Appl. Phys., **81**, 6675 (1997).
37. **J.C. Mather.** Appl. Opt., **21**, 1125 (1982).
38. **P.L. Richards.** J. Appl. Phys., **76**, 1 (1994).
39. **D.G. Johnson.** 1.14 - Thermal Sensors, Editor(s): Shunlin Liang, Comprehensive Remote Sensing, Elsevier, 2018, p. 376.
40. **U. Birkholz, R. Fettig, J. Rosenzweig.** Sens. Actuators, **12**, 179 (1987).
41. **U. Dillner, E. Kessler, H.-G. Meyer.** J. Sens. Sens. Syst., **2**, 85 (2013).

**ԳԵՐՀԱՂՈՐԴԻՉ ՄՈԼԻԲԴԵՆԻ ԿԼԱՆԻՉՈՎ ՄԻԱՖՈՏՈՆ  
ՋԵՐՄԱԷԼԵԿՏՐԱԿԱՆ ԴԵՏԵԿՏՈՐԻ ՏՎԻՉ**

Ա.Ա. ԿՈՒԶԱՆՅԱՆ, Վ.Ռ. ՆԻԿՈՂՈՍՅԱՆ, Ա.Ս. ԿՈՒԶԱՆՅԱՆ

Դիտարկված է մոլիբդենի կլանիչով և ջերմատարով, լանթան-ցերիումի հեքսոբորիդի ջերմաէլեկտրական շերտով և շափյուղայի դիէլեկտրիկ տակդիրով միաֆոտոն դետեկտորի տվիչ ստեղծելու հնարավորությունը: Համակարգչային մոդելավորման միջոցով ուսումնասիրված է 0.8, 1.65 և 3.1 էՎ էներգիաներով միակի ֆոտոնների կլանումը 1 և 0.25 մկմ<sup>2</sup> մակերես ու 0.5 և 0.8 Կ աշխատանքային ջերմաստիճան ունեցող տվիչում: Ներկայացված են եռաշերտ տվիչում ջերմության տարածման, ազդանշանի հզորության, համարժեք աղմուկի հզորության և ազդանշան-աղմուկ հարաբերակցության որոշման արդյունքները: Ուսումնասիրված են տվիչի տարբեր հատվածներում ջերմաստիճանի և շերտերի մակերևույթի միջին ջերմաստիճանի ժամանակային կախվածությունները: Որոշված են առավելագույն ջերմաստիճանը, դրան հասնելու ժամանակը, ջերմաստիճանի ֆոնային մակարդակին հասնելու ժամանակը և ջերմաէլեկտրական շերտի սահմաններում ջերմաստիճանի գրադիենտի բնութագրերը: Ստացված տվյալների համակարգումը հնարավորություն տվեց որոշել մոտ ինֆրակարմիրից մինչև ուլտրամանուշակագույն սպեկտրալ տիրույթում միակի ֆոտոնների արդյունավետ գրանցման համար տվիչի օպտիմալ կառուցվածքը:

**SINGLE-PHOTON THERMOELECTRIC DETECTOR SENSOR WITH  
SUPERCONDUCTING MOLYBDENUM ABSORBER**

A.A. KUZANYAN, V.R. NIKOGHOSYAN, A.S. KUZANYAN

The possibility of creating a single-photon detector sensor with a molybdenum absorber and heat sink, lanthanum-cerium hexaboride as the thermoelectric layer, and a sapphire dielectric substrate is considered. Using computer modeling, the absorption of single photons with energies of 0.8, 1.65, and 3.1 eV in a sensor with a surface area of 1 and 0.25  $\mu\text{m}^2$  at an operating temperature of 0.5 and 0.8 K is studied. The results of both heat propagation in a three-layer sensor and determination of the signal power, equivalent noise power, and signal-to-noise ratio are presented. The temporal dependences of the temperature in different areas of the sensor and the average surface temperature of the layers are studied. The maximum temperature, the time to reach the maximum, the time of temperature decay to the background level, and the characteristics of the temperature gradient at the boundaries of the thermoelectric layer are determined. Systematization of the obtained data made it possible to determine the optimal sensor design for efficient registration of single photons from the near infrared to ultraviolet spectral region.

## DNA SEQUENCING BY THE IONIC BLOCKADE CURRENTS METHOD

F.V. GASPARYAN\*, L.F. GASPARYAN, V.V. SIMONYAN

*DNA-HIVE LLC, Rockville, MD, USA*

\*e-mail: fgaspar@myyahoo.com

(Поступила в редакцию 5 декабря 2025 г.)

The solid-state nanopore probing technology can be useful for identifying the sequence of biological polymers. In nanopore experiments, the useful signal measured is the ionic current that passes through a nanopore while it is blocked nucleotides of a DNA molecule. The correlation between ionic blockade current passing through the nanopore, the geometric configuration of the pore, and the DNA sequence is the challenge addressed in this publication. The ionic blockade current was calculated and its histogram was constructed. An analysis of the effect of the nanopore size on the ionic blockade current was carried out. A detailed analysis of the dynamics of a DNA molecule in aqueous solution under the action of gravity, electrophoretic force and drag force is carried out. Analytical dependencies of the translocation rate of a DNA molecule through a nanopore on molecule's approach time to the nanopore, and on the applied voltage are obtained and analyzed. Numerical calculations were performed for dsDNA. Cases of coincidence and vice versa of the direction of the applied electric field with gravity are considered. For the case where the electrophoretic force is directed opposite to gravity, DNA movement slows down and the translocation rate decreases. Recommendations are provided for increasing the accuracy of reading DNA molecules. Reducing the time it takes for DNA to approach the pore can reduce the translocation rate to hundreds and thousands of nm/s. When interpreting the dynamics of the DNA molecule in aqueous solution, a new effect is introduced, which we call the "proton seduction effect".

### ЛИТЕРАТУРА

1. Gasparyan, L., Mazo, I., Gasparyan, F., and Simonyan, V., *Open Journal of Biophysics*, 2020, vol. 10, p. 96.
2. Bhattacharya, S., Yoo, J., and Aksimentiev, A., *ACS Nano*, 2016, vol. 10, p. 4644.
3. Chen, K., Gularek F., Liu, B., Weinhold, E., and Keyser, U.F., *ACS Nano*, 2021, vol. 15, p. 2629.
4. Xie, P., Xiong, Q., Fang, Y., Qing, Q., and Lieber, C.M., *Nat Nanotech.*, 2012, vol. 7, p. 119.
5. Branton, D., Deamer, D.W., Marziali, A., *et al.*, *Nat Biotechnol.*, 2008, vol. 26, p. 1146.
6. Dekker, C., *Nature Nanotech*, 2007, vol. 2, p. 209.
7. Ohshiro, T., Komoto, Y., Konno, M. and Koseki, J., *Scientific Reports*, 2019, vol. 9, p. 3886.
8. Comer, J., Dimitrov, V., Zhao, Q., Timp, G., and Aksimentiev, A., *Biophys. J.*, 2009, vol. 96, p. 593.
9. Mathé, J., Aksimentiev, A., Nelson, D.R., Schulten, K., and Meller, A., *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* 2005, vol. 102, p. 12377.

10. Bhattacharya, S., Derrington, I.M., and Pavlenok, M., *ACS Nano*, 2012, vol. 6, p. 6960.
11. Duleba, D., Dutta, P., Denuga, S., and Johnson, R.P., *ACS Meas. Sci. Au.*, 2022, vol. 2, p. 271.
12. Bezrukov, S.M., Vodyanoy, I., and Parsegian, V.A., *Nature*, 1994, vol. 370, p. 279.
13. Kasianowicz, J.J., Robertson, J.W.F., Chan, E.R., et al., *Annu. Rev. Anal. Chem.*, 2008, vol. 1, p. 737.
14. Kasianowicz, J.J., Brandin, E., Branton, D., and Deamer, D. W., *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* 1996, vol. 93, p. 13770.
15. Akeson, M., Branton, D., Kasianowicz, J.J., et al., *Biophys. J.* 1999, vol. 77, p. 3227.
16. Meller, A., Nivon, L., Brandin, E., Golovchenko, J., and Branton, D., *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* 2000, vol. 97 p. 1079.
17. Qiu, Y. and Ma, L., *Physics of Fluids*, 2022, vol, 34, p. 112010.
18. Comer, J. and Aksimentiev, A., *Nanoscale*, 2016, vol. 8, p. 9600.
19. Chen, K., Juhasz, M., Gularek, F., Weinhold, E., Tian, Y., Keyser, U.F., and Bell, N.A.W., *Nano Lett.*, 2017, vol. 17, p. 5199.
20. Wanunu, M., Sutin, J., McNally, B., Chow, A., and Meller, A., *Biophys. J.*, 2008, vol. 95, p. 4716.
21. Gupta, C., Liao, W.-C., Gallego-Perez, D., Castro, C.E., and Lee, L.J., 17th Int. Conf. on Miniaturized Syst. for Chem. and Life Sci., 27-31 October 2013, Freiburg, Germany, p. 817.
22. Saito, R.M., Brito, J.G., Lopes, F.S., and Blanes, L., *Analytical Methods*, 2010, vol. 2, p. 164.
23. Kornyshev, A.A., Kuznetsov, A.M., Spohr, E., and Ulstrup, J. *J. Phys. Chem. B.*, 2003, vol. 107, p. 3351.
24. Murad, S., *J. Chem. Phys.*, 2011, vol. 134, p. 114504.
25. Barany, S., *Adv Colloid Interface Sci.*, 2009, vol. 147-148, p. 36.
26. <https://bio.groups.et.byu.net/electricalMobility.phtml> .
27. Chassaing, P., Antonia, R.A., Anselmet, F., Joly, L., and Sarkar, S., Variable Density Fluid Turbulence (Fluid Mechanics and Its Applications), *Fluid Mechanics and Its Applications*. (2002) 69, Springer, Berlin.
28. McCormick, B.W., Aerodynamics, Aeronautics, and Flight Mechanics. John Wiley & Sons, Inc., New York, 2021.
29. Ordinary differential equations with applications. Textbook, Springer, Latest edition, © 2024.
30. Sze, S.M., Li, Y., Ng, K.K., Physics of Semiconductor Devices. 4th Edition, 2021.
31. Wang, Y., Zhao, Y., Bollas, A., et al., *Nat Biotechnol.*, 2021, vol. 39, p. 1348.
32. Fologea, D., Uplinger, J, Thomas, B., McNabb, D.S., and Li, J., *Nano Letters*, 2005, vol. 5, p. 1734.
33. Peng, H.B., and Ling, X.S.S., *Nanotechnology*, 2009, vol. 20, p. 185101.
34. He, Y., Tsutsui, M., Fan, C., Taniguchi, M., and Kawai, T., *ACS Nano*, 2011, vol. 5, p. 5509.
35. Storm, A.J., Storm, C., Chen, J., Zandbergen, H., Joanny, J.-F., and Dekker, C., *Nano Letters*, 2005, vol. 5, p. 1193.
36. Smolyanitsky, A., Yakobson, B.I., Wassenaar, T.A., Paulechka, E., and Kroenlein, K., *ACS Nano*, 2016, vol. 10, p. 9009.

**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ  
МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫХ ПЕРЕХОДОВ АТОМА ВОДОРОДА  
ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ РАДИКАЛОВ  
НО<sub>2</sub> И СН<sub>3</sub>О<sub>2</sub> С ЭТИЛЕНОМ**

М.А. ЭВИНЯН<sup>1</sup>, А.Г. ДАВТЯН<sup>1\*</sup>, Р.Ю. ЧИЛИНГАРЯН<sup>2</sup>,  
А.С. АБРААМЯН<sup>2</sup>, С.Д. АРСЕНТЬЕВ<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт химической физики им. А.Б. Налбандяна НАН Армении, Ереван, Армения

<sup>2</sup>Институт прикладных проблем физики НАН Армении, Ереван, Армения

\*e-mail: aramdav@ichph.sci.am

(Поступила в редакцию 5 ноября 2025 г.)

Вычислительными методами квантовой химии изучены реакции межмолекулярных переходов атомов водорода в реакционных системах C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>+НО<sub>2</sub> и C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>+СН<sub>3</sub>О<sub>2</sub>. Рассчитаны энтальпии этих реакций, найдены переходные состояния и определены потенциальные барьеры реакций. Установлено, что для отрыва атома Н от этилена в системах C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>+НО<sub>2</sub> и C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>+СН<sub>3</sub>О<sub>2</sub> необходима одинаковая энергия активации 27.6 ккал/моль, а энтальпии этих реакций равны соответственно 23.8 и 24.7 ккал/моль. Показано, что при этом образуются пред- и пост-реакционные Ван-дер-Ваальсовы комплексы и определены их структуры. Для реакций отрыва атома Н этиленом от НО<sub>2</sub> и СН<sub>3</sub>О<sub>2</sub> определены энтальпии 6.7 и 36.1 ккал/моль, соответственно.

## 1. Введение

Применение квантово-химических методов позволяет вычислять термодинамические и структурные параметры химических систем без проведения сложных экспериментов. При этом возможно получить информацию не только о свойствах молекул и оптимальных энергетических путях их превращений, но и определять структуры и термодинамические параметры метастабильных, не наблюдаемых в экспериментах комплексных состояний молекулярных структур.

Теоретические исследования взаимодействия радикалов НО<sub>2</sub> с этиленом квантово-химическими методами теории функционала плотности (Density Functional Theory – DFT) и *ab initio* проведены в работах [1, 2]. Однако в литературе отсутствуют исследования механизмов взаимодействия простейшего непредельного углеводорода – этилена с более сложными пероксидными радикалами, в частности с метилпероксидным радикалом СН<sub>3</sub>О<sub>2</sub>.

Известно, что определяющую роль в процессах окисления метана, этана, пропана, бутана, этилена, пропилена играют алкилпероксидные радикалы RO<sub>2</sub>, которые в больших концентрациях образуются в окислительных превращениях олефиновых и простейших парафиновых углеводородов [3, 4]. Исследование путей взаимодействия радикалов RO<sub>2</sub> с этиленом представляется важным в связи с необходимостью выявления каналов образования радикалов C<sub>2</sub>H<sub>3</sub> и C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>, которые участвуют в процессах окислительного превращения углеводородов.

Реакции этих радикалов играют существенную роль при крекинге, воспламенении, технологическом горении, взрывах газов, содержащих углеводороды, что отражено в известных механизмах окисления, включающих более 11000 элементарных стадий [5]. С другой стороны, изучение механизмов и альтернативных путей получения кислородсодержащих соединений, таких как спирты, альдегиды и оксиды олефинов, имеет большое практическое значение. В частности, изучение реакций пероксидных радикалов в процессах окисления олефиновых углеводородов [3] позволило предложить новый, высокоэффективный способ получения промышленно важного продукта – оксида этилена [4].

В настоящей работе поставлена задача с применением квантово-химических методов определить энергетически минимальные пути межмолекулярных переходов атомов водорода в системах  $C_2H_4+HO_2$  и  $C_2H_4+CH_3O_2$ , приводящих к образованию радикалов  $C_2H_3$  и  $C_2H_5$ , и провести сравнительный анализ этих путей.

## 2. Вычислительные методы

При расчётах молекулярных структур в реакционных системах  $C_2H_4+HO_2$  и  $C_2H_4+CH_3O_2$  применялись методы DFT-M062X [6], *ab initio* MP2 [7] и высокоточный композитный метод CBS-QB3 [8, 9]. Чтобы убедиться в корректности полученных профилей исследуемых реакций, расчёты проводились разными методами с применением различных наборов базисных функций: 6-311+G(2d,p) и aug-cc-pVTZ. Начальный поиск и локализация стационарных точек на поверхностях потенциальной энергии исследуемых систем проводился с применением метода M062X, далее термохимические параметры всех локализованных экстремумов были пересчитаны методами CBS-QB3 и MP2. Ранее подобная методика расчетов использовалась авторами [10, 11].

Расчеты проводились с помощью программы Gaussian 16 [12] для  $T = 298.15$  К и  $P = 1$  атм, а для визуализации молекулярных структур использовалась программа Gauss View 6.1 [13].

С целью поиска переходных состояний применяли методы Берни и STQN [14, 15]. Анализ рассчитанных частот гармонических колебаний позволял подтверждать наличие переходного состояния в локализованных стационарных точках.

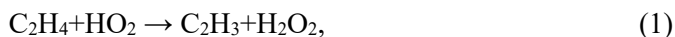
В ряде случаев для установления соответствия реагентов и продуктов переходному состоянию использовали процедуру расчета внутренней координаты реакции (intrinsic reaction coordinate – IRC), заложенную в программу Gaussian 16 [12].

## 3. Результаты и их обсуждение

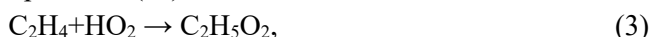
В реакционных системах  $C_2H_4+HO_2$  и  $C_2H_4+CH_3O_2$  можно рассматривать три основных канала протекания процессов взаимодействия этилена с пероксидными радикалами  $RO_2$  ( $HO_2$  и  $CH_3O_2$ ): межмолекулярные переходы атома Н и образование радикалов  $C_2H_3$  и  $C_2H_5$ ; присоединение  $RO_2$  к этилену  $C_2H_4$  с образованием радикального аддукта  $C_2H_4OOR$ ; присоединение радикалов  $RO_2$  к атомам углерода этилена с образованием более сложных пероксидных радикалов  $RC_2H_4O_2$ . Взаимодействие атомов кислорода, входящих в состав  $RO_2$ , с этиленом в данной работе не обсуждается, так как эти процессы подробно обсуждались в работах [3, 4].

В настоящей работе основное внимание было уделено межмолекулярным переходам атома Н от этилена к гидропероксидному радикалу  $HO_2$  (реакция (1)), приводящим к образованию винильного радикала  $C_2H_3$  и пероксида водорода

H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, а также отрыву атома Н этиленом с образованием этильного радикала C<sub>2</sub>H<sub>5</sub> и молекулярного кислорода O<sub>2</sub> (реакция (1a)). Аналогично исследовалось взаимодействие метилпероксидного радикала с этиленом, приводящее к радикалу C<sub>2</sub>H<sub>3</sub> и метилгидропероксиду CH<sub>3</sub>OOH (реакция (2)), или образованию этильного (C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>) радикала и формилокси-метильного бирадикала CH<sub>2</sub>OO (реакция (2a)):



Рассмотрена возможность протекания реакций (1a) и (2a) в два этапа через образование промежуточных пероксидных радикалов RC<sub>2</sub>H<sub>4</sub>O<sub>2</sub> в реакциях (3) и (4) с последующим отрывом молекулярного кислорода по реакции (3a) и распадом на C<sub>2</sub>H<sub>5</sub> и CH<sub>2</sub>OO по реакции (4a), соответственно:



С применением метода M062X изучены сечения поверхности потенциальной энергии (ППЭ) систем C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>+HO<sub>2</sub> и C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>+CH<sub>3</sub>O<sub>2</sub>, соответствующие реакциям (1)–(4a). Оптимизированы структуры и рассчитаны геометрические параметры реагентов и продуктов всех указанных реакций, а также локализованных переходных состояний (ПС) для реакций (1) и (2). Рассчитаны также энергетические параметры (полные энергии и энтальпии) всех локализованных экстремумов ППЭ систем C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>+HO<sub>2</sub> и C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>+CH<sub>3</sub>O<sub>2</sub>. Все полученные молекулярные структуры пересчитаны методами MP2 и CBS-QB3.

По результатам расчётов построены диаграммы относительных полных энергий ( $E_{el} + E_{thermal}$ ) локализованных экстремумов в системах C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>+HO<sub>2</sub> и C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>+CH<sub>3</sub>O<sub>2</sub> (рис.1), представляющие энергетику исследованных реакций. Значения полных энергий, полученные методом MP2 с набором базисных функций aug-cc-pVTZ, указаны относительно полных энергий реагентов C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>+HO<sub>2</sub> и C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>+CH<sub>3</sub>O<sub>2</sub>.

На энергетических путях реакций (1) и (2) (см. рис.1) локализованы минимумы, соответствующие пред- и пост-реакционным Ван-дер-Ваальсовым комплексам [C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>·HO<sub>2</sub>] – CR1, [C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>·H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>] – CP1, [C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>·CH<sub>3</sub>O<sub>2</sub>] – CR<sub>2</sub>, [C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>·CH<sub>3</sub>OOH] – CP2, и переходные состояния TS1 и TS2, структуры которых приведены на рис.2.

Расчёты показали (рис.1), что реакции (1) и (2) имеют одинаковые энергии активации  $E_{ac}$ , равные 27.6 ккал/моль. Здесь и далее в тексте при обсуждении результатов приводятся данные, полученные методом MP2 с набором базисных функций aug-cc-pVTZ.

Расчёты показали, что энтальпии  $\Delta H$  реакций (1) и (2) приблизительно одинаковы и равны соответственно 23.8 и 24.7 ккал/моль. (табл.1 и табл.2).

Анализ данных табл.1 указывает на то, в результате расчётов всеми применёнными методами, пред- и пост-реакционные комплексы реакции (1)

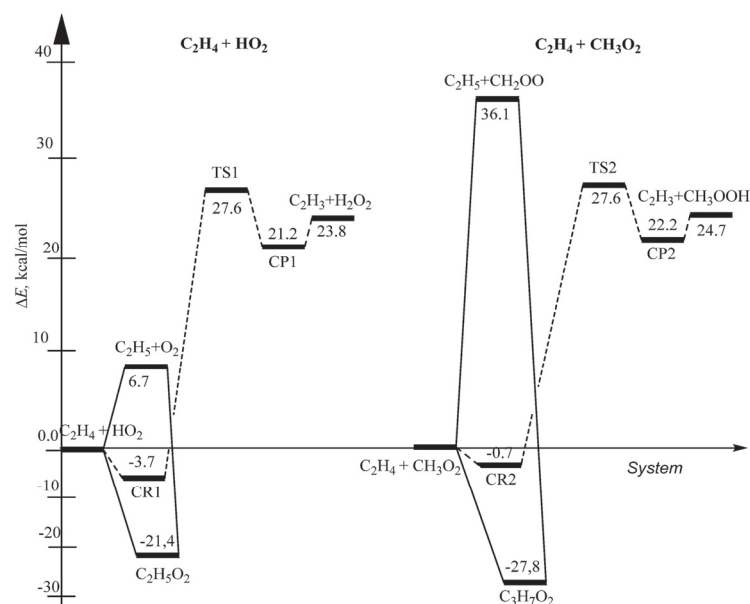


Рис.1. Относительные энергии локализованных стационарных точек ППЭ систем  $C_2H_4+HO_2$  и  $C_2H_4+CH_3O_2$ , рассчитанные методом MP2 с набором базисных функций aug-cc-pVTZ.

имеют приблизительно одинаковые энтальпии образования  $\sim(-4)$  ккал/моль для CR1 и  $\sim 20$  ккал/моль для CP1. Аналогично для реакции (2) (см. табл.2) получены значения  $\sim(-1)$  ккал/моль для CR2 и  $\sim 21$  ккал/моль для CP2.

Образующиеся по экзотермическим реакциям (3) и (4) промежуточные пероксидные радикалы  $C_2H_5O_2$  и  $C_3H_7O_2$  имеют относительные энтальпии равные  $-22.0$  и  $-28.4$  ккал/моль, соответственно. Однако, сравнивая данные табл.1 и табл.2 можно сделать вывод, что энтальпии реакций отрыва этиленом атома H от  $HO_2$  на  $\sim 30$  ккал/моль меньше, чем от  $CH_3O_2$ , очевидно из-за большой энергии образовавшегося продукта  $CH_2OO$ , который является бирадикалом.

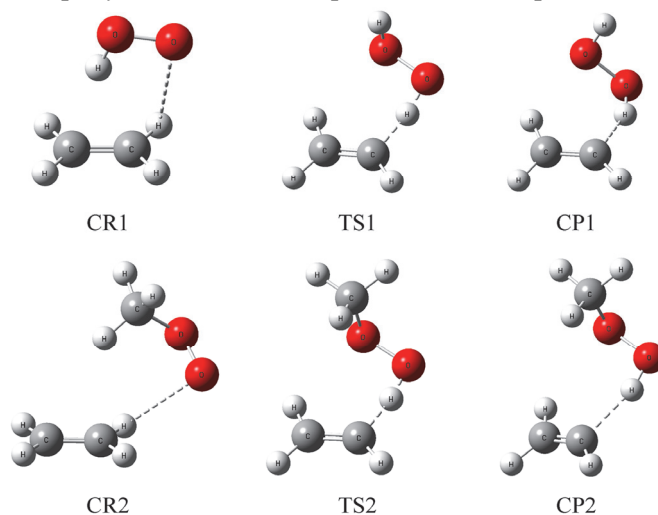


Рис.2. Структуры пред- и пост-реакционных Ван-дер-Ваальсовых комплексов и переходных состояний реакций (1) и (2), полученные методом M06-2X с применением базисного набора aug-cc-pVTZ.  $T = 298.15$  К и  $P = 1$  атм.

Табл.1. Значения энтальпий комплексов, ПС и продуктов относительно реагентов реакции (1), рассчитанные методами M062X, MP2 и CBS-QB3

Система	$\Delta H$ , ккал/моль				
	M062X*	MP2*	M062X**	MP2**	CBS-QB3
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> +HO <sub>2</sub>	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
[C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> ·HO <sub>2</sub> ]	-4.7	-3.9	-4.4	-4.3	-4.3
TS1	22.4	28.6	22.1	27.1	21.8
[C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ·H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> ]	20.4	21.8	19.8	20.6	20.1
C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> +H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	23.8	24.6	23.0	23.8	22.9
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> +O <sub>2</sub>	10.7	4.1	11.2	6.7	13.9
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> O <sub>2</sub>	-23.5	-21.1	-23.2	-22.0	-21.6

\*Расчет в базисе 6-311 + G(2d,p),

\*\*Расчет в базисе aug-cc-pVTZ

Табл.2. Значения энтальпий комплексов, ПС и продуктов относительно реагентов реакции (2), рассчитанные методами M062X, CBS-QB3 и MP2

Система	$\Delta H$ , ккал/моль				
	M062X*	MP2*	M062X**	MP2**	CBS-QB3
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> +CH <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
[C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> ·CH <sub>3</sub> O <sub>2</sub> ]	-1.5	-0.9	-1.2	-1.3	-0.9
TS2	23.3	28.5	23.0	27.0	22.6
[C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ·CH <sub>3</sub> OOH]	21.2	22.7	20.7	21.4	21.4
C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> +CH <sub>3</sub> OOH	25.4	25.4	24.6	24.7	24.4
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> +CH <sub>2</sub> OO	43.1	36.8	42.4	36.1	38.8
C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub>	-27.3	-27.3	-26.7	-28.4	-25.9

\*Расчет в базисе 6-311 + G(2d,p),

\*\*Расчет в базисе aug-cc-pVTZ

#### 4. Заключение

Методами квантово-химических расчетов исследована поверхность потенциальной энергии систем, соответствующая взаимодействию гидропероксидного и метилпероксидного радикалов с этиленом. Показано, что методы M062X, MP2 и CBS-QB3 при расчете исследованной системы дают достаточно близкие результаты, что позволяет использовать наименее ресурсоемкие из них, в частности M062X. Наряду с переходными состояниями

на поверхности потенциальной энергии систем  $C_2H_4+HO_2$  и  $C_2H_4+CH_3O_2$  обнаружены пред- и пост-реакционные Ван-дер-Ваальсовы комплексы. Рассчитаны энергетические параметры реакций отрыва атома Н от этилена пероксидными радикалами  $HO_2$  и  $CH_3O_2$ . Рассчитаны энергии активации этих реакций, и для реакций отрыва атома Н этиленом рассчитаны энтальпии.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов, требующего раскрытия в данной статье.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. A. Skancke, P.N. Skancke. *J. Mol. Struct.*, **207**, 201 (1990).
2. J.J. Guo, J.Q. Xu, Z.R. Li, N.X. Tan, X.Y. Li. *J. Phys. Chem. A*, **119**, 3161 (2015).
3. A.A. Mantashyan, L.A. Khachatryan, O.M. Niazyan, S.D. Arsenyev. *Combust. and Flame*, **43**, 221 (1981).
4. R.R. Grigoryan, S.D. Arsenyev. *Petroleum Chemistry*, **60**, 187 (2020).
5. <https://universityofgalway.ie/combustionchemistrycentre/mechanismdownloads> .
6. Y. Zhao, D. G. Truhlar. *Theor. Chem. Account.*, **120**, 215 (2008).
7. M. Head-Gordon, J.A. Pople, M.J. Frisch. *Chem. Phys. Lett.*, **153**, 503 (1988).
8. J.A. Montgomery Jr., M.J. Frisch, J.W. Ochterski, G.A. Petersson. *J. Chem. Phys.*, **110**, 2822 (1999).
9. J.A. Montgomery Jr., M.J. Frisch, J.W. Ochterski, G.A. Petersson. *J. Chem. Phys.*, **112**, 6532 (2000).
10. A.H. Davtyan, Z.H. Manukyan, S.D. Arsenyev, L.A. Tavadyan, V.S. Arutyunov. *Russ. J. Phys. Chem. B*, **18**, 461 (2024).
11. H.A. Harutyunyan, S.D. Arsenyev, A.H. Davtyan. *J. Contemporary Physics*, **60**, 181 (2025).
12. M.J. Frisch, G.W. Trucks, H.B. Schlegel, G.E. Scuseria, M.A. Robb, J.R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, G.A. Petersson, H. Nakatsuji, X. Li, M. Caricato, A.V. Marenich, J. Bloino, B.G. Janesko, R. Gomperts, B. Mennucci, H.P. Hratchian, J.V. Ortiz, A.F. Izmaylov, J.L. Sonnenberg, D. Williams-Young, F. Ding, F. Lipparini, F. Egidi, J. Goings, B. Peng, A. Petrone, T. Henderson, D. Ranasinghe, V.G. Zakrzewski, J. Gao, N. Rega, G. Zheng, W. Liang, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, K. Throssell, J.A. Montgomery Jr., J.E. Peralta, F. Ogliaro, M.J. Bearpark, J.J. Heyd, E.N. Brothers, K.N. Kudin, V.N. Staroverov, T.A. Keith, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A.P. Rendell, J.C. Burant, S.S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, J.M. Millam, M. Klene, C. Adamo, R. Cammi, J.W. Ochterski, R.L. Martin, K. Morokuma, O. Farkas, J.B. Foresman, D.J. Fox, *Gaussian 16*, (Gaussian, Inc., Wallingford, CT (2016)).
13. R. Dennington, T. A. Keith, J. M. Millam. *GaussView*, Version 6.1. Semichem Inc., Shawnee Mission KS. (2016).
14. C. Peng, P.Y. Ayala, H.B. Schlegel, M.J. Frisch. *J. Comp. Chem.*, **17**, 49 (1996).
15. C. Peng, H.B. Schlegel. *Israel J. Chem.*, **33**, 449 (1993).

ԷԹԻԼԵՆԻ ՀԵՏ HO<sub>2</sub> ԵՎ CH<sub>3</sub>O<sub>2</sub> ՌԱԴԻԿԱԼՆԵՐԻ ՓՈԽԱԶԴԵՑՈՒԹՅԱՆ ԺԱՄԱՆԱԿ  
ԶՐԱԾՆԻ ԱՏՈՄԻ ՄԻՋՍՈՂԵԿՈՒԼԱՅԻՆ ԱՆՑՈՒՄՆԵՐԻ ՔՎԱՆՏԱՔԻՄԻԱԿԱՆ  
ՈՒՍՈՒՄՆԱՍԻՐՈՒԹՅՈՒՆ

Մ.Ա. ԷՎԻՆՅԱՆ, Ա.Հ. ԴԱՎԹՅԱՆ, Ռ.Յ. ՉԻԼԻՆԳԱՐՅԱՆ,  
Ա.Ս. ԱԲՐԱՀԱՄՅԱՆ, Ս.Դ. ԱՐՍԵՆՏԵՎ

Քվանտային քիմիայի հաշվարկային մեթոդներով ուսումնասիրվել են ջրածնի ատոմների միջմոլեկուլային անցումների ռեակցիաները C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>+HO<sub>2</sub> և C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>+CH<sub>3</sub>O<sub>2</sub> ռեակցիոն համակարգերում: Հաշվարկվել են այս ռեակցիաների էնթալպիաները, տեղայնացվել են անցումային վիճակները և որոշվել են ռեակցիաների պոտենցիալ բարիերները: Հաստատվել է, որ C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>+HO<sub>2</sub> և C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>+CH<sub>3</sub>O<sub>2</sub> համակարգերում H ատոմի անջատման համար անհրաժեշտ է նույն ակտիվացման էներգիան՝ 27.6 կկալ/մոլ, իսկ էնթալպիաները կազմում են համապատասխանաբար 23.8 և 24.7 կկալ/մոլ: Ցույց է տրվել, որ այս ռեակցիաներում առաջանում են Վան Դեր Վալսյան նախա- և հետ- կոմպլեքսներ և որոշվել են նրանց կառուցվածքները: Էթիլենի միջոցով HO<sub>2</sub> և CH<sub>3</sub>O<sub>2</sub> ռադիկալներից H ատոմի անջատման ռեակցիաների էնթալպիաների համար որոշվել են համապատասխանաբար 6.7 և 36.1 կկալ/մոլ արժեքներ:

QUANTUM-CHEMICAL STUDY OF INTERMOLECULAR TRANSITIONS  
OF THE HYDROGEN ATOM DURING THE INTERACTION  
OF HO<sub>2</sub> AND CH<sub>3</sub>O<sub>2</sub> RADICALS WITH ETHYLENE

M.A. EVINYAN, A.H. DAVTYAN, R.YU. CHILINGARYAN,  
A.S. ABRAHAMYAN, S.D. ARSENTEV

Computational methods of quantum chemistry were used to study the reactions of intermolecular transitions of hydrogen atoms in the reaction systems C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>+HO<sub>2</sub> and C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>+CH<sub>3</sub>O<sub>2</sub>. The enthalpies of these reactions were calculated, transition states were found, and potential barriers of the reactions were determined. It was established that the abstraction of an H atom from ethylene in the systems C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>+HO<sub>2</sub> and C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>+CH<sub>3</sub>O<sub>2</sub> requires the same activation energy of 27.6 kcal/mol, while the enthalpies of these reactions are 23.8 and 24.7 kcal/mol, respectively. It was shown that pre- and post-reaction Van der Waals complexes are formed in this case, and their structures were determined. The enthalpies of 6.7 and 36.1 kcal/mol were determined for the reactions of H atom abstraction by ethylene from HO<sub>2</sub> and CH<sub>3</sub>O<sub>2</sub>, respectively.

## ТЕРМОДИНАМИКА ПЕРЕХОДА ПОРЯДОК–БЕСПОРЯДОК В ДВУСПИРАЛЬНОЙ СТРУКТУРЕ ДНК В ПРИСУТСТВИИ CoTAlIPyP4

Г.В. АНАНЯН\*, П.О. ВАРДЕВАНЯН, Н.Г. КАРАПЕТЯН

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

\*e-mail: angay@ysu.am

(Поступила в редакцию 3 декабря 2025 г.)

Определение термодинамических параметров перехода молекулы ДНК из высокоупорядоченной двуспиральной конформации в неупорядоченное клубкообразное состояние в присутствии лигандов имеет ключевую роль в понимании структурных особенностей комплексообразования. Для определения энтальпии  $\Delta H$  и энтропии  $\Delta S$  перехода спираль–клубок обычно применяется метод калориметрии. В данной работе эти параметры были определены с использованием альтернативного метода — УФ спектрофотометрического плавления. Были получены значения температуры и интервала плавления ( $T_m$  и  $\Delta T$ ) комплексов ДНК с водорастворимым катионным Co(II)-мезо-тетра(4-N-аллилпиридил) порфирином (CoTAlIPyP4). Показано, что энтальпия перехода спираль–клубок ДНК при комплексообразовании с CoTAlIPyP4 является эндотермической, что обусловлено как разрывом водородных связей между нуклеотидными парами, так и высвобождением молекул порфирина с поверхности двойной спирали ДНК. Энтропийный вклад положителен, поскольку система становится более неупорядоченной.

### 1. Введение

Исследование взаимодействия различных лигандов с ДНК занимает ключевую роль в процессе разработки лекарственных препаратов. Определение особенностей взаимодействия новых лекарственных препаратов с ДНК представляют как практический, так и фундаментальный интерес. Основную информацию о молекулярных силах, управляющих образованием комплексов, можно получить только посредством изучения термодинамики комплексообразования. Термодинамические параметры  $\Delta G$ ,  $\Delta H$ ,  $\Delta S$  комплексов ДНК с лигандами можно получить с помощью высокочувствительной микрокалориметрии.

Среди многочисленных методов исследования комплексов ДНК–лиганд особое место занимает плавление. Переход от строго упорядоченной двойной спирали к неупорядоченному клубкообразному состоянию молекулы ДНК, или так называемое плавление, может происходить при изменении различных параметров окружающей среды, таких как температура, ионная сила,  $pH$  и др. Молекула ДНК, состоящая из двух комплементарных полимерных цепей, соединенных водородными связями, в процессе плавления претерпевает значительные изменения физических свойств. Поскольку при нагревании водородные

связи, стабилизирующие двуспиральную молекулу ДНК, постепенно разрушаются, спираль разделяется на две полинуклеотидные цепи, которые сворачиваются в статистические клубки. При этом уменьшается оптическая активность и вязкость раствора ДНК, а также увеличивается интенсивность поглощения в УФ области при 260 нм [1]. Термодинамическая теория перехода спираль–клубок в молекуле ДНК основана на определении разности свободных энергий спирального и клубкообразного состояний [2].

Обычно для определения теплоты перехода спираль–клубок в молекуле ДНК применяется общеизвестный метод калориметрии [3, 4]. Однако Франк-Каменецкий и Карапетян предложили альтернативный метод определения  $\Delta H$  на основе спектрофотометрических кривых плавления [5, 6]. Этот метод применяется при таких разбавлениях растворов, когда можно пренебречь межмолекулярными взаимодействиями. Было показано, что энтальпию можно определить из кривых плавления ДНК–лиганд при помощи весьма универсальной формулы [6]:

$$\Delta H = \lim_{c \rightarrow 0} f(c) = R \times \lim_{c \rightarrow 0} \{(\delta\Delta T / \delta T_m^2) / [\delta(1/T_m)]^2\} c, \quad (1)$$

$$\delta T_m = T_m - T_0, \quad \delta\Delta T = \Delta T - \Delta_0 T,$$

где  $T_m$  и  $\Delta T$  – соответственно температура и интервал плавления комплексов ДНК–лиганд,  $T_0$  и  $\Delta_0 T$  те же параметры плавления ДНК без лигандов,  $c$  – концентрация лиганда,  $R$  – универсальная газовая постоянная. Было показано, что при низких концентрациях лиганда ( $c \ll 1$ )  $\delta T_m$  и  $\delta\Delta T$  можно рассчитать по следующим формулам:

$$\delta T_m = 2(RT_0^2 / \Delta H) c b \quad (2)$$

$$\delta\Delta T = 4(RT_0^2 / \Delta H) c. \quad (3)$$

Поскольку константы связывания лигандов со спиральными и клубкообразными состояниями ДНК различаются по значениям, формулы (2) и (3) показывают, что если константа связывания лиганда с одной из конформаций намного превосходит константу связывания с другой конформацией, то приращение ширины интервала плавления  $\delta\Delta T$  в два раза больше, чем приращение температуры плавления  $\delta T_m$ . В этом случае  $\Delta H$  можно определить по изменению каждого параметра при помощи формулы (4) или (5):

$$\Delta H = \frac{\delta(\Delta T)}{[\delta(T_m)]^2} T_0^2 c, \quad (4)$$

$$\Delta S = \Delta H / T_m. \quad (5)$$

Точность определения  $\Delta H$  в этом случае зависит от точности экспериментально вычисленных значений температуры и интервала плавления при разных значениях концентрации лигандов.

Основная цель данной работы — охарактеризовать термодинамические особенности комплексообразования порфиринов с ДНК с использованием альтернативного метода Франк-Каменецкого и Карапетяна, который может пролить свет на процесс связывания молекул порфирина с ДНК.

## 2. Материалы и методы исследований

Сверхчистая нативная ДНК тимуса телят была приобретена у Sigma-Aldrich Ltd. Водорастворимый порфирин CoTAlIPyP4 синтезирован в ЕМУ [7]. Исследования проводились в фосфатном буферном растворе (0.1BPSE = 0.6

ммоль  $\text{Na}_2\text{HPO}_4$  + 0.2 ммоль  $\text{NaH}_2\text{PO}_4$  + 18.5 ммоль  $\text{NaCl}$  + 0.1 ммоль  $\text{EDTA}$ ),  $pH$  7.0. Концентрация ДНК составляла  $7.57 \times 10^{-5}$  М пар оснований. Раствор порфирина с концентрацией  $10^{-5}$ – $10^{-4}$  М готовился за час до эксперимента и хранился в темноте во избежание фотохимических модификаций и деструкций порфирина. Для спектроскопических исследований использовались кварцевые кюветы (Perkin Elmer) толщиной 1 см и объемом 1.2 мл, с плотно закрывающимися тefлоновыми крышками.

Спектры поглощения и кривые плавления регистрировались на спектрофотометре Lambda 800 (Perkin Elmer) с температурным блоком PTP-6 Peltier System. Для построения, сглаживания и обработки полученных результатов использовалась программа Origin (OriginLab Corporation).

### 3. Результаты и их обсуждение

На рис.1 приведены кривые плавления ДНК в присутствии различных концентраций порфирина  $\text{CoTAlIPyP4}$ . Используя формулы (4) и (5), были определены  $\Delta H$  и  $\Delta S$  перехода спираль–клубок ДНК при комплексообразовании с  $\text{CoTAlIPyP4}$  (табл.1).

Комплексообразование молекулы ДНК с водорастворимыми катионными порфиринами обычно сопровождается стабилизацией молекулы ДНК [8, 9]. Анализ кривых плавления показывает, что даже при очень низких относительных концентрациях порфирина наблюдается стабилизация двуспиральной молекулы ДНК. Увеличение концентрации  $\text{CoTAlIPyP4}$  приводит к смещению кривых плавления ДНК в сторону более высоких температур, при этом температура и интервал плавления увеличиваются (табл.1).

Изменения энтальпии и энтропии могут предоставить важную информацию о связывании порфиринов с ДНК. Энтальпия перехода ДНК спираль–клубок — это количество тепла, необходимое для преобразования ДНК из высокоупорядоченной канонической двухцепочечной формы в неупорядоченную форму. Этот переход является эндотермическим, то есть требует затрат энергии для разрыва водородных связей между парами оснований и расщепления двойной спирали на

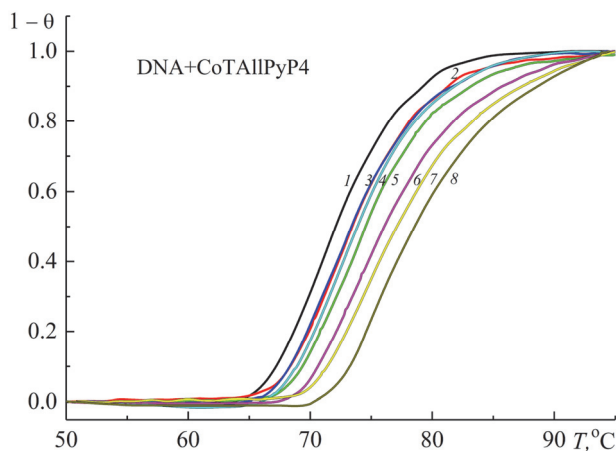


Рис.1. Кривые плавления ДНК при взаимодействии с  $\text{CoTAlIPyP4}$ . Относительная концентрация порфирина ( $r = C_P/C_{\text{DNA}}$ ) имеет значения: 1 – 0; 2 – 0.001; 3 – 0.003; 4 – 0.005; 5 – 0.01; 6 – 0.03; 7 – 0.05; 8 – 0.08.

Табл.1. Термодинамические параметры плавления комплекса ДНК–СоТАИРурР4

$r$	$T_m, ^\circ\text{C}$	$\Delta T$	$\delta(T_m)$	$\delta(\Delta T)$	$\Delta H$ ккал/моль	$\Delta S$ э.е.
0	72.05	8.76	–	–	8.8±0.06	0.12±0.01
0.001	73.48	9.34	1.43	0.58	10.27±0.02	0.02±0.004
0.005	73.84	9.51	1.79	0.75	14.88±0.09	0.082±0.007
0.01	74.47	9.80	2.42	1.04	18.01±0.12	0.123±0.011
0.03	76.05	10.89	4.0	2.13	28.28±0.21	0.273±0.016
0.05	77.11	11.31	5.06	2.55	29.53±0.23	0.334 ±0.012
0.08	78.90	11.75	6.85	2.99	35.26±0.24	0.335±0.012

отдельные цепи, при этом энтропия системы увеличивается (табл.1).

Присутствие положительно заряженных молекул порфирина может только увеличить энергетические затраты, поскольку сначала энергия потребуется на вытеснение этих молекул с поверхности двойной спирали ДНК, а затем на разделение полинуклеотидных цепей путем разрыва водородных связей.

Важную роль в этом процессе играет гидратно–натриевая оболочка ДНК, состоящая из высокоупорядоченных молекул воды вокруг полярных групп и ионов натрия, нейтрализующих отрицательный заряд молекулы ДНК [10–12]. Разрушение этой упорядоченной системы молекулами порфирина СоТАИРурР4 при комплексообразовании является энтропийно выгодным (табл.1). Известно, что кулоновское взаимодействие между катионами и анионами сопровождается положительными изменениями энтропии [13, 14]. Следовательно, положительное изменение энтропии при связывании катионного металлопорфирина с ДНК, вероятно, обусловлено электростатическим взаимодействием между положительно заряженными *мезо*-заместителями порфирина и отрицательно заряженными фосфатными группами ДНК.

Двухвалентный атом кобальта внутри полости плоского порфирина образует пять координационных связей, имеет один аксиальный лиганд, который вытесняет атом кобальта из полости порфирина, и имеет толщину примерно 5–7 Å [15, 16]. При таких размерах положительно заряженные молекулы СоТАИРурР4 не могут интеркалировать между нуклеотидными парами оснований ДНК, они располагаются лишь на отрицательно заряженной поверхности двойной спирали ДНК. Было показано [16–18], что Со-порфирины, как и Zn-, Mn-, Fe-содержащие порфирины с аксиальными лигандами, при взаимодействии с ДНК предпочитают внешний тип связывания, что реализуется посредством электростатических взаимодействий. Считается, что молекулы воды, непосредственно взаимодействующие с ДНК, играют ключевую роль в стабилизации комплексов порфиринов с нуклеиновыми кислотами, в частности, за счет образования водных мостиков между молекулами порфиринов и ДНК [19–22]. Как видно из табл.1, с увеличением концентрации СоТАИРурР4 энтропия растет. Взаимодействие молекул СоТАИРурР4 с ДНК приводит к значительному искажению структуры ДНК [23,

24]. В результате этого искажения изменяется локальная плотность заряда молекулы ДНК, что приводит к высвобождению противоионов натрия из тех участков поверхности спирали, которые взаимодействуют с молекулами порфиринов. Как искажение структуры ДНК, так и высвобождение противоионов, адсорбированных на поверхности двойной спирали и нейтрализующих отрицательный заряд молекулы ДНК [10, 11], приводит к значительным положительным изменениям энтропии [13, 25, 26]. В ходе этого процесса энтропия увеличивается как за счет перехода связанных молекул воды в свободную фазу, так и за счет увеличения подвижности нуклеотидных цепей при переходе спираль–клубок. Чем выше концентрация исследуемого порфирина в растворе, тем более разупорядочена система. Таким образом, при переходе спираль–клубок ДНК при наличии  $\text{CoTAlIPyP4}$  в растворе увеличивается количество свободных молекул порфирина, ионов натрия и воды, связанных с двойной спиралью ДНК. Определение термодинамических параметров методом спектрофотометрического плавления применимо при очень маленьких концентрациях лиганда, а концентрация порфирина в растворе в данном случае составляет  $10^{-5}$ – $10^{-4}$  М. В таких разбавленных растворах образование агрегатов не наблюдается [9, 16]. Следовательно, взаимодействие ДНК–порфирин имеет энтропийный характер. На основании полученных результатов можно предположить, что характер сил взаимодействия преимущественно гидрофобный.

#### 4. Заключение

Термодинамические параметры перехода спираль–клубок ДНК (энтальпия  $\Delta H$  и энтропия  $\Delta S$ ) при взаимодействии с водорастворимым катионным порфирином  $\text{CoTAlIPyP4}$  были определены с использованием экспериментально полученных значений температуры и интервала плавления ( $T_m$  и  $\Delta T$ ). Показано, что энтальпия перехода спираль–клубок ДНК при комплексообразовании с  $\text{CoTAlIPyP4}$  порфирином имеет эндотермический характер, что связано как с разрывом водородных связей, так и с высвобождением внешне связанных молекул порфирина с поверхности ДНК. Молекула  $\text{CoTAlIPyP4}$  имеет один аксиальный лиганд и толщину 5–7 Å. Поэтому при взаимодействии эти молекулы располагаются только на внешней поверхности двойной спирали ДНК. Такое расположение приводит к значительному искажению структуры и изменению локальной плотности заряда молекулы ДНК, которое было доказано методами кругового дихроизма (КД) и вискозиметрии [8]. Эти конформационные изменения ДНК приводят к высвобождению противоионов натрия и переходу связанных молекул воды в свободную фазу из тех участков поверхности спирали, которые взаимодействуют с молекулами порфиринов. Эти изменения приводят к значительным положительным изменениям энтропии. Чем выше концентрация исследуемого порфирина в растворе, тем более разупорядочена система. Следовательно, взаимодействие ДНК–порфирин имеет энтропийный характер. На основании полученных результатов можно предположить, что характер сил взаимодействия преимущественно гидрофобный.

Работа выполнена при поддержке Комитета по науке РА в рамках научного проекта № 25RG-1F152.

## ЛИТЕРАТУРА

1. **R.M. Wartell, A.S. Benight.** Physics Reports, **126**, 67 (1985).
2. **A.A. Vedenov, A.M. Dykhne, M.D. Frank-Kamenetskii.** Sov. Phys. Usp., **14**, 715 (1972).
3. **N.C. Garbett.** The Use of Calorimetry to Study Ligand–DNA Interactions. Chapter 12 in: Ed. J. Aldrich-Wright, Metallointercalators. Springer, Vienna, pp. 299–324, 2011.
4. **A. Vologodskii, M.D. Frank-Kamenetskii.** Phys. Life Rev., **25**, 1 (2018).
5. **A.T. Karapetian, P.O. Vardevanian, G.A. Terzikian, M.D. Frank-Kamenetskii.** J. Biomol. Struct. Dyn., **8**, 123 (1990).
6. **A.T. Karapetian, P.O. Vardevanian, M.D. Frank-Kamenetskii.** J. Biomol. Struct. Dyn., **8**, 131 (1990).
7. **A.G. Tovmasyan, N.S. Babayan, L.A. Sahakyan, A.G. Shahkhatuni, G.H. Gasparyan, R.M. Aroutiounian, R.K. Ghazaryan.** J. Porphyrins Phthalocyanines, **12**, 1100 (2008).
8. **V.G. Barkhudaryan, G.V. Ananyan.** J. Porphyr. Phthalocyanines. **22**, 1022 (2018).
9. **G.V. Ananyan, Y.B. Dalyan, N.H. Karapetyan, V.G. Barkhudaryan, A.A. Avetisyan.** J. Biomol. Struct. Dyn., **41**, 7290 (2023).
10. **X. Shi, R.B.J. Macgregor.** Biophys. Chem., **125**, 471 (2007).
11. **T.V. Chalikian, G.E. Plum, A.P. Sarvazyan, K.J. Breslauer.** Biochemistry, **33**, 8629 (1994).
12. **H. Ogoshi, T. Mizutani, T. Hayashi, Y. Kuroda, K.M. Kadish, K.M. Smith, R. Guilard.** The Porphyrin Handbook. Academic Press, Burlington, **6**, 279 (1999).
13. **B. Jana, S. Pal, P.K. Maiti, S.T. Lin, J.T. Hynes, B. Bagchi.** J. Phys. Chem. B., **110**, 19611 (2006).
14. **G.A. Jeffrey, W. Saenger.** Hydration of Nucleic Acids. Chapter In: Hydrogen Bonding in Biological Structures. Springer, Berlin, Heidelberg, pp. 484–504, 1994.
15. **U. Sehlstedt, S.K. Kim, P. Carter, J. Goodisman, J. F. Vollano, B. Norden, J.C. Dabrowiak.** Biochemistry, **33**, 417 (1994).
16. **G.V. Ananyan, N.H. Karapetyan, Y.B. Dalyan, R.S. Ghazaryan, S.G. Haroutiunian.** J. Contemp. Phys., **59**, 398 (2024).
17. **L. Gong, I. Bae, S.K. Kim.** J. Phys. Chem. B, **116**, 12510 (2012).
18. **G.V. Ananyan, N.H. Karapetyan, Y.B. Dalyan.** J. Biomol. Struct. Dyn., **40**, 10313 (2021).
19. **R.F. Pasternack, E.J. Gibbs.** Met. Ions In Biol. Syst., **33**, 367 (1996).
20. **R. Satange, M.-H. Hou.** RSC Chem. Biol., **6**, 699 (2025).
21. **B.P. Fingerhut.** Chem. Commun., **57**, 12880 (2021).
22. **B. Nguyen, S. Neidle, W.D. Wilson.** Acc. Chem. Res., **42**, 11 (2009).
23. **M. Bennett, A. Krah, F. Wien, E. Garman, R. McKenna, M. Sanderson, S. Niedle.** Proc. Nat. Acad. Sci. USA, **97**, 9476 (2000).
24. **L.A. Lipscomb, F.X. Zhou, S.R. Presnell, R.J. Woo, M.E. Peek, R.R. Plaskon, L.D. Williams.** Biochemistry, **35**, 2818 (1996).
25. **J.B. Chaires.** Biopolymers, **44**, 201 (1997).
26. **A. Mardt, R.F. Gorriz, F. Ferraro, P. Ulrich, M. Zahran, P. Imhof.** Biophys. Chem., **283**, 106779 (2022).

ԴՆԹ-Ի ԿՐԿՆԱԿԻ ՊԱՐՈՒՅՐԱԶԵՎ ԿԱՌՈՒՑՎԱԾՔՈՒՄ  
ԿԱՐԳ-ԱՆԿԱՐԳԱՎՈՐՈՒԹՅՈՒՆ ԱՆՑՄԱՆ ԹԵՐՄՈԴԻՆԱՄԻԿԱՆ  
CoTAlIPyP4-Ի ԱՌԿԱՅՈՒԹՅԱՄԲ

Գ.Վ. ԱՆԱՆՅԱՆ, Պ.Հ. ՎԱՐԴԵՎԱՆՅԱՆ, Ն.Հ. ԿԱՐԱՊԵՏՅԱՆ

Լիզանդների առկայությամբ ԴՆԹ-ի բարձր կարգավորված կրկնակի պարուրաձև կոնֆորմացիայից անկարգավորված կծիկանման վիճակի անցման թերմոդինամիկական պարամետրերի որոշումը կարևոր է կոմպլեքսագոյացման կառուցվածքային առանձնահատկությունները հասկանալու համար: Այս պարամետրերը որոշելու համար սովորաբար օգտագործվում է կալորիամետրիկ մեթոդը: Աշխատանքում ուսումնասիրվել են ջրալույծ կատիոնային Co(II)-*meso*-տետրա(4-N-ալիլպիրիդիլ)պորֆիրինի (CoTAlIPyP4) հետ ԴՆԹ-ի փոխազդեցության թերմոդինամիկական առանձնահատկությունները թերմոդինամիկական պարամետրերի որոշման ակտերնատիվ՝ ՈւՄ-հալման սպեկտրոֆոտոմետրիկ մեթոդը: ԴՆԹ-CoTAlIPyP4 կոմպլեքսների պարույր-կծիկ անցման էնթալպիան  $\Delta H$  և էնտրոպիան  $\Delta S$  որոշվել են փորձնականորեն ստացված հալման ջերմաստիճանի և հալման միջակայքի արժեքների ( $T_m$  և  $\Delta T$ ) միջոցով: Ցույց է տրվել, որ կոմպլեքսագոյացումը էնդոթերմիկ է՝ պայմանավորված ինչպես ջրածնային կապերի խզմամբ, այնպես էլ ԴՆԹ-ի կրկնակի պարույրի մակերևույթից CoTAlIPyP4 պորֆիրինային մոլեկուլների արտագատմամբ: Էնտրոպիկ ներդրումը դրական է, քանի որ համակարգը դառնում է ավելի անկարգավորված:

THERMODYNAMICS OF THE ORDER-DISORDER TRANSITION IN THE  
DOUBLE-HELICAL STRUCTURE OF DNA IN THE PRESENCE OF CoTAlIPyP4

G.V. ANANYAN, P.H. VARDEVANYAN, N.H. KARAPETYAN

Determining the thermodynamic parameters of the DNA transition from a highly ordered double-helical conformation to a disordered coiled state in the presence of ligands is key to understanding the structural features of complex formation. Calorimetry is commonly used to determine the enthalpy  $\Delta H$  and entropy  $\Delta S$  of the helix-coil transition. In this study, these parameters were determined using an alternative method: UV spectrophotometric melting. The melting temperature and melting range ( $T_m$  and  $\Delta T$ ) of DNA complexes with water-soluble cationic Co(II)-*meso*-tetra(4-N-allylpyridyl)porphyrin (CoTAlIPyP4) were obtained. The enthalpy of the helix-coil transition during complex formation with CoTAlIPyP4 was shown to be endothermic, which is caused by both the rupture of hydrogen bonds between nucleotide pairs and the release of porphyrin molecules from the surface of the DNA double helix. The entropic contribution is positive because the system becomes more disordered.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ПОДВИЖНОГО СОЧЛЕНЕНИЯ ПРЯМОУГОЛЬНЫХ ВОЛНОВОДОВ СВЧ ДИАПАЗОНА С ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНЫМИ СЕЧЕНИЯМИ

Р.А. ДАВТЯН<sup>1</sup>, А.С. МОВСИСЯН<sup>2</sup>, А.К. АГАРОНЯН<sup>3</sup>, В.Г. АВETИСЯН<sup>3\*</sup>

<sup>1</sup>“PLANET FIBER”, Ереван, Армения

<sup>2</sup>Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

<sup>3</sup>Российско–Армянский университет, Ереван, Армения

\*e-mail: avahan@mail.ru

(Поступила в редакцию 13 ноября 2025 г.)

Приведены особенности конструкции подвижного рупорного сочленения прямоугольных волноводов с максимальным углом раскрыва рупора во взаимно-перпендикулярных плоскостях менее нескольких градусов. Сочленение построено на стандартных волноводах последовательных поперечных сечений. Обсуждаются методы его исследования с применением векторного анализатора цепей. При условии одномодового режима работы сочленяемых волноводов исследованы степень отражения от сочленения и нестабильности его амплитудно- и фазо-частотных передаточных характеристик. Показано, что при углах падения  $\phi \geq 45^\circ$  парциальных волн Бриллюэна на узкие стенки внутреннего волновода и в относительной полосе частот  $\Delta f/f \geq 14\%$  подобные сочленения могут обеспечить достаточно малые величины исследуемых характеристик – коэффициент стоячей волны по напряжению  $K \leq 1.12$  и стандартные отклонения нестабильностей передаточных характеристик по мощности  $\sigma_p \leq 0.2$  дБ, а по фазе  $\sigma_\phi \leq 2^\circ$ .

### 1. Введение

Широкополосные подвижные сочленения волноводов находят широкое применение при построении телескопических и тромбонных фазосдвигателей, в измерительных комплексах для аттестации волноводных образцовых мер угла сдвига фаз. В работах [1, 2] предложено применение подвижного рупорного сочленения полых металлических прямоугольных волноводов в устройстве тромбонного компенсатора изменения длины передающей волноводной линии миллиметрового диапазона. Такая линия предложена для построения автоматических измерительных комплексов по определению параметров испытываемых антенн отмеченного диапазона по измерениям их ближнего поля. Отметим, что в приведенном устройстве тромбонные компенсаторы работают в условиях режима многомодовости волноводов, поскольку размеры волноводов линии велики по сравнению с длиной рабочей волны основной моды  $H_{10}$ . Применение фильтров высших типов волн в линии передачи обеспечивает стабильности ее передаточных характеристик по амплитуде и фазе, приемлемых для осуществления достаточно точных антенных измерений.

Предложенное решение подвижной линии передачи с применением

тормонного волноводного компенсатора изменения длины линии обусловлено отсутствием, в отличие от диапазона сантиметровых волн, в диапазоне миллиметровых волн пригодной гибкой коаксиальной линии передачи хотя бы длиной в 2...3 мв. Гибкая коаксиальная линия такой длины требуется для обеспечения необходимой зоны сканирования  $1 \times 1 \text{ м}^2$  измерительного зонда для измерения амплитудно-фазового распределения поля на плоской поверхности раскрыва испытываемой антенны при ее диаметре около 0.6...0.7 м [2]. При этом в процессе измерений коаксиальная линия, претерпевающая различные по радиусу изгибы, порождает фазовые и амплитудные ошибки, вносимые в измерение поля в раскрыве. Для сравнения приведем характеристики специализированных фазостабильных коаксиальных кабелей сантиметрового и миллиметрового диапазонов. Например, кабели СВЧ такого рода серии РКА до частот 10 ГГц имеют затухание 1.0...1.5 дБ/м, фазовую нестабильность на изгиб до 1.0...1.5 градуса и нестабильность по мощности до 0.05 дБ. Между тем для таких же специализированных фазостабильных кабелей миллиметровых волн серии КСФ на частоте 60 ГГц затухание увеличивается около 5-и раз, а фазовая нестабильность на изгиб и нестабильность по мощности увеличиваются около 15-и раз.

В тромонных компенсаторах полые металлические прямоугольные волноводы подвижных рупорных сочленений удовлетворяют условию  $ka \gg 1$  квазиоптического приближения и для миллиметровых волн с длинами  $\lambda < 10 \text{ мм}$   $ka = 2\pi a/\lambda \geq 25$  ( $k$  – коэффициент распространения,  $a_{\min} = 40 \text{ мм}$  – размер широкой стенки волновода) [3]. В них, согласно концепции Бриллюэна, распространяющиеся парциальные волны миллиметрового диапазона для моды  $H_{10}$  с критической длиной волны  $\lambda_{CR}^{H_{10}} = 2a$  имеют углы  $\phi$  падения на стенки волновода  $\phi = \arccos \frac{\lambda}{\lambda_{CR}^{H_{10}}} = \arccos \frac{\lambda}{2a} > 83^\circ$  [4–6]. Таким образом, подвижное сочленение работает в условиях очень пологого падения парциальных волн работающей моды  $H_{10}$  на стенки волновода и, как отмечалось выше, многомодовости.

Однако самостоятельный интерес представляет работа подобного сочленения волноводов в их одномодовом режиме на основной моде  $H_{10}$  в СВЧ диапазоне. Такое подвижное сочленение может найти применение в СВЧ устройствах с линией передачи, в которой составляющие устройство узлы подвижны относительно друг друга, как например в волноводных устройствах, указанных в начале главы. В случае одномодового режима работы такой линии передачи меняется характер электродинамики распространения волн в ней. Возникает режим отсечки распространения высших мод, возникающих на неоднородности линии в виде сочленения волноводов разных сечений, а в самих волноводах нарушается пологость падения парциальных волн рабочей основной моды  $H_{10}$ . Созданная сочленением неоднородность породит отражения этой моды и внесет амплитудные и фазовые погрешности в распространение волны. В результате возникнет ограниченная полоса частот приемлемых условий распространения волны рабочей моды через сочленение одномодовых волноводов, в каждом из которых такой режим теоретически обеспечивается в полосе частот около 46% при соотношении размеров широкой и узкой стенок волновода равной 2.

Целью настоящей работы являлось исследование степени отражения и неустойчивости передаточных характеристик рупорного подвижного сочленения стандартных волноводов последовательных сечений в условиях их одномодового режима работы в диапазоне СВЧ.

## 2. Конструкция подвижного рупорного сочленения волноводов стандартных последовательных сечений

Конструкция исследуемого подвижного сочленения волноводов изображена на рис. 1.

Исследуемое сочленение представляет из себя рупорную, бесконтактную по постоянному току, подвижную стыковку сочленяемых стандартных волноводов с их последовательными внутренними сечениями ( $a_1 = 40 \times b_1 = 20$ ) и ( $a_2 = 48 \times b_2 = 24$ ) мм<sup>2</sup>, подобную и приведенную в [2]. Однако в конструкцию сочленения внесены следующие изменения. Первое – увеличенная по площади внешняя поверхность припаянных латунных накладок. Это создает более благоприятные условия замыкания токов на обращенных к друг другу поверхностях волноводов через узкую щель  $d \leq 0.2$  мм между ними из-за увеличения распределенной емкости щели. Вторая особенность состоит в покрытии поглощающим слоем поверхностей накладок в щели, а также внешней поверхности внутреннего волновода до последнего ряда фторопластовых прокладок, обеспечивающих соосность стыкуемых волноводов при взаимном скольжении. Поглощающий электромагнитную энергию слой является смесью поливинилацетатной эмульсии с мелкодисперсным порошком карбонильного железа. Такое покрытие способствует увеличению электромагнитной развязки между полем в сочленении и внешними возможными полями. Реализация конструкции исключает процессы (относительно дорогих и длительных) гальванического наращивания меди на дюралюминевую оправку рупорного окончания и последующей ее

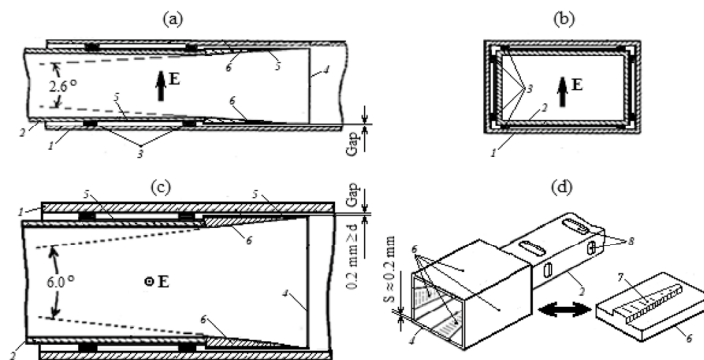


Рис. 1. Разрезы рупорного сочленения: (а) продольный разрез в плоскости вектора  $E$  напряженности электрического поля моды  $H_{10}$ ; (б) поперечный разрез в плоскости фторопластовой прокладки; (с) продольный разрез в плоскости, перпендикулярной вектору  $E$ ; (д) аксонометрия рупорного окончания внутреннего волновода. 1 – внешний волновод, 2 – внутренний волновод, 3 – односторонне фольгированные фторопластовые прокладки, припаянные к внутреннему волноводу по периметру его поперечного сечения, 4 – рупорное окончание внутреннего волновода, 5 – поглощающий слой, 6 – припаянные латунные накладки, 7 – выступ насадки, 8 – канавки для пайки фторопластовых прокладок.

химической травки.

### 3. Методы исследования, результаты и их обсуждение

Методы исследования характеристик подвижного сочленения волноводов последовательных сечений основывались на применении векторного анализатора цепей ZNB40 [7]. Частотный диапазон измерений выбирался из двух условий [4–6]. Нижняя частота измерений  $f_L = 4.8$  ГГц выбиралась из условия малых затухания и дисперсии основной моды  $H_{10}$  во внутреннем волноводе –  $f_L > 1.25 f_{CR.int}^{H_{10}} \approx 4.69$  ГГц, где  $f_{CR.int}^{H_{10}} = c/\lambda_{CR.int}^{H_{10}} = c/2a_1 = c/(2 \times 40) = 3.75$  ГГц есть критическая частота моды  $H_{10}$ . Верхняя частота измерений  $f_U = 6.15$  ГГц выбиралась из условия одномодовой работы внешнего волновода сочленения –  $f_U < f_{CR.ext}^{H_{20}} = c/a_2 = c/48 \approx 6.25$  ГГц, где  $f_{CR.ext}^{H_{20}}$  есть критическая частота моды  $H_{20}$ , следующей после моды  $H_{10}$ .

Для последующих исследований была изготовлена согласованная пирамидальная нагрузка для внутреннего волновода. Нагрузка представляет собой пенопластовую пирамиду высотой 200 мм с прямоугольным основанием. Вдоль широкой грани пирамиды по ее середине от основания пирамиды и до расстояния в 15 мм от ее вершины отфрезерован сквозной паз шириной 4 мм. Паз заполнен поглощающей электромагнитную энергию смесью мелкодисперсного порошка карбонильного железа с поливинилацетатной эмульсией. Такой же смесью покрыта и вся поверхность нагрузки.

Для определения коэффициента стоячей волны по напряжению (КСВН)  $K_B$  нагрузки применялся стенд измерений, блок-схема которого изображена на рис.2.

Частота анализатора цепей развевывалась от значения 4.7 до 6.17 ГГц с установкой 4-х маркеров на следующих частотах  $f_j$  ( $j = 1, 2, 3, 4$  – номер маркерной частоты) –  $f_1 = 4.8$ ,  $f_2 = 5.25$ ,  $f_3 = 5.7$  и  $f_4 = 6.15$  ГГц. Калибровка измерений на маркерных частотах по параметру модуля  $|\dot{S}_{11}|_j$  комплексного коэффициента отражения в блок-схеме выполнялась по сечению А.

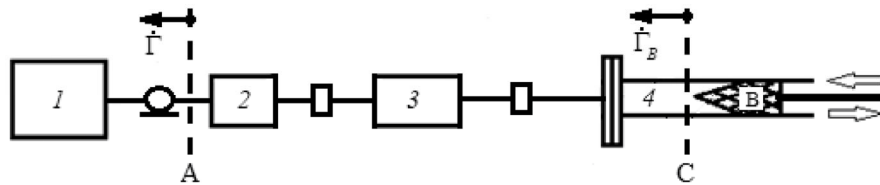


Рис.2. Блок-схема измерений: 1 – векторный анализатор цепей ZNB40, 2 – коаксиально-волноводный переход РЕWСА-1076, 3 – волноводный переход между сечениями  $(47.5 \times 22.15 \rightleftharpoons 40 \times 20)$  мм<sup>2</sup> волноводов, 4 – волновод сечением  $(40 \times 20)$  мм<sup>2</sup>, В – нагрузка,  $\dot{\Gamma}_A, \dot{\Gamma}_B$  – коэффициенты отражения соответственно в плоскостях А и С.

На этих частотах КСВН  $K_j$  во входной плоскости А и КСВН  $K_{Bj}$  нагрузки определялись по методу, основанному на следующих соображениях. Рассмотрим изображенную на рис.3 схему, на которой показана эквивалентная картина падающих и отраженных волн согласно блок-схеме рис.2.

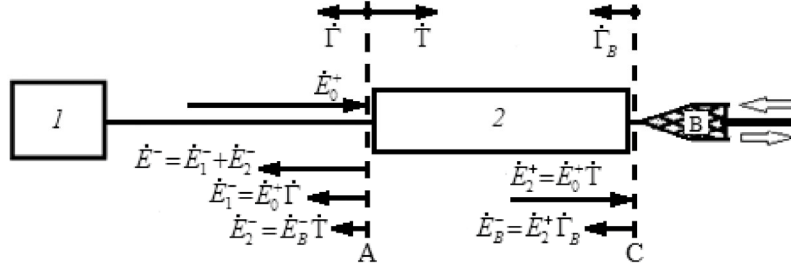


Рис.3. Эквивалентная картина падающих и отраженных волн: 1 – векторный анализатор цепей ZNB40, 2 – эквивалентный двухполюсник, расположенный правее плоскости А до плоскости С,  $\dot{E}^+$  – комплексная напряженность электрического поля падающих волн,  $\dot{E}^-$  – комплексная напряженность электрического поля отраженных волн, В – нагрузка,  $\dot{\Gamma}$ ,  $\dot{\Gamma}_B$  – комплексные коэффициенты отражения соответственно в плоскостях А и С,  $\dot{T}$  – комплексный коэффициент прохождения в плоскости А.

В схеме рис.3 не учтены вторичные отражения между отражающими плоскостями А и С, приводящие к отражениям, являющимся величинами малости более высоких порядков по сравнению с указанными на схеме. Не учтены также незначительные потери в эквивалентном двухполюснике 2. Из рис.3 следует

$$\left. \begin{aligned} \dot{E}^- = \dot{E}_1^- + \dot{E}_2^- = \dot{E}_0^+ [\dot{\Gamma} + (\dot{T})^2 \dot{\Gamma}_B] \\ \dot{S}_{11} = \frac{\dot{E}^-}{\dot{E}_0^+} = \dot{\Gamma} + (\dot{T})^2 \dot{\Gamma}_B \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

Перемещением нагрузки В можно добиться того, чтобы вызванное ею отражение  $\dot{E}_2^-$  было бы либо синфазным с отражением  $\dot{E}_1^-$ , либо противофазным. Тогда для первого и второго случаев, учитывая нижнее соотношение в (1) и соотношение  $|\dot{T}|^2 = 1 - |\dot{\Gamma}|^2$ , можно записать

$$\left. \begin{aligned} |\dot{S}_{11}|^{\max} = |\dot{\Gamma}| + |\dot{T}|^2 |\dot{\Gamma}_B| = |\dot{\Gamma}| + (1 - |\dot{\Gamma}|^2) |\dot{\Gamma}_B| \\ |\dot{S}_{11}|^{\min} = |\dot{\Gamma}| - |\dot{T}|^2 |\dot{\Gamma}_B| = |\dot{\Gamma}| - (1 - |\dot{\Gamma}|^2) |\dot{\Gamma}_B| \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

Система уравнений (2) определяет модули  $|\dot{\Gamma}|$ ,  $|\dot{\Gamma}_B|$  коэффициентов отражения через величины параметров  $|\dot{S}_{11}|^{\max}$  и  $|\dot{S}_{11}|^{\min}$ , регистрируемых векторным анализатором цепей при перемещении нагрузки. Из (2) получаем

$$\left. \begin{aligned} |\dot{\Gamma}| &= \frac{|\dot{S}_{11}|^{\max} + |\dot{S}_{11}|^{\min}}{2} \\ |\dot{\Gamma}_B| &= \frac{|\dot{S}_{11}|^{\max} - |\dot{S}_{11}|^{\min}}{2(1 - |\dot{\Gamma}|^2)} \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

Описанный метод измерения назовем «методом перемещения нагрузки», чтобы отличить его от «метода подвижной нагрузки», приведенного в [8, 9]. В «методе подвижной нагрузки» применяется последующая за генератором СВЧ измерительная линия, выход которой нагружен на тестируемое устройство. При перемещении зонда измерительной линии им замеряется отношение максимума к минимуму волны в измерительной линии, что определяет величину  $K$  в плоскости  $A$ . КСВН нагрузки  $K_B$  также определяется отношением максимума к минимуму волны в измерительной линии, но при неподвижном зонде, когда они замеряются при перемещении нагрузки. Заметим, что в описанном выше «методе перемещения нагрузки», при значениях  $K \leq 1.5$  в плоскости  $A$  имеем  $|\dot{\Gamma}| = \frac{K-1}{K+1} \leq 0,2 \rightarrow |\Gamma|^2 = 1 - |\dot{\Gamma}|^2 \geq 0,96$  и ошибка в определении  $|\dot{\Gamma}_B|$  по приближенной формуле  $|\dot{\Gamma}_B| \approx \left( |\dot{S}_{11}|^{\max} - |\dot{S}_{11}|^{\min} \right) / 2$ , в отличие от нижнего выражения в (3), составляет менее 4%. Результаты измерений по блок-схеме рис.2 и определяемые величины по соотношениям (3) на маркерных частотах сведены в табл.1.

Следуя приведенному «методу перемещения нагрузки» по изображенной на рис.4 блок-схеме, на отмеченных выше маркерных частотах определялись

Табл.1. Измеренные и определяемые величины, соответствующие рис.2 и 3

$j$	1	2	3	4
$f_j, \text{ ГГц}$	4.8	5.25	5.7	6.15
$ \dot{S}_{11} _j^{\min}$	0.100	0.025	0.052	0.013
$ \dot{S}_{11} _j^{\max}$	0.200	0.100	0.080	0.065
$ \dot{\Gamma} _j$	0.150	0.062	0.066	0.039
$ \dot{\Gamma} _j^2$	0.977	0.996	0.996	0.998
$ \dot{\Gamma}_B _j$	0.051	0.038	0.014	0.026
$K_j$	1.35	1.13	1.14	1.08
$K_{Bj}$	1.11	1.08	1.03	1.05

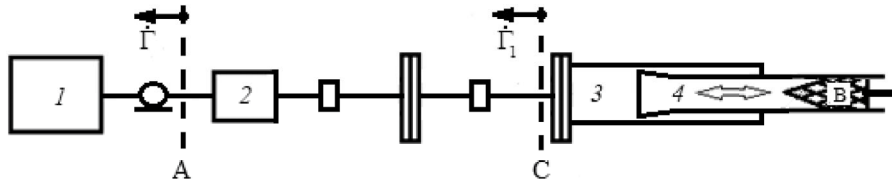


Рис.4. Блок-схема измерений: 1 – векторный анализатор цепей ZNB40, 2 – коаксиально-волноводный переход PEWCA-1076, 3 – подвижное сочленение волноводов, 4 – внутренний волновод сочленения, В – нагрузка,  $\dot{\Gamma}, \dot{\Gamma}_1$  – коэффициенты отражения соответственно в отражающих плоскостях А и С.

значения  $K_j$  в плоскости А, а также и  $K_{1j}$  сочленения в плоскости С с помещенной в его внутреннем волноводе неподвижной нагрузке В. Однако в этом случае перемещался сам внутренний волновод 4. Результаты измерений по блок-схеме рис.4 и определяемые величины сведены в табл.2.

Табл.2. Измеренные и определяемые величины, соответствующие рис.4

$j$	1	2	3	4
$f_j, \text{ГГц}$	4.8	5.25	5.7	6.15
$ \dot{S}_{11} _j^{\min}$	0.109	0.032	0.025	0.004
$ \dot{S}_{11} _j^{\max}$	0.240	0.080	0.115	0.113
$ \dot{\Gamma} _j$	0.174	0.058	0.070	0.058
$ \dot{\Gamma} _j^2$	0.969	0.997	0.995	0.997
$ \dot{\Gamma}_1 _j$	0.068	0.024	0.045	0.055
$K_j$	1.42	1.12	1.15	1.12
$K_{1j}$	1.14	1.05	1.10	1.12

Некоторое увеличение значений  $K_j$  отчасти обусловлено и отсутствием перехода между сечениями ( $a_1 = 47.5 \times b_1 = 22.15$ ) и ( $a_2 = 48 \times b_2 = 24$ ) мм<sup>2</sup> волноводов. Из табл.1 можно заметить, что на маркерных частотах для нагрузки  $K_{Bj} \leq 1.11$ , а, согласно табл.2, для подвижного сочленения вместе с нагрузкой  $K_{1j} \leq 1.14$ . По сути, подвижное сочленение в относительной полосе частот, равной  $\frac{\Delta f}{f_0} = \frac{f_4 - f_1}{(f_4 + f_1)/2} = \frac{6.15 - 4.8}{(6.15 + 4.8)/2} \times 100\% \approx 25\%$ , вносит мизерный вклад в отражение.

Следующая серия измерений предназначалась для исследования

нестабильностей передаточных характеристик подвижного сочленения по мощности и по фазе. Измерения выполнялись на стенде, блок-схема которого изображена на рис.5.

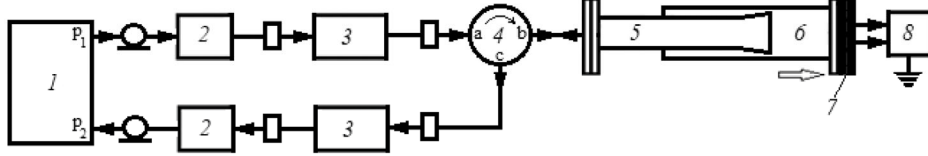


Рис.5. Блок-схема измерений: 1 – векторный анализатор цепей ZNB40, 2 – коаксиально-волноводный переход PEWCA-1076, 3 – волноводный переход между сечениями  $(47.5 \times 22.15 \rightleftharpoons 40 \times 20)$  мм<sup>2</sup> волноводов, 4 – циркулятор, 5 – внутренний волновод сочленения, 6 – внешний волновод сочленения, 7 – короткозамыкатель, 8 – датчик перемещений (энкодер линейных перемещений DITRON с точностью  $\pm 5$  мкм и с цифровым считывателем DL50).

Измерения проводились следующим способом. Сначала на маркерных частотах выполнялась калибровка схемы измерений по параметрам модуля  $|\dot{S}_{12}|_j$  и набега фазы  $\varphi_j$  комплексного коэффициента прохождения  $\dot{S}_{12}$  с выхода  $p_1$  анализатора на его вход  $p_2$  при короткозамкнутом выходе  $b$  циркулятора 4. В процессе измерений внешний короткозамкнутый волновод 6 сочленения перемещался с шагом  $\Delta l = 1$  мм на расстояние  $\Delta L = 41$  мм. Это расстояние приблизительно равно  $\Lambda_{1ext}^{H_{10}}/2$ , где  $\Lambda_{1ext}^{H_{10}}$  – длина волны во внешнем волноводе на наименьшей маркерной частоте  $f_1 = 4.8$  ГГц ( $\lambda_1 = c/f_1 = 62.5$  мм) и  $\Lambda_{1ext}^{H_{10}}$  определяется выражением [4–6]

$$\Lambda_{1ext}^{H_{10}} = \frac{\lambda_1}{\sqrt{1 - \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_{CR,ext}^{H_{10}}}\right)^2}} = \frac{62.5}{\sqrt{1 - \left(\frac{62.5}{2 \times 48}\right)^2}} \approx 82 \text{ мм.} \quad (4)$$

Перемещение на расстояние  $\Delta L = 41$  мм обеспечивает минимальный суммарный фазовый набег  $\varphi_{\Sigma j}^{\min} \approx 360^\circ$  на всех маркерных частотах. При каждом  $n$ -ом шаге перемещения внешнего волновода на отмеченных маркерных частотах  $f_j$  векторным анализатором цепей измерялись параметр  $|\dot{S}_{12}|_{jn}$  и фазовый набег  $\varphi_{jn}^M$ . Из этих данных высчитывались величины  $|\dot{S}_{12}|_{jn}^2$  и разность  $\Delta\varphi_{jn}$  между теоретическими  $\varphi_{jn}^T$  и измеренными  $\varphi_{jn}^M$  набегами фаз

$$\Delta\varphi_{jn} = \varphi_{jn}^T - \varphi_{jn}^M = \gamma_j 2\Delta l n - \varphi_{jn}^M = \frac{720^\circ}{\Lambda_{j,ext}^{H_{10}}} \Delta l n - \varphi_{jn}^M, \quad (5)$$

где  $\gamma_j = 2\pi/\Lambda_{j,ext}^{H_{10}} = 360^\circ/\Lambda_{j,ext}^{H_{10}}$  – коэффициент фазы основной моды  $H_{10}$   $j$ -ой маркерной частоты во внешнем волноводе. В табл.3 приведены абсолютные размахи по мощности  $\delta P_j^{\max}$  (дБ) и по фазе  $\delta\varphi_j^{\max}$  (град), высчитанные по следующим соотношениям

Табл.3. Максимальные абсолютные размахи по мощности и по фазе и соответствующие стандартные отклонения на 4-х маркерных частотах

$j$	1	2	3	4
$f_j$ , ГГц	4.8	5.25	5.7	6.15
$\delta P_j^{\max}$ , дБ	0.60	0.60	0.48	0.42
$\sigma_{P_j}$ , дБ	0.20	0.20	0.16	0.14
$\delta \varphi_j^{\max}$ , град	16	4.6	5.1	4.6
$\sigma_{\varphi_j}$ , град	5.3	1.5	1.7	1.5

$$\left. \begin{aligned} \delta P_j^{\max} &= \frac{1}{2} 10 \lg \frac{\left( |\dot{S}_{12}|_{jn}^{\max} \right)^2}{\left( |\dot{S}_{12}|_{jn}^{\min} \right)^2} \\ \delta \varphi_j^{\max} &= \frac{1}{2} \left| \Delta \varphi_{jn}^{\max} - \Delta \varphi_{jn}^{\min} \right| \end{aligned} \right\}. \quad (6)$$

Предполагая гауссовское распределение случайных ошибок измерений, имеем, что стандартные отклонения по мощности  $\sigma_{P_j}$  и по фазе  $\sigma_{\varphi_j}$  равны 1/3 соответствующих абсолютных размахов [10].

Как следует из табл.3, область частот, в которой обеспечивается достаточно малая нестабильность передаточных характеристик ( $\sigma_P \leq 0.2$  дБ и  $\sigma_\varphi < 2^\circ$ ) работы сочленения, снизу гарантированно ограничена частотой  $f_L^0 = f_2 = 5.25$  ГГц, выше которой, как видно из рис.4 и табл.2, сочленение вместе с нагрузкой имеет значения коэффициента отражения  $\Gamma_1 \leq 0.055 \rightarrow K_1 \leq 1.12$ . При этом отношение  $f_L^0$  к критической частоте  $f_{CR.int}^{H_{10}} = 3.75$  ГГц внутреннего волновода равно  $f_L^0 / f_{CR.int}^{H_{10}} = 5.25 / 3.75 = 1.4$ . Оценка угла падения  $\phi_{int}$  парциальных волн Бриллюэна на узкие стенки внутреннего волновода сочленения на частоте  $f_L^0$  дает следующее значение [4–6]

$$\phi_{int} = \arccos \frac{f_{CR.int}^{H_{10}}}{f_L^0} = \arccos \frac{1}{1.4} = 44.4^\circ. \quad (7)$$

При конструкции сочленения с максимальным углом раскрыва его рупорного окончания в несколько градусов такой угол падения можно принять в качестве критерия обеспечения достаточно высоких показателей характеристик сочленения. Основанием для этого является следующее. С увеличением частоты угол  $\phi_{int}$  растет, количество переотражений парциальных волн уменьшается и в пределе волны очень высоких частот пойдут практически вдоль оси волновода. Физически ясно, что лучи парциальных волн с повышением частоты, имея

меньшее количество переотражений от стенок, будут испытывать меньшее воздействие со стороны неоднородностей рупорного окончания в сочленении. Это означает возникновение на его неоднородностях меньших отражений и меньших по интенсивности других типов волн. Однако при увеличении частоты возникает другая проблема, связанная уже с возможностью распространения возникших этих типов волн в волноводах. Они, испытывая взаимные преобразования с основной рабочей модой  $H_{10}$ , в том числе и между собой, приведут к ухудшению передаточных характеристик сочленения. Поэтому волны высших типов приходится подавлять, что и осуществляется специальными фильтрами в подвижной линии передачи миллиметровых волн, построенной на таких сочленениях, волноводы которых являются сверхразмерными для предназначенных рабочих частот [1, 2, 11–12].

Первый высший тип волны  $H_{20}$  сначала возникает во внешнем волноводе из-за его большего размера широкой стенки. Тогда, при отмеченной малой нестабильности передаточных характеристик сочленения, интервал частот его одномодового режима работы с модой  $H_{10}$  выразится соотношением

$$1.4 f_{CR.int}^{H_{10}} = f_L^0 \leq f \leq f_U = f_{CR.ext}^{H_{20}}. \quad (8)$$

Или, учитывая, что  $f_{CR.int}^{H_{10}} = 3.75$  и  $f_{CR.ext}^{H_{20}} = c/a_2 = 300/48 \approx 6.25$  ГГц, для искомого интервала частот получим  $5.25 \leq f \leq 6.25$  ГГц, а для относительной полосы частот  $-\frac{\Delta f}{f_0} = \frac{f_U - f_L^0}{(f_U + f_L^0)/2} = \frac{6.25 - 5.25}{(6.25 + 5.25)/2} \times 100\% \approx 17.4\%$ . При этом на верхней

частоте  $f_U = 6.25$  ГГц углы падения  $\phi_{int}$  и  $\phi_{ext}$  парциальных волн на узкие стенки соответственно внутреннего и внешнего волноводов, согласно (7), равны

$$\left. \begin{aligned} \phi_{int} &= \arccos \frac{f_{CR.int}^{H_{10}}}{f_U} = \arccos \frac{3.75}{6.25} \approx 53^\circ \\ \phi_{ext} &= \arccos \frac{f_{CR.ext}^{H_{10}}}{f_U} = \arccos \frac{3.125}{6.25} \approx 60^\circ \end{aligned} \right\}. \quad (9)$$

Рассмотрим теперь подобные подвижные рупорные сочленения стандартных волноводов следующих 3-х последовательных сечений [13]

$$(a_1^{(1)} = 23 \times 10 = b_1^{(1)} \Leftrightarrow a_2^{(1)} = 28.5 \times 12.6 = b_2^{(1)}) \text{ мм}^2,$$

$$(a_1^{(2)} = 28.5 \times 12.6 = b_1^{(2)} \Leftrightarrow a_2^{(2)} = 35 \times 15 = b_2^{(2)}) \text{ мм}^2,$$

$$(a_1^{(3)} = 35 \times 15 = b_1^{(3)} \Leftrightarrow a_2^{(3)} = 40 \times 20 = b_2^{(3)}) \text{ мм}^2,$$

имеющих соответствующие  $k$ -ые критические частоты  $f_{CR.int}^{H_{10}(k)}$  и  $f_{CR.ext}^{H_{20}(k)}$  внутренних и внешних волноводов:

$$f_{CR.int}^{H_{10}(1)} = \frac{c}{\lambda_{CR.int}^{H_{10}(1)}} = \frac{c}{2a_1^{(1)}} = \frac{300}{2 \times 23} \approx 6.52 \text{ ГГц}, \quad f_{CR.ext}^{H_{20}(1)} = \frac{c}{\lambda_{CR.ext}^{H_{20}(1)}} = \frac{c}{a_2^{(1)}} = \frac{300}{28.5} \approx 10.53 \text{ ГГц};$$

$$f_{CR.int}^{H_{10}(2)} = \frac{c}{\lambda_{CR.int}^{H_{10}(2)}} = \frac{c}{2a_1^{(2)}} = \frac{300}{2 \times 28.5} \approx 5.26 \text{ ГГц}, \quad f_{CR.ext}^{H_{20}(2)} = \frac{c}{\lambda_{CR.ext}^{H_{20}(2)}} = \frac{c}{a_2^{(2)}} = \frac{300}{35} \approx 8.57 \text{ ГГц};$$

$$f_{CR.int}^{H_{10}^{(3)}} = \frac{c}{\lambda_{CR.int}^{H_{10}^{(3)}}} = \frac{c}{2a_1^{(3)}} = \frac{300}{2 \times 35} \approx 4.28 \text{ ГГц}, \quad f_{CR.ext}^{H_{20}^{(3)}} = \frac{c}{\lambda_{CR.ext}^{H_{20}^{(3)}}} = \frac{c}{a_2^{(3)}} = \frac{300}{40} \approx 7.5 \text{ ГГц}.$$

На основании теории электродинамического подобия и масштабного моделирования [11, 14, 15] можно утверждать, что рассматриваемые сочленения в одномодовом режиме работы будут иметь малые нестабильности передаточных характеристик со стандартными отклонениями по мощности  $\sigma_p \leq 0.2$  дБ и по фазе  $\sigma_\varphi \leq 2^\circ$ , если в них соблюдается выбранный критерий угла падения  $\phi_{int} \geq 44.4^\circ$  парциальных волн на узкие стенки внутренних волноводов. При этом соответствующие относительные полосы рабочих частот

$$\left(\frac{\Delta f}{f_0}\right)^{(k)} = \frac{f_U^{(k)} - f_L^{0(k)}}{(f_U^{(k)} + f_L^{0(k)})/2} \text{ будут равны:}$$

$$1.4 f_{CR.int}^{H_{10}^{(1)}} = f_L^{0(1)} \approx 9.13 \text{ ГГц} \leq f \leq 10.53 \text{ ГГц} \approx f_U^{(1)} \rightarrow \left(\frac{\Delta f}{f_0}\right)^{(1)} \approx 14\%,$$

$$1.4 f_{CR.int}^{H_{10}^{(2)}} = f_L^{0(2)} \approx 7.37 \text{ ГГц} \leq f \leq 8.57 \text{ ГГц} \approx f_U^{(2)} \rightarrow \left(\frac{\Delta f}{f_0}\right)^{(2)} \approx 15\%,$$

$$1.4 f_{CR.int}^{H_{10}^{(3)}} = f_L^{0(3)} \approx 5.99 \text{ ГГц} \leq f \leq 7.5 \text{ ГГц} \approx f_U^{(3)} \rightarrow \left(\frac{\Delta f}{f_0}\right)^{(3)} \approx 22\%.$$

#### 4. Заключение

Описаны особенности конструкции бесконтактного по постоянному току подвижного сочленения СВЧ волноводов последовательных стандартных сечений. В конструкции сочленения внутренний волновод имеет рупорное окончание с максимальным углом его раскрыва  $6^\circ$  во взаимно-перпендикулярных плоскостях, а вся внешняя поверхность окончания покрыта поглощающим электромагнитную энергию слоем. Узкая щель шириной менее 0.2 мм между этой поверхностью и внутренней поверхностью внешнего волновода сочленения из-за большей емкости способствует короткому замыканию СВЧ токов поверхностей и взаимной электромагнитной развязке между полем в сочленении и внешними возможными полями. Выполнено исследование степени отражения и нестабильности передаточных характеристик предложенного подвижного сочленения с применением векторного анализатора цепей ZNB40. В этом случае обсуждается предложенный метод исследования меры отражения сочленения, названный «методом перемещения нагрузки». На основе проведенного исследования, концепции Бриллюэна, теории электродинамического подобия и масштабного моделирования показано, что подвижные сочленения СВЧ стандартных волноводов последовательных сечений на частотах, соответствующих углам падения  $\phi_{int} \geq 45^\circ$  парциальных волн Бриллюэна на узкую стенку внутреннего волновода, имеют вполне приемлемые показатели параметров. В результате получены следующие значения параметров. В режиме одномодовой работы в относительной полосе частот не менее 14% такие сочленения будут иметь КСВН  $\leq 1.12$  и стандартные отклонения передаточных характеристик по мощности –  $\sigma_p \leq 0.2$  дБ, а по фазе –  $\sigma_\varphi \leq 2^\circ$ .

## ЛИТЕРАТУРА

1. **V.H. Avetisyan.** IEEE Trans. on Antennas and Propagation, **58**, 2149 (2010).
2. **С.Б. Макаров, Р.А. Давтян, А.К. Агаронян, М.В. Маркосян, В.Г. Аветисян, С.В. Завьялов, С.В. Томашевич.** Радиотехника, №11, 107 (2021).
3. **Б.З. Каценеленбаум.** Высокочастотная электродинамика. Москва, Наука, 1966.
4. **О.И. Фальковский.** Техническая электродинамика. Санкт-Петербург, Лань, 2022.
5. **Н.А. Семенов.** Техническая электродинамика. Москва, Связь, 1973.
6. **Н. Heuermann.** Microwave Technology. New York, Springer, 2024.
7. [https://www.rohde-schwarz.com/cac-en/products/test-and-measurement/network-analyzers/rs-znb-vector-network-analyzer\\_63493-11648.html](https://www.rohde-schwarz.com/cac-en/products/test-and-measurement/network-analyzers/rs-znb-vector-network-analyzer_63493-11648.html) .
8. **Р.А. Валитов, Б.И. Макаренко.** Измерения на миллиметровых и субмиллиметровых волнах. Методы и техника. Москва, Радио и связь, 1984.
9. **V. Terpati, A. Ferrero, M. Sayed.** Modern RF and Microwave Measurements Technique. New York, Cambridge University Press, 2013.
10. **В.И. Тихонов.** Статистическая радиотехника. Москва, ЕЕ Медиа, 2025.
11. **А.М. Григорьев.** Электродинамика и микроволновая техника. Санкт-Петербург, Лань, 2026.
12. **T.N. Anderson.** Microwave J., №12, 22 (1982).
13. ГОСТ 20900-2014. Трубы волноводные медные и латунные прямоугольные.
14. **G. Sinebair.** Proc. IRE, **36**, 36 (1948).
15. **Е.Н. Майзельс, В.А. Торгованов.** Измерение характеристик рассеяния радиолокационных целей. Москва, Сов. радио, 1972.

## INVESTIGATION OF THE MOVABLE JOINT OF RECTANGULAR MICROWAVE WAVEGUIDES WITH CONSECUTIVE CROSS-SECTIONS

R.A. DAVTYAN, A.S. MOVSISYAN, A.K. AGARONYAN, V.H. AVETISYAN

The design features of a movable horn joint of rectangular waveguides with a maximum horn opening angle in mutually perpendicular planes less than a few degrees are presented. The joint is built on the standard waveguides of consecutive cross-sections. Research methods using a vector network analyser are discussed. In the case of single-moded operation of the jointed waveguides the reflection degree from the joint and the instabilities of its amplitude- and phase-frequency transmission characteristics are investigated. At angles  $\phi \geq 45^\circ$  of incidence of partial Brillouin waves on the narrow walls of the internal waveguide and in the relative frequency band  $\Delta f/f \geq 14\%$ , it is shown that such joints can provide sufficiently small values of the characteristics under study – the voltage standing wave ratio  $K \leq 1.12$  and the standard deviations of transmission characteristics instabilities in power  $\sigma_p \leq 0.2$  dB and in phase  $\sigma_\phi \leq 2^\circ$ .

ԲՈՎԱՆԴԱԿՈՒԹՅՈՒՆ

<b>Ա.Ռ. Բալաբեկյան, Գ.Հ. Հովհաննիսյան, Ս.Վ. Գազիկյան, Ս.Գ. Պողոսյան, Մ.Ա. Խաչատրյան, Է.Լ. Կարապետյան, Ջ.Ռ. Դոնոյան, Կ. Կատովսկի.</b> Միջին զանգվածային տիրություն գտնվող միջուկներում հազվագյուտ կլաստերացման պրոցեսները.....	3
<b>S.E. Boichenko.</b> Contribution of Individual Harmonics to the Power of Circularly Polarized Synchrotron Radiation.....	10
<b>K. Walia, P. Sharma.</b> Nonlinear Self-Focusing of Cosh–Gaussian Laser Beam in Relativistic Plasma with Linear Absorption.....	19
<b>Գ.Պ. Ջոթյան, Ա.Պ. Ջոթյան, Ա.Ա. Ավետիսյան.</b> Մետակայուն քվանտային վիճակների միջև կոհերենտության շրջելի զեներացիա՝ հաճախության քառակուսային չիրպով լազերային իմպուլսների միջոցով.....	21
<b>S. Touam, N. Mounis, F. Guenfoud, I. Bendjedide, S. Chelli, F.Z. Khelifati, D. Lamrous, O. Belaidi, S. Ghemid H. Meradji.</b> First-Principles Study of $B_{1-x}Ga_xP_yBi_{1-y}$ Quaternary Alloys for Near-Infrared Optoelectronic, Spectroscopic and Sensing Applications.....	31
<b>Վ.Ա. Հարությունյան, Ա.Հ. Մելիքյան, Հ.Ռ. Մինասյան.</b> Մոքսի պոտենցիալի սահմանափակ կիրառելիության պատճառներից մեկի մասին.....	33
<b>Դ.Ս. Ալավերդյան, Ռ.Ս. Հակոբյան, Ա.Հ. Մակարյան, Մ.Ռ. Հակոբյան.</b> Պլանար և պարբերական կողմնորոշման սահմանային պայմաններով նեմատիկ հեղուկ բյուրեղային բջջի օպտիկական հատկությունները.....	39
<b>Վ.Ա. Հարությունյան.</b> Ջրածնի մոլեկուլի նկարագրությունը Հայտլեր–Լոնդոնի մոդելի շրջանակում՝ խտտորումների տեսության առաջին կարգում.....	47
<b>Ն.Ռ. Աղամալյան, Ե.Ա. Կաֆադարյան, Ն.Բ. Կնյազյան, Գ.Գ. Մանուկյան, Վ.Վ. Բադրամյան, Ա.Ս. Սաակով, Ս.Վ. Մկրտչյան, Ա.Յու. Ալեքսանյան, Լ.Ա. Պողոսյան, Մ.Ն. Ներսիսյան.</b> Օքսիֆտոքիդային բարիումի բորայումինոսիլիկատային ապակիներ, ակտիվացված նեոդիմիումի և էրբիումի իոններով. Օպտիկական հատկություններ.....	54
<b>Մ.Կ. Բայան, Վ.Պ. Մկրտչյան, Ա.Պ. Այվազյան, Մ.Ա. Պետրոսյան.</b> Ռենտգենյան դինամիկական դիֆրակտային ալիքային ճակատի բաժանումով ինտերֆերացիայի երկու ասիմետրիկական անդրադարձումների օգտագործմամբ.....	63
<b>Լ.Վ. Լեոնյան, Հ.Ս. Մանուկյան.</b> Ռենտգենյան փնջի երկչափ կիզակետումը ոլորման սահմանով բյուրեղի էլքի մակերևույթի վրա.....	75
<b>Մ.Կ. Բայան.</b> Բյուրեղների մակերևույթային վիճակների վերլուծություն դինամիկական դիֆրակցիայի տեսության գաղափարների օգտագործմամբ.....	82
<b>Ռ.Ռ. Վարդանյան, Ն.Կ. Բադալյան, Դ.Ս. Դավթյան.</b> Արևային էներգիայի հիբրիդային ֆոտովոլտային և ջերմային փոխարկիչների բնութագրերի ուսումնասիրությունը.....	93

<b>Վ. Ավետիսյան, Մ. Սուքիասյան, Մ. Պասյան, Լ. Միքաելյան, Մ. Քալաշյան, Ա. Կուտուզյան.</b> Ֆունկցիոնալ առումով այլ դասի սիմիլարիտոնների ձևավորումը օպտիկական լուսատարերում .....	102
<b>ՄՄ.Լ. Մովսիսյան, Դ.Լ. Հովհաննիսյան.</b> Ֆեմտովայրկյանային ինֆրակարմիր լազերային իմպուլսի չիրպը գրանցելու ոչ գծային օպտիկական մեթոդ.....	109
<b>Ա.Ա. Կուզանյան, Վ.Ռ. Նիկողոսյան, Ա.Ս. Կուզանյան.</b> Գերհաղորդիչ մոլիբդենի կլանիչով միաֆոտոն ջերմաէլեկտրական դետեկտորի տվիչ...	122
<b>F.V. Gasparyan, L.F. Gasparyan, V.V. Simonyan.</b> DNA Sequencing by the Ionic Blockade Currents Method.....	131
<b>Մ.Ա. Էվինյան, Ա.Հ. Դավթյան, Ռ.Յ. Չիլինգարյան, Ա.Ս. Աբրահամյան, Ս.Դ. Արսենյան.</b> Էթիլենի հետ HO <sub>2</sub> և CH <sub>3</sub> O <sub>2</sub> ռադիկալների փոխազդեցության ժամանակ ջրածնի ատոմի միջմոլեկուլային անցումների քվանտաքիմիական ուսումնասիրություն .....	133
<b>Գ.Վ. Անանյան, Պ.Հ. Վարդևանյան, Ն.Հ. Կարապետյան.</b> ԴՆԹ-ի կրկնակի պարույրաձև կառուցվածքում կարգ-անկարգավորություն անցման թերմոդինամիկական CoTAllPyP4-ի առկայությամբ.....	140
<b>Ռ.Ա. Դավթյան, Ա.Ս. Մովսիսյան, Ա.Կ. Ահարոնյոն, Վ.Հ. Ավետիսյան.</b> Հաջորդող հատվածքներով ԳԲՀ ուղղանկյուն ալիքատարերի շարժական միակցման հետազոտում .....	147

## CONTENTS

<b>A.R. Balabekyan, G.H. Hovhannisyan, S.V. Gaginyan, S.G. Poghosyan, M.A. Khachatryan, E.L. Karapetyan, J.R. Drnoyan, K. Katovsky.</b> Rare Clustering Processes in Nuclei in the Intermediate Mass Range .....	3
<b>S.E. Boichenko.</b> Contribution of Individual Harmonics to the Power of Circularly Polarized Synchrotron Radiation.....	10
<b>K. Walia, P. Sharma.</b> Nonlinear Self-Focusing of Cosh–Gaussian Laser Beam in Relativistic Plasma with Linear Absorption.....	19
<b>G.P. Djotyan, A.A. Avetisyan, A.P. Djotyan.</b> Reversible Generation of Coherence Between Metastable Quantum States Using Laser Pulses with Quadratic Frequency Chirp.....	21
<b>S. Touam, N. Mounis, F. Guenfoud, I. Bendjedide, S. Chelli, F.Z. Khelifati, D. Lamrous, O. Belaidi, S. Ghemid H. Meradji.</b> First-Principles Study of $B_{1-x}Ga_xP_yBi_{1-y}$ Quaternary Alloys for Near-Infrared Optoelectronic, Spectroscopic and Sensing Applications.....	31
<b>V.A. Harutyunyan, A.H. Melikyan, H.R. Minassian.</b> On one Reason for the Limited Applicability of the Morse Potential.....	33
<b>D.S. Alaverdyan, R.S. Hakobyan, A.H. Makaryan, M.R. Hakobyan.</b> Optical Properties of a Cell of Nematic Liquid with Planar and Periodical Orientational Boundary Conditions.....	39
<b>V.A. Harutyunyan.</b> The Hydrogen Molecule in the Heitler–London Model in First-Order Perturbation Theory .....	47
<b>N.R. Aghamalyan, Ye.A. Kafadaryan, N.B. Knyazyan, G.G. Manukyan, V.V. Baghramyanyan, A.S. Saakov, S.V. Mkrtychyan, A.Y. Aleksanyan, L.A. Poghosyan, M.N. Nersisyan.</b> Oxyfluoride Barium Boroaluminosilicate Glasses Activated with Neodymium and Erbium Ions: Optical Properties.....	54
<b>M.K. Balyan, V.P. Mkrtychyan, A.P. Aivazyan, S.A. Petrosyan.</b> X-Ray Dynamical Diffraction Interferometer with Wave Front Division Using Two Asymmetrical Reflections .....	63
<b>L.V. Levonyan, H.M. Manukyan.</b> Two-Dimensional Focusing of an X-Ray Beam on the Exit Surface of a Crystal with a Twist Boundary .....	75
<b>M.K. Balyan.</b> Analysis of Surface States of Crystals Using Ideas of Dynamical Theory of Diffraction .....	82
<b>R.R. Vardanyan, N.K. Badalyan, D.S. Davtyan.</b> Investigation of the Characteristics of Hybrid Photovoltaic-Thermal Solar Energy Converters .....	93

<b>V. Avetisyan, M. Sukiasyan, M. Papyan, L. Mikaelyan, M. Kalashyan, A. Kutuzyan.</b> Emergence of a Similariton with a Functionally Distinct Profile in Optical Fibers .....	102
<b>M.L. Movsisyan, D.L. Hovhannisyan.</b> Nonlinear Optical Method for Recording the Chirp of a Femtosecond Infrared Laser Pulse .....	109
<b>A.A. Kuzanyan, V.R. Nikoghosyan, A.S. Kuzanyan.</b> Single-Photon Thermoelectric Detector Sensor with Superconducting Molybdenum Absorber .....	122
<b>F.V. Gasparyan, L.F. Gasparyan, V.V. Simonyan.</b> DNA Sequencing by the Ionic Blockade Currents Method.....	131
<b>M.A. Evinyan, A.H. Davtyan, R.Yu. Chilingaryan, A.S. Abrahamyan, S.D. Arsentev.</b> Quantum-Chemical Study of Intermolecular Transitions of the Hydrogen Atom During the Interaction of HO <sub>2</sub> and CH <sub>3</sub> O <sub>2</sub> Radicals with Ethylene.....	133
<b>G.V. Ananyan, P.H. Vardevanyan, N.H. Karapetyan.</b> Thermodynamics of the Order-Disorder Transition in the Double-Helical Structure of DNA in the Presence of CoTAlIPyP4.....	140
<b>R.A. Davtyan, A.S. Movsisyan, A.K. Agaronyan, V.H. Avetisyan.</b> Investigation of the Mobile Junction of Rectangular Microwave Waveguides with Consecutive Cross-Sections .....	147

## СОДЕРЖАНИЕ

<b>А.Р. Балабекян, Г.О. Оганнисян, С.В. Гагинян, С.Г. Погосян, М.А. Хачатрян, Э.Л. Карапетян, Д.Р. Дрноян, К. Катовский.</b> Редкие процессы кластеризации ядер в области средних масс .....	3
<b>С.Е. Бойченко.</b> Вклад отдельных гармоник в мощность синхротронного излучения круговой поляризации .....	10
<b>K. Walia, P. Sharma.</b> Nonlinear Self-Focusing of Cosh–Gaussian Laser Beam in Relativistic Plasma with Linear Absorption.....	19
<b>Г.П. Джотян, А.А. Аветисян, А.П. Джотян.</b> Обратимая генерация когерентности между метастабильными квантовыми состояниями с использованием лазерных импульсов с квадратичным частотным чирпом .....	21
<b>S. Touam, N. Mounis, F. Guenfoud, I. Bendjedide, S. Chelli, F.Z. Khelifati, D. Lamrous, O. Belaidi, S. Ghemid H. Meradji.</b> First-Principles Study of $B_{1-x}Ga_xP_yBi_{1-y}$ Quaternary Alloys for Near-Infrared Optoelectronic, Spectroscopic and Sensing Applications.....	31
<b>В.А. Арутюнян, А.О. Меликян, А.Р. Минасян.</b> Об одной из причин ограниченной применимости потенциала Морзе.....	33
<b>Д.С. Алавердян, Р.С. Акопян, А.А. Макарян, М.Р. Акопян.</b> Оптические свойства ячейки нематического жидкого кристалла с планарным и периодически ориентационным граничными условиями .....	39
<b>В.А. Арутюнян.</b> Молекула водорода в модели Гайтлера–Лондона в первом порядке теории возмущений .....	47
<b>Н.Р. Агамалян, Е.А. Кафадарян, Н.Б. Князян, Г.Г. Манукян, В.В. Баграмян, А.С. Сааков, С.В. Мкртчян, А.Ю. Алексанян, Л.А. Погосян, М.Н. Нерсисян.</b> Оксифторидные барий-бороалюмосиликатные стекла, активированные ионами неодима и эрбия: Оптические свойства .....	54
<b>М.К. Балян, В.П. Мкртчян, А.П. Айвазян, С.А. Петросян.</b> Рентгеновский динамический дифракционный интерферометр с разделением волнового фронта с использованием двух асимметричных отражений.....	63
<b>Л.В. Левонян, А.М. Манукян.</b> Двумерная фокусировка рентгеновского пучка на выходной поверхности кристалла с границей кручения .....	75
<b>М.К. Балян.</b> Анализ поверхностных состояний кристалла с использованием идей динамической теории дифракции.....	82
<b>Р.Р. Варданян, Н.К. Бадалян, Д.С. Давтян.</b> Исследование характеристик гибридных фотоэлектрических и тепловых преобразователей солнечной энергии .....	93

<b>В. Аветисян, М. Сукиасян, М. Папаян, Л. Микаэлян, М.Калашян, А. Кутузян.</b> Формирование симиляритона с функционально особым профилем в оптических волокнах .....	102
<b>М.Л. Мовсисян, Д.Л. Оганесян.</b> Нелинейно-оптический метод регистрации чирпа фемтосекундного ИК лазерного импульса .....	109
<b>А.А. Кузаян, В.Р. Никогосян, А.С. Кузаян.</b> Датчик термоэлектрического детектора одиночных фотонов со сверхпроводящим молибденовым поглотителем .....	122
<b>F.V. Gasparyan, L.F. Gasparyan, V.V. Simonyan.</b> DNA Sequencing by the Ionic Blockade Currents Method.....	131
<b>М.А. Эвинян, А.Г. Давтян, Р.Ю. Чилингарян, А.С. Абрамян, С.Д. Арсентьев.</b> Квантово-химическое исследование межмолекулярных переходов атома водорода при взаимодействии радикалов $\text{HO}_2$ и $\text{CH}_3\text{O}_2$ с этиленом.....	133
<b>Г.В. Ананиян, П.О. Вардеванян, Н.Г. Карапетян.</b> Термодинамика перехода порядок–беспорядок в двуспиральной структуре ДНК в присутствии CoTAlPrP4 .....	140
<b>Р.А. Давтян, А.С. Мовсисян, А.К. Агаронян, В.Г. Аветисян.</b> Исследование подвижного сочленения прямоугольных волноводов СВЧ диапазона с последовательными сечениями.....	147