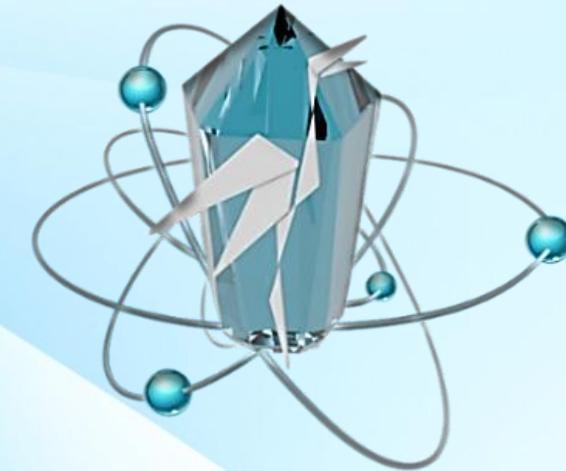


МГПУ им. И.П. Шамякина

МЕЖДУНАРОДНАЯ
НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
ПО ОПТИКЕ И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКЕ,
ПОСВЯЩЕННАЯ 80-ЛЕТИЮ СО ДНЯ РОЖДЕНИЯ
ПРОФЕССОРА ШЕПЕЛЕВИЧА ВАСИЛИЯ ВАСИЛЬЕВИЧА



Сборник научных статей



Мозырь, 27–28 марта 2025 года

Министерство образования Республики Беларусь

Учреждение образования
«Мозырский государственный педагогический университет имени И. П. Шамякина»

Государственное научное учреждение
«Институт физики имени Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларусь»

Общественное объединение
«Белорусское физическое общество»

МЕЖДУНАРОДНАЯ
НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
ПО ОПТИКЕ И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКЕ,
ПОСВЯЩЕННАЯ 80-ЛЕТИЮ СО ДНЯ РОЖДЕНИЯ
ПРОФЕССОРА ШЕПЕЛЕВИЧА ВАСИЛИЯ ВАСИЛЬЕВИЧА

Мозырь, 27–28 марта 2025 года

Сборник научных статей

Мозырь

МГПУ им. И. П. Шамякина

2025

УДК 53
ББК 22.3
М43

Редакционная коллегия:

В. Н. Навныко, кандидат физико-математических наук (ответственный редактор);
В. В. Давыдовская, кандидат физико-математических наук, доцент;
Г. В. Кулак, доктор физико-математических наук, профессор;
Е. М. Овсиюк, доктор физико-математических наук, доцент;
В. С. Савенко, доктор технических наук, профессор

Печатается согласно плану научно-практических мероприятий,
планируемых к проведению в УО МГПУ им. И. П. Шамякина в 2025 году,
и приказу по университету от 24.03.2025 № 385

Международная научно-практическая конференция по оптике и теоретической
M43 физике, посвященная 80-летию со дня рождения профессора Шепелевича Василия
Васильевича, Мозырь, 27–28 марта 2025 г. : сб. науч. ст. / УО МГПУ
им. И. П. Шамякина ; редкол.: В. Н. Навныко (отв. ред.) [и др.]. – Мозырь : МГПУ
им. И. П. Шамякина, 2025. – 245 с.
ISBN 978-985-477-937-9.

В сборнике научных статей представлены результаты научных исследований по оптике и
акустооптике кристаллов, теоретической физике, а также в области компьютерного моделирования
физических процессов и явлений.

Адресуется научным работникам, преподавателям, аспирантам, студентам.

Материалы сборника публикуются в авторской редакции.

УДК 53
ББК 22.3

ISBN 978-985-477-937-9

© УО МГПУ им. И. П. Шамякина, 2025



Шепелевич Василий Васильевич

*Доктор физико-математических наук, профессор,
лауреат первой премии имени Ю. И. Островского в области голограмм и интерферометрии,
лауреат Международной премии имени академика Ф. И. Федорова
(02.03.1945 – 25.03.2024)*

Шепелевич Василий Васильевич родился 2 марта 1945 года в деревне Ковнятин Пинского района Брестской области. В 1969 году окончил Брестский государственный педагогический институт имени А. С. Пушкина. После окончания аспирантуры и защиты в 1975 году диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук был направлен на работу в Мозырский государственный педагогический институт. Здесь работал сначала старшим преподавателем, затем заведующим кафедрой физики, кафедрой теоретической физики, доцентом, заведующим научно-исследовательской лабораторией когерентной оптики и голограммии, проректором по научной работе, профессором. В 1994 году защитил диссертацию на соискание ученой степени доктора физико-математических наук. В 1996 году получил ученое звание профессора, являлся обладателем диплома № 1 доктора наук ВАК Республики Беларусь.

Василий Васильевич – лауреат первой премии 2003 года по голограммии и интерферометрии имени Ю. И. Островского. В 2011 году В. В. Шепелевич стал лауреатом Международной премии имени академика Ф. И. Федорова, учрежденной Национальной академией наук Беларуси в связи со столетием со дня рождения Ф. И. Федорова. В 2014 году Василий Васильевич был награжден медалью Франциска Скорины.

Им опубликовано более 300 научных и научно-методических работ, в том числе учебное пособие «Введение в когерентную оптику и голограммии» под грифом Министерства просвещения СССР, монография «Голограммия в фотопрефрактивных оптических активных кристаллах»; получены патенты на изобретение и на полезную модель.

Большое внимание В. В. Шепелевич уделял подготовке научно-педагогических кадров. Он стал основателем научной школы «Когерентная оптика и голограммия в фотопрефрактивных кристаллах». Творческий подход Василия Васильевича к работе с молодежью позволил выявить много талантливых молодых людей и привлечь их

к научной деятельности. Под руководством В. В. Шепелевича защищено 11 кандидатских диссертаций.

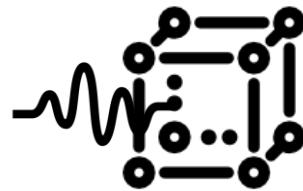
Шепелевич Василий Васильевич – известный учёный в области оптики кристаллов. Он являлся идейным вдохновителем, организатором проведения двух Международных научных конференций «Оптика кристаллов», которые проходили на английском языке в нашем университете в 2000 и 2014 гг. и собрали известных ученых-физиков из многих стран мира.

Принимал активное участие в общественной работе. На протяжении многих лет являлся председателем первичной организации Белорусского физического общества МГПУ им. И. П. Шамякина.

Собственным примером доказывая, что талантливый человек талантлив во всем, Василий Васильевич писал стихи. Уделял значительное внимание исследованию и сохранению духовных и культурных ценностей Белорусского Полесья. Опубликовал сборник народных песен «Песни деревни Ковнятин Пинского района», сборник стихов «Каля паэзіі». Уважение к белорусскому культурному наследию он воспитывал и в своих учениках.

Значительная часть жизни и деятельности Василия Васильевича Шепелевича была посвящена развитию системы образования Республики Беларусь, становлению Мозырского государственного педагогического университета, подготовке учительских кадров и кадров высшей научной квалификации. Его высокий профессионализм, духовное богатство, активная гражданская позиция снискали заслуженное признание и уважение коллег, студентов, педагогической общественности города и республики.

Секция 1



Оптика и акустооптика кристаллов

УДК 535.4:548

М.А. Аманова¹, В.Н. Навныко², А.В. Макаревич², В.В. Шепелевич²

¹*Институт телекоммуникаций и информатики Туркменистана*

²*Мозырский государственный педагогический университет имени И.П. Шамякина*

ВЛИЯНИЕ ПЬЕЗОЭФФЕКТА И ОПТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ НА ДИФРАКЦИОННУЮ ЭФФЕКТИВНОСТЬ ГОЛОГРАММ В ФОТОРЕФРАКТИВНОМ КРИСТАЛЛЕ $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$

С учетом линейного электрооптического, обратного пьезоэлектрического и фотоупругого эффектов произведено исследование зависимости дифракционной эффективности голограмм, сформированных в образце фоторефрактивного кристалла $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$, от ориентационного угла, величины удельного вращения и толщины кристалла.

Ключевые слова: фоторефрактивный кристалл, обратный пьезоэлектрический эффект, фотоупругость, оптическая активность, дифракционная эффективность, $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$.

Кубические фоторефрактивные кристаллы класса симметрии 23 являются перспективными средами для записи и считывания объемных голограмм, так как отличаются от сегнетоэлектрических фоторефрактивных кристаллов меньшим временем фоторефрактивного отклика, а от полупроводниковых фоторефрактивных кристаллов – большими значениями электрооптических коэффициентов [1].

Кроме того, кристаллы-силлениты обладают естественной оптической активностью и становятся оптически анизотропными под действием электрического поля [2]. Важной особенностью кубических фоторефрактивных кристаллов является возможность в них обратного пьезоэлектрического эффекта, который обуславливает комплекс энергетических и поляризационных эффектов, обнаруживаемых при записи и считывании объемных фазовых голограмм. Содержательный аналитический обзор современного состояния исследований и научных публикаций по голографии фоторефрактивных пьезокристаллов представлен в [3].

Этим кристаллам характерно удачное сочетание разнообразных физических свойств. В них возможны линейный электрооптический, обратный пьезоэлектрический, объемный фотогальванический эффекты, эффект Фарадея; они обладают ярко

выраженной фотопроводимостью, высокой светочувствительностью и разрешающей способностью, высоким быстродействием и реверсивностью с большим числом циклов записи-считывания голограмм, а также другими полезными оптическими свойствами и технологичностью [1–3].

Фоторефрактивные кристаллы находят практическое применение в системах записи и обработки оптической информации [1].

Рассмотрено влияние электрооптического эффекта, обратного пьезоэлектрического эффекта, фотоупругости и оптической активности на дифракционную эффективность голограммы, записанной в кристалле $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$ толщиной 8 мм.

Дифракционная эффективность голограммы рассчитывалась с использованием выражения (1), которое имеет вид

$$\eta(d) = \frac{S_{\perp}^2(d) + S_{\parallel}^2(d)}{R_{\perp}^2(0) + R_{\parallel}^2(0)} \times 100\% , \quad (1)$$

где $R_{\perp}(0)$ и $R_{\parallel}(0)$ – проекции векторной амплитуды восстанавливающей голограмму волны R на направления перпендикулярное к плоскости падения и лежащее в плоскости падения на входе в кристалл, $S_{\perp}(d)$ и $S_{\parallel}(d)$ – соответствующие проекции векторной амплитуды восстановленной волны S на выходе из кристалла.

При численных расчетах использованы заимствованные в [1] параметры кристалла $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$, которые сведены в таблицу 1.

Таблица 1 – Физические параметры кристалла $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$

Физическая величина	Обозначение	Значение	Единица измерения
Показатель преломления	n	2,54	–
Электрооптический коэффициент	r	-5×10^{-12}	м/В
Коэффициенты упругости	c_1 c_2 c_3	$12,96 \times 10^{10}$ $2,99 \times 10^{10}$ $2,45 \times 10^{10}$	Н/м ²
Пьезоэлектрический коэффициент	e_0	1,12	Кл/м ²
Фотоупругие постоянные	p_1 p_2 p_3 p_4	-0,16 -0,13 -0,12 -0,015	–
Амплитуда напряженности электрического поля пространственного заряда	E_{SC}	5×10^4	В/м

На рисунке 1 представлены графики зависимости дифракционной эффективности η голограмм, записанных в кристаллических пластинках $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$ толщиной $d = 8$ мм от ориентационного угла θ и значения удельного вращения ρ кристалла. На рисунке 1 также показаны результаты влияния на дифракционную эффективность голограммы вкладов обратного пьезоэффекта и оптической активности кристалла.

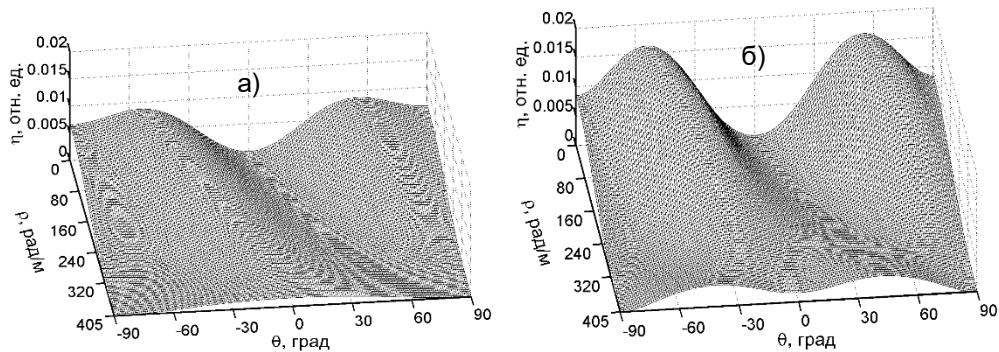


Рисунок 1 – Зависимости дифракционной эффективности η голограмм, сформированных в кристалле $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$ толщины 8 мм, от ориентационного угла θ и значения оптической активности ρ кристалла: а) – без учета пьезоэффекта; б) – с учетом пьезоэффекта

Иллюстрированные на фрагментах а и б зависимости рассчитаны соответственно без учета и с учетом пьезоэффекта. Сравнивая их, можно сделать заключение о значимости и соотношении вкладов пьезоэффекта и оптической активности кристалла в дифракционную эффективность голограммы.

Как видно из рисунка 1, вклад обратного пьезоэффекта и оптической активности существенно влияют на величину η . Из рисунка следует, что учет обратного пьезоэлектрического эффекта и оптической активности приводит к появлению двух горбов на срезе поверхности $\rho = 405 \text{ рад/м}$.

Видно, что обратный пьезоэлектрический эффект и оптическая активность существенно изменяют характер исследуемой зависимости. Игнорирование пьезоэлектрического эффекта может уменьшить рассчитанную дифракционную эффективность голограммы приблизительно в два раза.

Таким образом, в рамках данной работы на примере кристалла $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$ продемонстрирована возможность экспериментального исследования зависимости дифракционной эффективности голограмм от ориентационного угла и толщины фоторефрактивного кристалла. Показано, что только учет обратного пьезоэлектрического и фотоупругого эффектов в теоретических расчетах приводит к удовлетворительному согласованию теории и эксперимента. Поэтому исследование одновременного влияния обратного пьезоэлектрического эффекта, фотоупругости и удельного вращения кристалла может оказаться полезным, и полученные результаты найдут применение в целях предварительного выбора параметров при практическом решении задачи оптимизации выходных энергетических характеристик голограмм.

Список использованных источников

1. Петров, М. П. Фоторефрактивные кристаллы в когерентной оптике / М. П. Петров, С. И. Степанов, А. В. Хоменко. – СПб. : Наука, 1992. – 320 с.
2. Оптические свойства кристаллов / А. Ф. Константинова [и др.]. – Минск : Наука и техника, 1995. – 302 с.
3. Шепелевич, В. В. Запись и считывание голограмм в кубических гиротропных фоторефрактивных пьезокристаллах (Обзор) / В. В. Шепелевич // ЖПС. – 2011. – Т. 78, № 4. – С. 493–515.

И.В. Балыкин¹, А.А. Рыжевич^{1,2}, Т.А. Железнякова², Н.С. Казак¹

¹Институт физики НАН Беларуси

²Белорусский государственный университет

ОПТИМАЛЬНЫЕ ПАРАМЕТРЫ ОПТИЧЕСКОЙ СХЕМЫ ДЛЯ ФОРМИРОВАНИЯ ОДНОКОЛЬЦЕВОГО СВЕТОВОГО ПУЧКА В ОДНООСНОМ КРИСТАЛЛЕ

Рассчитаны численными методами параметры оптической схемы на основе одноосного кристалла, ориентированного вдоль своей оптической оси, позволяющие наиболее полно преобразовать сгенерированный лазерным излучателем гауссов световой пучок в однокольцевой пучок с винтовой дислокацией волнового фронта второго порядка.

Ключевые слова: одноосный кристалл, оптическая ось кристалла, однокольцевой световой пучок, винтовая дислокация волнового фронта.

Введение. В [1] была предложена схема формирования многокольцевого светового пучка с винтовой дислокацией волнового фронта (ВДФ) 2-го порядка на основе одноосного кристалла. Из первого (приосевого) кольца затем формировался бесселев световой пучок 2-го порядка, применимый в ряде прикладных задач. В [2] было показано, что однокольцевые световые пучки с ВДФ 1-го и 2-го порядка заданного максимального диаметра по уровню I_{\max}/e^2 переносят большее количество энергии, чем световые пучки лагерр-гауссова типа такого же диаметра с ВДФ всех остальных порядков, включая гауссов световой пучок без ВДФ. Актуальной является задача формирования однокольцевого светового пучка с ВДФ 2-го порядка в одноосном кристалле с максимальной эффективностью.

Расчет оптимальных параметров оптической схемы. Будем определять оптимальные параметры оптической схемы на основе одноосного кристалла из [1] для формирования БСП₂ из гауссова пучка, показанной на рисунке 1.

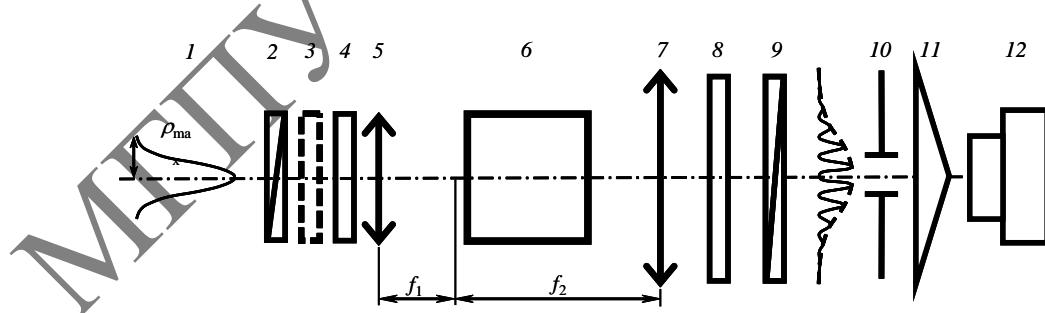


Рисунок 1 – Оптическая схема формирования БСП₂:

1 – гауссов световой пучок; 2, 9 – поляризаторы; 3 – пластина $\lambda/2$; 4, 8 – пластина $\lambda/4$;
5, 7 – линзы, составляющие телескоп; 6 – одноосный кристалл; 10 – диафрагма; 11 – аксонон;
12 – CCD-камера [1]

Как видно из схемы, для формирования БСП₂ необходимо выделить диафрагмой приосевое кольцо в многокольцевом пучке, формируемом с использованием одноосного кристалла, заключенного в телескоп. Таким образом, вопрос подбора оптимальных

параметров для формирования БСП₂ можно свести к вопросу максимизации мощности, содержащейся в первом приосевом кольце многокольцевого пучка.

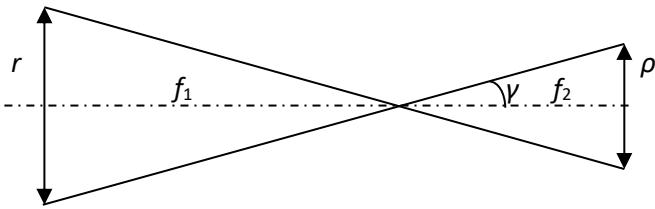


Рисунок 2 – Ход лучей в телескопе: γ – угол между лучом и оптической осью системы, r – радиальная координата во входной плоскости телескопа, p – радиальная координата в выходной плоскости телескопа

Интенсивность в пучке на выходе телескопа в соответствии с [1] определяется формулой

$$I_2(p) = \left(\frac{f_1}{f_2} \right)^2 I_0 \left(\frac{f_1}{f_2} p \right) \sin^2 \left(\frac{\Delta k L}{2} \right),$$

где L – длина кристалла, $\frac{\Delta k}{2} = \frac{k_0}{4n_o} \left(\frac{n_o^2}{n_e^2} - 1 \right) \sin^2 \gamma$, $\sin^2 \gamma = \frac{p^2}{p^2 + f_2^2}$ из рисунка 2,

k_0 – волновое число света, проходящего через кристалл, n_o и n_e – показатели преломления для обыкновенной и необыкновенной волн в кристалле, $I_0(r) = \frac{1}{2\pi\sigma^2} \exp \left[-\frac{r^2}{2\sigma^2} \right]$, где σ – полуширина входного гауссова пучка по уровню $1/e^2$

по интенсивности. I_0 в этом случае определена так, чтобы мощность входного пучка была равна 1 для любой полуширины σ . Такая нормировка приводит к тому, что прямое вычисление интеграла для подсчета мощности, определяемой интенсивностью в выходной плоскости I_2 , дает эффективность преобразования.

Введем увеличение M и параметр θ , характеризующий свойства кристалла и падающего на него излучения следующим образом:

$$\frac{f_2}{f_1} = M; \theta^2 = \frac{k_0}{4n_o} \left(\frac{n_o^2}{n_e^2} - 1 \right) L.$$

Используя введенные обозначения, перепишем

$$\begin{aligned} I_2(p) &= \left(\frac{f_1}{f_2} \right)^2 I_0 \left(\frac{f_1}{f_2} p \right) \sin^2 \left(\frac{\Delta k L}{2} \right) = \frac{1}{M^2} I_0 \left(\frac{p}{M} \right) \sin^2 \left(\frac{k_0}{4n_o} \left(\frac{n_o^2}{n_e^2} - 1 \right) \sin^2 \gamma \right) = \\ &= \frac{1}{M^2} \frac{1}{2\pi\sigma^2} \exp \left[-\frac{p^2}{2\sigma^2 M^2} \right] \sin^2 \left(\theta^2 \frac{p^2}{p^2 + f_2^2} \right). \end{aligned}$$

Вводя нормализованные единицы, рассчитаем мощность в первом приосевом кольце многокольцевого пучка

$$\rho_n = \frac{p}{\sigma M}; p d\rho = \sigma^2 M^2 \rho_n d\rho_n; f_{2n} = \frac{f_2}{\sigma M};$$

$$P_2 = 2\pi \int_0^{\rho_{\max}} \rho I_2(\rho) d\rho = \int_0^{\rho_{\max}} \exp \left[-\frac{\rho_n^2}{2} \right] \sin^2 \left(\theta^2 \frac{\rho_n^2}{\rho_n^2 + f_{2n}^2} \right) \rho_n d\rho_n,$$

где ρ_{\max} – радиальная координата первого внеосевого минимума интенсивности, получаемая из условия $\theta^2 \frac{\rho_{\max}^2}{\rho_{\max}^2 + f_2^2} = \pi$, т.е. $\rho_{\max} = \frac{f_2}{\sqrt{\theta^2 / \pi - 1}}$. Интеграл для P_2 берется численно, независимыми параметрами для интеграла является нормализованное фокусное расстояние f_{2n} и параметр θ . Отметим, что мощность исходного пучка P_0 в силу нормировки равна единице, поэтому эффективность преобразования $\eta = \frac{P_2}{P_0} = P_2$.

Рассмотрим теперь, как выглядит зависимость эффективности преобразования от параметров схемы.

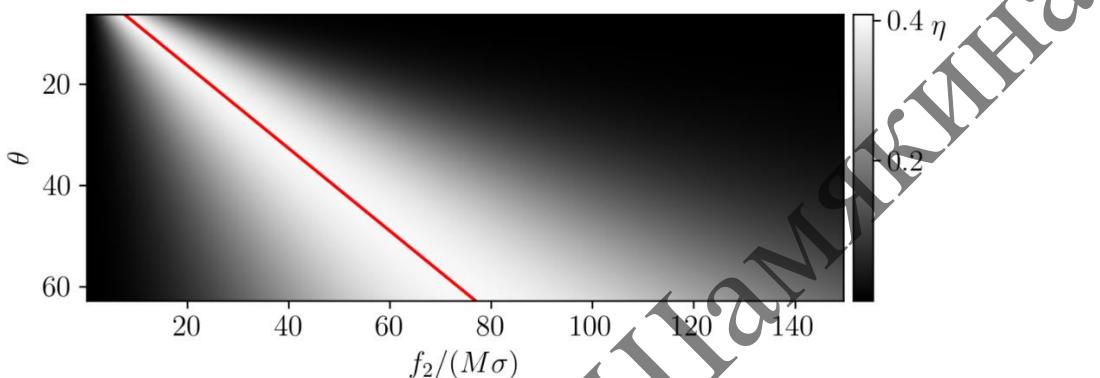


Рисунок 3 – Зависимость эффективности преобразования η от параметров θ и $f_2 / (M\sigma)$

Из рисунка 3 видно, что диапазон значений $f_2 / (M\sigma)$, для которых эффективность преобразования достаточно высока, растет с увеличением θ (достигаемого, например, за счет использования более длинного кристалла), т.е. чем больше θ , тем менее критичен точный подбор $f_2 / (M\sigma)$. Наклонной линией на рисунке 3 изображена зависимость оптимального значения f_{2n} от θ . Уравнение, ее описывающее, задается формулой

$$f_{2opt} / (M\sigma) = \theta \cdot 1,22649007 - 0,10266538.$$

С использованием данного уравнения можно подобрать оптимальную комбинацию параметров $f_{2opt} / (M\sigma)$ для заданной длины волны и параметров кристалла, определяющих значение θ . Рассмотрим, как эффективность преобразования зависит от θ в случае, если фокусное расстояние $f_2 / (M\sigma)$ равно оптимальному $f_{2opt} / (M\sigma)$, график этой зависимости показан на рисунке 4. Отметим, что с ростом параметра θ , пропорционального длине кристалла, эффективность преобразования достаточно медленно (в пределах 1% от максимального практически достижимого значения) снижается, составляя величину $\eta \approx 40\%$. При этом необходимо иметь в виду, что ситуацию для $\theta < 10$ сложно реализовать практически в силу ограничений по апертурам стандартных оптических элементов и размеров их держателей.

Значение параметра $\theta = 36,908$ соответствует одноосному кристаллу ниобата лития длиной $L = 10$ мм, обладающего $n_o = 2,2576$, $n_e = 2,1295$ для длины волны 633 нм. Зависимость эффективности преобразования η от $f_2 / (M\sigma)$ для этого случая изображена на рисунке 5. Максимальная эффективность преобразования при этом равна 39,7%.

Центральная вертикальная линия на рисунке 5 определяет значение $f_2 / (M\sigma)$, для которого эффективность преобразования максимальна, две боковые линии – значения, для которых эффективность преобразования составляет половину от максимальной. Видно, что в используемой схеме при значениях $f_2 / (M\sigma)$ несколько больших

оптимального, эффективность преобразования сохраняется в более широком диапазоне значений, чем при меньших.

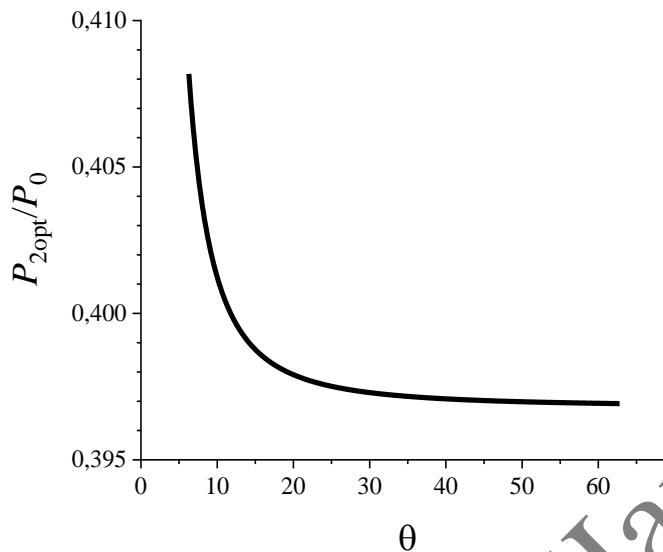


Рисунок 4 – Зависимость эффективности преобразования энергии в приосевое кольцо от θ для оптимальных значений $f_2 / (M\sigma)$

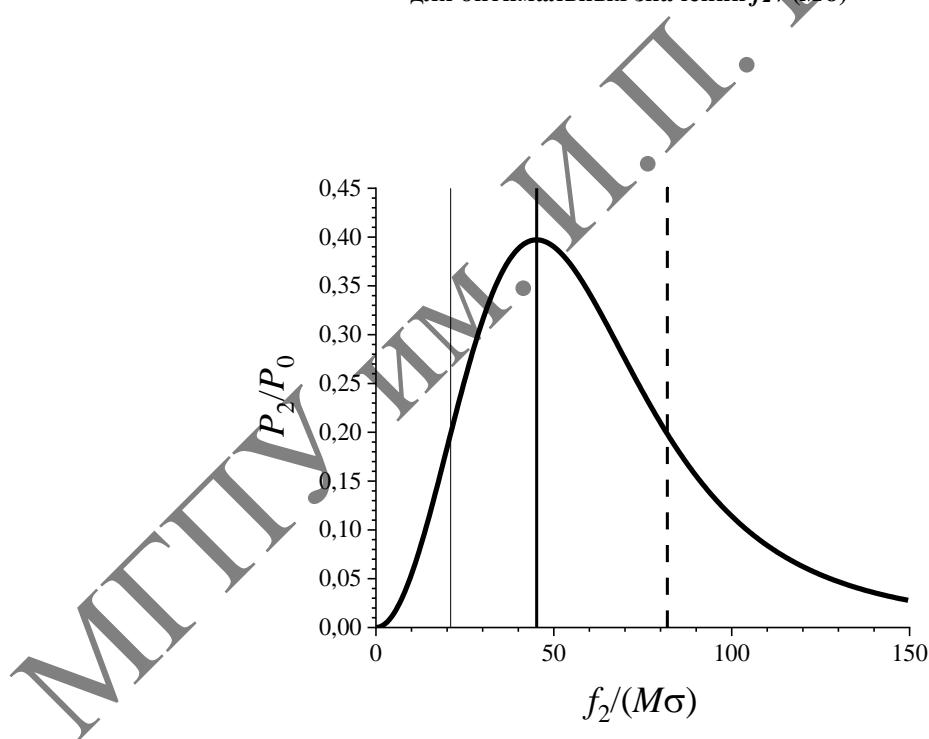
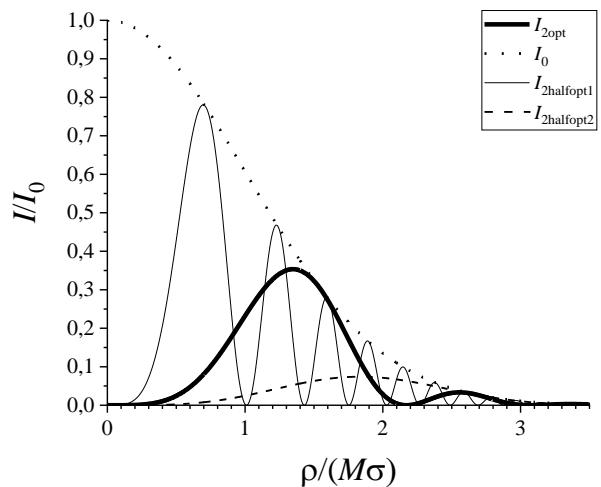


Рисунок 5 – Зависимость эффективности преобразования энергии в приосевое кольцо для различных $f_2 / (M\sigma)$ при $\theta = 36,908$ (для кристалла ниобата лития длиной 10 мм)

На рисунке 6 изображены распределения интенсивности в исходном гауссовом пучке, в выходном кольцевом пучке с оптимальным преобразованием и в пучках, обладающих мощностью, половиной от оптимальной (т.е. соответствующих крайним вертикальным линиям на рисунке 5).



**Рисунок 6 – Радиальное распределение интенсивности в выходной плоскости пучка
(для кристалла ниобата лития длиной 10 мм)**

Соотношение I/I_0 при максимально эффективном преобразовании в кристалле ниобата лития составляет 0,3535.

Заключение. Исследование зависимости эффективности преобразования гауссова светового пучка в приосевое кольцо многокольцевого светового пучка с ВДВФ 2-го порядка от параметров оптической схемы показало, что существует оптимальное соотношение параметров $f_2 / (M\sigma)$ и θ , при котором достигается максимальная эффективность преобразования, и эта эффективность практически не зависит от длины используемого в схеме кристалла. Наибольшая практически достижимая эффективность преобразования гауссова светового пучка в однокольцевой пучок с ВДВФ₂ в кристалле ниобата лития длиной 10 мм при идеальном просветлении всех оптических элементов схемы составляет 39,7%. При подборе оптимальной конфигурации оптической схемы для формирования однокольцевого светового пучка с ВДВФ 2-го порядка в конкретном одноосном кристалле маркером достижения наиболее эффективного преобразования следует считать равенство максимального значения интенсивности в однокольцевом пучке 35,35% от максимальной интенсивности преобразуемого гауссова светового пучка.

Список использованных источников

1. Balykin, I.V. Bessel Light Beam of the Second Order Formation with Uniaxial Crystal / I.V. Balykin, A.A. Ryzhevich, A.G. Mashchenko V.E. Leparskii, N.A. Khilo // Журнал прикладной спектроскопии. – 2016. – Том 83, спецвыпуск 6–16, ч. 3. – С. 453–454.
2. Балыкин, И.В. Продольное распределение максимального значения интенсивности в бесселевых световых пучках нулевого и высших порядков / И.В. Балыкин, А.А. Рыжевич, Н.С. Казак // Журнал прикладной спектроскопии. – 2023. – Том 90, № 3. – С. 462–474.

И.В. Балыкин¹, А.А. Рыжевич^{1, 2}, Н.С. Казак¹

¹Институт физики НАН Беларуси

²Белорусский государственный университет

САМОДИФРАКЦИЯ МНОГОКОЛЬЦЕВЫХ СВЕТОВЫХ ПУЧКОВ НЕБЕССЕЛЕВА ТИПА

Рассчитаны численными методами закономерности самодифракции многокольцевых световых пучков не бесселева типа, обладающих и не обладающих винтовой дислокацией волнового фронта. Приведены Фурье-спектры многокольцевых световых полей, претерпевших самодифракцию.

Ключевые слова: самодифракция, многокольцевой световой пучок, винтовая дислокация волнового фронта, Фурье-спектр.

Введение. В [1] было впервые обнаружено и исследовано явление самодифракции многокольцевых бесселевых световых пучков (БСП) нулевого порядка в тонком слое фосфида индия в спектральной области, соответствующей краю фундаментального поглощения. В [2] были исследованы закономерности самодифракции БСП в тонком слое жидкого красителя и показано, что, будучи пространственно-периодическими по своей природе, БСП вызывают периодическое возмущение оптических свойств среды, создавая, таким образом, необходимое условие для самодифракции лазерного излучения. Так как БСП имеют аксиально симметричное распределение интенсивности, что облегчает интерпретацию результатов и упрощает численное моделирование, целесообразно применение БСП для исследования свойств различных сред методом самодифракции [2] наряду с традиционными световыми полями [3]. В [4] были впервые описаны, а в [5] подробно исследованы закономерности формирования в двуосных кристаллах многокольцевых световых пучков небесселева типа. Данные световые пучки в отличие от БСП нулевого порядка не имеют осевого пика интенсивности, превышающего в 6 и более раз значение интенсивности в остальных максимумах интенсивности, поэтому являются более предпочтительными для исследования сред, не имеющих высокой лучевой прочности. В связи с этим актуальным является вопрос самодифракции многокольцевых световых пучков небесселева типа в поглощающих средах.

Самодифракция небесселевых многокольцевых световых пучков. Рассмотрим случай падения гауссова пучка на амплитудную решетку, обладающую осевой симметрией.

Входное поле запишем как

$$I_{\text{incident}}(r) = \exp\left[-\left(\frac{r}{w}\right)^2\right].$$

Поле в плоскости решетки в таком случае

$$I(r) = I_{\text{incident}}(r) \cdot M(r),$$

где $M(r)$ – функция пропускания решетки (модуляция).

В качестве амплитудных решеток будем рассматривать структуры, описываемые квадратом функции косинуса и синуса, что соответствует небесселевым многокольцевым световым пучкам, описанным в [4; 5], не обладающим и обладающим винтовой дислокацией волнового фронта соответственно:

$$M(r) = \cos^2(\pi r / T) = \frac{1}{2}(1 + \cos(2\pi r / T)), M(r) = \sin^2(\pi r / T) = \frac{1}{2}(1 - \cos(2\pi r / T))$$

В дальнейшем также использовано следующее обозначение:

$$q_0 = \frac{\pi}{T}$$

Такое обозначение удобно при рассмотрении спектра, поскольку, как будет показано в дальнейшем, позволяет создать спектральную шкалу, на которой характерные места имеют целочисленные значения частотной координаты. Физический смысл q_0 – поперечное волновое число БСП, формирующего решетку.

В скалярном приближении поле в дальней зоне может быть представлено как Фурье-преобразование поля в плоскости решетки. Для его расчета с учетом сепарабельности входного поля на радиальную и азимутальную части, то есть в силу его представимости в виде

$$g(r, \varphi) = g_R(r)g_\Phi(\varphi)$$

использовалось преобразование Фурье-Ханкеля в форме

$$F\{g(r, \varphi)\} = \sum_{k=-\infty}^{\infty} c_k (-j)^k \exp(jk\varphi) H_k\{g_R(r)\},$$

где $c_k = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} g_\Phi(\varphi) \exp(-jk\varphi) d\varphi$ и

$$H_k\{g_R(r)\} = 2\pi \int_0^\infty r g_R(r) J_k(2\pi r \rho) dr$$

Нами был рассмотрен простейший случай азимутальной компоненты поля $g_\Phi(\varphi) = 1$, что соответствует ситуации аксиальной симметрии поля бесконечного порядка. В таком случае коэффициент c_k запишется как

$$c_k = \delta_{0k}.$$

А всё преобразование можно записать в форме

$$F\{g(r, \varphi)\} = H_0\{g_R(r)\} = 2\pi \int_0^\infty r g_R(r) J_0(2\pi r \rho) dr.$$

Несложно показать, что это преобразование можно обобщить для случая дислокации волнового фронта целого порядка n , т.е. для $g_\Phi(\varphi) = \exp(jn\varphi)$. Обозначим поле для этого случая как $g(r, \varphi)_n = \exp(jn\varphi) g_R(r)$. Тогда можно записать

$$F\{g(r, \theta)_n\} = (-j)^n \exp(jn\varphi) H_n\{g_R(r)\}.$$

Для расчета преобразования на компьютере выражение было переведено в дискретную форму

$$\hat{F}\{g(r, \theta)\} = 2\pi \sum_{t=0}^P J_0(2\pi r_t \rho_m) r_t \Delta r_t g_R(r_t),$$

где r_t, ρ_m – значения представляющие собой выборку радиальной и частотной координат соответственно. Выборка радиальной координаты производилась равномерно, выборка частотной – с квадратично распределенной плотностью, чтобы спектр был более различим в области низких частот. Обозначенные зависимости можно записать в виде формул:

$$\begin{aligned} r_t &= t \Delta r \\ \Delta r_t &= \Delta r \\ \rho_m &= \left(m \sqrt{\Delta \rho} \right)^2 \end{aligned}$$

Вычисление преобразования производилось путем перемножения матрицы преобразования на столбец, представляющий собой выборку значений поля в плоскости решетки. Такой метод позволяет легко производить многочисленные расчеты для различных решеток, поскольку матрица вычисляется лишь один раз и может быть повторно использована для различных типов входных полей. Таким образом, расчет можно записать в форме

$$F = HG,$$

где H – матрица размерами $[M, P]$, где M – объем выборки спектра, P – объем выборки радиальной координаты, определяемая формулой

$$H_{M \times P} = h_{mt} = 2\pi J_0(2\pi r_t \rho_m) r_t \Delta r_t,$$

где G – вектор-столбец вида

$$G_{P \times 1} = g(r_t),$$

F – вектор-столбец, представляющий поле в дальней зоне, взятое в точках, соответствующих выборке спектральной координаты ρ_m

$$F_{M \times 1} = f(\rho_m).$$

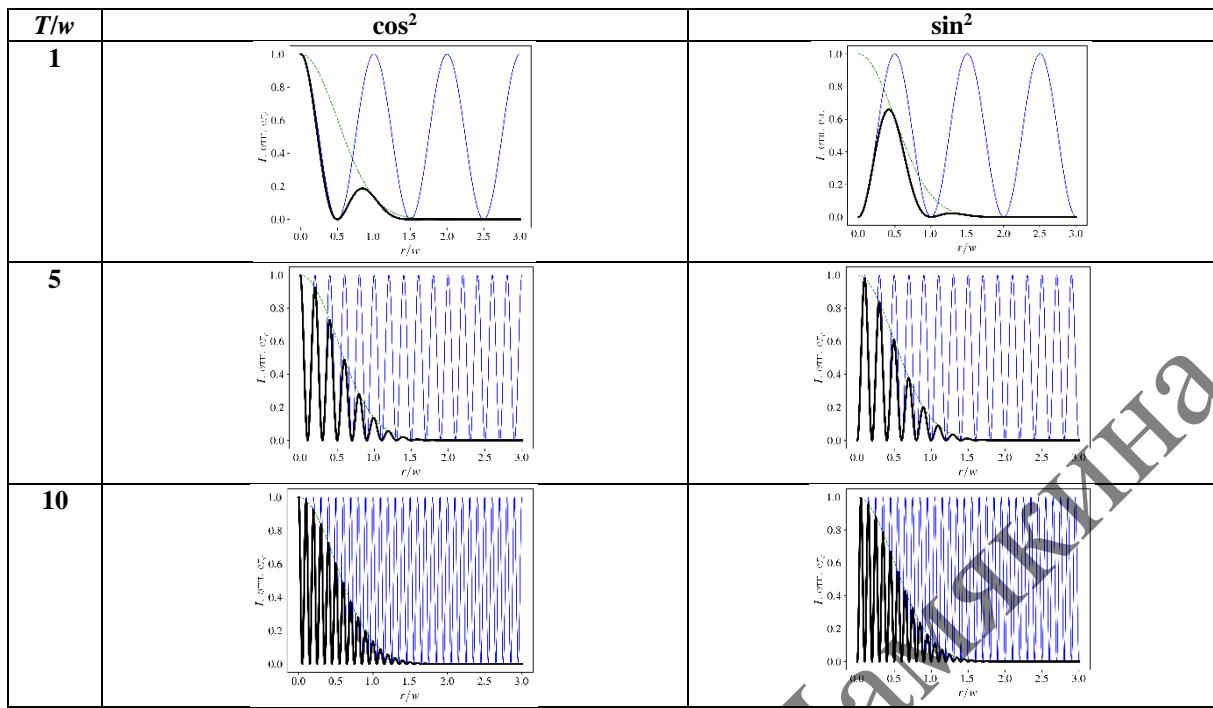
В дальнейших рассуждениях для большей ясности вместо частотной координаты ρ использовалось поперечное волновое число в форме $q = 2\pi\rho$, а также нормированное поперечное волновое число $q/q_0 = 2T\rho$, где $q_0 = \pi/T$.

На рисунке 1 приводятся радиальные картины поля в плоскости решетки для различных соотношений параметра масштаба решетки T и полуширины падающего пучка w . На графиках показано исходное поле $I_{incident}$, функция пропускания решетки M и результирующее поле I .

На рисунке 2 приводятся соответствующие радиальные распределения интенсивности дифрагировавших пучков, не обладающих (\cos^2) и обладающих (\sin^2) винтовой дислокацией волнового фронта в дальней зоне (радиальные спектры).

На рисунке 3 для сравнения приведены спектры претерпевших самодифракцию БСП нулевого порядка с аналогичными по периоду поля характеристиками.

Из рисунков 2 и 3 видно, что небесселевы световые многокольцевые пучки, как обладающие, так и не обладающие винтовой дислокацией волнового фронта, подвержены самодифракции в поглощающей среде как и бесселевы световые пучки.



**Рисунок 1 – Радиальные распределения интенсивности в плоскости решетки
(Синим обозначено исходное поле I_{Incident} , оранжевым – функция пропускания решетки M ,
зеленым – результирующее поле I)**

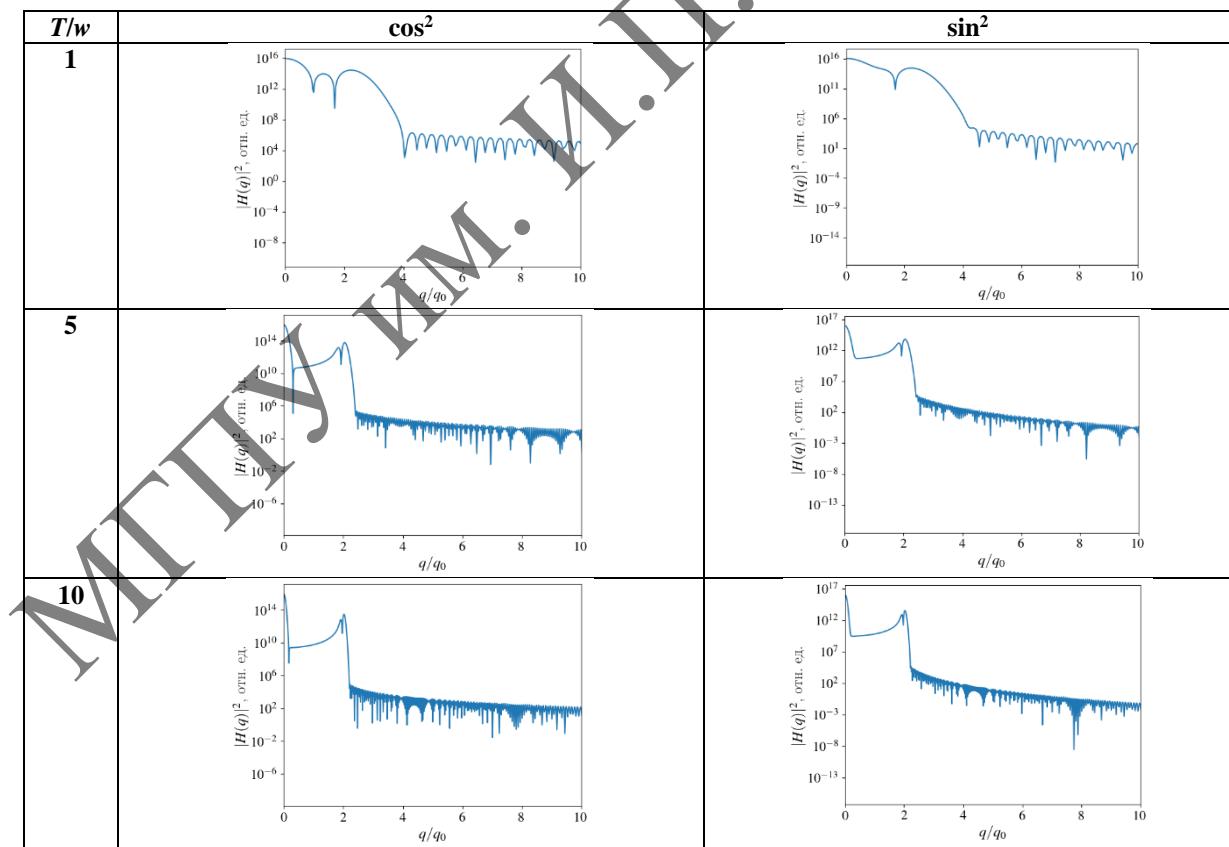


Рисунок 2 – Фурье-спектры дифрагировавших пучков без и с дислокацией волнового фронта

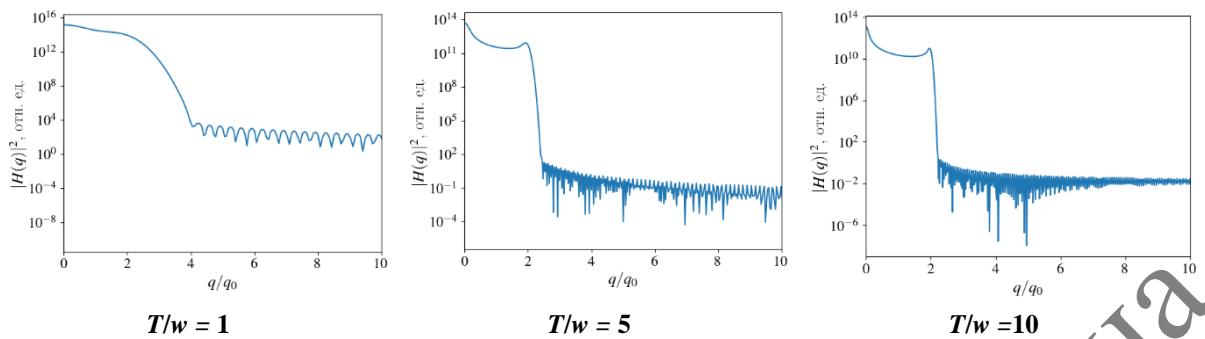


Рисунок 3 – Фурье-спектры дифрагировавших БСП

Заключение. Подобие спектров интенсивности дифрагировавших бесселевых и небесселевых световых пучков подтверждает применимость небесселевых световых пучков для диагностики нелинейных характеристик нелинейных поглощающих прозрачных сред методом самодифракции. Отсутствие в небесселевых световых пучках высококонтрастных осевых максимумов интенсивности делает их более применимыми для неразрушающего исследования методами, описанными в [3], сред с невысокой лучевой прочностью.

Список использованных источников

1. Ryzhevich, A.A. The first time observation of Bessel light beam self-diffraction in heavily doped n-InP / A.A. Ryzhevich, I.A. Utkin // Optics of Crystals : Proc. SPIE, Mozyr, 26–30 September 2000 / Ed. by V.V. Shepelevich, N.N. Egorov. – SPIE, 2000. – Vol. 4358. – P. 254–257.
2. Казак, Н.С. Самодифракция бесселевых световых пучков в нелинейной среде / Н.С. Казак, Е.Г. Катранжи, И.А. Уткин, А.А. Рыжевич, А.Н. Хило // ЖПС. – 2004. – Т. 71, № 5. – С. 642–645.
3. Eichler, H.J. Laser-Induced Dynamic Grating / H.J. Eichler, P. Günter, D.W. Pohl. – Berlin : Springer-Verlag, 1986. – 256 p.
4. Katranji, E.G. Production and transformation of ring light beams by means of biaxial crystals / E.G. Katranji, A.G. Mashchenko, A.A. Ryzhevich // Optics of Crystals : Proc. SPIE, Mozyr, 26–30 September 2000 / Ed. by V.V. Shepelevich, N.N. Egorov. – SPIE, 2000. – Vol. 4358. – P. 179–186.
5. Казак, Н.С. Формирование и преобразование небесселевых многокольцевых световых пучков / Н.С. Казак, Е.Г. Катранжи, А.А. Рыжевич // ЖПС. – 2002. – Т. 69, № 2. – С. 242–247.

В.Н. Белый¹, Н.А. Хило¹, П.И. Ропот¹, П.А. Хило

¹*Институт физики имени Б.И. Степанова НАН Беларуси*

²*Гомельский государственный технический университет имени П.О. Сухого*

АКУСТООПТИЧЕСКАЯ КРУГОВАЯ РАЗВЕРТКА СВЕТОВОГО ЛУЧА ПРИ КВАЗИКОЛЛИНЕАРНОЙ ДИФРАКЦИИ В АНИЗОТРОПНЫХ КРИСТАЛЛАХ

Исследована возможность создания нового типа анизотропного акустооптического дефлектора (АОД) с круговой угловой разверткой. Проведено исследование акустооптического (АО) взаимодействия БСП, распространяющегося в кристалле тетрагональной симметрии в направлении, перпендикулярном оптической оси четвертого порядка в плоскости XZ, с ультразвуковой волной, распространяющейся в том же направлении. Исследована эффективность АО взаимодействия от азимутального угла. Определена угловая ширина дифракционного максимума и число разрешимых положений световой волны при круговом сканировании.

Ключевые слова: Бесселев световой пучок, ультразвуковая волна, угловое разрешение, эффективность дифракции

Введение. Среди устройств, используемых для развертки лазерных пучков, акустооптические дефлекторы (АОД) выделяются рядом преимуществ: высоким быстродействием угловой развертки лазерного пучка, отсутствием механических узлов, малыми габаритными размерами и массой. Наилучшие характеристики АОД получены при использовании анизотропной дифракции Брэгга, при которой синхронизм акустооптического взаимодействия существенно шире, чем в случае изотропной дифракции. В видимой и ближней ИК-областях оптического спектра наибольшее применение нашли анизотропные АОД на парателлурите (TeO_2) – акустооптическом материале, обладающим целым рядом уникальных характеристик.

Одним из наиболее серьезных недостатков АОД остается относительно небольшие значения максимальных углов развертки сканирующего пучка (как правило, до 3° для длины волны 1,064 мкм).

Геометрия АО дифракции. В работе исследована возможность создания нового типа анизотропного АОД с круговой угловой разверткой, что отчасти компенсирует указанный недостаток. Для этого проведено исследование АО взаимодействия БСП, распространяющегося в кристалле тетрагональной симметрии в направлении, перпендикулярном оси четвертого порядка в плоскости XZ, с ультразвуковой волной, распространяющейся во встречном направлении. Геометрия взаимодействия приведена на рисунке 1. Падающий ТЕ, поляризованный БСП, является астигматический с волновым вектором k_e , зависящим от азимутального угла φ , а дифрагированный ТН, поляризованный БСП – круговым с волновым вектором k_o .

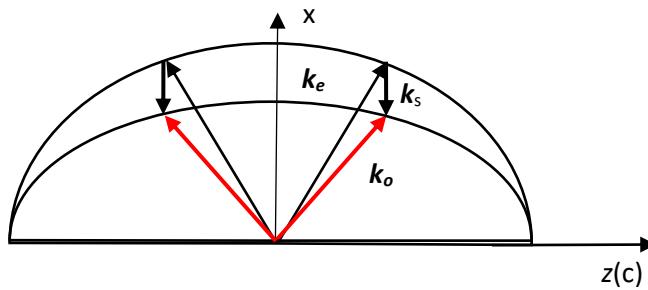


Рисунок 1 – Геометрия акустооптического взаимодействия

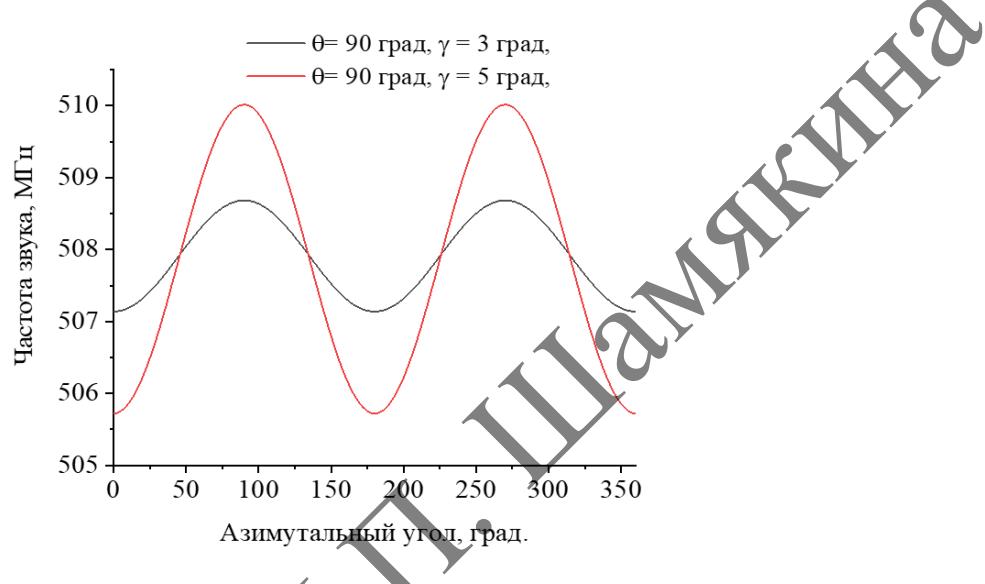


Рисунок 2 – Изменение частоты ультразвуковой волны, необходимой для синхронного АО взаимодействия, в зависимости от азимутального угла

Волновые векторы k_o и k_e , принадлежащие указанным конусам и лежащие в плоскости (x, z) , показаны на рисунке 1. Проекции данных векторов на границу раздела являются поперечными волновыми числами БСП, которые в данном случае одинаковы для обоих пучков. Модуль волнового вектора k_s , удовлетворяющий условию продольного синхронизма при АО взаимодействии, определяется из соотношения

$$k_s = k_e(\alpha) \cos \gamma - \sqrt{k_o^2 - (k_e(\alpha) \sin \gamma \sin \phi)^2 - (k_e(\alpha) \cos \phi)^2},$$

$$k_e(\alpha) = k_0 \sqrt{\frac{\varepsilon_o \varepsilon_e}{\varepsilon_e \cos(\gamma, \phi)^2 + \varepsilon_o \sin(\gamma, \phi)^2}}$$

где γ – угол конусности падающего БСП, ϕ – азимутальный угол в плоскости ZY.

Как следует из графиков на рисунке 2, при распространении БСП в направлении, перпендикулярном оптической оси при заданной частоте ультразвуковой волны существуют четыре азимутальных угла, при которых выполняется условие продольного синхронизма при акустооптическом взаимодействии.

Эффективность АО взаимодействия. Так как каждая плосковолновая компонента падающего астигматического БСП е-типа эффективно взаимодействует только с одной из компонент БСП о-типа из-за волнового рассинхронизма для других

компонент, то укороченные уравнения для АО дифракции имеют вид, аналогичный случаю взаимодействия плоских волн

$$\begin{aligned}\frac{dA_o}{dy} &= i\chi_1 A_e \exp(-i\Delta ky), \\ \frac{dA_e}{dy} &= i\chi_2 A_o \exp(i\Delta ky)\end{aligned}\quad (1)$$

В (1) A_e и A_o – амплитуды проходящей и дифрагированной плосковолновой компоненты, Δk – волновая расстройка, зависящая от азимутального угла φ . Параметр АО связи имеет вид $\chi_{1,2} = \frac{\pi\Delta\epsilon}{\lambda n_{e,o} \cos\gamma_{d,t}}$, $\chi = \sqrt{\chi_1\chi_2}$, а индуцированное акустической волной изменение диэлектрической проницаемости $\Delta\epsilon = \epsilon_0\epsilon_e p_{13} \sqrt{\frac{2P}{\rho v^3 ab}}$. Здесь p_{13} – фотоупругая постоянная, ρ плотность кристалла, v – скорость акустической волны, a, b – размеры пьезопреобразователя, P – акустическая мощность.

Эффективность дифракции рассчитывается из укороченных уравнений (1) и равна

$$\eta(\varphi, P) = \frac{\chi^2}{[\Delta k(\varphi)/2]^2 + \chi(P)^2} \sin^2 \left(L \sqrt{[\Delta k(\varphi)/2]^2 + \chi(P)^2} \right),$$

где L – длина взаимодействия.

Численный расчет проведен при следующих параметрах кристалла TeO_2 : длина волны $\lambda=0.63\text{мкм}$, показатели преломления $n_o=2.25$, $n_e=2.41$, фотоупругая постоянная, ответственная за акустооптическое взаимодействие, $p_{13}=0.21$, скорость УЗ волны $v=2.1\text{ км/с}$. При этом глубина модуляции диэлектрической проницаемости $\sim 10^{-6}$. Число разрешимых положений плосковолновой компоненты порядка 50 в одном квадранте.

Заключение. В работе предложен метод осуществления выборочного синхронизма плосковолновых компонент БСП при АО дифракции. В результате такого типа АО дифракции происходит азимутальное сканирование дифрагированного парциального светового пучка, выделенного из конуса плоских волн, составляющих падающий БСП.

Исследована эффективность АО взаимодействия в зависимости от азимутального угла. Определена угловая ширина отдельного максимума дифракции и число разрешимых положений плосковолновой компоненты при круговом сканировании

Список использованных источников

1. Belyi, V. Acousto-Optic Control of Bessel-like Beam Parameters in the Far Zone with the Use of Uniaxial TeO_2 and $\text{NaBi}(\text{MoO}_4)_2$ Crystals / V.N. Belyi, N.A Khilo, A.M. Varanetskii, P.I. Ropot, A.V. Agashkov and P.A Khilo // IEEE. – 2024. – P. 1–5, doi: 10.1109/WECONF61770.2024.10564657.

О.М. Бородавченко¹, В.Д. Живулько¹, К.В. Усенко¹, А.В. Мудрый¹, М.В. Якушев²

¹*Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению*

²*Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН*

СВОБОДНЫЕ ЭКСИТОНЫ В ОПТИЧЕСКИХ СПЕКТРАХ МОНОКРИСТАЛЛОВ И ТОНКИХ ПЛЕНОК CuInSe₂

Высококачественные монокристаллы и тонкие пленки соединения CuInSe₂ с составом, близким к стехиометрическому исследованы с применением методов оптической спектроскопии. Для энергий фотонов $> 1,0$ эВ в оптических спектрах монокристалла CuInSe₂ наблюдаются узкие линии, относящиеся к свободным экситонам А и В. Математическая обработка спектров оптического отражения позволила уточнить значения энергетического положения линий свободных экситонов с энергией А $\sim 1,0407$ эВ и В $\sim 1,0444$ эВ. Наиболее интенсивная полоса Р $\sim 0,970$ эВ, наблюдаемая в спектрах фотолюминесценции тонких пленок CuInSe₂, отнесена к излучательной рекомбинации неравновесных носителей заряда на донорно-акцепторных парах.

Ключевые слова: CuInSe₂, монокристаллы, тонкие пленки, экситоны.

Введение. Полупроводниковые тонкие пленки со структурой халькопирита CuInSe₂ и твердые растворы на их основе Cu(In,Ga)Se₂, Cu(In,Ga)(S,Se)₂ используются в качестве базовых поглощающих слоев для современных солнечных элементов [1]. К достоинствам материалов на основе халькопиритов необходимо отнести прямозонный характер энергетических переходов и высокий коэффициент поглощения $\alpha \sim 10^5$ см⁻¹, что дает возможность их использования для создания солнечных элементов с коэффициентами полезного действия (КПД) на уровне $\sim 15\text{--}23,35\%$ [2–4]. Однако при том, что технология изготовления солнечных элементов на основе полупроводников со структурой халькопирита активно развивается, теоретически спрогнозированный уровень эффективности $\sim 30\%$ остается не достигнутым, а число научных публикаций об их фундаментальных характеристиках ограничено. Оценка современного состояния данного научного направления [5; 6] подтверждает необходимость проведения исследований по определению структурных и оптических характеристик высококачественных монокристаллов и тонких пленок CuInSe₂ с малой концентрацией собственных дефектов структуры. Новые экспериментальные данные необходимы для прогнозирования и достоверного установления процессов дефектообразования в материалах этого типа с разной степенью отклонения состава от стехиометрии, что в свою очередь может оказать стимулирующее воздействие на состояние технологии изготовления современных солнечных элементов и привести к повышению их КПД.

Исследования структурных и оптических характеристик проводились на монокристаллах и поликристаллических тонких пленках соединения CuInSe₂. Высококачественные монокристаллы CuInSe₂ с составом близким к идеальной стехиометрии Cu $\sim 24,8$ ат.%, In $\sim 24,7$ ат.%, Se $\sim 50,5$ ат.% выращены с использованием вертикального метода Бриджмена [7]. Тонкие пленки CuInSe₂ толщиной 1,4–1,6 мкм формировались непосредственно на стеклянных подложках методом магнетронного распыления высокочистых металлов Cu и In при температурах $\sim 300\text{--}400$ °C с последующей

селенизацией полученных слоев [8]. Рентгеноспектральный микроанализ с энергетической дисперсией, проведенный в десяти точках при сканировании электронным зондом поверхности тонких пленок CuInSe₂, показал однородное распределение основных элементов с составом Cu ~ 24,0 ат.%, In ~ 24,5 ат.%, Se ~ 51,5 ат.%. Для регистрации спектров оптического отражения и пропускания использовался дифракционный монохроматор с установленным на его выходе детектором с рабочим спектральным диапазоном 0,6–1,7 мкм. В качестве источника света применялась вольфрамовая лампа мощностью 100 Вт. Спектры фотолюминесценции регистрировались при возбуждении неравновесных носителей заряда лазерным излучением на длине волны 532 нм с плотностью мощности возбуждения ~ 1 Вт/см². Исследуемые образцы размещались в специальном оптическом криостате, обеспечивающем криогенную температуру измерений ~ 4,2 К.

Интерпретация экситонных состояний проводилась на основе квазикубической модели Хоупфилда, описывающей трехкратное расщепление валентной зоны CuInSe₂ на А, В и С подзоны вследствие отрицательного тетрагонального искажения [9]. Обнаружение узких экситонных линий в оптических спектрах поглощения, отражения и фотолюминесценции свидетельствует о высоком структурном качестве исследованных кристаллов и тонких пленок соединения CuInSe₂.

На рисунке 1 представлены нормированные спектры фотолюминесценции монокристалла и тонкой пленки CuInSe₂. Энергетическая область > 1,0 эВ характеризуется наличием узких линий, относящихся к рекомбинации свободных экситонов А и В. Спектры оптического отражения позволили так же зафиксировать резонанс С ~ 1,27 эВ, рисунок 2. Узкая линия М2 ~ 1,034 эВ, а также полосы М5 и М6 соответствует излучательной рекомбинации связанных экситонов на дефектах структуры. Уточнение энергетического положения резонансов свободных экситонов А, В в спектрах отражения осуществлялось с использованием математической обработки контура по формуле [10]:

$$R(E) = R_0 + R_x \left(\operatorname{Re} \left\{ \frac{e^{i\theta}(E_x - E + i\Gamma_x)}{\Gamma_x^2 + (E_x - E)^2} \right\} \right), \quad (1)$$

где E_x – энергетическое положение резонансов отражения экситонов, Γ_x – параметр уширения экситонов, θ – фаза, R_x – амплитуда соответствующего резонанса, R_0 – параметр уровня интенсивности резонанса отражения. Полученные таким образом численные значения энергетического положения резонансов отражения А и В составили ~ 1,0407 эВ и ~ 1,0444 эВ, соответственно.

В случае тонкой пленки CuInSe₂ наиболее интенсивной в спектрах фотолюминесценции является широкая полоса Р ~ 0,970 эВ с низкоэнергетическими компонентами Р_{1LO} ~ 0,943 эВ и Р_{2LO} ~ 0,916 эВ, обусловленная излучательной рекомбинацией неравновесных носителей заряда в соединении CuInSe₂ с участием одного 1LO и двух 2LO продольных оптических фононов с энергией LO ~ 27 мэВ [8].

На рисунке 3 приведен спектр оптического поглощения тонкой пленки CuInSe₂ при температуре жидкого гелия ~ 4,2 К, в котором наблюдаются резонансные максимумы А ~ 1,041 эВ и В ~ 1,044 эВ, что свидетельствует о высоком качестве исследуемых образцов. Кроме максимумов А и В, обусловленных влиянием

кристаллического поля, в спектре поглощения в области энергий $\sim 1,27$ эВ отчетливо проявляется резонанс С, соответствующий третьей валентной подзоне, возникновение которой обусловлено спин-орбитальным взаимодействием [9].

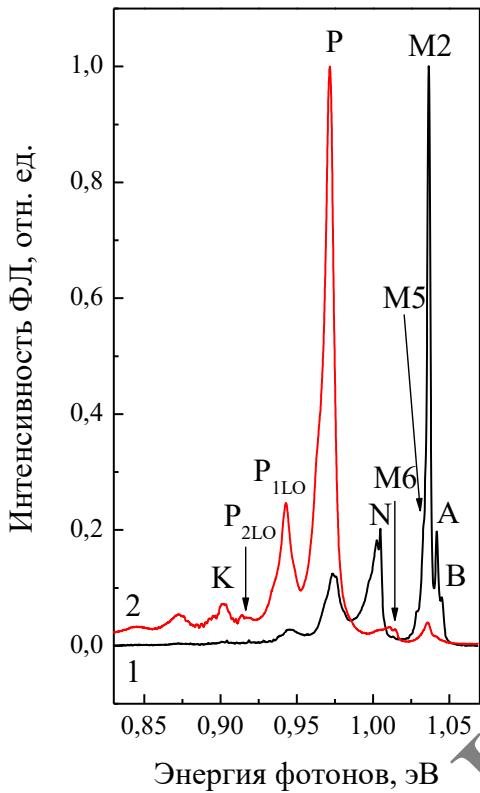


Рисунок 1 – Спектры фотолюминесценции монокристалла (1) и тонкой пленки (2) CuInSe₂

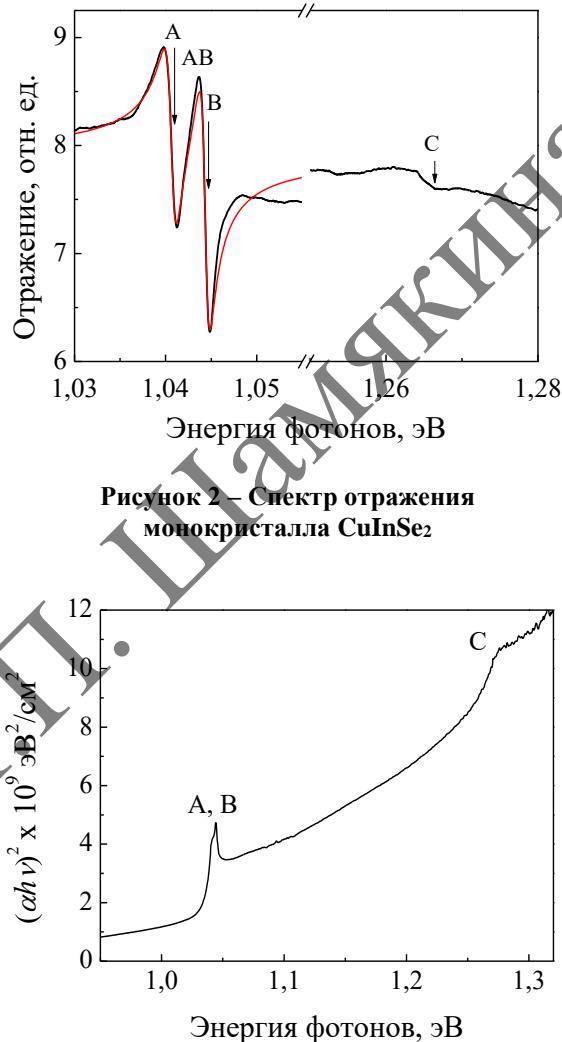


Рисунок 2 – Спектр отражения монокристалла CuInSe₂

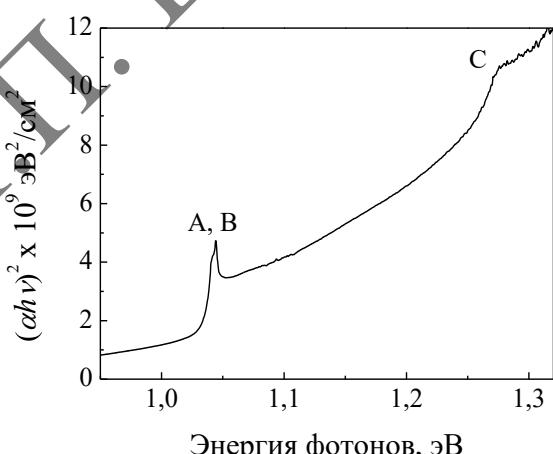


Рисунок 3 – Спектр поглощения тонкой пленки CuInSe₂

В соответствии с квазикубической моделью Хоупфилда параметры тетрагонального кристаллического поля Δ_{CF} и спин-орбитального взаимодействия Δ_{SO} можно описать численно по экспериментально полученным данным энергетического положения экситонных резонансов отражения А, В и С при криогенной температуре по следующим формулам [9, 11]:

$$\Delta_{CF} = -\frac{1}{2}(E_1 + E_2) - \frac{1}{2}[(E_1 + E_2)^2 - 6E_1E_2]^{1/2}, \quad (2)$$

$$\Delta_{SO} = -\frac{1}{2}(E_1 + E_2) + \frac{1}{2}[(E_1 + E_2)^2 - 6E_1E_2]^{1/2}, \quad (3)$$

где $E_1 = E_B - E_A$ и $E_2 = E_B - E_C$ – энергии, характеризующие относительное расщепление трех валентных подзон А, В и С.

Таким образом, для высококачественных монокристаллов CuInSe₂ с составом близким к стехиометрии значения Δ_{CF} и Δ_{SO} составили $\sim 5,25$ мэВ $\sim 226,59$ мэВ, соответственно.

Анализ температурной зависимости спектров отражения высококачественного монокристалла CuInSe₂, содержащих экситонные особенности А и В, позволил установить, что кристаллическое поле и спин-орбитальное взаимодействие оказывает значительное влияние на увеличение энергии связи свободных экситонов [12]. Определенные в настоящей работе экспериментальные данные по энергетическому положению свободных экситонов в соединении CuInSe₂ с составом, близким к стехиометрии, расширяют представления о зонной структуре данного типа материалов, что необходимо для развития технологии изготовления эффективных солнечных элементов на основе многокомпонентных полупроводников со структурой халькопирита.

Работа выполнена по проекту ГПНИ «8. Материаловедение, новые материалы и технологии», задание 1.4.4.

Список использованных источников

1. Solar cell efficiency tables (version 65) / M.A. Green [et al.] // Prog. Photovolt. Res. Appl. – 2025. – Vol. 33. – P. 3–15.
2. Potassium fluoride postdeposition treatment with etching step on both Cu-rich and Cu-poor CuInSe₂ thin film solar cells / F. Babbe [et al.] // Phys. Rev. Mater. – 2018. – Vol. 2. – P. 105405-1–105405-9.
3. Effects of heavy alkali elements in Cu(In,Ga)Se₂ solar cells with efficiencies up to 22.6 % / P. Jackson [et al.] // Phys. Stat. Sol. PRL. – 2016. – Vol. 10. – P. 583–586.
4. Cd-Free Cu(In,Ga)(Se,S)₂ Thin-Film Solar Cell with a New World Record Efficacy of 23.35 % / M. Nakamura [et al.] // IEEE J. Photovolt. – 2019. – Vol. 9. – P. 1863–1867.
5. A review on barrier layers used in flexible stainless-steel based CIGS photovoltaic devices / S. Ishizuka [et al.] // npj Flexible electronics. – 2022. – Vol. 6. – P. 90-1–90-8.
6. Siebentritt, S. Chalcopyrite solar cells – state-of-the-art and options for improvement / S. Siebentritt, T.P. Weiss // Sci. China-Phys. Mech. Astron. – 2023. – Vol. 66, № 1. – P. 217301-1–217301-15.
7. Tomlinson, R.D. Fabrication of CuInSe₂ single crystals using melt-growth techniques / R.D. Tomlinson // Solar Cells. – 1986. – Vol. 16. – P. 17–26.
8. Optical properties and band gap energy of CuInSe₂ thin films prepared by two-stage selenization process / M.V. Yakushev [et al.] // J. Phys. Chem. Sol. – 2003. – Vol 64, Iss. 9–10. – P. 2005–2009.
9. Hopfield, J.J. Fine structure in the optical absorption edge of anisotropic crystals / J.J. Hopfield // J. Phys. Chem. Solids. – 1960. – Vol. 15. – P. 97–107.
10. Exciton region reflectance of homoepitaxial GaN layers / K.P. Korona [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 1996. – Vol. 69, № 6. – P. 788–790.

11. Shay, L.J. Ternary Chalcopyrite Semiconductors: Growth, Electronic Properties, and Applications / L.J. Shay, J.H. Wernick. – Oxford : Pergamon Press, 1975. – 244 p.

12. Температурная зависимость спектров оптического отражения монокристаллов CuInSe₂ со структурой халькопирита / О.М. Бородавченко [и др.] // Журнал прикладной спектроскопии. – 2024. – Т. 91, № 3. – С. 409–416.

УДК 535.3; 538.9; 539.2; 666.192

Н.В. Варапай¹, В.В. Ковгар¹, А.А. Романенко¹, И.В. Прусова²

¹*Институт физики имени Б.И. Степанова НАН Беларусь*

²*Белорусский национальный технический университет*

СИНТЕЗ И СПЕКТРАЛЬНО-ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА КВАРЦЕВЫХ ГЕЛЬ-СТЕКОЛ, ЛЕГИРОВАННЫХ Cr, Yb И Er

Золь-гель методом синтезированы кварцевые стёкла, легированные хромом, эрбием и иттербием, и исследованы их спектрально-люминесцентные свойства. Установлено, что Cr входит в матрицу преимущественно в степени окисления 3+ и 5+. Дополнительное введение в неё Er и/или Yb сопровождается переходом значительной доли Cr³⁺ в Cr⁵⁺ и Cr⁶⁺ и формирование сложных Cr–Yb- и Cr–Er-центров. При этом реализуется достаточно эффективная сенсибилизация люминесценции ионов Er³⁺ ионами Yb³⁺ и Cr⁵⁺, Cr⁶⁺.

Ключевые слова: золь-гель метод, f- и d-элементы, активированные материалы, люминесценция, сенсибилизация люминесценций.

Введение. Стёкла, активированные ионами Er³⁺, давно и уверенно заняли свою нишу среди активных материалов для лазеров и усилителей, функционирующих вблизи 1550 нм. Эта спектральная область привлекательна тем, что (1) является оптимальной для передачи информации по волоконно-оптическим линиям связи и (2) лазерное излучение в этой области наименее опасно для глаз человека. К настоящему времени собран большой объём информации, касающейся спектрально-люминесцентных и лазерных свойств таких стекол, (см. напр., [1–4]). Однако подобная информация крайне ограничена для стекол, полученных золь-гель методом, который даёт ряд преимуществ при формировании оптических центров [5]. В частности, нам не удалось найти работ, где бы рассматривались спектрально-люминесцентные свойства Er-содержащих кварцевых гель-стекол, дополнительно легированных Cr и Yb, ионы которых могут сенсибилизировать люминесценцию Er³⁺ [6, 7]. Поэтому в настоящей работе была поставлена задача синтезировать такие стёкла и исследовать их спектрально-люминесцентные свойства.

На рисунке 1 изображена схема синтеза опытных образцов, включающая [8]: (1) гидролиз тетраэтилортосиликата (ТЭОС) в водно-спиртовом растворе в присутствии соляной кислоты в качестве катализатора до получения золя; (2) введение в него аэросила (ультрадисперсного SiO₂); (3) нейтрализацию полученной коллоидной системы раствором аммиака; (4) литье жидкого шликера в формы; (5) гелеобразование; (6) отмывание от растворимых примесей и старение в воде; (7) сушку и термообработку

ксерогелей. Легирование синтезированных образцов ксерогелей проводилось путем импрегнирования водно-спиртовыми растворами хлоридов хрома, эрбия и иттербия с концентрацией (масс. % относительно массы ксерогеля) 0,05, 1,0 и 1,0 соответственно. Спекание ксерогелей осуществлялось в вакууме при $T \approx 1230$ °C.



Рисунок 1– Схема золь-гель синтеза кварцевых стекол

На рисунке 2 приведены спектры поглощения синтезированных стекол. Как видно, в спектре Cr-содержащего стекла (кривая 1) наблюдаются две достаточно интенсивные широкие полосы с максимумами при $\lambda \approx 680$ нм и 450 нм, из которых последняя приходится на край более интенсивной УФ-полосы, а длинноволновое «крыло» первой простирается до 1300 нм. Полосы в видимой области можно приписать суперпозиции главным образом спин-разрешенных переходов $^4A_2 \rightarrow ^4T_2$ ($\lambda \approx 610$ нм) и $^4A_2 \rightarrow ^4T_1$ ($\lambda \approx 420$ нм) октаэдрических Cr³⁺, $^3A_2 \rightarrow ^3T_1$ ($\lambda \approx 620$ нм) тетраэдрических Cr⁴⁺ [9], а также $^2A_1 \rightarrow ^2E$ ($\lambda \approx 670$ нм) и $^2A_1 \rightarrow ^2B$ ($\lambda \approx 1100$ нм) тетраэдрических Cr⁵⁺ и $^2T_2 \rightarrow ^2E$ ($\lambda \approx 470$ нм) октаэдрических Cr⁵⁺ [10]. Более интенсивную УФ-полосу (её максимум лежит при 370 нм) следует приписать полосе переноса заряда Cr^{6+O²⁻ → Cr^{5+O⁻ [9]. При дополнительном легировании этого стекла Yb (кривая 2) и Yb-Er (кривая 4) наблюдается значительное снижение интенсивности полосы при $\lambda \approx 680$ нм и менее существенное – при $\lambda \approx 450$ нм, что можно связать с повышением основности стекла из-за частичного перехода оксида иттербия и эрбия в гидроксид и соответствующим повышением доли высокозарядных ионов хрома. Слабые и относительно узкие полосы при $\lambda \approx 520$ и 1530 нм на кривой 4 обусловлены переходами $^4I_{15/2} \rightarrow ^2H_{11/2}$ и $^4I_{15/2} \rightarrow ^4I_{13/2}$ ионов Er³⁺, а слабая полоса при $\lambda \approx 980$ нм на кривых 2 и 4 – переходом $^2F_{7/2} \rightarrow ^2F_{5/2}$ ионов Yb³⁺. Для Er-содержащего стекла (кривая 3), помимо отмеченных полос, наблюдаются также узкие}}

полосы при $\lambda \approx 380$ нм (интенсивная) и $\lambda \approx 650$, 800 и 980 нм (слабые), обусловленные переходами ${}^4I_{15/2} \rightarrow {}^4G_{11/2}$, ${}^4F_{9/2}$, ${}^4I_{9/2}$, ${}^4I_{13/2}$ соответственно. Что касается слабой полосы при $\lambda \approx 1380$ нм, присутствующей в спектрах всех стекол, то её следует связать со вторым обертоном фундаментальных колебаний примесных OH^- -групп (их концентрация, определённая по методике [8], составила 0,02–0,03 масс. %).

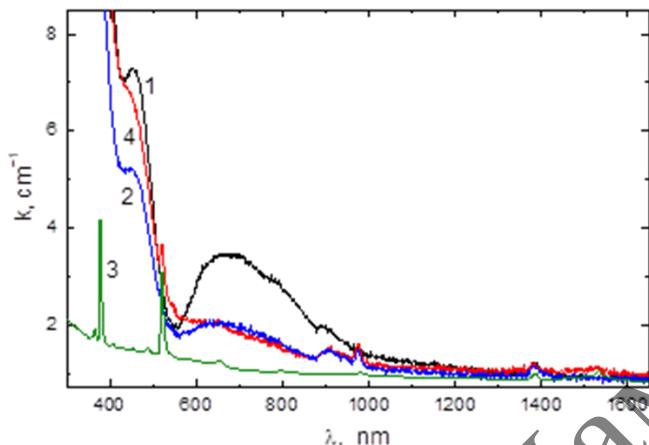


Рисунок 2 – Спектры поглощения стекол, легированных Cr (1) и Er (3), а также солегированных Cr–Yb (2) и Cr–Yb–Er (4)

На рисунке 3 приведены корректированные спектры люминесценции и её возбуждения. Видно, что люминесценция Cr-содержащего стекла характеризуется слабой полосой при 430 нм, интенсивной при 640 нм и слабой при 1250 нм (кривая 1(a)). Интерпретация первой из них затруднительна – по-видимому, она обусловлена излучением из возбуждённого состояния переноса заряда оксокомплексов $[\text{CrO}_4]^{2-}$. Интенсивную полосу можно приписать суперпозиции полосы люминесценции ${}^2E \rightarrow {}^2T_2$ октаэдрических Cr^{5+} (основной вклад) и полос ${}^4T_2 \rightarrow {}^4A_2$ окта- и тетраэдрических Cr^{3+} (вносят вклад в длинноволновое крыло) [9]. Слабая ИК-полоса, по-видимому, представляет собой суперпозицию второго порядка дифракции сильной полосы при 640 нм и полос люминесценции тетраэдрических Cr^4 и Cr^{5+} [11]. Описанная люминесценция значительно ослабляется при солегировании этого стекла Yb и Er. В спектре Cr–Yb-содержащего стекла (кривая 2(a)) обращает на себя внимание достаточно высокий коэффициент ветвления люминесценции на штарковскую компоненту с энергией 530 cm^{-1} (обозначена стрелкой) состояния ${}^2F_{7/2}$. Поскольку в спектре Yb-содержащего кварцевого стекла такой эффект отсутствует [12], данный факт свидетельствует в пользу формирования сложных Cr–Yb-центров. В спектре люминесценции Cr–Yb–Er-содержащего стекла, возбуждаемого преимущественно через ионы хрома (кривая 4'(a)) и преимущественно в полосе ${}^4I_{15/2} \rightarrow {}^2H_{11/2}$ ионов Er^{3+} (кривая 4(a)) различий в контуре полосы ${}^4I_{13/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$ ($\lambda \approx 1530$ нм) не обнаружено, а её эффективная полуширина составляет ≈ 47 нм, что примерно на 9 нм больше, чем для Er-содержащего стекла [5]. Этот факт также свидетельствует в пользу формирования сложных центров. В спектре возбуждения люминесценции как ионов Er^{3+} (кривая 4(b)), так и ионов Yb^{3+} (кривая 2(b), вставка) в солегированном хромом стекле наблюдается достаточно интенсивное

длинноволновое крыло близкое по форме аналогичному крылу в спектре Cr-содержащего стекла (кривая 1(b)).

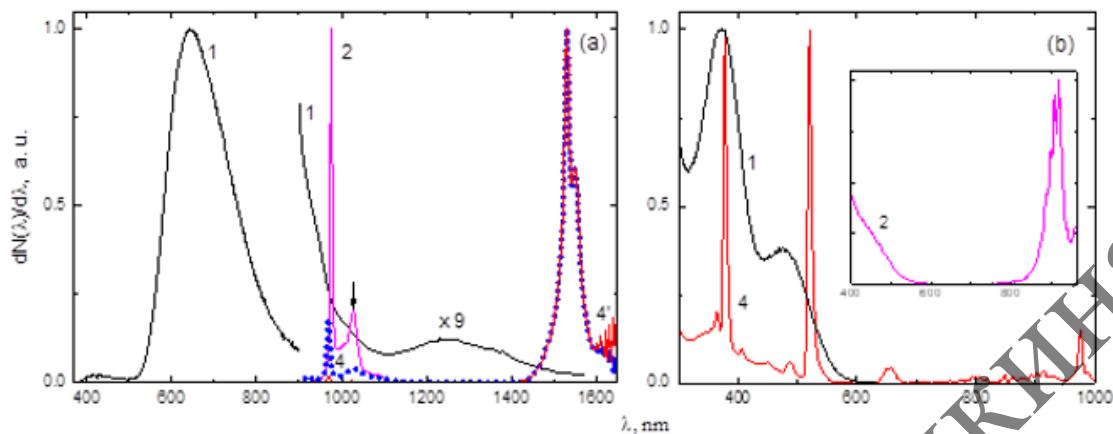


Рисунок 3 – Спектры люминесценции (а) и её возбуждения (б), легированных Cr (1) и солегированных Cr–Yb (2) и Cr–Yb–Er (4)
 λ_{exc} , нм: 360 (1, 2); 521 (4); 377 (4'). λ_{rec} , нм: 650 (1); 977 (2); 1532 (4)

Таким образом, хром входит в кварцевые тель-стёкла в основном в виде октаэдрических и тетраэдрических Cr^{3+} и октаэдрических Cr^{5+} и Cr^{6+} , люминесцирующих в широкой диффузной полосе с максимумом при 640 нм, длинноволновое крыло которой простирается до 1500 нм. При дополнительном легировании этих стекол Yb и/или Er имеет место формирование сложных Cr–Yb- и Cr–Er-центров, повышение доли высокозарядных ионов хрома, ослабление их люминесценций и появление сенсибилизированной люминесценции ионов Yb^{3+} и Er^{3+} . Последняя возбуждается в широкой полосе при $\lambda < 600$ нм, обусловленной суперпозицией полос возбуждения октаэдрических Cr^{5+} и Cr^{6+} . Привлекательным свойством Cr–Yb-центров является повышенный коэффициент ветвления люминесценции на высокорасположенную штарковскую компоненту ионов Yb^{3+} , а Cr–Er-центров – увеличение эффективной ширины полосы люминесценции $^4\text{I}_{13/2} \rightarrow ^4\text{I}_{15/2}$ ионов Er^{3+} .

Работа поддержана программой Союзного Государства «Компонент Ф», задание 3.1.

Список использованных источников

1. Лазерные фосфатные стекла / Н.Е. Алексеев [и др.] ; М.Е. Жаботинский (ред.). – М. : Наука, 1980. – 352 с.
2. Qian, Q. The spectroscopic properties of Er^{3+} -doped antimony–borate glasses / Q. Qian, Q.Y. Zhang, H.F. Jiang [et al.] // Physica B. – 2010. – V. 405. – P. 2220–2225.
3. Speghini, A. Electronic spectroscopy of trivalent lanthanide ions in lead zinc borate glasses / A. Speghini, M. Peruffo, M. Casarin [et al.] // J. Alloys Compds. – 2000. – V. 300–301. – P. 174–179.
4. Savelii, I. Nanostructuring an erbium local environment inside sol–gel silica glasses: toward efficient erbium optical fiber lasers / I. Savelii, H. El Hamzaoui, L. Bigot [et al.] // Laser Phys. Lett. – 2016. – V. 13, № 2.

5. Малашкевич, Г.Е. Влияние условий синтеза и состава кварцевых гель-стекол на ширину полосы люминесценции $^4I_{13/2} \rightarrow ^4I_{15/2}$ ионов Er³⁺ / Г.Е. Малашкевич, В.В. Ковгар, Н.В. Варапай [и др.] // ЖПС. – 2023. – Т. 90. – С. 684–688.
6. Лунтер, С.Г. Энергетические параметры лазеров на эрбьевых стеклах, сенсибилизированных иттербием и хромом / С.Г. Лунтер, А.Г. Мурzin, М.Н. Толстой [и др.] // Квантовая электроника. – 1984. – Т. 11, № 1. – С. 103–108.
7. Malashkevich, G.E. Luminescence of borogermanate glasses activated by Er³⁺ and Yb³⁺ ions / G.E. Malashkevich, V.N. Sigaev, N.V. Golubev [et al.] // J. Non-Cryst. Solids. – 2011. – V. 357. – P. 67–72.
8. Malashkevich, G.E. Optical centers of cerium in silica gel-glasses obtained by the sol-gel process / G.E. Malashkevich, E.N. Poddenezhny, I.M. Melnichenko [et al.] // J. Non-Cryst. Solids. – 1995. – V. 188. – P. 107–117.
9. Малашкевич, Г.Е. Спектрально-люминесцентные свойства стекол системы $(Y_{1-x}Yb_x)_2O_3-Al_2O_3-B_2O_3-SiO_2 + Cr_2O_3 + Na_2O$ / Г.Е. Малашкевич, В.В. Ковгар, А.А. Романенко [и др.] // Оптика и спектроскопия. – 2022. – Т. 130, вып. 1. – С. 199–206.
10. Koepke, Cz. Excited state spectroscopy of chromium ions in various valence states in glasses / Cz. Koepke, K. Wisniewski, M. Grinberg // J. Alloy. Comp. – 2002. – V. 341. – P. 19–27.
11. Strek, W. Spectroscopic studies of chromium-doped silica sol-gel glasses / W. Strek, P.J. Deren, E. Lukowiak [et al.] // J. Non-Cryst. Solids. – 2001. – V. 288. – P. 56–65.
12. Kouhar, V. Stokes and anti-Stokes luminescence of heavily-doped Yb-containing glasses / V. Kouhar, G. Malashkevich, I. Khodasevich [et al.] // Programme and Book of Abstracts of ICfE-9, September 6–9, 2015, – Oxford, 2015. – P. 78.

УДК 535.93

М.М. Векшин, О.Е. Полютова
Кубанский государственный университет

ГИБРИДНЫЕ МОДЫ ВЫСОКОКОНТРАСТНЫХ ПОЛОСКОВЫХ ОПТИЧЕСКИХ As₂S₃ ВОЛНОВОДОВ И ИХ ПРИМЕНЕНИЕ

Высококонтрастный интегрально-оптический As₂S₃ полосковый волновод с асимметричным распределением показателя преломления в вертикальном направлении имеет гибридные моды, что дает возможность создавать преобразователи поляризации оптического излучения на его основе.

Ключевые слова: Интегральная оптика, полосковые оптические волноводы, гибридные моды.

Введение. В настоящее время большой актуальностью являются исследования в области построения поляризационных схем планарной фотоники с целью их применения в различных системах оптической обработки информации, в частности, в новых системах волоконно-оптической связи с поляризационным и модовым уплотнением каналов.

Цель работы состоит в расчете и анализе параметров мод интегрально-оптического высококонтрастного As_2S_3 полоскового волновода и исследовании применения таких волноводов в качестве пассивного преобразователя поляризации оптического излучения.

Модовый анализ оптического волновода. Расчетные параметры полоскового волновода: показатель преломления волноводного канала $n_f = 2,4$, подложки из стекла n_s типа К-8 – 1,5, покровной среды $n_c = 1$. Длина волны – 1,55 мкм. Высота волноводного канала – 0,3 мкм. Для расчетов ширина канала варьировалась в диапазоне от 0,7 мкм до 1,5 мкм. Поперечное сечение волновода показано на вкладке к рисунку 1(а).

Результат полного векторного расчета мод волновода с указанными параметрами показан на рисунке 1(а), на котором представлена зависимость эффективного показателя преломления волноводных мод от ширины волноводного канала. Анализ характеристик мод волновода позволил установить следующие закономерности их формирования. У второй и третьей моды волновода существует определенная область его ширины $\sim 1,2$ мкм (отмеченная на графике), в которой эффективные показатели преломления этих мод имеют близкие значения. Вторая мода, появляющаяся как мода TM_0 , по мере увеличения ширины волновода после прохождения этой области изменяет ориентацию своей поляризации и пространственную структуру поля и переходит в моду TE_1 . Третья мода, зарождающаяся как мода TE_1 , имеет ту же особенность – после указанной области сближения кривых эта мода трансформируется в моду TM_0 . В области с близкими значениями эффективных показателей преломления обе моды имеют гибридный характер с соразмерными поперечными компонентами полей. Считать их TE - и TM -модами в этой области нельзя.

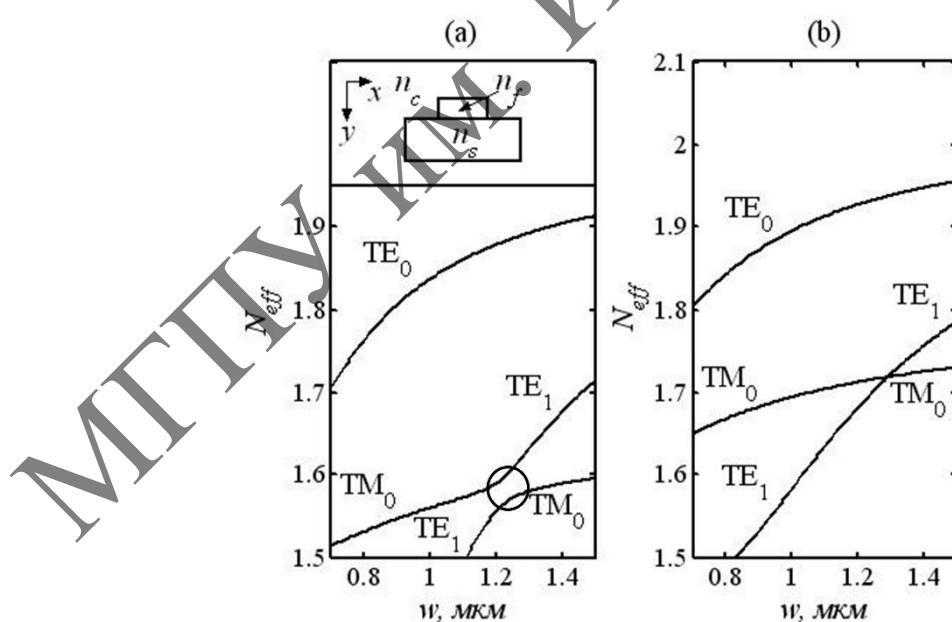


Рисунок 1 – Зависимость эффективного показателя преломления волноводных мод полоскового As_2S_3 волновода от его ширины в случае асимметричного профиля показателя преломления по оси y – (а) и симметричного профиля – (б)

Был проведен аналогичный расчет с волноводом, у которого показатель преломления покровной среды был равен показателю преломления подложки. Остальные параметры волновода были те же, что и в первом случае. Результаты этого расчета показаны на рисунке 1(б). В данном случае все моды линейно поляризованы. Таким образом, асимметрия профиля показателя преломления приводит к появлению гибридных мод.

Интегрально-оптические схемы преобразователей поляризации. Эти особенности мод полоскового волновода с асимметричным профилем дают возможность создать пассивный преобразователь поляризации оптического излучения, состоящий из волновода рупорообразной формы. Принцип действия преобразователя поляризаций основан на модовой эволюции [1], а физической основой этого преобразования является наличие у волновода в определенном интервале значений его ширины гибридных мод.

Принцип работы преобразователя, показанного на рисунке 2, можно пояснить следующим образом. Предположим, что на вход волновода подается ТМ-поляризованное излучение, и вектор напряженности магнитного поля направлен горизонтально (вдоль оси x). Это излучение возбуждает в волноводе моду, которая и распространяется в волноводе. По мере распространения моды в волноводе за счет плавного увеличения толщины пленки, покрывающей волновод, поляризация этой моды изменяется на 90° и на выходе волновода уже будет существовать TE-поляризованная мода первого порядка. То есть мода TM_0 преобразуется в моду TE_1 . Совершенно аналогично будет функционировать преобразователь поляризации, в котором будет увеличиваться плавно не ширина, а толщина пленки.

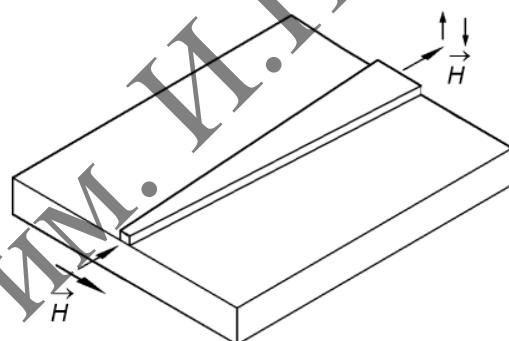


Рисунок 2 – Схематический ТМ–ТЕ преобразователя поляризации оптического излучения (конвертора мод TM_0 – TE_1) эволюционного типа на основе полоскового As_2S_3 волновода

Указанные особенности мод исследуемого волновода позволяют создать еще одну разновидность преобразователя поляризаций оптического излучения, который использует не эволюционное преобразование, а интерференцию именно самих гибридных мод – то есть второй и третьей моды волновода (если их нумеровать по мере убывания их эффективного показателя преломления) при ширине волновода, соответствующей области максимального сближения эффективных показателей преломления этих двух мод (см. выделенную область на рисунке 1(а)). Поляризация магнитного поля второй моды волновода имеет круговой характер и направлена по часовой стрелке, поляризация третьей моды имеет такой же вид, но направлена против часовой стрелки.

С использованием волновода, обладающего такими гибридными модами, можно создать устройство для пассивного преобразования плоскости поляризации световой волны на 90° за счет интерференции этих двух мод [2]. Схема поляризационного преобразователя показана на рисунке 3.

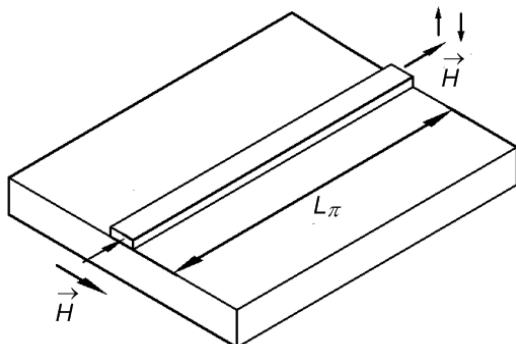


Рисунок 3 – Схематический ТМ–ТЕ преобразователя поляризации оптического излучения (конвертора мод ТМ₀–ТЕ₁) интерференционного типа на основе полоскового As₂S₃ волновода

Принцип работы преобразователя можно объяснить следующим образом. Предположим, что на вход волновода подается ТМ-поляризованное излучение, и вектор напряженности магнитного поля направлен горизонтально. Излучение возбуждает обе гибридные моды, которые при распространении интерферируют друг с другом. После прохождения определенного расстояния, равного половине длины биений мод L_π , обе моды будут находиться в противофазе. Компоненты полей H_x обоих мод взаимно компенсируют друг друга, их суперпозиция в любой точке поперечного сечения волновода близка к нулю.

Но совсем иная ситуация складывается с компонентами магнитного поля H_y этих двух мод. При той же длине волновода их интерференция в любой точке поперечного сечения волновода будет конструктивной и “у”-компоненты поля от одной гибридной моды, будет усиливать “у”-компоненту поля от другой гибридной моды. Следовательно, на выходе волновода будет наблюдаться оптическое излучение от моды ТЕ₁, в котором вектор напряженности магнитного поля расположен вертикально. Так как преобразователь имеет на входе ТМ₀-моду, поэтому можно говорить о конверсии мод ТМ₀–ТЕ₁.

Заключение. Таким образом, особенности модовой структуры полоскового As₂S₃ полоскового волновода с асимметричным в вертикальным направлением профилем показателя преломления дают возможность создавать пассивные волноводные преобразователи поляризации оптического излучения.

Список использованных источников

1. Watts, M.R. Integrated mode-evolution based polarization rotators / M.R. Watts, H.A. Haus / Optics Letters. – 2005. – Vol. 30. – № 2. – P. 138–140.
2. Mertens, K. Polarization conversion by hybrid modes: Theory and applications / K. Mertens, M. Sennewald, H.J. Schmitt / Radio Sci. – 1996. – Vol. 31. – № 6. – P. 1773–1779.

В.В. Давыдовская, В.Н. Навыко, А.В. Федорова, Д.С. Блоцкая, С.Н. Завалей
Мозырский государственный педагогический университет имени И.П. Шамякина

ОСОБЕННОСТИ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ВИХРЕВОГО СВЕТОВОГО ПУЧКА В ФОТОРЕФРАКТИВНОМ КРИСТАЛЛЕ

В работе представлены результаты теоретического изучения динамики распространения вихревого светового пучка в фоторефрактивном кристалле SBN, особенностей образования филаментов и их взаимодействия, а также обоснована возможность использования данного светового пучка как волновода, выполненного на основе кристалла SBN, к которому приложено внешнее электрическое поле.

Ключевые слова: моделирование, распространение, фоторефрактивный кристалл, вихревой световой пучок, филамент, оптический волновод.

Введение. Актуальность использования квазисолитонных структур в фоторефрактивных кристаллах обусловлена развитием современных методов и устройств оптоэлектроники, требующих создания новых способов осуществления управляемой адресной локализации световых пучков.

В настоящее время большое внимание уделяется исследованию пространственных солитонов, так как в они способны передавать большие объёмы информации и распространяться практически без дифракционной расходности и изменения формы светового пучка.

Разработка новых способов управления квазисолитонными сингулярными пучками с использованием фоторефрактивных кристаллов, установление механизмов, особенностей и закономерностей динамики преобразования вортексов при их распространении и взаимодействии в средах с фоторефрактивной нелинейностью является актуальной задачей когерентной оптики [1].

Вортексы могут быть полезными для многих приложений, таких как информационные технологии, микроскопия, оптические пинцеты и телекоммуникации, а также могут использоваться для создания запутанных состояний света и управления ими, что может быть использовано для разработки новых методов квантового вычисления и квантовой связи [2; 3].

Для моделирования распространения сингулярного пучка в кристалле SBN были использованы следующие параметры: $n_e = 2,33$, $r_{33} = 235 \text{ пм/В}$, $\lambda = 0,6314 \text{ мкм}$, $T = 295 \text{ К}$ [4; 5], использовалась модель сингулярного пучка, представленная в [6], характерный размер входного пучка $r_0 = 20 \text{ мкм}$, топологический заряд пучка $m = 1$.

Модуль напряжённости внешнего электрического поля, в которое помещён кристалл, равен $E_0 = 0,5 \text{ кВ/см}$. Максимальное значение относительной интенсивности сингулярного светового пучка на входе в кристалл $I_{max} = 1$ (рисунок 1).

При исследовании особенностей изменения светового поля по мере распространения сингулярного светового в фоторефрактивном кристалле SBN можно отметить образование двух независимых филаментов с их дальнейшим поворотом относительно оси пучка. При анализе угла поворота верхнего филамента, образовавшегося на оси ox , угол отсчитывался от данной оси против часовой стрелки.

При выбранных параметрах моделирования и толщине кристалла до 15 мм в значительной мере проявляется взаимодействие между образовавшимися филаментами (рисунок 2, а, б), это отражается на величине изменения, угла отклонения филамента. Так для верхнего филамента при изменении толщины кристалла от 10 мм до 15 мм оно составило порядка 10° .

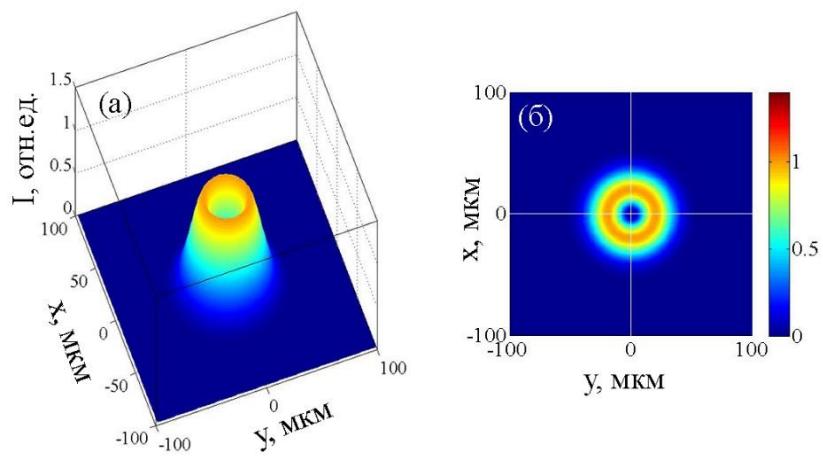


Рисунок 1 – Вид вихревого пучка на входе в кристалл; а – трехмерное модельное изображение зависимости $I(x,y)$; б – распределение относительной интенсивности $I(x,y)$ в пучке при наблюдении навстречу оси z

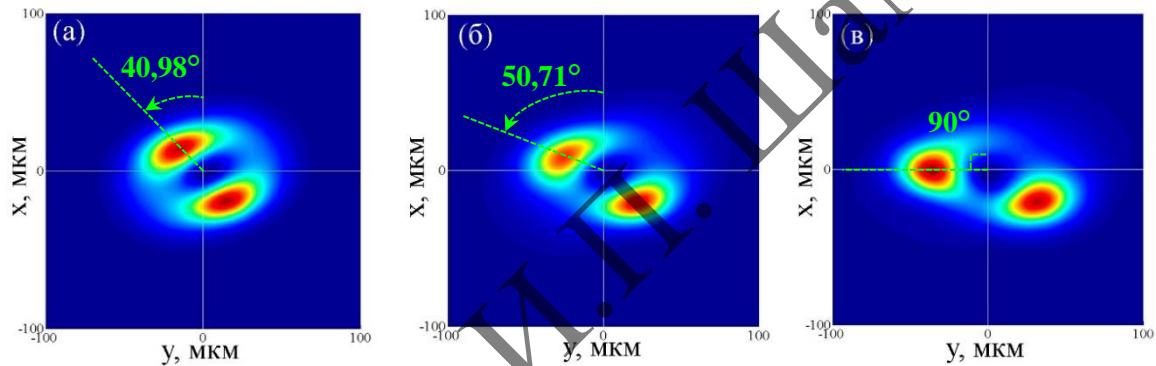


Рисунок 2 – Динамика распространения двумерного сингулярного пучка в фоторефрактивном кристалле SBN; а – толщина кристалла $SBN z=10$ мм; б – $z=15$ мм; в – $z=20$ мм

При дальнейшем увеличении толщины кристалла расстояние между филаментами увеличивается, и степень их влияния друг на друга снижается, за счет этого степень поворота филамента увеличивается – при изменении толщины кристалла от 15 мм до 20 мм изменение угла поворота составило около 40° (рисунок 2, в).

Следует отметить, что при рассмотрении трехмерной модели распределения светового поля по толщине кристалла (рисунок 3, а–в) четкое формирование двух самостоятельных филаментов можно наблюдать при толщине кристалла превышающей 5 мм.

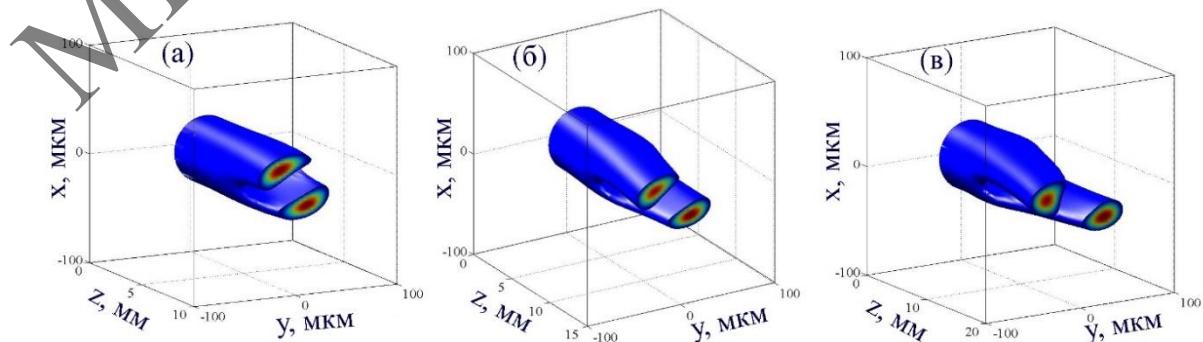


Рисунок 3 – Трехмерная модель; а – толщина кристалла $SBN z=10$ мм; б – $z=15$ мм; в – $z=20$ мм

Следует отметить, что различие значений относительной интенсивности образовавшихся филаментов, которое отчетливо заметно на рисунке 2, а, б, которое также наблюдалось при экспериментальных исследованиях (см. напр., [7]) по аналогии с взаимодействием пучков можно также объяснить с помощью диффузионного механизма перемещения зарядов, который приводит к смещению филаментов против направления вектора напряженности внешнего электрического поля, приложенного к кристаллу SBN вдоль направления внешнего электрического поля.

Однако для верхнего филамента это смещение увеличивает поворот, который возникает за счет орбитального углового момента, для нижнего филамента наоборот компенсирует поворот филамента по часовой стрелке (рисунок 4, в).

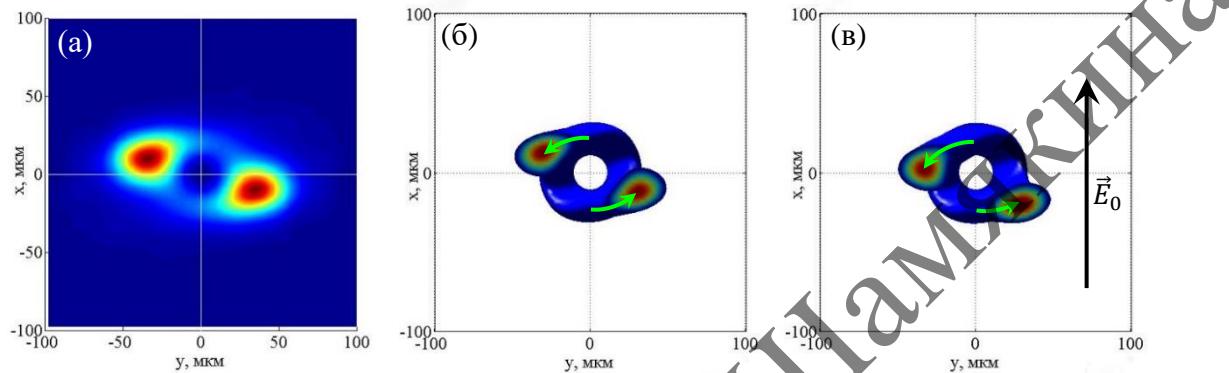


Рисунок 4 – Динамика распространения двумерного сингулярного пучка в фотопрекративном кристалле SBN; а – б: толщина кристалла z=20 мм без учета диффузии; в: z=20 мм с учетом диффузии

Следствием этого является то, что образовавшиеся филаменты проходят в кристалле различный оптический путь, который приводит к появлению разности фаз между ними и, как следствие, к появлению энергетического обмена, что проявляется перекачке энергии от верхнего филамента к нижнему (рисунок 2, б, в). Без учета диффузионного слагаемого поля пространственного заряда возникновение разности фаз и энергетический обмен объяснить нельзя, так на рисунке 4, а, б мы видим симметричную картину.

В работе представлены результаты теоретического изучения динамики распространения и распада двумерного оптического вихря в фотопрекративном кристалле SBN, а также возможность использования его как волновода, выполненного на основе кристалла SBN, к которому приложено внешнее электрическое поле. Такой оптический вихрь способен управлять световым пучком.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования Республики Беларусь (договор № 1410/2021 от 22.03.2021) в рамках государственной программы научных исследований № 6 «Фотоника и электроника для инноваций» на 2021–2025 гг. (задание 6.1.14).

Список использованных источников

1. Mamaev, A.V. Propagation of a mutually incoherent optical vortex pair in anisotropic nonlinear media / A.V. Mamaev, M. Saffman, A.A. Zozulya // J. Opt.B: Quantum Semiclass. Opt. – 2004. – V. 6. – P. S318–S322.
2. Wang, J. Advances in communications using optical vortices / J. Wang // Photonics Research. – 2016. – V.4. – P. 14–28.
3. Andrews, D. Symmetry and Quantum Features in Optical Vortices / D. Andrews // Symmetry – 2021. – V. 13. – P. 1368.

4. Ducharme, S. Electro-optic and Piezoelectric Measurements in Photorefractive Barium Titanate and Strontium Barium Niobate / S. Ducharme, J. Feinberg, R.R. Neurgaonkar // J. Quantum Electron. – 1987. – Vol. 23, № 12. – P. 2116–2121.

5. Weber, M.J. Handbook of optical materials / M.J. Weber. – Boca Raton : CRC Press, 2003. – 536 p.

6. Шленов, С.А. Спектральное уширение фемтосекундных оптических вихрей при филаментации в плавленом кварце в условиях аномальной дисперсии групповой скорости / С.А. Шленов, Е.В. Васильев, С.В. Чекалин, В.О. Компанец, Р.В. Скиданов // ЖЭТФ. – 2021. – 159(3). – С. 400–408.

7. Partially Incoherent Optical Vortices in Self-Focusing Nonlinear Media / C-C. Jeng, M-F. Shih, K. Motzek, Y.S. Kivshar // Phys. Rev. Lett. – 2004. – Vol. 92, № 4. – P. 043904-1 – 043904-4.

УДК 535.56, 548.736

**А.Ф. Константинова¹, Т.Г. Головина¹, А.П. Дудка¹, А.В. Буташин¹,
Н.С. Козлова², Е.В. Забелина², В.М. Касимова²**

¹Институт кристаллографии имени А.В. Шубникова Курчатовского комплекса
кристаллографии и фотоники НИЦ «Курчатовский институт»

²Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС»

ОПТИЧЕСКИЕ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ СЕМЕЙСТВА ЛАНГАСИТА И ИХ СВЯЗЬ С АТОМНОЙ СТРУКТУРОЙ

Проведено исследование оптических (показателей преломления и оптической активности) и механических (анизотропии разрушения, модуля Юнга) свойств кристаллов семейства лангасита, в том числе поглощающих, во взаимосвязи с их структурой и составом. Изучен ряд разнообразных по составу представителей этого семейства с применением взаимодополняющих экспериментальных и расчетных методик.

Ключевые слова: лангаситы, структура кристаллов, показатели преломления, поглощение, оптическая активность, механические свойства кристаллов.

Введение. В свое время Ф.И. Федоров предложил ковариантный метод для изучения оптических свойств кристаллов, в том числе оптической активности [1]. После этого вопросами теории оптической активности кристаллов занимались многие исследователи, среди которых был и В.В. Шепелевич [2, 3]. На основе разработанной теории появились различные экспериментальные работы [4].

В настоящей работе представлен обзор публикаций авторов, связанных с экспериментальным и теоретическим исследованием оптических и некоторых других свойств кристаллов семейства лангасита разного состава.

Кристаллы семейства лангасита $A_3BC_3D_2O_{14}$ (пр. гр. $P321$, рисунок 1, а) изучаются с начала 1980-х гг. [5]. По сравнению с другими пьезоэлектрическими материалами, применяемыми в датчиках физических величин, кристаллы семейства лангасита имеют ряд преимуществ, поэтому их продолжают выращивать и исследовать [6]. В настоящее

время синтезировано более 200 соединений семейства лангасита; большая часть монокристаллов выращена методами Чохральского и бестигельной зонной плавки.

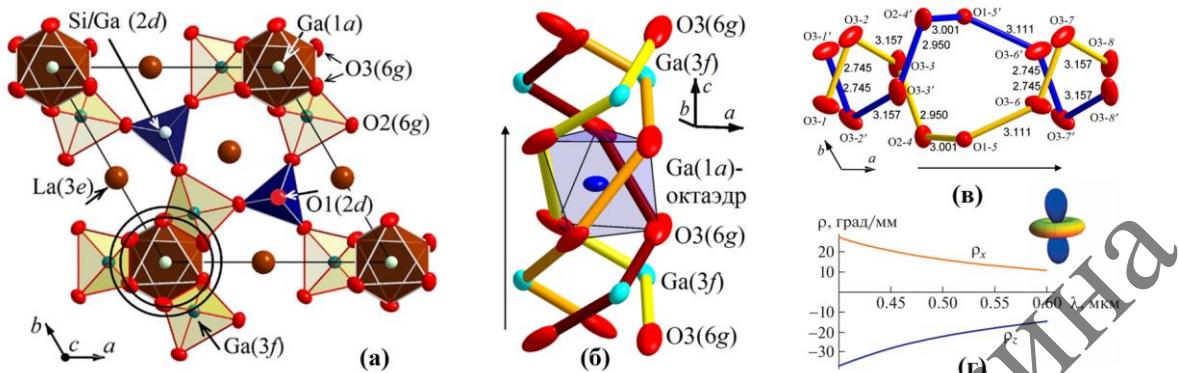
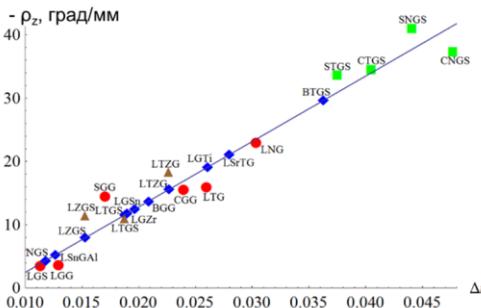


Рисунок 1 (а) – Структура кристалла $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$; (б, в) – спирали электронной плотности для правого кристалла вдоль оси c (б) и перпендикулярно к ней (в); (г) – ρ_z и ρ_x для $\text{Ca}_3\text{TaGa}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$

Изучению физических свойств и атомного строения кристаллов семейства лангасита посвящено множество работ. Показатели преломления и параметры оптической активности некоторых лангаситов описаны, например, в [7–9]. Так как кристаллы семейства лангасита имеют одинаковую симметрию, уирощается определение связи оптических и механических свойств этих кристаллов, в том числе поглощающих, с их структурой и составом.

Выполнены рентгеноструктурные исследования ряда кристаллов семейства лангасита. Показано, что структурной основой анизотропии оптической активности лангаситов являются спиральные образования электронной плотности [10]. В направлении, параллельном оптической оси, данные спирали являются правыми и трехзаходными и имитируют тройную винтовую ось симметрии (рисунок 1, б); в перпендикулярном направлении – левыми и двухзаходными и имитируют двойную винтовую ось симметрии (рисунок 1, в). Из полученных структурных данных с помощью программы WinOptAct проведен расчет вращения плоскости поляризации света, проходящего в направлении, параллельном (ρ_z) и перпендикулярном (ρ_x) оптической оси c [4]. Для всех исследованных правых кристаллов величина ρ_z отрицательна, а ρ_x – положительна (рисунок 1, г). Для левых кристаллов знаки ρ_x , ρ_z и закрутка спиралей меняются на противоположные.

Для ряда кристаллов семейства лангасита (рисунок 2) выполнен расчет показателей преломления и двупреломления методом молекулярных рефракций, а также с помощью программы WinOptAct по структурным данным. Показано, что зависимость величины ρ_z от двупреломления Δn для кристаллов семейства лангасита можно приблизительно аппроксимировать прямой линией (рисунок 2) [11]. Кристаллы, для которых величины ρ_z и Δn , и ρ_z экспериментальные, отмечены на рисунке 2 кружками. Треугольники и квадраты показывают кристаллы, для которых известны значения ρ_z , а Δn рассчитано. Ромбик на прямой – оценка величины ρ_z из полученной зависимости по рассчитанным для ряда кристаллов значениям Δn . Отметим, что данная зависимость не соблюдается для сильно поглощающих кристаллов BTFS, BNFS, SNFS.



Кристалл	Δn	Кристалл	Δn
$\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$	LGS	$\text{Nd}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$	NGS
$\text{La}_3\text{Ga}_5\text{GeO}_{14}$	LGG	$(\text{La}_{0.6}\text{Nd}_{0.4})_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$	$\text{LN}_{0.4}\text{GS}$
$\text{La}_3\text{Nb}_{0.5}\text{Ga}_{5.5}\text{O}_{14}$	LNG	$(\text{La}_{0.4}\text{Nd}_{0.6})_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$	$\text{LN}_{0.6}\text{GS}$
$\text{La}_3\text{Ta}_{0.5}\text{Ga}_{5.5}\text{O}_{14}$	LTG	$\text{Ba}_3\text{TaGa}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$	BTGS
$\text{Sr}_3\text{Ga}_2\text{Ge}_4\text{O}_{14}$	SGG	$\text{La}_3\text{Ga}_5\text{ZrO}_{14}$	LGZr
$\text{Ca}_3\text{Ga}_2\text{Ge}_4\text{O}_{14}$	CGG	$\text{La}_3\text{Ga}_5\text{TiO}_{14}$	LGTi
$\text{Ca}_3\text{TaGa}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$	CTGS	$\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SnO}_{14}$	LGSn
$\text{Ca}_3\text{NbGa}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$	CNGS	$\text{La}_{2.9}\text{Sr}_{0.1}\text{Ta}_{0.56}\text{Ga}_{5.44}\text{O}_{14}$	LSrTG
$\text{Sr}_3\text{TaGa}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$	STGS	$\text{La}_3\text{SnGa}_{3.1}\text{Al}_{1.9}\text{O}_{14}$	LSnGAI
$\text{Sr}_3\text{NbGa}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$	SNGS	$\text{Ba}_3\text{Ga}_2\text{Ge}_4\text{O}_{14}$	BGG
$\text{La}_3\text{Ta}_{0.25}\text{Ga}_{5.25}\text{Si}_{0.5}\text{O}_{14}$	LTGS	$\text{Ba}_3\text{TaFe}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$	BTFS
$\text{La}_3\text{Ta}_{0.25}\text{Zr}_{0.5}\text{Ga}_{5.25}\text{O}_{14}$	LTZG	$\text{Ba}_3\text{NbFe}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$	BNFS
$\text{La}_3\text{Ga}_5\text{Zr}_{0.5}\text{Si}_{0.5}\text{O}_{14}$	LZGS	$\text{Sr}_3\text{NbFe}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$	SNFS

Рисунок 2 – Слева: Зависимость вращения плоскости поляризации света ρ_z от двупреломления Δn при длине волны $\lambda = 0.589$ мкм. Справа: исследованные кристаллы и рассчитанные величины Δn

В поглощающих кристаллах оптическая активность характеризуется не только вращением плоскости поляризации света, но и циркулярным дихроизмом θ . Величина θ характеризует различие поглощения при распространении в кристалле волн левой и правой круговой поляризации. Для поглощающего кристалла можно формально ввести “комплексное вращение”:

$$\Phi = \rho + i\theta = \frac{\pi}{\lambda} (n_L - n_R) + i \frac{\pi}{\lambda} (\kappa_L - \kappa_R),$$

где n_L , n_R – показатели преломления, а κ_R , κ_L – коэффициенты поглощения для волн правой и левой круговых поляризаций соответственно. Параметры ρ и θ связаны между собой соотношениями Крамерса–Кронига в виде:

$$\rho(\lambda) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \theta(\lambda') \frac{\lambda'}{\lambda^2 - \lambda'^2} d\lambda', \quad \theta(\lambda) = -\frac{2}{\pi\lambda} \int_0^\infty \rho(\lambda') \frac{\lambda'^2}{\lambda^2 - \lambda'^2} d\lambda',$$

$$\theta_i = \theta_{i0} e^{-(\lambda_i - \lambda_{i0})^2/\sigma_i^2}, \quad \Delta\rho_i(\lambda) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \theta_i(\lambda') \frac{\lambda'}{\lambda^2 - \lambda'^2} d\lambda',$$

где интеграл понимается в смысле главного значения, $\Delta\rho_i$ – добавка к величине ρ , связанная с изолированной полосой циркулярного дихроизма θ_i .

Проведено исследование структуры и оптических свойств поглощающих кристаллов $(\text{La}_{1-x}\text{Nd}_x)_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$, $x = 0, 0.4, 0.6, 1$ [12]. Спектры поглощения данных кристаллов показаны на рисунке 3, а. Выполнен расчет величины ρ_z из измеренных спектров пропускания в поляризованном свете. Показано, что при малой величине ρ_z ($\sim 3\text{--}5$ град/мм) для получения лучших результатов нужно использовать спектры пропускания не при параллельных и скрещенных поляризаторах, как обычно принято, а при разных углах между ними, например $\pm 45^\circ$. Значения ρ_z в области прозрачности экстраполированы формулой Друде. Измерен циркулярный дихроизм данных кристаллов в диапазоне 400–1000 нм. С помощью соотношений Крамерса–Кронига определена связь между величинами циркулярного дихроизма θ и удельного вращения ρ_z в области полос поглощения кристаллов $(\text{La}_{1-x}\text{Nd}_x)_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$. Для этого рассчитаны значения $\Delta\rho$ для измеренных полос циркулярного дихроизма и добавлены к дисперсии $\rho_z(\lambda)$, полученной без учета поглощения. Проведено сравнение рассчитанных и экспериментальных величин ρ_z (рисунок 3, б, на вставке приведен фрагмент дисперсии в диапазоне 840–920 нм).

Исследованы оптические свойства (n_o , n_e и ρ) железосодержащих кристаллов (мультиферроиков) семейства лангасита $\text{Ba}_3\text{TaFe}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$ (BTFS), $\text{Ba}_3\text{NbFe}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$ (BNFS), $\text{Sr}_3\text{NbFe}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$ (SNFS). Кристаллы выращены методом бестигельной зонной плавки. Проведено сравнение измеренных и рассчитанных показателей преломления. Выполнен

расчет показателей преломления и параметров оптической активности по структурным данным [13]. Спиральные образования электронной плотности являются структурной основой потенциального магнитного упорядочения в железосодержащих кристаллах семейства лангасита. Таким образом, проявление оптической активности и мультиферроидные свойства кристаллов являются следствием общей структурной особенности, присущей лангаситам, а именно наличию спиралей электронной плотности, которые связывают атомы разных химических сортов, то есть подчиняются закону винтовой оси симметрии лишь приближенно.

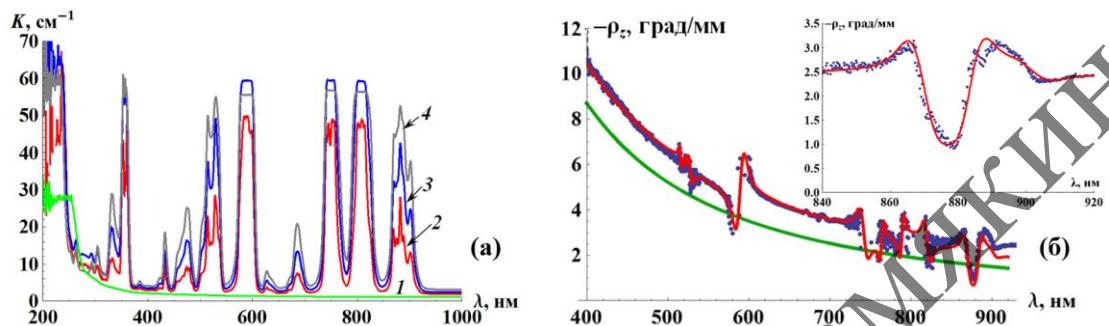


Рисунок 3 – (а) – Спектры поглощения кристаллов LGS (1), LN_{0.4}GS (2), LN_{0.6}GS (3), NGS (4) в неполяризованном свете. (б) – Экспериментальные (точки) и рассчитанные с учетом поглощения величины ρ_z для кристалла LN_{0.4}GS в сравнении с величиной ρ_z для LGS

Исследована анизотропия микротвердости и разрушения при давлении в плоскости базиса (0001) нескольких кристаллов семейства лангасита (LGS, LTG, LTGS, LTZG, CGG) с помощью индентирования по Берковичу [14]. Индентор Берковича представляет собой алмазную пирамиду с основанием в виде равностороннего треугольника, его симметрия совпадает с симметрией плоскости (0001) лангаситов, имеющей тройную поворотную ось симметрии. Картинами индентирования представляют собой восстановленный отпечаток индентора, ответственный за пластическую деформацию кристалла, и три трещины. Обнаружено образование микротрещин, прямых и выходящих точно из углов отпечатков («кристаллографических»), в шести направлениях с шагом 60°. Наблюдаемые особенности образования микротрещин можно объяснить с привлечением структурной модели мультиячейки. Как следует из данной модели, разломы идут в направлении полиэдротов со смешанной катионной заселенностью, при этом линия разлома раздвигает элементарные ячейки разного химического состава (рисунок 4, а).

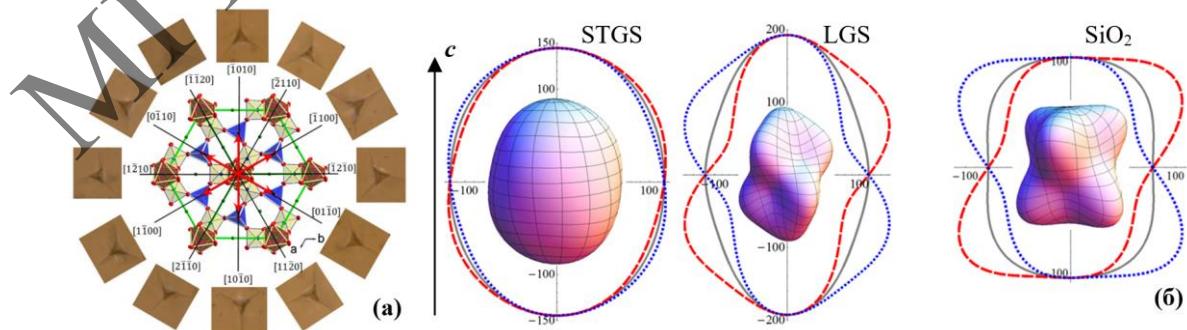


Рисунок 4 – (а) – Картины индентирования плоскости (0001) кристалла LGS при разных поворотах индентора. В центре: модель структуры кристалла LGS. (б) – Характеристические поверхности модуля Юнга E (ГПа) некоторых кристаллов и их сечения

Рассмотрена анизотропия модуля Юнга для разных кристаллов семейства лангасита (рисунок 4, б). Видно, что для кристалла STGS анизотропия данной величины менее выражена, чем для кристаллов LGS и кварца. Показаны структурная основа пьезоэлектричества лангаситов и разница между правыми и левыми кристаллами, которая важна при изготовлении пьезоэлектрических устройств.

Кристаллы семейства лангасита имеют оптимальный набор оптических, механических, акустических и пьезоэлектрических характеристик для практического применения. В настоящее время используются кристаллы LGS, LGT, CTGS [6]. Знание взаимосвязи между структурой, составом и различными свойствами таких кристаллов позволяет прогнозировать, какими будут указанные свойства для новых представителей этого семейства.

Работа выполнена в рамках государственного задания НИЦ «Курчатовский институт» и при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках государственного задания ВУЗам FSME-2023-0003.

Список использованных источников

1. Федоров, Ф.И. Теория гиротропии / Ф.И. Федоров. – Минск : Наука и техника, 1976. – 456 с.
2. Шепелевич, В.В. Электромагнитные волны в поглощающих оптически активных кристаллах : дис. ... канд. физ.-мат. наук : 01.04.05 / В.В. Шепелевич. – Минск, 1974. – 107 с.
3. Особенности проявления оптической активности в поглощающих кристаллах / А.Ф. Константинова, В.В. Шепелевич, Б.В. Бокуть [и др.] // Кристаллография. – 1976. – Т. 21. – Вып. 6. – С. 1108–1112.
4. Оптические свойства кристаллов / А.Ф. Константинова, Б.Н. Гречушников, Б.В. Бокуть, Е.Г. Валяшко. – Минск : Наука и техника, 1995. – 302 с.
5. Модифицированные редкоземельные галлаты со структурой $\text{Ca}_3\text{Ga}_2\text{Ge}_4\text{O}_{14}$ / Б.В. Миль, А.В. Буташин, Г.Г. Ходжабагян [и др.] // ДАН СССР. – 1982. – Т. 264, № 6. – С. 1385–1389.
6. АО «Фомос-Материалы» [Электронный ресурс] // – Режим доступа: <https://newpiezo.com/>. – Дата доступа: 13.03.2025.
7. Кристаллооптические исследования соединений со структурой тригонального Ca-галлогерманата ($\text{Ca}_3\text{Ga}_2\text{Ge}_4\text{O}_{14}$) / О.А. Батурина, Б.Н. Гречушников, А.А. Каминский [и др.] // Кристаллография. – 1987. – Т. 32, № 2. – С. 406–412.
8. Каминский, А.А. Физика и спектроскопия лазерных кристаллов / А.А. Каминский. – М. : Наука, 1986. – 271 с.
9. Забелина, Е.В. Оптические свойства кристаллов семейства лангасита: $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$, $\text{La}_3\text{Ga}_{5.5}\text{Ta}_{0.5}\text{O}_{14}$, $\text{Ca}_3\text{TaGa}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$ / Е.В. Забелина, Н.С. Козлова, О.А. Бузанов // Оптика и спектроскопия. – 2023. – Т. 131. – Вып. 5. – С. 634–641.
10. Константинова, А.Ф. Анизотропия оптической активности в кристаллах семейства лангасита / А.Ф. Константинова, Т.Г. Головина, А.П. Дудка // Кристаллография. – 2018. – Т. 63, № 2. – С. 218–224.
11. Экспериментальное и теоретическое определение величины вращения плоскости поляризации света в кристаллах семейства лангасита / А.Ф. Константинова,

Т.Г. Головина, Б.В. Набатов [и др.] // Кристаллография. – 2015. – Т. 60, № 6. – С. 950–957.

12. Структура и оптические свойства кристаллов семейства лангасита $(La_{1-x}Nd_x)_3Ga_5SiO_{14}$ ($x = 0, 0.4, 0.6, 1$) / Т.Г. Головина, А.Ф. Константина, А.П. Дудка [и др.] // Кристаллография. – 2024. – Т. 69, № 2. – С. 290–302.

13. Измерение и расчет показателей преломления кристаллов семейства лангасита $Sr_3NbFe_3Si_2O_{14}$, $Ba_3NbFe_3Si_2O_{14}$, $Ba_3TaFe_3Si_2O_{14}$ и связь оптической активности с особенностями распределения электронной плотности / А.Ф. Константина, Т.Г. Головина, А.П. Дудка [и др.] // Кристаллография. – 2022. – Т. 67, № 6. – С. 963–970.

14. Анизотропия микротвердости и разрушения кристалла лангасита и ее структурная основа / Н.Л. Сизова, Т.Г. Головина, А.Ф. Константина, А.П. Дудка // Кристаллография. – 2021. – Т. 66, № 6. – С. 913–918.

УДК 531.226.1

Г.В. Кулак¹, В.И. Казаков², П.И. Ропот³, О.В. Шакин²

¹Мозырский государственный педагогический университет имени И.П. Шамякина

²Государственный университет аэрокосмического приборостроения

³Институт физики НАН Беларусь

ДИФРАКЦИЯ ИГОЛЬЧАТЫХ СВЕТОВЫХ ПУЧКОВ НА УЛЬТРАЗВУКЕ В ОДНООСНЫХ КРИСТАЛЛАХ

Исследована брэгговская дифракция циркулярно поляризованных игольчатых световых пучков на медленной сдвиговой ультразвуковой волне в кристаллах парателлурита. Показано, что при изменении угла конусности падающего на диафрагму бесселевого светового пучка достигается высокая эффективность дифракции ~90% для сформированного и падающего на акустооптическую ячейку игольчатого пучка. Установлено, что при увеличении длины акустооптического взаимодействия эффективность дифракции игольчатых световых пучков достигает максимального значения при меньших мощностях ультразвука.

Ключевые слова: игольчатый световой пучок, брэгговская дифракция света, дифракционная эффективность, одноосный кристалл.

Введение. В работе [1] показано, что для кольцевой апертуры светового поля с равномерным освещением длина фокальной области увеличивается по сравнению с обычными пучками. Метод формирования кольцевого пучка посредством аподизации апертуры светового поля рассмотрен в [2]. Особенности преобразования кольцевой структуры светового поля с использованием двухаксиконной схемы изучены в [3]. В работе [4] рассмотрены особенности формирования игольчатых световых пучков (ИП) с использованием аксиконной схемы и апподизирующей диафрагмы. ИП отличаются высокой интенсивностью, высокой разрешающей способностью и увеличенной глубиной фокусировки. Такие пучки, имеющие более удлиненную фокальную область по сравнению с гауссовыми, находят широкое применение в лазерных технологиях

для резки, сварки, гравировки и др. В работе [5] исследованы особенности брэгговской дифракции ограниченных световых пучков различных амплитудных распределений (гауссового, прямоугольного и лорентцевого) на ультразвуке. Показано, что дифракционная эффективность уменьшается при переходе от пучка прямоугольного профиля, падающего на акустооптическую (АО) ячейку, далее переходя к гауссовому и, наконец, к лорентцевому профилю. Отметим, что при этом использовалась двумерная теория связанных волн, естественным образом учитывающая сложное амплитудное распределение падающего светового пучка. В настоящей работе с использованием теории связанных волн исследуются особенности брэгговской дифракции ИП на ультразвуке. Во многих работах (см. напр. [6]) указано, что для отдельных срезов кристаллов теллура (Te) достижимо значение коэффициента АО качества $M_2 \sim 500 \times 10^{-12} \text{с}^3/\text{кг}$. При этом кристаллы Te перспективны для создания АО устройств в инфракрасной области оптического спектра.

На рисунке 1 представлена схема формирования ИП и анизотропной брэгговской дифракции циркулярно поляризованных световых пучков. Здесь гауссов пучок от лазерного источника проходит через систему двух аксионов с различными преломляющими углами γ_1 и γ_2 , причем $\gamma_1 > \gamma_2$. За вторым аксионом в области квазибездифракционного распространения формируется бесселев световой пучок (БСП), который при малых $\Delta\gamma = \gamma_2 - \gamma_1$ имеет широкий центральный максимум диаметром d по уровню нулевой интенсивности. На пути БСП расположен экран с круговой щелевой диафрагмой, причем край диафрагмы совпадает с первым нулем БСП. В результате за экраном формируется пучок в форме осевого максимума с нулевой интенсивностью по краю апертуры, который принято называть ИП [4].

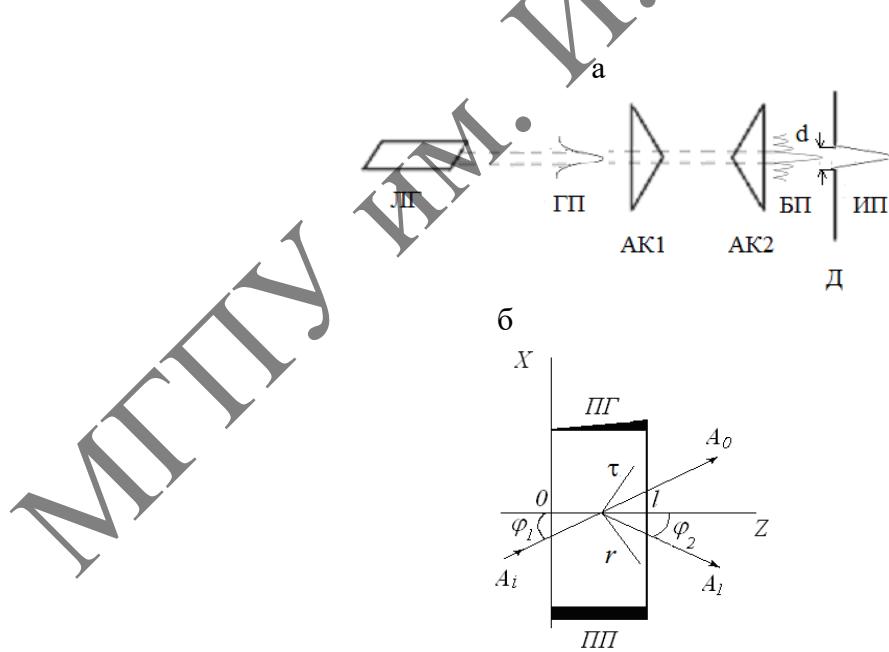


Рисунок 1 – а) Схема формирования ИП (ЛИ - лазерный источник), АК1 – аксион с углом конусности γ_1 , АК2 – аксион с углом конусности γ_2 , Д – диафрагма, БП – бесселев пучок, **д** – размер щели, **ИП** – игольчатый пучок, **б)** Схема АО взаимодействия БСП и УЗ волны (ПП – пьезопреобразователь, ПГ – поглотитель ультразвука, φ_1 и φ_2 – угол падения и дифракции соответственно)

Рассмотрим геометрию АО взаимодействия (рисунок 1), для которой УЗ волна распространяется в кристалле парателлурида под малым углом δ к оси X и занимает пространство между плоскостями $z = 0$ и $z = l$. Ось падающего ИП расположена в плоскости XZ под углом φ_1 к фронту УЗ волны. Для рассматриваемой геометрии АО взаимодействия следует положить: $\varphi_1 = \varphi_2 = \arcsin(\lambda_0 f / 2n\upsilon)$, где λ_0 – длина световой волны в вакууме, $n = (n_o + n_e)/2$ – средний показатель преломления кристалла (n_o , n_e – обычновенный и необыкновенный показатели преломления кристалла), υ – фазовая скорость УЗ волны.

Теоретические результаты и обсуждение. В рамках двумерной теории связанных волн система связанных дифференциальных уравнений для комплексных амплитуд дифрагированных волн $A_0(r), A_1(\tau)$ имеет вид [5]:

$$\frac{\partial A_0}{\partial \tau} + i\chi A_1 = 0, \quad \frac{\partial A_1}{\partial r} + i\chi A_0 = 0, \quad (1)$$

где коэффициент связи дифрагированных волн χ выражается через свертки тензора диэлектрической проницаемости $\Delta\epsilon_{ij} = -\epsilon_{ik}\epsilon_{lj}p_{klmn}U_{mp}$ (ϵ_{ij}, U_{mp} – компоненты тензора диэлектрической проницаемости и тензора УЗ деформации, p_{klmn} – компоненты тензора фотоупругости) с векторами поляризации \vec{e}_0, \vec{e}_1 дифрагированных волн нулевого «0» и первого «1» порядка, то есть; $\chi = k^2(\vec{e}_0 \Delta \vec{e}_2)$, $\tau = z \sin \varphi - x \cos \varphi$, $r = z \sin \varphi + x \cos \varphi$; $k = 2\pi n / \lambda_0$. Если искать решение системы уравнений (1) методом Римана с использованием граничных условий: $A_0(z=0) = A_{i0}$, $A_1(z=0) = 0$, то общее решение можно представить в виде:

$$A_0(r) = A_{i0}(r) - \frac{1}{2} \nu \int_{-1}^{+1} A_i[r - l(1-q)\sin \varphi] \frac{J_1(\nu \sqrt{1-q^2})}{\sqrt{1-q^2}} dq, \quad (2)$$

$$A_1(\tau) = -i \frac{1}{2} \nu \int_{-1}^{+1} A_i[l(1-q)\sin \varphi - \tau] J_0(\nu \sqrt{1-q^2}) dq, \quad (3)$$

где $\nu = \chi l / kn^2 \cos \varphi$ – индекс модуляции УЗ волной; $J_0(x)$, $J_1(x)$ – функции Бесселя первого рода, соответственно нулевого и первого порядка. При этом индекс модуляции выражается через коэффициент акустооптического качества M_2 : $\nu = \frac{2\pi}{\lambda_0 \cos \varphi} \sqrt{\frac{M_2 P_a l}{2h}}$,

где P_a – мощность ультразвука, h – ширина пьезопреобразователя.

Выражения (2), (3) позволяют рассчитать амплитудное распределение дифрагированного ИП нулевого и первого порядка для любого уровня акустической мощности и широкого класса падающих световых пучков. Эффективность АО дифракции (η) определяется соотношением

$$\eta = \frac{\int_{-\tau_1}^{+\tau_1} |A_l(\tau)|^2 d\tau}{\int_{-r_1}^{+r_1} |A_0(r)|^2 dr + \int_{-\tau_1}^{+\tau_1} |A_l(\tau)|^2 d\tau}. \quad (4)$$

Численные расчеты проводились для АО дифракции излучения с длиной волны $\lambda_0=532$ нм на медленной сдвиговой УЗ волне, распространяющейся под малым углом $\delta \ll 1$ к оси [110] одноосного гиротропного кристалла парателлурита (TeO_2). Полагалось, что коэффициент АО качества для циркулярно-поляризованной падающего волнового пучка равен [7]: $M_2=793 \cdot 10^{-18} \text{с}^3/\text{г}$. В соответствии со схемой, представленной на рисунке 1а, бесселев световой пучок нулевого порядка на выходе второго аксиона имеет вид

$$A_i(r) = A_{ni} J_0(qr), \quad (5)$$

где $q = (2\pi/\lambda) \sin \Delta\gamma$, причем $\lambda = \lambda_0/n$; полагается, что относительное изменение угла конусности системы из двух аксионов составляет $\Delta\gamma/\gamma = 10^{-2}$, где $\Delta\gamma = \gamma_2 - \gamma_1$. Пределы интегрирования в выражении (4) находились из условия достижения первого нуля функции Бесселя (5), то есть $qr_1 = 2.4$, тогда $r_1 = 1.2\lambda/\pi \sin(\Delta\gamma)$. При интегрировании в (4) полагалось, что $r_1 = \tau_1$. Как следует из рисунка 2а, диаметр диафрагмы $d = 2r_1$, причем величина $r_1 \sim 1$ мм. Для эффективной АО дифракции ИП необходимо, чтобы выполнялось соотношение: $\Delta\gamma \leq \lambda f / 2v$ (f – центральная частота источника УЗ волны, v – фазовая скорость УЗ волны), то есть угловая расходимость светового пучка должна быть меньше, чем угловая ширина брэгговского синхронизма [8].

На рисунке 2 представлены амплитудные пространственные распределения бесселевого светового пучка.

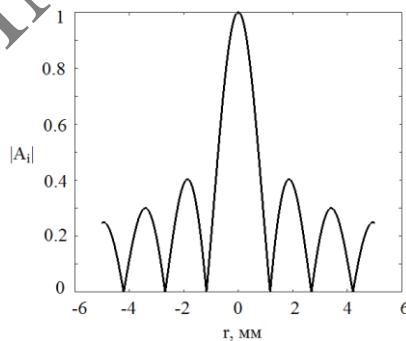


Рисунок 2 – Зависимость амплитуды (A_i) бесселевого светового пучка от поперечной координаты r ($\Delta\gamma = 0,01^\circ$, $\lambda_0=532$ нм)

На рисунке 3 для ИП представлена зависимость дифракционной эффективности η от мощности ультразвука P_a , рассчитанная по формуле (4), при различных значениях длины АО взаимодействия l .

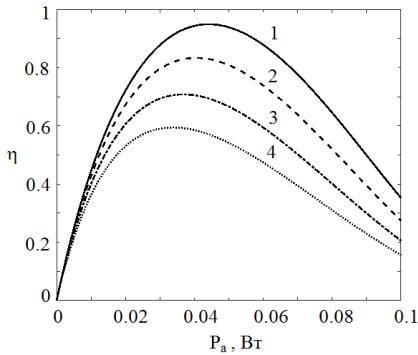


Рисунок 3 – Зависимость эффективности дифракции ИП η от мощности ультразвуковой волны P_a при различных длинах АО взаимодействия l : 1-5, 2-10, 3-15, 4-20 мм (кристиалл TeO_2 , $\lambda_0=532$ нм, $M_2=793 \cdot 10^{-18} \text{с}^3/\text{г}$, $h=4$ мм, $w=1$ мм, $\phi=1^\circ$, $\Delta\gamma=1^\circ$)

Максимальное значение дифракционной эффективность $\eta=95\%$ достигает, например, при $l=1$ мм для мощности УЗ $P_a=0,043$ Вт. При увеличении длины АО взаимодействия величина мощности УЗ, при которой достигается максимальная эффективность дифракции смещается в сторону меньших УЗ мощностей.

Зависимость эффективности дифракции η ИП от мощности ультразвука P_a при различных $\Delta\gamma=\gamma_2-\gamma_1$ представлена на рисунке 4.

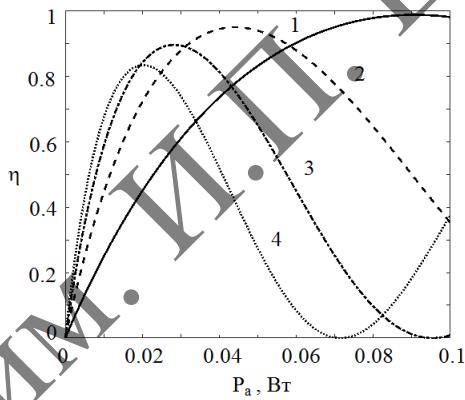


Рисунок 4 – Зависимость эффективности дифракции ИП η от мощности ультразвуковой волны P_a при различных углах $\Delta\gamma$: 1- $0,01^\circ$, 2- $0,02^\circ$, 3- $0,03^\circ$, 4- $0,04^\circ$ (кристиалл TeO_2 , $\lambda_0=532$ нм, $M_2=793 \cdot 10^{-18} \text{с}^3/\text{г}$, $h=4$ мм, $l=10$ мм, $\phi=1^\circ$)

Максимальное значение дифракционной эффективность $\eta=98\%$ достигает, например, при $\Delta\gamma=0,01^\circ$ для мощности УЗ $P_a=0,093$ Вт. При увеличении угла конусности $\Delta\gamma$ величина мощности УЗ, при которой достигается максимальная эффективность дифракции смещается в сторону меньших УЗ мощностей. При этом, однако, максимальное значение эффективности дифракции снижается до 82% при $\Delta\gamma=0,04^\circ$.

Заключение. В работе теоретически исследована брэгговская дифракция циркулярно поляризованных игольчатых световых пучков на медленной сдвиговой ультразвуковой волне в кристаллах парателлурита. Показано, что при изменении угла конусности, падающего на диафрагму бесселевого светового пучка, в условиях выделения центральной части пучка достигается высокая эффективность дифракции ~82–98% для сформированного падающего на акустооптическую ячейку ИП. Следует

отметить, что аналогичные особенности АО взаимодействия могут наблюдаться в кристаллах теллура в инфракрасном диапазоне спектра [6].

Список использованных источников

1. Linfoot, E.H. Diffraction Images in Systems with an Annular Aperture / E.H. Linfoot, E. Wolf // Proceedings of the Physical Society. Section B. – 1953. – V. 66, № 2. – P. 145.
2. Wolford, W.T. Use of Annular Aperture to Increase Focal Depth / W.T. Wolford // Journal of the Optical Society of America. – 1960. – V. 50, № 8. – PP. 749–753.
3. Формирование бесселевых световых пучков на больших расстояниях из кольцевых полей / Н.А. Хило, П.И. Ропот, П.К. Петров, В.Н. Белый // Известия НАН Беларуси. Сер. физ.-мат. наук. – 2022. – Т. 58, № 1. – С. 90–100.
4. Grunwald, R. Needle beams: a review / R. Grunwald, M. Bock // Advances in Physics: X. – 2020. – Vol. 8, № 1. 1736950 <https://doi.org/10.1080/23746149.2020.1736950>.
5. Белый, В.Н. Дифракция световых пучков на затухающих ультразвуковых волнах в оптически изотропных средах / В.Н. Белый, И.Г. Войтенко, Г.В. Кулак // Журнал прикладной спектроскопии. – 1992. – Т. 56, № 5–6. – С. 831–836.
6. Исследование акустооптических характеристик кристаллов теллура в режиме анизотропной дифракции / В.И Балакший., В.Б. Волошинов, Г.А. Князев, Л.А. Кулакова // ЖТФ. – 2008. – Т. 78, В. 10. – С. 87–95.
7. Блистанов, А.А. Кристаллы квантовой и нелинейной оптики / А.А. Блистанов. – М. : МИСИС, 2000. – 431 с.
8. Балакший, В.И. Физические основы акустооптики / В.И. Балакший, В.И. Парыгин, Л.Е. Чирков. – М. : Радио и связь, 1985. – 279 с.

УДК 535.326

Г.В. Кулак, Т.В. Николаенко, Л.А. Тозик

Мозырский государственный педагогический университет имени И.П. Шамякина

РАСПРОСТРАНЕНИЕ СВЕТОВЫХ ВОЛН В ТРЕХМЕРНЫХ ФОТОННЫХ КРИСТАЛЛАХ S_i/S_iO_2

Развита теория распространения световых волн в трехмерных фотонных кристаллах методом преобразования Фурье в аналитической форме. Установлены дисперсионные зависимости и комплексные векторные амплитуды блоховских волн трехмерного фотонного кристалла. Показано, что в кристаллической структуре кристалла S_i/S_iO_2 плотность потока световой мощности для s-поляризованной волны в 2,5 раза больше, чем для p-поляризованной волны.

Ключевые слова: трехмерный фотонный кристалл, дисперсионная зависимость, функция Блоха, плотность потока мощности.

Введение. Наличие в веществе периодической структуры (фотонный кристалл (ФК)), имеющей период, близкий к длине электромагнитной волны, приводит к формированию в системе разрешенных для распространения волн зон и запрещенных фотонных зон [1].

На основе одномерных фотонных кристаллов (см. [2]) были созданы новые оптические устройства: высокодобротные резонаторы, спектральные фильтры, селективные зеркала, нелинейные оптические элементы.

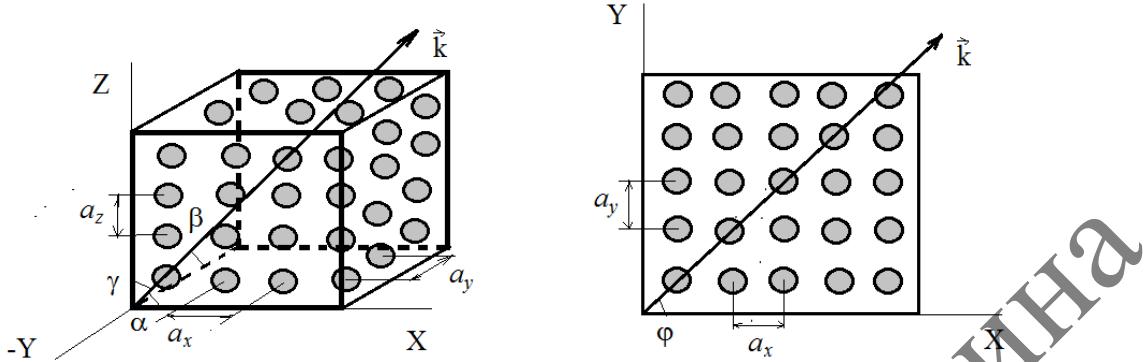


Рисунок 1 – Схема распространения света в трехмерном (а) и двумерном (б) ФК (ФК – кристалл, α, β, γ – направляющие углы волнового вектора световой волны относительно осей X, Y, Z ; φ – угол распространения волны в плоскости XY ; a_x, a_y, a_z – постоянные решетки вдоль осей X, Y, Z соответственно)

В настоящее время особый интерес представляют трехмерные ФК, построенные из глобул одинакового диаметра. В работе [3] установлено, что картина дифракции света на искусственных опалах представляет собой ряд интенсивных максимумов, число и угловое положение которых зависит от длины волны и взаимной ориентации падающего светового пучка и кристаллографических плоскостей образца.

На рисунке 1 представлен трехмерный фотонный кристалл с квадратной решеткой [3].

Теоретические результаты и обсуждение. Из уравнений Максвелла и материальных уравнений для ФК следует волновое уравнение для напряженности магнитного поля $\vec{H} \sim \exp(-i\omega t)$ [2, 3]:

$$\text{rot}(\hat{\epsilon}^{-1}(\vec{r}, t) \text{rot} \vec{H}(\vec{r}, t)) = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{H}(\vec{r}, t)}{\partial t^2}, \quad (1)$$

где

$$\hat{\epsilon}^{-1}(\vec{r}, t) = \hat{\epsilon}^{-1}(\vec{r}), \quad (2)$$

причем $\hat{\epsilon}^{-1}(\vec{r})$ – обратный тензор диэлектрической проницаемости ФК. Решение уравнения (1) ищем в виде суммы волн Блоха с различными векторами обратной решетки

$$\vec{H}(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{G}} \vec{M}(\vec{G}) e^{i(\vec{k} + \vec{G}) \cdot \vec{r}}, \quad (3)$$

где $\vec{M}(\vec{G})$ – амплитуды спектральных составляющих блоховских волн ФК. Полагалось, что вектор обратной решетки ФК имеет вид: $\vec{G} = m_x \vec{b}_x + m_y \vec{b}_y + m_z \vec{b}_z$ ($m_{x,y,z} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$), где $\vec{b}_x = (2\pi/a_x) \vec{e}_x$, $\vec{b}_y = (2\pi/a_y) \vec{e}_y$, $\vec{b}_z = (2\pi/a_z) \vec{e}_z$, причем $a_{x,y,z}$ – период решетки вдоль осей X, Y, Z, соответственно, $\vec{e}_{x,y,z}$ – единичные векторы вдоль осей X, Y, Z.

Тензор диэлектрической непроницаемости ФК разложим по векторам обратной решетки \vec{G} следующим образом:

$$\varepsilon_{kl}^{-1}(\vec{r}) = \sum_G \zeta_{kl}(\vec{G}) e^{i\vec{G}\vec{r}}, \quad (4)$$

где

$$\zeta_{kl}(\vec{G}) = \frac{1}{V} \int_V \varepsilon_{kl}^{-1} e^{i\vec{G}\vec{r}} d^3\vec{r}, \quad (5)$$

причем V – объем элементарной ячейки ФК; $k, l = 1 \div 3$. Полагаем в дальнейшем, что для трехмерного ФК тензор ζ_{kl} является 3×3 -матрицей.

Подставив выражения (3)-(5) в (1), получим следующее векторно-тензорное равенство:

$$\sum_G [(\vec{k} + \vec{G}'), \hat{\zeta}(\vec{G}')][(\vec{k} + \vec{G}), \vec{M}] e^{i(\vec{k} + \vec{G}')\vec{r}} = \frac{\omega^2}{c^2} \vec{M}(\vec{G}) e^{i(\vec{k} + \vec{G})\vec{r}}. \quad (6)$$

Уравнение (8) является основным для расчета дисперсионного уравнения $\omega = \omega(k)$ и компонент вектора $\vec{M} = (M_x, M_y, M_z)^\tau$, где τ – операция транспонирования.

Выполнив алгебраические преобразования на основании выражения (6) с учетом соотношения для 3×3 -матрицы ζ_{kl} получим систему линейных однородных уравнений вида:

$$\begin{aligned} b_{11}M_x + b_{12}M_y + b_{13}M_z &= 0, \\ b_{21}M_x + b_{22}M_y + b_{23}M_z &= 0, \\ b_{31}M_x + b_{32}M_y + b_{33}M_z &= 0, \end{aligned} \quad (7)$$

где

$$\begin{aligned} b_{11} &= \sum_G \zeta_{12}(k_z + b_z m_z)(k_y + b_y m_y) - \sum_G \zeta_{13}(k_y + b_y m_y)(k_y + b_y m_y) - \\ &\quad - \sum_G \zeta_{21}(k_z + b_z m_z)(k_z + b_z m_z) + \sum_G \zeta_{23}(k_y + b_y m_y)(k_z + b_z m_z) - \frac{\omega^2}{c^2}, \\ b_{12} &= -\sum_G \zeta_{11}(k_z + b_z m_z)(k_y + b_y m_y) + \sum_G \zeta_{13}(k_x + b_x m_x)(k_y + b_y m_y) + \\ &\quad + \sum_G \zeta_{21}(k_z + b_z m_z)(k_z + b_z m_z) - \sum_G \zeta_{23}(k_x + b_x m_x)(k_z + b_z m_z), \\ b_{13} &= \sum_G \zeta_{11}(k_y + b_y m_y)(k_y + b_y m_y) - \sum_G \zeta_{12}(k_x + b_x m_x)(k_y + b_y m_y) - \\ &\quad - \sum_G \zeta_{21}(k_y + b_y m_y)(k_z + b_z m_z) + \sum_G \zeta_{22}(k_x + b_x m_x)(k_z + b_z m_z), \\ b_{21} &= \sum_G \zeta_{12}(k_z + b_z m_z)(k_z + b_z m_z) + \sum_G \zeta_{13}(k_y + b_y m_y)(k_z + b_z m_z) - \\ &\quad - \sum_G \zeta_{32}(k_z + b_z m_z)(k_x + b_x m_x) - \sum_G \zeta_{33}(k_y + b_y m_y)(k_x + b_x m_x), \\ b_{22} &= -\sum_G \zeta_{11}(k_z + b_z m_z)(k_z + b_z m_z) + \sum_G \zeta_{13}(k_x + b_x m_x)(k_z + b_z m_z) + \\ &\quad + \sum_G \zeta_{31}(k_z + b_z m_z)(k_x + b_x m_x) - \sum_G \zeta_{33}(k_x + b_x m_x)(k_x + b_x m_x) - \frac{\omega^2}{c^2}, \\ b_{23} &= \sum_G \zeta_{11}(k_z + b_z m_z)(k_y + b_y m_y) - \sum_G \zeta_{12}(k_x + b_x m_x)(k_z + b_z m_z) - \\ &\quad - \sum_G \zeta_{31}(k_y + b_y m_y)(k_x + b_x m_x) + \sum_G \zeta_{32}(k_x + b_x m_x)(k_x + b_x m_x), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
b_{31} &= \sum_G \zeta_{22}(k_z + b_z m_z)(k_x + b_x m_x) - \sum_G \zeta_{23}(k_x + b_x m_x)(k_y + b_y m_y) - \\
&\quad - \sum_G \zeta_{12}(k_y + b_y m_y)(k_z + b_z m_z) + \sum_G \zeta_{13}(k_y + b_y m_y)(k_y + b_y m_y), \\
b_{32} &= -\sum_G \zeta_{21}(k_z + b_z m_z)(k_x + b_x m_x) + \sum_G \zeta_{23}(k_x + b_x m_x)(k_x + b_x m_x) + \\
&\quad + \sum_G \zeta_{11}(k_z + b_z m_z)(k_y + b_y m_y) - \sum_G \zeta_{13}(k_x + b_x m_x)(k_y + b_y m_y), \\
b_{33} &= \sum_G \zeta_{21}(k_y + b_y m_y)(k_x + b_x m_x) - \sum_G \zeta_{22}(k_x + b_x m_x)(k_x + b_x m_x) - \\
&\quad - \sum_G \zeta_{11}(k_y + b_y m_y)(k_y + b_y m_y) + \sum_G \zeta_{12}(k_x + b_x m_x)(k_y + b_y m_y) - \frac{\omega^2}{c^2}.
\end{aligned} \tag{8}$$

Здесь следует полагать, что $k_x = k \cos \alpha, k_y = k \cos \beta, k_z = k \cos \gamma$, причем α, β, γ – направляющие углы волнового вектора волны Блоха относительно соответственно осей X, Y, Z . Суммирование по G в выражениях (8) означает в соответствие с определением вектора обратной решетки ФК суммирование по $m_x, m_y, m_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Для первой зоны Бриллюэна следует полагать $m_x, m_y, m_z = 0, \pm 1$ и для второй зоны $m_x, m_y, m_z = 0, \pm 1, \pm 2$.

Для нетривиального решения системы (7) необходимо чтобы ее определитель равнялся нулю, то есть

$$\begin{vmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} \end{vmatrix} = 0 \tag{9}$$

или

$$\begin{aligned}
&(b_{11}b_{22}b_{33} + b_{12}b_{23}b_{31} + b_{21}b_{13}b_{32}) - \\
&-(b_{13}b_{22}b_{31} + b_{12}b_{21}b_{33} + b_{32}b_{23}b_{11}) = 0.
\end{aligned} \tag{10}$$

Выражение (10) является дисперсионным уравнением для волн Блоха трехмерного фотонного кристалла.

Положив $M_z = 1$, из системы уравнений (7) получаем следующие выражения для M_x и M_y :

$$M_x = \frac{(b_{23}b_{12} - b_{13}b_{22})}{(b_{11}b_{22} - b_{12}b_{22})}, \quad M_y = \frac{(b_{13}b_{21} - b_{11}b_{23})}{(b_{11}b_{22} - b_{12}b_{22})}. \tag{11}$$

Из выражения (3) получаем следующее выражение для напряженности магнитного поля $\vec{H}(x, y, z) = \vec{U}(x, y, z) \exp(i\vec{k}\vec{r})$, где вектор-функция Блоха трехмерного ФК имеет вид:

для первой зоны Бриллюэна

$$\vec{U}(x, y, z) = \left\{ \vec{e}_z + \vec{e}_x M_x \cos \left[2\pi \left(\frac{x}{a_x} + \frac{y}{a_y} + \frac{z}{a_z} \right) \right] + \vec{e}_y M_y \cos \left[2\pi \left(\frac{x}{a_x} + \frac{y}{a_y} + \frac{z}{a_z} \right) \right] \right\}, \tag{12a}$$

для второй зоны Бриллюэна

$$\begin{aligned}
\vec{U}(x, y, z) &= \left\{ \vec{e}_z + \vec{e}_x M_x \cos \left[2\pi \left(\frac{x}{a_x} + \frac{y}{a_y} + \frac{z}{a_z} \right) \right] + \vec{e}_y M_y \cos \left[2\pi \left(\frac{x}{a_x} + \frac{y}{a_y} + \frac{z}{a_z} \right) \right] \right\} + \\
&+ \left\{ \vec{e}_x M_x \cos \left[4\pi \left(\frac{x}{a_x} + \frac{y}{a_y} + \frac{z}{a_z} \right) \right] + \vec{e}_y M_y \cos \left[4\pi \left(\frac{x}{a_x} + \frac{y}{a_y} + \frac{z}{a_z} \right) \right] \right\}.
\end{aligned} \tag{12б}$$

Вектор Пойтинга волны Блоха находим из соотношения: $\vec{S} = \hat{\vec{k}} / \vec{U}^2 / 2\bar{n}c$, где $\hat{\vec{k}}$ – единичный вектор в направлении распространения световой волны, \bar{n} – средний показатель преломления ФК. При расчетах полагалось, что компоненты тензора диэлектрической непроницаемости ФК даются соотношениями:

$$\zeta_{kl} = \frac{f}{\varepsilon_{kl}^1} + \frac{1-f}{\varepsilon_{kl}^2}, \quad (13)$$

где ε_{kl}^1 – компонента тензора диэлектрической проницаемости включения, ε_{kl}^2 – компонента тензора диэлектрической проницаемости матрицы. Коэффициент заполнения ФК $f = V_1/V$, где V – объем элементарной ячейки ФК, V_1 – объем занимаемый включением в элементарной ячейке.

При распространении света в плоскости XY в выражениях (12) следует положить $z=0$. В этом случае имеют место равные нулю компоненты тензора диэлектрической непроницаемости ФК: $\zeta_{31}=\zeta_{32}=\zeta_{13}=\zeta_{23}=0$. При этом дисперсионное уравнение (9) для s-поляризованных волн принимает следующий вид:

$$\sum_G [(k_x + b_x m_x)(k_y + b_y m_y)\zeta_{12} - (k_x + b_x m_x)(k_x + b_x m_x)\zeta_{22} - (k_y + b_y m_y)(k_y + b_y m_y)\zeta_{11} + (k_y + b_y m_y)(k_x + b_x m_x)\zeta_{12}]^2 = k_0^4, \quad (14a)$$

и для p-поляризованных волн

$$\sum_G [(k_x + b_x m_x)(k_y + b_y m_y)(k_y + b_y m_y)(k_x + b_x m_x)\zeta_{33}] + \sum_G [k_0^2 - (k_x + b_x m_x)(k_x + b_x m_x)\zeta_{33}] \cdot [(k_y + b_y m_y)(k_y + b_y m_y)\zeta_{33} - k_0^2] = 0, \quad (14b)$$

где $k_x = k \cos \varphi$, $k_y = k \sin \varphi$.

На рисунке 2 представлена зависимость квадрата функции Блоха $|\vec{U}_n(x_n, y_n)|^2$ для s-поляризованной волны, распространяющейся в плоскости XY от нормированной координаты $x_n = x/a_x$ и $y_n = y/a_y$.

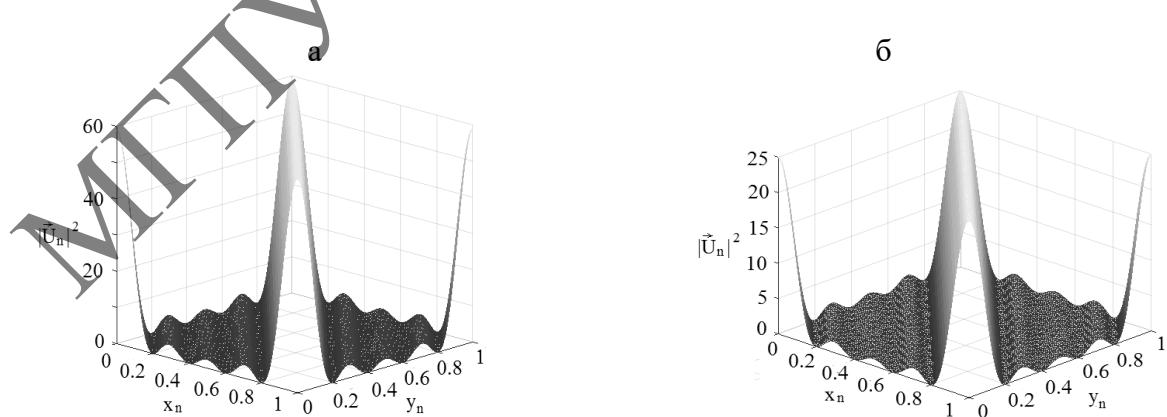


Рисунок 2 – Зависимость квадрата нормированной функции Блоха $|\vec{U}_n(x_n, y_n)|^2$ от нормированной координаты x_n и y_n (фотонный кристалл Si/SiO₂, $a_x=a_y=120$ нм, $\lambda=1,5$ мкм, $\varphi=1^0$, $k_n=2$; s-поляризация (а), p-поляризация (б))

Из рисунка 2 следует, что функция Блоха имеет осциллирующий характер, достигая максимального значения на границах зоны Бриллюэна. При этом максимум квадрата амплитуды функции Блоха для р-поляризованной волны в 2,5 раза меньше, чем для с-поляризованной волны.

Заключение. Рассмотрена теоретическая модель распространения световых волн в трехмерных фотонно-кристаллических структурах типа Si/SiO₂. Получены аналитические выражения для дисперсионных зависимостей и блоховских с- и р-поляризованных волн кристалла. Показано, что плотность потока световой мощности для с-поляризованной волны в 2,5 раза больше, чем для р-поляризованной волны.

Список использованных источников

1. Горелик, В.С. Оптика глобулярных фотонных кристаллов / В.С. Горелик // Квант. электрон. – 2007. – Т. 37, № 5. – С. 409–432.
2. Нурлигареев, Д.Х. Распространение света в одномерном фотонном кристалле: анализ методом функций Флоке-Блоха / Д.Х. Нурлигареев, В.А. Сычугов // Квант. электрон. – 2008. – Т. 38, № 5. – С. 452–461.
3. Брэгговская дифракция света в искусственных опалах / А.В. Барышев, В.А. Каплянский, В.А. Кособукин [и др.] // ФТТ. – 2003. – Т. 45, В. 3. – С. 434–445.

УДК 535.317; 534.535

С.Н. Курилкина, В.Н. Белый, Н.А. Хило

Институт физики имени Б.И. Степанова НАН Беларуси

ОПТИЧЕСКИЕ И АКУСТИЧЕСКИЕ СОВЕРШЕННЫЕ ВИХРЕВЫЕ ПУЧКИ

Показана невозможность формирования с помощью линзы оптических и акустических совершенных вихревых пучков, фурье-образ которых не зависит от топологического заряда, на основе бессель-гауссовых (БГП), практически реализуемых пучков. Найдена зависимость положения максимума интенсивности фурье-образа БГП от его параметров (угла конусности и размера перетяжки). Установлено, что смещение максимума интенсивности фурье-образа бессель-гауссова пучка от положения кольца, соответствующего фурье-образу бесселева пучка, возрастает с уменьшением угла конусности.

Ключевые слова: вихревой пучок, совершенный вихревой пучок, бессель-гауссов пучок, линза, фокальная плоскость линзы.

Введение. В настоящее время внимание многих исследователей привлекают вихревые пучки – световые и акустические поля, обладающие орбитальным угловым моментом, описываемым фазовым множителем $\exp(it\phi)$, где t – топологический заряд. К ним, в частности, относятся нашедшие широкое применение бесселевые световые (БСП) и акустические (БАП) вихревые пучки [1–3]. Известно, что их поперечное распределение интенсивности характеризуется осевым минимумом, ширина которого оказывается зависящей от величины t .

Предложены совершенные оптические вихревые пучки (СОВП), для которых ширина осевого минимума не зависит от топологического заряда [4]. СОВП

перспективны для манипуляции микрочастицами в оптической связи. По аналогии можно предположить возможность формирования совершенных акустических вихревых пучков (САВП).

Известно, что при падении на линзу бесселева пучка в ее фокальной плоскости формируется распределение интенсивности в виде бесконечно тонкого кольца с диаметром, не зависящим от m , что обуславливает возможность получения совершенных вортексов из бесселевых пучков с помощью линзы. Однако, как известно, бесселев пучок, обладающий бесконечной энергией, является лишь аппроксимацией практически реализуемого бессель-гауссова пучка, в связи с чем представляет интерес исследование возможности использования линзового метода для практической реализации совершенных оптических и акустических вихревых пучков. Данная проблема рассматривается в настоящем сообщении.

Рассмотрим бессель-гауссов пучок (БГП) с амплитудой

$$E_0(r, \phi) = \alpha_0 J_m(k_r r) \exp\left(-\frac{r^2}{w_0^2}\right) \exp im\phi, \quad (1)$$

падающий на линзу с фокусным расстоянием f . В выражении (1) для светового пучка E – напряженность электрического поля, для акустического – упругое смещение продольной акустической волны, $J_m(x)$ – функция Бесселя m -го порядка, $k_r = k \sin \gamma$ – поперечная компонента волнового вектора с волновым числом k , γ – половина угла раствора конуса волновых векторов, образующих БГП, w_0 – радиус перетяжки гауссова пучка, α_0 – константа. Комплексная амплитуда на выходе линзы определяется соотношением

$$E_1(r, \phi) = E_0(r, \phi) \exp\left(-ik \frac{r^2}{2f}\right). \quad (2)$$

Далее пучок (2) распространяется в соответствии с законами дифракции, и для его амплитуды в фокальной плоскости линзы может быть использован дифракционный интеграл Френеля. В случае, если до и после линзы пучок распространяется в одинаковой среде, амплитуда на расстоянии z от линзы представима в виде:

$$E(r, \phi) = -\frac{i}{\lambda f} \exp\left[ik\left(z + \frac{r^2}{2f}\right)\right] \int_0^{2\pi} \int_0^\infty E_0(r', \phi') \exp\left[\frac{ik}{f}(rr' \cos(\phi - \phi') + im\phi')\right] r' dr' d\phi'. \quad (3)$$

Здесь интеграл описывает фурье-образ бессель-гауссова пучка, падающего на линзу. Для неограниченного пучка из (3) следует:

$$E(r, \phi) = i^{m-1} \frac{w_0}{T \sqrt{W}} \exp\left[ik\left(z + \frac{r^2}{2f}\right)\right] \exp\left(-\frac{r^2 + R^2}{T^2}\right) I_m\left(\frac{2Rr}{T^2}\right) \exp(im\phi), \quad (4)$$

Здесь $I_m(x)$ – модифицированная функция Бесселя, $R = k_r f / k = f \sin \gamma$ – радиус кольцевого спектра Фурье (при малых углах $\sin \gamma \approx \gamma$ и $R = f\gamma$), $T = 2f/(kw_0)$ – ширина кольцевого поля при $m=0$, а мощность пучка (1)

$$W = 2\pi \int_0^\infty J_m^2(qr) \exp\left(-\frac{2r^2}{w_0^2}\right) r dr. \quad (5)$$

Как следует из (4) с использованием [5], распределение интенсивности БГП в фокальной плоскости линзы задается выражением:

$$I(\bar{r}) = \frac{w_0^2}{WT^2} \exp[-\eta] \exp[-\eta \bar{r}^2] I_m^2(\eta \bar{r}). \quad (6)$$

Здесь параметр $\eta = 2R^2 / T^2$ указывает соотношение радиуса кольца R для бесселева пучка и его ширины T , а $\bar{r} = r/R$ - расположение точки наблюдения относительно радиуса кольцевого спектра Фурье.

На рисунке 1 представлены результаты расчета смещений максимумов распределения интенсивности в фокальной плоскости линзы относительно кольцевого поля с радиусом R ($\Delta r_{max} / R = (r_{max} - R) / R$) – фурье-образа бесселева пучка (рисунок 1а), а также относительно максимума фурье-образа бессель-гауссова пучка с топологическим зарядом $m=0$ ($\Delta r_{BG,max} / R = (r_{max}(m \neq 0) - r_{max}(m = 0)) / R$) (рисунок 1б) для различных параметров η и m . Кривая 1 на рисунке 1 соответствует случаю $\eta=47.51$. Это реализуется для световой волны при параметрах: длина волны 632.8 нм (Не-Не лазер); $w_0=0.25$ мм; $\gamma=0.225^\circ$ (достигается, например, при использовании аксиона с углом при основании 1° и показателем преломления материала аксиона 1.45 (плавленый кварц)). Для акустической волны при $\eta=47.51$ имеем: частота звука 2 МГц, $w_0=3$ см, $\gamma=0.3^\circ$ (подобные параметры схемы принципиально достижимы для акустических формирователей бесселевых акустических пучков).

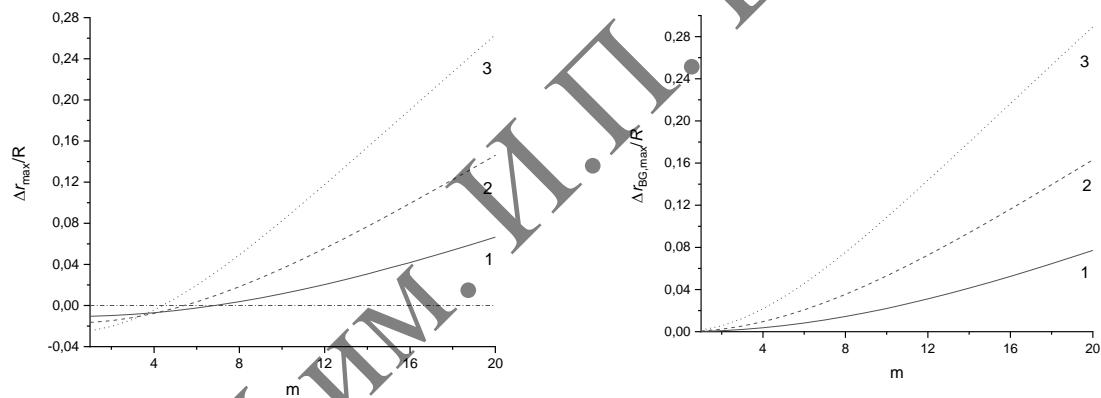


Рисунок 1 – Зависимость смещения максимума интенсивности кольцевого пучка относительно радиуса кольцевого фурье-спектра совершенного вортекса $\Delta r_{max} / R$ (а), а также относительно положения максимума интенсивности фурье-образа невортексного БГП $\Delta r_{BG,max} / R$ (б) от величины топологического заряда m . Здесь $\eta=47.51$ (1), $\eta=30$ (2), $\eta=20$ (3)

Для кривых 2 и 3 на рисунке 2 соответственно $\eta=30$ и $\eta=20$, что имеет место при $\gamma=0.179^\circ$ для оптических пучков ($\gamma=0.12^\circ$ для акустических) (кривая 2) и $\gamma=0.146^\circ$ для оптических пучков ($\gamma=0.05^\circ$ для акустических) (кривая 3) при прочих параметрах, как и для кривой 1.

Как видно из рисунка 1а, положение максимума интенсивности оказывается зависящим от m : с увеличением топологического заряда r_{max} удаляется от радиуса R кольцевого спектра Фурье. Однако, как следует из рисунка 1а, r_{max} становится меньше R ($\bar{r}_{max} < 1$) при значениях m , меньших некоторого граничного значения m_b ($m < m_b$), причем величина m_b возрастает с увеличением параметра η . Так, например, для случая БГП с

целым значением топологического заряда при $\eta=47.51$ имеем $m_b=7$, при $\eta=30$ получаем $m_b=6$, в случае же $\eta=20$ имеем $m_b=6$.

Из рисунка 1б видно, что расстояние от центра до максимума интенсивности фурье-образа бессель-гауссова вихревого пучка $r_{\max}(m \neq 0)$ оказывается больше такового для случая невихревого БГП $r_{\max}(m = 0)$, при этом величина смещения $\Delta r_{BG,\max}$ оказывается зависящей от топологического заряда и параметра η .

На рисунке 2 зависимость положений максимумов интенсивности фурье-спектра от топологического заряда проиллюстрирована для случая оптических вихревых пучков путем расчета распределений интенсивности в соответствии с соотношением (6).

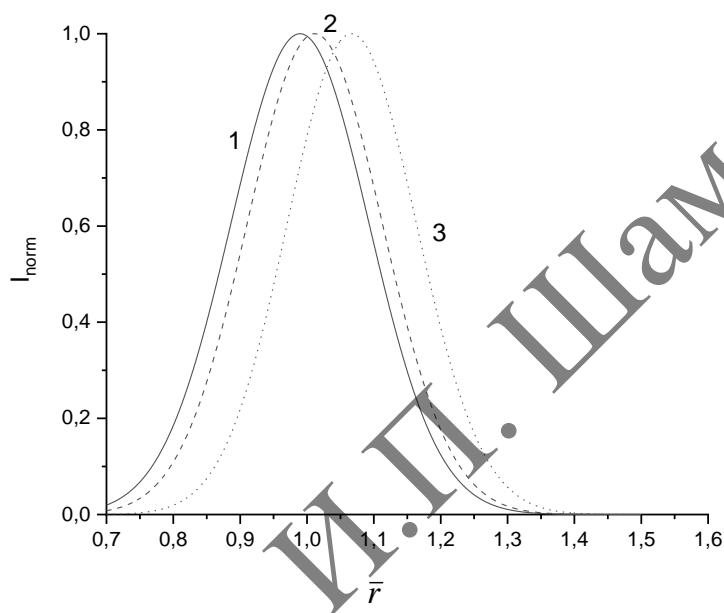


Рисунок 2 – Распределение интенсивности фурье-образа БГП в фокальной плоскости линзы, нормированной на ее максимальное значение, в зависимости от параметра \bar{r} при различных значениях топологического заряда; 1 – $m=1$, 2 – $m=10$, 3 – $m=20$. При расчете полагалось $w_0 = 0.25$ мм, $R = 3.927$ мм, $T = 0.806$ мм ($\eta = 47.51$)

Расчет показывает, что при уменьшении параметра η , что достигается путем уменьшения угла конусности γ , либо размера перетяжки w_0 , расстояние между максимумами, соответствующими различным значениям топологического заряда, увеличивается.

Таким образом, полученные результаты показывают невозможность формирования совершенных вортексов с помощью бессель-гауссовых пучков. При этом степень их «несовершенства», определяемая величиной отклонения максимума распределения интенсивности в фокальной плоскости линзы от параметра R , задающего радиус кольца фурье-образа бесселева пучка, оказывается большей для пучков с меньшим углом конуса γ и, следовательно, большей областью бездифракционности.

Список использованных источников

1. Durnin, J. Exact solutions for nondiffracting beams. I. The scalar theory / J. Durnin // Journal of the Optical Society of America A. – 1987. – Т. 4, №. 4. – С. 651–654.

2. Казак, Н. Бесселевы световые пучки: свойства и перспективы применения / Н. Казак, В. Белый, Н. Хило // Наука и инновации. – 2003. – № 7–8. – С. 9–18.
3. Generating Bessel beams with broad depth-of-field by using phase-only acoustic holograms / S. Jiménez-Gambín [et al.] // Scientific reports. – 2019. – Т. 9, № 1. – Article 20104.
4. Vaity, P. Perfect vortex beam: Fourier transformation of a Bessel beam / P. Vaity, L. Rusch // Optics letters. – 2015. – Т. 40, № 4. – Р. 597–600.
5. Прудников, А.П. Интегралы и ряды. Специальные функции / А.П. Прудников, Ю.А. Брычков, О.И. Маричев. – М. : Наука, 1983.

УДК 535.4; 53.05

А.В. Макаревич¹, В.Н. Навныко¹, С.М. Шандаров², Е.Ю. Цырулик¹

¹Мозырский государственный педагогический университет имени И.П. Шамякина

²Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники

ОСОБЕННОСТИ И ВОЗМОЖНОСТИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАНИЯ ВЫХОДНЫХ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ГОЛОГРАММ В ФОТОРЕФРАКТИВНЫХ КРИСТАЛЛАХ

Представлены результаты экспериментальных исследований зависимости дифракционной эффективности и коэффициента усиления предметной световой волны от толщины фоторефрактивного кристалла $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$. Данна теоретическая интерпретация полученных результатов на основе модели смешанных голограмм, формируемых в этом кристалле, с одновременным учетом обратного пьезоэлектрического и фотоупругого эффектов. Экспериментальные исследования реализованы на основе ранее апробированной методики изучения зависимости выходных энергетических характеристик фазовых голограмм от толщины фоторефрактивных кристаллов $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$ и $\text{Bi}_{12}\text{GeO}_{20}$.

Ключевые слова: голографическая решетка, смешанная голограмма, фоторефрактивный кристалл, дифракционная эффективность, коэффициент усиления.

Введение. Известно, что дифракционная эффективность η объемных голограмм и коэффициент усиления U предметной световой волны в фоторефрактивных кристаллах типа силленита $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$ (BSO), $\text{Bi}_{12}\text{GeO}_{20}$ (BGO) и $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$ (BTO) существенно зависят от толщины d используемых кристаллических образцов, их материальных параметров, а также от условий формирования голограмм. К таким условиям, в частности, относятся ориентация вектора голографической решетки относительно кристаллографических направлений, определяемая ориентационным углом кристалла θ , и поляризация взаимодействующих в них световых волн, задаваемая азимутом Ψ_0 (см., например [1–3]).

При этом ранее в работах, рассматривающих зависимости выходных энергетических характеристик голограмм от толщины фоторефрактивных сред, авторы чаще всего ограничивались обсуждением только результатов теоретического анализа, не сравнивая их с экспериментом (см., например, [4, 5]). Однако в работах [6–8] с использованием идеи, предложенной в [9–11], на примерах кристаллов BSO и BGO была

показана и развита возможность исследования зависимостей дифракционной эффективности η и коэффициента усиления γ не только от толщины d этих кристаллических сред, но и от их ориентационного угла θ при различных значениях азимута линейной поляризации Ψ_0 взаимодействующих в них волн. Также на основании проведенных исследований была показана необходимость обязательного учета обратного пьезоэлектрического и фотоупругого эффектов (далее сокращенно «пьезоэффект») при теоретической интерпретации экспериментальных данных, чем пренебрегалось в [9–11].

В рамках данной работы представлены результаты экспериментального изучения зависимостей $\eta(d)$ и $\gamma(d)$ с теоретической интерпретацией экспериментальных данных в соответствии с моделью, предложенной в [12], при одновременном учете пьезоэффекта и модели смешанных голограмм, формируемых в кристалле ВТО среза $(\bar{1}\bar{1}0)$.

Для изучения зависимости дифракционной эффективности голограмм от толщины кристалла ВТО использовалась методика проведения эксперимента и обработки полученных данных, описанная в [6; 7]. Угол схождения опорного и предметного световых пучков вне кристалла равнялся 50° , а отношение их интенсивностей составляло приблизительно 0,5. Ориентационный угол θ был равен 200° . Толщина кристалла составляла 7,7 мм.

Полученные экспериментальные зависимости $\eta(d)$ при $\Psi_0 = 0, 45^\circ, 90^\circ$ и 135° изображены на рисунке 1, где также представлены соответствующие теоретические кривые, построенные с учетом влияния на дифракционную эффективность смешанной голограммы пьезоэффекта (сплошная линия) и без его учёта (штриховая линия).

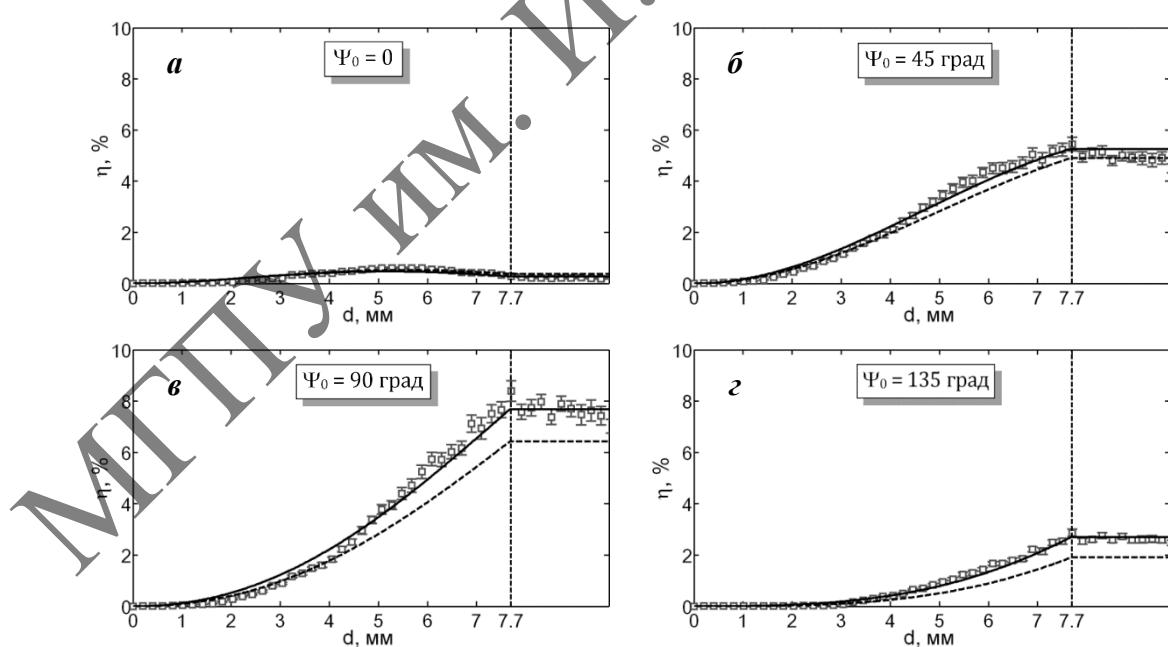


Рисунок 1 – Зависимости $\eta(d)$ смешанных голограмм в кристалле ВТО: штриховая и сплошная линии – без учёта и с учётом пьезоэффекта соответственно; \square – экспериментальные данные

При теоретическом анализе полученных результатов использованы параметры кристалла ВТО из [12]. Амплитуда напряженности поля пространственного заряда E_{SC} была определена по результатам наилучшей корреляции теории и эксперимента и составила $3,053 \text{ кВ/см}$.

Исходя из рисунков 1, б–1, г, можно сделать вывод, что теоретические зависимости $\eta(d)$, построенные в пренебрежении пьезоэффектом, существенно расходятся с экспериментальными данными. Исключением является рисунок 1, а, где это различие невелико. При этом в пренебрежении пьезоэффектом варьирование подгоночных значений E_{SC} не дает одновременной удовлетворительной корреляции теоретических зависимостей $\eta(d)$ и полученных экспериментальных данных на рисунках 1, а–1, г.

В частности, полученные при проведении эксперимента двумерные изображения распределения интенсивности восстановленного с голограммы пучка на светочувствительной матрице CCD-камеры в соответствии с методикой, описанной в [6; 7], представлены на рисунке 2. Для лучшей визуализации этих изображений их яркость и контраст увеличены на 50 единиц с использованием диспетчера рисунков Microsoft Office.

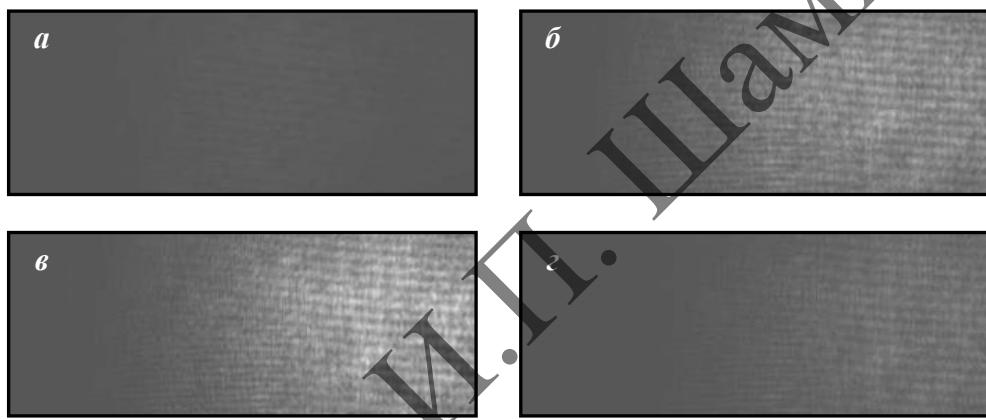


Рисунок 2 – Изображения распределения интенсивности восстановленного с голограммы пучка на светочувствительной матрице CCD-камеры: а – $\Psi_0 = 0^\circ$; б – $\Psi_0 = 45^\circ$; в – $\Psi_0 = 90^\circ$; г – $\Psi_0 = 135^\circ$

Для экспериментального изучения зависимости $\gamma(d)$ и обработки полученных данных была применена методика, описанная в [8]. Условия эксперимента были аналогичны рассмотренным выше, за исключением отношения интенсивностей световых пучков до вхождения в кристалл, которое в этом случае составляло приблизительно 0,24.

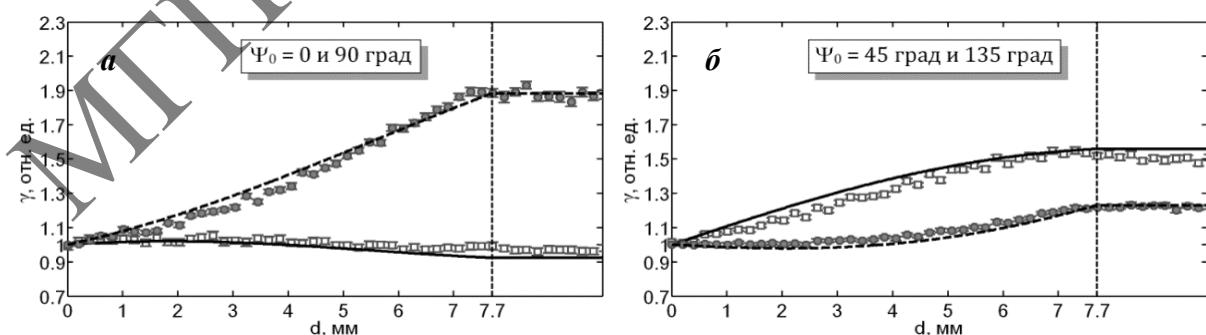


Рисунок 3 – Зависимости $\gamma(d)$ смешанных голограмм в кристалле ВТО: а – $\Psi_0 = 0^\circ$ и 90° ; б – $\Psi_0 = 45^\circ$ и 135° ; сплошная линия и \square – соответственно теоретически рассчитанные и экспериментально установленные зависимости $\gamma(d)$ при $\Psi_0 = 0^\circ$ и 45° ; штриховая линия и \bullet – соответственно теоретически рассчитанные и экспериментально установленные зависимости $\gamma(d)$ при $\Psi_0 = 90^\circ$ и 135°

Результаты экспериментальных и теоретических исследований, выполненных при двух взаимно перпендикулярных поляризациях, представлены на рисунке 3. В данном случае при теоретическом анализе экспериментальных данных амплитуда напряженности поля пространственного заряда E_{SC} составила 1,301 кВ/см.

Из этих рисунков следует, что экспериментальные данные и теоретические зависимости $\gamma(d)$ имеют удовлетворительное согласование. Этот экспериментально доказанный факт является признаком того, что система уравнений связанных волн, представленная в [12], также может быть успешно применена для описания процесса одновременной дифракции световых волн на смешанных голограммах, сформированных при двухволновом взаимодействии в кристалле ВТО.

Расчет доверительных интервалов для экспериментальных данных на рисунках 1 и 3 проводился при значении доверительной вероятности, равном 0,95.

Ниже в соответствии с методикой, описанной в [8], на рисунке 4 показаны двумерные изображения распределения интенсивности предметного пучка при проведении экспериментов. Здесь яркость и контраст изображений увеличены на 20 единиц.

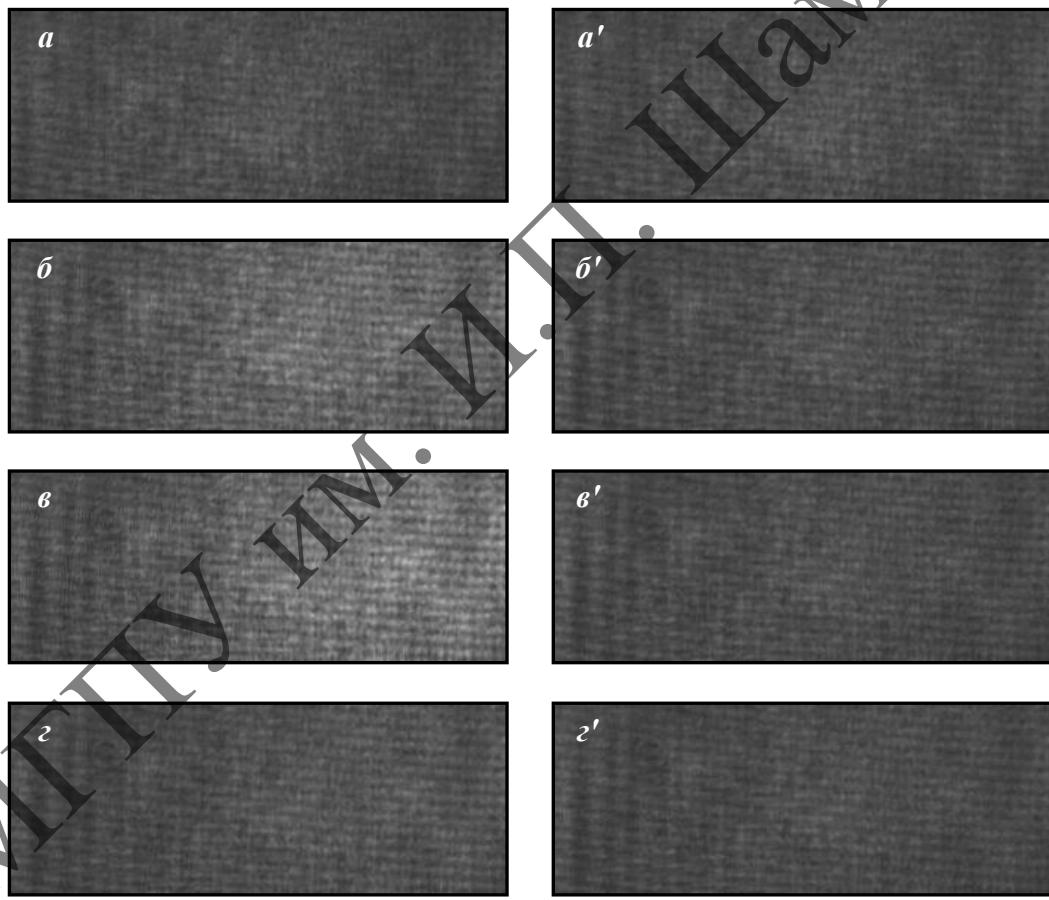


Рисунок 4 – Изображения распределения интенсивности в предметном пучке: $a, б, в, г$ – при наличии голограммической решётки в кристалле; $a', б', в', г'$ – в отсутствие голограммической решётки в кристалле; a и a' – при $\Psi_0 = 0^\circ$; $б$ и $б'$ – при $\Psi_0 = 45^\circ$; $в$ и $в'$ – при $\Psi_0 = 90^\circ$; $г$ и $г'$ – при $\Psi_0 = 135^\circ$

Полосы, которые можно видеть в левой части изображений 4, $a-4$, $а'-4$, $г-4$, $г'-4$ являются результатом дифракции предметного пучка на прямоугольной диафрагме. Однако при обработке экспериментальных данных [8] влияние этих дифракционных полос при получении зависимостей $\gamma(d)$ взаимно компенсируется.

Таким образом, представлены результаты экспериментального исследования зависимости дифракционной эффективности η смешанных голограмм и коэффициента усиления γ предметного светового пучка от толщины d кристалла ВТО ($\bar{1}\bar{1}0$) при его ориентационном угле $\theta = 200^\circ$ и четырех азимутах линейной поляризации взаимодействующих световых пучков $\Psi_0 = 0, 45^\circ, 90^\circ$ и 135° с использованием одного кристаллического образца среза ($\bar{1}\bar{1}0$) с фиксированной толщиной 7,7 мм. Выявлено, что только учет обратного пьезоэлектрического и фотоупругого эффектов наряду с моделью смешанных голограмм в теоретических расчётах приводит к удовлетворительному согласованию теории и эксперимента, что должно быть принято во внимание при практическом использовании этого кристалла. При этом методика исследования и обработки экспериментальных данных, описанная в [6–8], может быть в перспективе использована для аналогичного исследования и других объемных фотопреломляющих голограммических сред с целью проверки или возможной корректировки теории дифракции в них световых волн.

Список использованных источников

1. Solymar, L. The physics and applications of photorefractive materials / L. Solymar, D. J. Webb, A. Grunnet-Jepsen. – Oxford : Clarendon Press, 1996. – 494 p.
2. Фоторефрактивные эффекты в электрооптических кристаллах / С. М. Шандаров [и др.]. – Томск : Томск. гос. ун-т систем упр. и радиоэлектроники, 2007. – 242 с.
3. Шепелевич, В.В. Голография в фоторефрактивных оптически активных кристаллах / В.В. Шепелевич. – Минск : Изд. центр БГУ, 2012. – 254 с.
4. Gonzalez, G. Optimization of the diffraction efficiency in non-uniform gratings in sillenite crystals ($\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$ and $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$) considering the variation of fringe period, optical activity and polarization angles in a strong non-linear regime / G. Gonzalez, A. Zuñiga, F. Magaña // Rev. Mex. Fis. – 2009. – Vol. 55, № 1. – P. 25–31.
5. Gonzalez, G. Influence of the non-uniformity of the grating along sample thickness and of grating period variation, on the diffraction efficiency optimization in a sillenite crystal ($\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$) in a strong non-linear regime under an external dc field / G. Gonzalez, A. Zuñiga, F. Magaña // Opt. mat. – 2009. – Vol. 31, № 8. – P. 1218–1223.
6. Экспериментальное исследование ориентационной зависимости дифракционной эффективности пропускающих голограмм от толщины кристалла $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$ / А.В. Макаревич [и др.] // Письма в ЖТФ. – 2015. – Т. 41, № 19. – С. 46–54.
7. Экспериментальное исследование зависимости дифракционной эффективности фоторефрактивных голограмм от толщины образца и ориентационного угла в кристалле $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$ среза ($\bar{1}\bar{1}0$) / В.В. Шепелевич [и др.] // Известия вузов. Физика. – 2015. – Т. 28, № 10. – С. 74–79.
8. Макаревич, А.В. Влияние пространственной ориентации и толщины кристалла $\text{Bi}_{12}\text{GeO}_{20}$ на коэффициент усиления предметной световой волны: теория и эксперимент / А.В. Макаревич, В.В. Шепелевич, С.М. Шандаров // Проблемы физики, математики и техники. – 2018. – № 4 (37). – С. 35–43.
9. Dynamic holography with none plane waves in sillenites / E. Shamonina [et al.] // Opt. Quant. Electron. – 1996. – Vol. 28, № 1. – P. 25–42.

10. Investigation of two-wave mixing in arbitrary oriented sillenite crystals / E. Shamonina [et al.] // Appl. Phys. B. – 1997. – Vol. 64, № 1. – P. 49–56.
11. Optical activity in photorefractive $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$ / E. Shamonina [et al.] // Opt. Comm. – 1998. – Vol. 146, № 1–6. – P. 62–68.
12. Шепелевич, В.В. Смешанные пропускающие голограммы в фоторефрактивном пьезокристалле $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$ / В.В. Шепелевич, А.В. Макаревич, С.М. Шандаров // Письма в ЖТФ. – 2014. – Т. 40, № 22. – С. 83–89.

УДК 535.42

С.Ф. Ничипорко

Мозырский государственный педагогический университет имени И.П. Шамякина

ВЛИЯНИЕ ВНЕШНЕГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА ПОЛЯРИЗАЦИОННЫЕ ЗАВИСИМОСТИ ДИФРАКЦИОННОЙ ЭФФЕКТИВНОСТИ ГОЛОГРАММ В ФОТОРЕФРАКТИВНЫХ КРИСТАЛЛАХ СРЕЗА (111)

Представлены результаты исследований поляризационной зависимости дифракционной эффективности пропускающих голограмм от приложенного электрического поля к фоторефрактивному кристаллу $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$ с одновременным учетом электрооптического и пьезоэлектрического эффектов, фотоупругости и оптической активности кристалла.

Ключевые слова: дифракционная эффективность голограммы, фоторефрактивный кристалл, азимут поляризации.

За последние 30 лет проявляется значительный интерес к исследованию взаимодействия световых волн в кубических фоторефрактивных кристаллах $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$ (BSO), $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$ (ВТО), GaAs среза (111). В [1] изучались дифракция и двухволновое взаимодействие в кристалле GaAs среза (111). Ориентационная зависимость эффективности четырехволнового взаимодействия в кристаллах класса $\bar{4}3m$ этого же среза исследовалась в [2]. В [3] рассматривалось двухволновое взаимодействие в таких же кристаллах для случая произвольной пространственной ориентации вектора голограммической решетки, включая срез (111). Исследованию отражательных голографических решеток в кристалле ВТО среза (111) посвящена работа [4]. В [4–9] рассмотрены различные способы оптимизации относительной интенсивности сигнальной волны и дифракционной эффективности голограмм кубических фоторефрактивных пьезокристаллах среза (111). Выходные характеристики смешанных голограмм, записанных в фоторефрактивном кубическом пьезокристалле ВТО в диффузионном режиме в случае произвольной пространственной ориентации вектора голограммической решетки, включая срез (111) исследованы в [10].

В данной работе представлены результаты исследования влияния внешнего электрического поля на поляризационные зависимости дифракционной эффективности пропускающих голограмм с учетом электрооптического, пьезоэлектрического эффектов, фотоупругости и оптической активности кубического кристалла BSO среза (111).

В [9] установлено, что толщина кристалла BSO среза (111), при которой достигается наибольшая дифракционная эффективность голограммы в диффузационном режиме равна 5 мм, отношение интенсивностей световых пучков 1:10. Для расчета остальные параметры кристалла на длине волны $\lambda = 0.6328$ мкм взяты также из [9].

На рисунке 1 изображена зависимости дифракционной эффективности η голограммы от азимута поляризации Ψ_0 считающей световой волны для различных значений ориентационного угла θ ($\theta=0$ рисунок 1а; $\theta=15^\circ$ рисунок 1б; $\theta=30^\circ$ рисунок 1 с) и при различных значениях внешнего постоянного электрического поля E_0 .

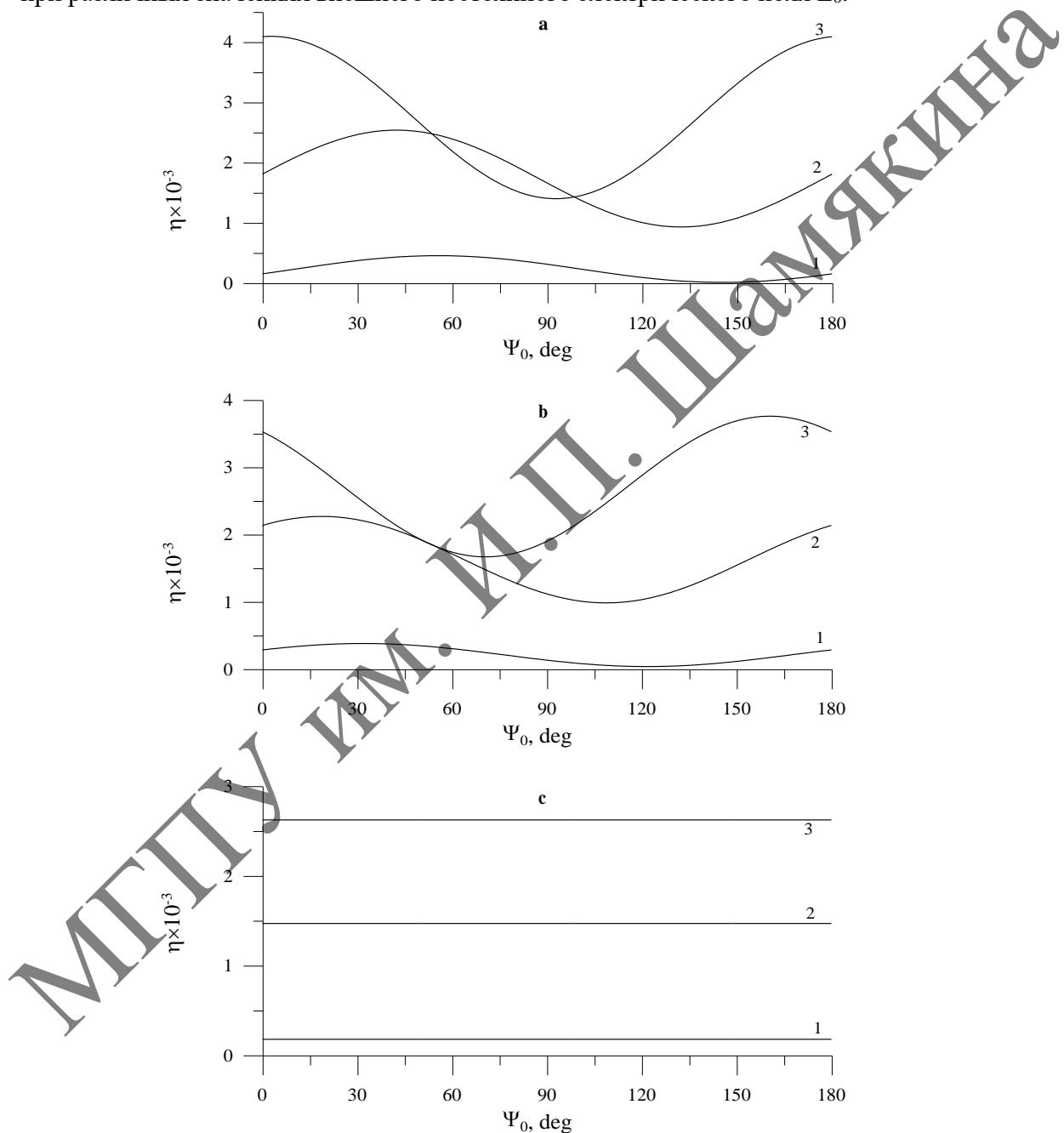


Рисунок 1 – Поляризационные зависимости дифракционной эффективности η голограммы в кристалле BSO при различных значениях амплитуды внешнего электрического поля.

1 - $E_0=0$; 2 - $E_0=5$ кВ/см; 3 - $E_0=10$ кВ/см. а - $\theta=0$; б - $\theta=15^\circ$; в - $\theta=30^\circ$.

Из рисунков 1–3 видно, что увеличение амплитуды внешнего постоянного электрического поля $E_0=0$ – кривые 1, $E_0=5$ кВ/см – кривые 2, $E_0=10$ кВ/см – кривые 3 приводит к увеличению значений дифракционной эффективности голограммы. Приложение к кристаллу электрического поля 5 кВ/см (кривые 2) однозначно повышает значения дифракционной эффективности голограммы по всем азимутам поляризации световых волн по сравнению с диффузионным режимом ($E_0=0$ – кривые 1). с увеличением амплитуды внешнего постоянного электрического поля E_0 . Увеличение амплитуды электрического поля до 10 кВ/см приводит к росту значений дифракционной эффективности голограммы, однако при определенных азимутах поляризации дифракционная эффективность голограммы имеет одинаковые значения при $\Psi_0 = 53^\circ$ и $\Psi_0 = 99^\circ$ для $\theta=0$ кривые 2 и 3 рисунок 1а и в диапазоне азимутов поляризаций 49° – 57° для $\theta=15^\circ$ кривые 2 и 3 рисунок 1б, а в диапазоне азимутов поляризации 53° – 99° кривая 3 рисунок 1а для $E_0=10$ кВ/см значения дифракционной эффективности голограммы в ниже чем $E_0=5$ кВ/см кривая 2.

Для $\theta=0$ рисунок 1а и $\theta=15^\circ$ рисунок 1б наблюдается качественное изменение поляризационных зависимостей дифракционной эффективности голограммы (смещение максимальных и минимальных значений). Максимальные значения дифракционной эффективности голограммы для ориентационного угла $\theta=0$ (рисунок 1а) достигают для напряженности электрического поля $E_0=0$ при азимуте поляризации $\Psi_0 = 55^\circ$ кривая 1; $E_0=5$ кВ/см – $\Psi_0 = 42^\circ$ кривая 2; $E_0=10$ кВ/см – $\Psi_0 = 3^\circ$ кривая 3. На рисунке 1с для $\theta=30^\circ$ наблюдается отсутствие поляризационной зависимости дифракционной эффективности голограммы.

Таким образом, получены поляризационные зависимости дифракционной эффективности голограмм, записанных в кристалле BSO среза (111) толщиной 5 мм для ориентационных углов 0 , 15° и 30° при различных значениях внешнего постоянного электрического поля 0 , 5 кВ/см и 10 кВ/см.

Список использованных источников

1. Eichler, H.J. Photorefractive two-wave mixing in semiconductors of the $43m$ space group in general spatial orientation / Y. Ding, H.J. Eichler, B. Smandek // Phys. Rev. A. – 1995. – Vol. 52. – P. 2411–2418.
2. Ding, Y. Crystal orientation dependence of the photorefractive four-mixing in compound semiconductors of symmetry group $\bar{4}3m$ / Y. Ding, H.J. Eichler // Opt. Commun. – 1994. – Vol. 110. – P. 446–464.
3. Diffraction and two beam-coupling in GaAs along the [111]-direction / B. Sugg, F. Kahman, R.A. Rupp [et al.] // Opt. Commun. – 1993. – Vol. 106. – P. 6–12.
4. Reflection holographic gratings in (111) cut $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$ crystal for real time interferometry / N. Kukhtarev, B.S. Chen, P. Venkateswarlu [et al.] // Opt. Commun. – 1993. – Vol. 104. – P. 23–28.
5. Gain optimization at two-wave mixing in cubic photorefractive piezocrystals of (111)-cut / V.V. Shepelevich, S.F. Nichiporko, A.E. Zagorskij [et al.] // Photorefractive Materials, Effects, and Devices. 27–30 June, 1999, Elsinore, Denmark: OSA Trends in Optics and Photonics 1999. – Vol. 27. – P. 353–360.

6. Ориентационная зависимость дифракционной эффективности голограмм в кубических фоторефрактивных пьезокристаллах среза (111) / С.Ф. Ничипорко, А.А. Загорский, В.В. Шепелевич [и др.] // Письма в ЖТФ. – 2000. – Т. 26, вып. 3. – С. 44–49.

7. Diffusion recording in photorefractive selenite crystals: an analytical approach for engineering purposes / E. Shamonina, Yi Hu, V.P. Kamenov [et al.] // Opt. Commun. – 2000. – Vol. 180, № 1–3. – P. 183–190.

8. Optimization of diffraction efficiency and gain for two-wave mixing in cubic (111)-cut photorefractive piezocrystals / V.V. Shepelevich, S.F. Nichiporko, A.E. Zagorskiy [et al.] // Opt. Mat. – 2001. – Vol. 18, № 1. – P. 135–138.

9. Optimization of diffraction efficiency and gain for two-wave mixing in cubic (111)-cut photorefractive piezocrystals / V.V. Shepelevich, S.F. Nichiporko, A.E. Zagorskiy [et al.] // Ferroelectrics. – 2002. – Vol. 266. – P. 305–333.

10. Дифракционная эффективность смешанных пропускающих голограмм в фоторефрактивном оптически активном пьезокристалле $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$ произвольного среза / А.В. Макаревич, В.В. Шепелевич, В.Н. Навыко [и др.] // Кристаллография. – 2019. – Т. 64, № 5. – С. 782–788.

УДК 535:681.7.068.4

Д.В. Понкратов¹, И.А. Верхов², ЛИ. Сотская², Е.А. Чудаков¹, А.Б. Сотский¹

¹Могилевский государственный университет имени А.А. Кулешова

²Белорусско-Российский университет

ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ ТОНКОПЛЕНОЧНЫХ МЕТАЛЛОДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ РЕФРАКТОМЕТРОВ

Исследуются спектроскопические рефрактометры со слоистой металлодиэлектрической структурой, нанесенной на основание призмы связи. Разработан метод расчета рефрактометров, учитывающий аномальный скин-эффект в металлических пленках. Для структуры кварцевая призма связи – золотая пленка – кварцевая пленка – вода с исследуемым показателем преломления определены оптимальные толщины пленок и угол падения зондирующего света, позволяющие поднять чувствительность рефрактометра до рекордного значения $9.6 \cdot 10^5 \text{ nm / RIU}$.

Ключевые слова: схема Кречмана, тонкопленочные рефрактометры растворов, скин-эффект, чувствительность.

Введение. Тонкопленочные рефрактометры предназначены для работы в качестве сенсоров химических и биологических компонентов в растворах. Для ряда приложений перспективны рефрактометры спектроскопического типа, в которых приращение показателя преломления раствора dn_s вызывает сдвиг $d\lambda$ минимума отражения устройства на шкале длин волн. Чувствительность таких устройств определяется производной $S = d\lambda / dn_s$. Хорошо изучены рефрактометры, использующие возбуждение плазмонных мод в схеме Кречмана. Оптимизация их структуры, выполненная в [1],

позволила достичь рекордной на настоящий момент чувствительности $S = 5.7 \cdot 10^4 \text{ nm / RIU}$. В настоящей работе исследованы возможности дальнейшего увеличения S . Расчеты выполнены для структуры кварцевая призма связи – золотая пленка – кварцевая пленка – вода с контролируемым показателем преломления. Проанализирован спектр энергетического коэффициента отражения света от призмы связи. За счет выбора угла падения излучения и толщины пленок достигнуто сочетание нулевого отражения света и возбуждения волноводной моды кварцевой пленки, находящейся при условиях, близких к критическим. Это позволило поднять чувствительность рефрактометра до $S = 9.7 \cdot 10^5 \text{ nm / RIU}$.

Оптическая схема рассматриваемых устройств представлена на рисунке 1. В области $y > 0$ расположена призма связи с диэлектрической проницаемостью ϵ_a . На основание призмы нанесена металлодиэлектрическая структура, состоящая из m чередующихся металлических и диэлектрических пленок. Толщина l -й пленки равна d_l , координата ее верхней границы $y = y_l$. Относительная диэлектрическая проницаемость диэлектрических пленок равна ϵ_s . В области $y < y_1 - d_1$ находится среда с измеряемым показателем преломления n_s , ее диэлектрическая проницаемость $\epsilon_s = (n_s - ik_s)^2$ (k_s – коэффициент поглощения). Монохроматическая плоская волна с зависимостью от времени t и координаты Z вида $\exp(i\omega t - ik_0 \beta z)$ падает на структуру из области $y > 0$, под углом γ . Здесь $\beta = n_a \sin \gamma$, $k_0 = \omega/c = 2\pi/\lambda$ – волновое число вакуума. Ось однородности – $0x$. Под A , B и C понимаются амплитуды падающей, отраженной от рефрактометра и прошедшей сквозь него волн.

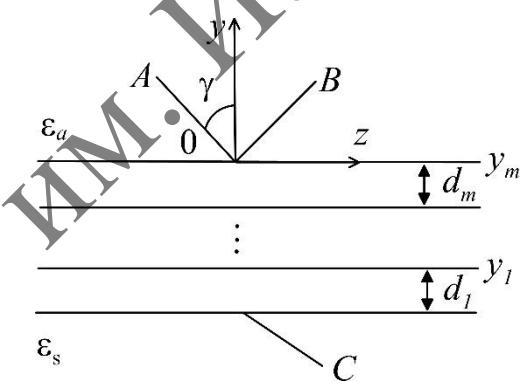


Рисунок 1 – Оптическая схема тонкопленочных рефрактометров

Коэффициенты отражения волн s - и p -поляризации от основания призмы связи даются выражениями

$$r_s = \frac{B}{A} = \frac{ik_{ya} L_{11}^{(s)} - L_{21}^{(s)} + ik_{ys} (ik_{ya} L_{12}^{(s)} - L_{22}^{(s)})}{ik_{ya} L_{11}^{(s)} + L_{21}^{(s)} + ik_{ys} (ik_{ya} L_{12}^{(s)} + L_{22}^{(s)})},$$

$$r_p = \frac{B}{A} = \frac{L_{12}^{(p)} ik_{ya} \epsilon_a^{-1} + L_{22}^{(p)} - L_{11}^{(p)} \epsilon_s k_{ya} \epsilon_a^{-1} k_{ys}^{-1} + L_{21}^{(p)} i \epsilon_s k_{ys}^{-1}}{L_{12}^{(p)} ik_{ya} \epsilon_a^{-1} - L_{22}^{(p)} - L_{11}^{(p)} \epsilon_s k_{ya} \epsilon_a^{-1} k_{ys}^{-1} - L_{21}^{(p)} i \epsilon_s k_{ys}^{-1}},$$

$$\mathbf{L}^{(s,p)} = \mathbf{M}_m^{(s,p)} \mathbf{M}_{m-1}^{(s,p)} \dots \mathbf{M}_1^{(s,p)},$$

где $k_{ya,s} = \sqrt{\varepsilon_{a,s} - \beta^2}$, $\mathbf{L}^{(s,p)}$, $\mathbf{M}_l^{(s,p)}$ – 2x2 матрицы. Матрицы $\mathbf{M}_l^{(s,p)}$, соответствующие диэлектрическим пленкам, имеют стандартный вид [2]. При их расчете использована известная трехчленная формула Селлмейера для дисперсии плавленого кварца. Матрицы $\mathbf{M}_l^{(s,p)}$, соответствующие металлическим пленкам, строятся путем решения интегральных уравнений теории аномального скин-эффекта [3]. Оптическими параметрами металлической пленки, помимо ее толщины, являются диэлектрическая проницаемость ионного остова металла $\varepsilon(\lambda)$, концентрация электронов проводимости n_0 , время релаксации τ , и вероятности зеркального отражения электронов от верхней и нижней границ металлической пленки p_1 и p_2 . Значения данных параметров для сверхчистых (99.999%) золотых пленок различных толщин d_1 приведены в таблице 1.

Таблица 1 – Параметры электронного газа в золотых пленках различной толщины

d_1, nm	τ, s	n_0, m^{-3}	p_1	p_2
25	$0.90 \cdot 10^{-14}$	$5.81 \cdot 10^{28}$	0.01	0.47
53	$1.12 \cdot 10^{-14}$	$5.86 \cdot 10^{28}$	1.00	0.55
117	$1.31 \cdot 10^{-14}$	$5.69 \cdot 10^{28}$	1.00	0.69

Табличные данные получены в результате решения обратной задачи спектральной эллипсометрии по обработке экспериментальных спектров поляризационных углов, соответствующих золотым пленкам различной толщины на кремниевой подложке, приведенных в [4]. Наблюдаемый в таблице 1 рост величин τ , p_1 , p_2 при увеличении d_1 можно связать с увеличением степени кристалличности золота по мере роста пленки [4]. Найденные спектры диэлектрической проницаемости золотых пленок представлены на рисунке 2.

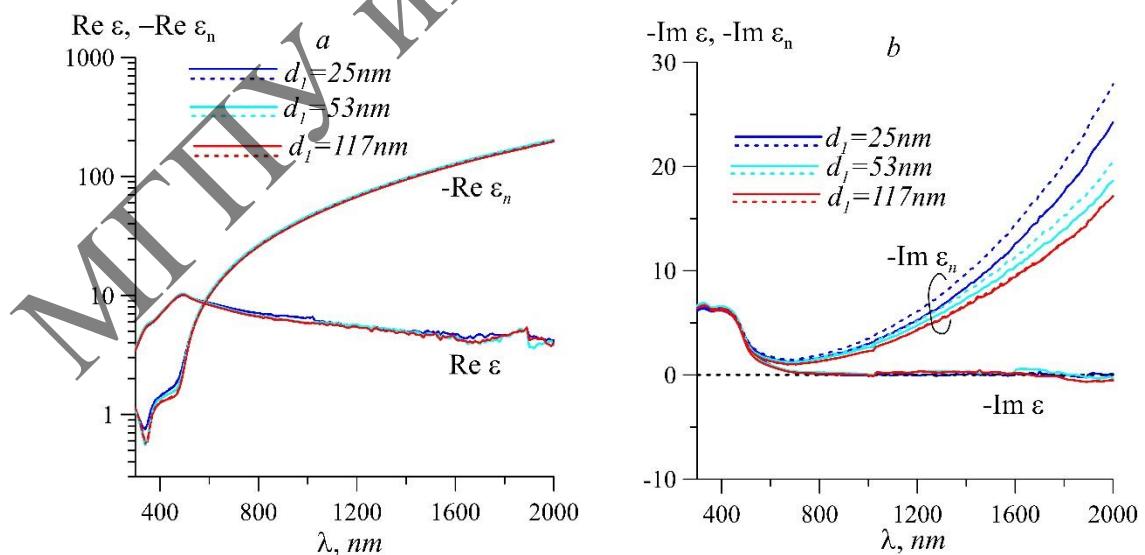


Рисунок 2 – Спектры действительной (a) и мнимой (b) частей диэлектрических проницаемостей золотых пленок различных толщин. Горизонтальная штриховая линия – нулевой уровень

Через ϵ_n на рисунке 2 обозначена комплексная диэлектрическая проницаемость золотых пленок, найденная с использованием модели нормального скин-эффекта Друде (штриховые кривые – данные работы [4], сплошные кривые – решение обратной задачи спектральной эллипсометрии), ϵ – найденная диэлектрическая проницаемость ионного остова золота. Как видно из рисунка 2, функция $\epsilon(\lambda)$, в отличие от $\epsilon_n(\lambda)$, стабильна относительно толщины золотой пленки, что подтверждает корректность модели аномального скин-эффекта.

Исследованы рефрактометры двух типов. Рефрактометр первого типа имеет стандартную схему Кречмана с одной золотой пленкой ($m = 1$) и работает на волнах p -поляризации. Рефрактометры второго типа являются двухпленочными ($m = 2$). В них золотая пленка нанесена непосредственно на основание призмы связи и играет роль буферного слоя при возбуждении собственных мод кварцевой пленки, находящейся на золотой пленке. Вычисления выполнены в окрестности длины волны $\lambda_0 = 800 \text{ nm}$, где показатель преломления воды $n_s = 1.329$.

Расчеты показали, что однопленочные рефрактометры имеют чувствительность на два порядка меньшую по сравнению с двухпленочными рефрактометрами. Поэтому далее обсуждаются характеристики рефрактометров второго типа.

Первым шагом на пути оптимизации рефрактометров с позиций максимизации их чувствительности является достижение режима нулевого отражения света от призмы связи на длине волны $\lambda = \lambda_0$. Для рефрактометра первого типа это означает выполнение комплексного уравнения $r_p = 0$. В рефрактометрах второго типа может выполняться также уравнение $r_s = 0$. Указанные трансцендентные уравнения могут быть удовлетворены за счет выбора толщин двух пленок при произвольных углах падения света на структуру. Решения данных уравнений показаны на рисунке 3.

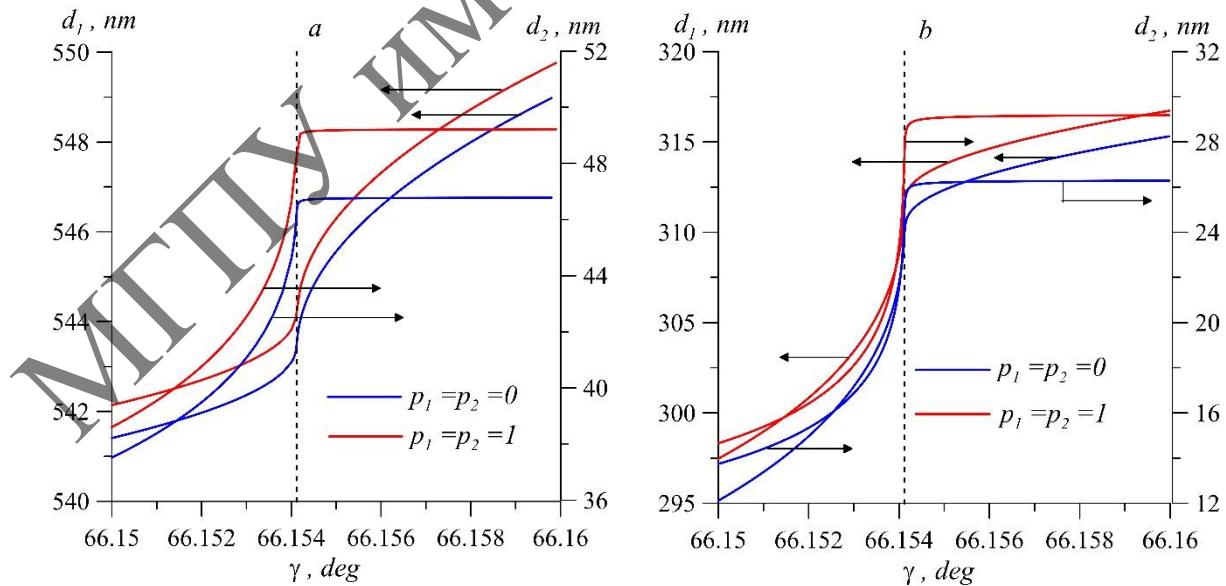


Рисунок 3 – Толщины кварцевой (d_1) и золотой (d_2) пленок, обеспечивающие нулевое отражение света от двухпленочного рефрактометра, в зависимости от угла падения света и вероятностей зеркального отражения электронов от границ золотой пленки p_1, p_2 : а – волны p -поляризации, б – волны s -поляризации. Штриховые линии – угол полного внутреннего отражения γ_c

На рисунке 3 зависимости $d_1(\gamma)$ и $d_2(\gamma)$, относящиеся к волнам p - и s -поляризации, существенно различаются. На эти зависимости влияют и вероятности зеркального отражения электронов p_1 , p_2 .

Второй шаг оптимизации – выбор оптимального угла падения света γ . Влияние этого угла на факторы чувствительности $S = S_p$ и $S = S_s$ при использовании волн p -, либо s -поляризации и выборе толщин пленок в соответствии с рисунком 3 иллюстрирует рисунок 4. Здесь кривые, относящиеся к случаям $p_1 = p_2 = 0$ и $p_1 = p_2 = 1$, в масштабах рисунка совпадают, но это совпадение имеет место при разных толщинах пленок d_1 и d_2 (см. рисунок 3). Видно, что экстремальная чувствительность рефрактометров достигается при $\gamma \rightarrow \gamma_c$ со стороны полного внутреннего отражения света от границы раздела кварцевая пленка – вода. Модули $|S_{p,s}(\gamma)|$ резко уменьшаются при увеличении k_s , а при $\gamma = \gamma_1 = 66.15435^\circ$ и $\gamma = \gamma_2 = 66.15463^\circ$ функции $S_p(\gamma)$ и $S_s(\gamma)$ изменяют знак. В области $\gamma > \gamma_2$ использование волн s -поляризации предпочтительно, поскольку здесь $S_s(\gamma) > S_p(\gamma)$. При $k_s = 1.25 \cdot 10^{-7}$ резкий максимум функции $S_s(\gamma)$, равный $8.88 \cdot 10^6$ nm/RIU, достигается при $\gamma = 66.15466^\circ$. Но столь тонкая настройка угла падения затруднительна, поэтому рассмотрим угол $\gamma = 66.155^\circ$, при котором зависимости $S_s(\gamma)$ и $S_p(\gamma)$ малочувствительны к величине k_s (см. рисунок 4).

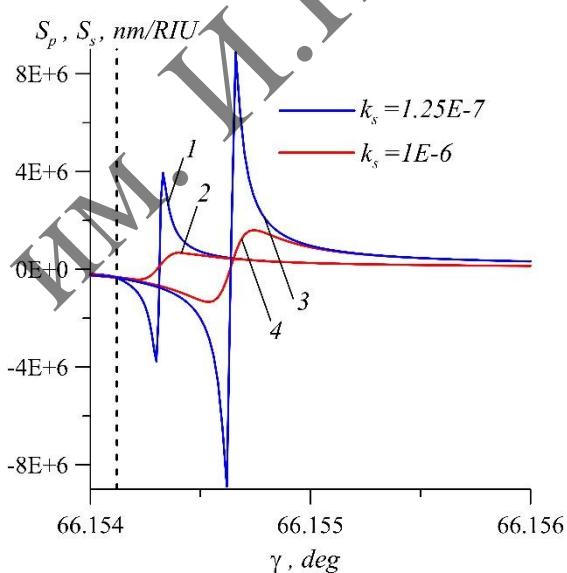


Рисунок 4 – Чувствительность двухпленочных рефрактометров при использовании волн p - (1, 2) и s -поляризации (3, 4). Штриховая прямая – граничный угол γ_c

Подводя итог, для волн s -поляризации, падающих под углом $\gamma = 66.155^\circ$, чувствительность двухпленочного рефрактометра составляет $S_s = 9.6 \cdot 10^5$ nm / RIU. Этому значению при среднеквадратичной погрешности определения положения минимумов зависимостей $|r_{p,s}(\lambda)|^2$ 0.0014 nm [1] соответствует разрешающая

способность $1.5 \cdot 10^{-9}$, которая более чем на порядок меньше рекордного значения $2.5 \cdot 10^{-8}$, достигнутого при возбуждении длиннопробежной плазмонной моды в [1].

Работа выполнена в рамках Государственной программы научных исследований Республики Беларусь «1.15 Фотоника и электроника для инноваций».

Список использованных источников

1. Slavík, R. Ultrahigh resolution long range surface plasmon-based sensor / R. Slavík, J. Homola // Sens. Actuators B: Chem. – 2007. – Vol. 123, № 1. – P. 10–12.
2. Борн, М. Основы оптики / М. Борн, Э. Вольф. – М. : Наука, 1973. – 719 с.
3. Сотский, А.Б. Аномальный скин-эффект в металлических пленках / А.Б. Сотский, Е.А. Чудаков, Л. И. Сотская // ЖПС. – 2024. – Т. 91, № 2. – С. 581–593.
4. Optical constants and structural properties of thin gold films / D.I. Yakubovsky, A.V. Arsenin, Y.V. Stebunov [et al.] // Optics Express. – 2017. – Vol. 25, № 21. – P. 25574–25587.

УДК 532.88 + 621.378

Е.В. Тимошенко¹, В.А. Юревич², Ю.В. Юревич²

¹Могилевский государственный университет имени А.А. Кулешова

²Белорусский государственный университет пищевых и химических технологий

НУТАЦИОННАЯ СТРУКТУРА ИНТЕНСИВНОСТИ В ИМПУЛЬСНЫХ ЛАЗЕРАХ НА ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ

Проведена модификация осцилляторного уравнения для полярного угла вектора Блоха, позволившая анализировать особенности структуры сверхизлучения, развивающегося в резонаторах импульсных полупроводниковых лазеров с квантоворазмерными эффектами.

Ключевые слова: квантоворазмерные структуры, резонансная нелинейность, когерентные оптические эффекты, сверхизлучение, формализм вектора Блоха.

Введение. Важным направлением в совершенствовании компактных источников импульсного когерентного излучения является разработка полупроводниковых лазеров, применяемых в линиях сверхбыстрой передачи информации или совместимых с системами нанофотоники [1]. Признано, что в качестве активных элементов оптических и лазерных схем нанофотоники предпочтительны массивы квантовых точек (КТ) [2]. Такого рода элементарными квантовыми излучателями (КИ) с размером, превышающим атом, но с дискретным энергетическим спектром, в соответствующих технологиях образованы компактные регулярные структуры с относительно высокой концентрацией КИ, в связи с чем такие материалы именуют суперкристаллами (СК) [3]. Квантовые переходы с участием КТ характеризуются гигантскими силами осциллятора, что неизбежно приводит к более яркому проявлению нелинейных оптических эффектов при умеренных уровнях интенсивности когерентного светового поля, действующего в лазерной структуре из КТ. Субмикронные и нанометровые слои на основе подобных структур обладают сравнительно

низкороговым нелинейным откликом на поле когерентного излучения, особенно выраженным в экситонной области спектра. Типичная для резонансного взаимодействия кинетика когерентного излучения сопровождается фазовой неустойчивостью – в процессе формирования излучаемого массивом КТ поля в лазерном резонаторе происходят смещение частоты и соответствующие вариации фазового соотношения действующего на КТ светового поля с поляризационным откликом СК. Известно, что нелинейный дрейф частоты (frequency chirp) выступает сильным фактором радикальных изменений в динамике импульсного излучения [4].

В работе, положенной в основу настоящего сообщения, в рамках формализма вектора Блоха проанализированы особенности динамики импульсного излучения лазеров на КТ в условиях когерентного взаимодействия светового поля со средой СК и резонансной фазовой нелинейности. Фактически рассматриваются закономерности формирования сверхизлучения в резонаторе в условиях нелинейного смещения частоты. Принципиальным моментом, определяющим новизну работы, являлось применение представлений обобщенной двухуровневой схемы [5], которое дало возможность учета нелинейной рефракции, вызванной влиянием поглощения в квазирезонансных переходах. Наряду с типичным для плотной упаковки дипольных КИ взаимным поляризующим влиянием их близких полей, квазирезонансная поляризованность способна стимулировать перенормировку фазового соотношения поля и поляризованности ансамбля КТ.

Постановка задачи. Явление сверхизлучения (СИ) происходит как следствие самопроизвольной фазовой корреляции (согласования фаз или фазировки) первоначально независимых КИ (в рассматриваемом случае образующих массив КТ). Появление фазовой корреляции объясняют двумя факторами – взаимодействием элементарных КИ через излучаемое ими световое поле и нелинейностью осцилляторных движений электронов внутри КИ.

СИ представляет собой эффект сверхбыстрого взаимодействия излучения с веществом, когда характерная длительность высвечиваемых оптических импульсов значительно меньше времени действия релаксационных механизмов в среде [6]. Испускание импульса СИ ансамблем из большого числа N возбуждённых КИ способно развиваться в течение времени $\tau_{\text{ж}}$, много меньшего характерного времени излучения τ_1 изолированного КИ (времени межзонной релаксации перехода). Характерное время сверхизлучения $\tau_{\text{ж}}$ зависит от вероятности резонансного перехода в канале вынужденного излучения и обратно пропорционально N . Пиковая интенсивность импульса на частоте ω , плотность энергии в котором определяется числом излучённых квантов $N\hbar\omega$, получается пропорциональной второй степени N (N^2) – в результате высвечиваемый импульс СИ оказывается особо мощным. В этом состоит основное отличие СИ от некоррелированного испускания системы возбуждённых КИ, где характерное время спонтанного излучения порядка τ_1 , а интенсивность пропорциональна первой степени N .

СИ было экспериментально обнаружено во многих средах – газах, твёрдых телах и полупроводниках, в том числе в экситонных конденсатах при низких температурах и системах КТ в наногетероструктурах. В полупроводниковых средах СИ происходит как коллективная спонтанная рекомбинация. Динамика компонентов отклика среды в режиме СИ определяет процесс генерации излучения в случае достижения пороговой инверсии

в массиве КТ. В процессе формирования СИ фазы отдельных КИ, представляемых диполями, спонтанно синхронизируются, в результате чего в пределах массива КТ формируется коллективный диполь с малым временем излучательной рекомбинации. Влиянием диполь-дипольного взаимодействия и реакцией на поле переходов, близких к основному, по мере резонансных вариаций населённости определяется смещение центра линии ω и уширение спектральной линии усиления. Такими особенностями, присущими резонансному взаимодействию, определяется дефазировка ансамбля дипольных КТ в ходе формирования импульса СИ, которая способна изменить его форму и структуру.

Далее рассматривается влияние этих факторов нелинейной фазовой динамики на резонансную кинетику сверхизлучения в обычном допущении среднего поля по длине резонатора. Фазовыми эффектами определена возможность возникновения динамической обратной связи, поэтому применительно к усиливающим элементам с квантоворазмерными эффектами следует говорить именно о автомодуляционном процессе с характерностью явления СИ.

Основные уравнения. В использованном подходе уравнение для квазистационарной напряженности поля $E(t)$ в резонаторе аналогично, например, [7], решается совместно с уравнениями Блоха для электрических моментов дипольных КИ. Этими квантовомеханическими уравнениями описывается динамика вероятностных переменных материального отклика СК – поляризованности $\rho(t)$ и инверсии заселённости уровней $n(t)$. Расчетная модель процесса излучения образует замкнутую самосогласованную систему уравнений, в которой коррелирующее поле зависит от резонансных свойств активных центров в массиве КТ и, в свою очередь, определяет их динамику их реакции в условиях одноквантового резонанса. В общем случае рассматриваемого взаимодействия может быть учтена конечность времени фазовой (внутризонной) релаксации T_2 отклика среды слоя, тогда формулируемая модель записывается так:

$$\frac{dE}{dt} + \frac{E}{T_r} = \frac{\omega_0}{\varepsilon_0} P, \quad \frac{d\rho}{dt} = \frac{\mu}{\hbar} (n+1) E - \frac{\rho}{T_2} (1-i\Delta), \quad \frac{dn}{dt} = -\frac{\mu}{2\hbar} (\rho^* E + \rho E^*). \quad (1)$$

Здесь P – поляризованность массива КТ, $T_r = l/c$ – время обхода светом резонатора, μ – матричный элемент дипольного момента перехода, $\Delta = (\omega - \omega_0)T_2$ – нормированный по полуширине спектральной линии ($1/T_2$) дефект частоты. Для возникновения СИ среда должна быть максимально инвертирована, возможность обратимого процесса изменения заселённости при сбросе инверсии не рассматривается – в уравнении для вариации инверсии n исключены релаксационные составляющие.

Представления обобщённой двухуровневой схемы, обоснованные в [5], приводят к перенормировке выражения для поляризованности, в котором учитывается поляризующее влияние излучения переходов, близких к резонансному:

$$P = N(\mu\rho + i2\pi\Delta\alpha\varepsilon_0 n E'), \quad E' = \frac{E + i\mu N \rho / 3\varepsilon_0}{1 + 2\pi\Delta\alpha N n / 3}, \quad (2)$$

где $\Delta\alpha$ – различие поляризуемостей КИ на уровнях перехода (дефект поляризуемости). Диполь-дипольное взаимодействие в ансамбле КТ определено использованием в уравнениях для отклика величины действующего на КИ поля E' , различающегося с коррелирующим полем E включением локальной поправки Лоренца.

Осцилляторное уравнение и результаты моделирования СИ. В последующем приближении кинетической модели (1), (2) удобно ввести для поля E нормированную переменную $e(t) = \mu E(t)/\hbar$ и использовать обозначения параметра времени СИ τ_R , коэффициента нелинейной рефракции β и нормирующего коэффициента в поправке Лоренца γ соответственно в виде:

$$\tau_R = \frac{\varepsilon_0 \hbar c}{\mu^2 N l \cdot \omega_0}, \quad \beta = \frac{2\pi\Delta\alpha\hbar}{\mu^2} \varepsilon_0, \quad \gamma = \frac{\mu^2 N}{3\varepsilon_0 \hbar}.$$

Систему (1) тогда можно записать в виде:

$$\frac{de}{dt} = \frac{1}{T_r} \left(\frac{1}{\tau_R} \frac{\rho + i\beta n e}{1 + \beta \gamma n} - e \right), \quad \frac{d\rho}{dt} = \frac{(n+1)e}{1 + \beta \gamma n} + i\rho \left(\Delta\omega + \gamma \frac{n+1}{1 + \beta \gamma n} \right), \quad \frac{dn}{dt} = -\frac{\rho^* e + \rho e^*}{2(1 + \beta \gamma n)}. \quad (3)$$

В системе (3) пренебрегается необратимой релаксацией поляризованности в предположении о когерентном характере взаимодействия. Тогда решение неавтономной задачи расчёта отклика СК может иметь полуаналитическое представление при любом виде поля $E(t)$. Для этого аналогично [6] следует также допустить значимость точного резонанса ($\Delta = 0$), то есть, отсутствие фазовой модуляции, вызванной дефектом частоты. С учётом начальных условий $\rho(t=0) = 0$, $n(t=0) = 0$ далее из уравнений для отклика в (3) вытекает выражение, представляющее собой закон сохранения вектора Блоха [6]: $R^2 + (n+1)^2 = 1$. Решения для материальных переменных можно записать как функции угла поворота $\theta(t)$ переменных $\rho(t)$ и $n(t)$:

$$\rho(t) = \sin\left(\theta - \frac{\beta\gamma\rho}{1 - \beta\gamma}\right), \quad n(t) = \cos\left(\theta - \frac{\beta\gamma\rho}{1 - \beta\gamma}\right) - 1, \quad \theta = \frac{1}{1 - \beta\gamma} \int_{-\infty}^t \text{Re } e(t) dt. \quad (4)$$

Величиной угла поворота $\theta(t)$ за время формирования импульсов СИ определяется изменение полярного угла вектора Блоха в пространстве переменных $\text{Re}\rho$, $\text{Im}\rho$, n . Преобразованием первого из уравнений (1) получено, что осцилляторное уравнение, которым в рассматриваемом случае действенности факторов резонансной нелинейности определяется динамика полярного угла вектора Блоха, имеет вид:

$$\frac{d^2\theta}{dt^2} + \frac{1}{T_r} \frac{d\theta}{dt} = \frac{1}{\tau_R T_r} \frac{\sin\theta}{1 + (\beta\gamma)^2 + 2\beta\gamma \cos\theta}. \quad (5)$$

На рисунке 1 приведены результаты расчета величины $S(t) = (T_r e(t))^2$, характеризующей нормированную интенсивность излучения, на основе численного интегрирования уравнения (5). Значения ряда использованных в оценках кинетики процесса СИ параметров (5) в основном отвечали данным [2], пиковая интенсивность импульсов соответствовала примерно $10\dots100 \text{ МВт}/\text{см}^2$.

Решениями (5) относительно $S(t)$, в сущности, воспроизводится расчетная модель режима сверхизлучения в резонаторе с указывающей на квантовый характер процесса контрастной структурой всплесков интенсивности, имеющих нутационную природу. Оптическая нутация обусловлена соответствующим вращением вектора Блоха вокруг направления коррелирующего поля, происходящим с характерной частотой $\Omega = \sqrt{1/\tau_R T_r}$ и затухающим по мере сброса инверсии. На рисунке 1 можно отметить критичность характеристик структуры по отношению к действенности факторов нелинейности отклика.

По мере увеличения параметра нелинейности $\beta\gamma$ (на рисунке 1 – фрагменты a' , a'' , b' , b'' , c' , c'') в нутационной серии импульсов частота их следования нарастает. Таким образом, автомодуляционными следствиями дрейфа частоты, вызванного фазовой нелинейностью, являются снижение периода следования импульсов, образующих временную структуру СИ, и резкое нарастание их асимметрии.

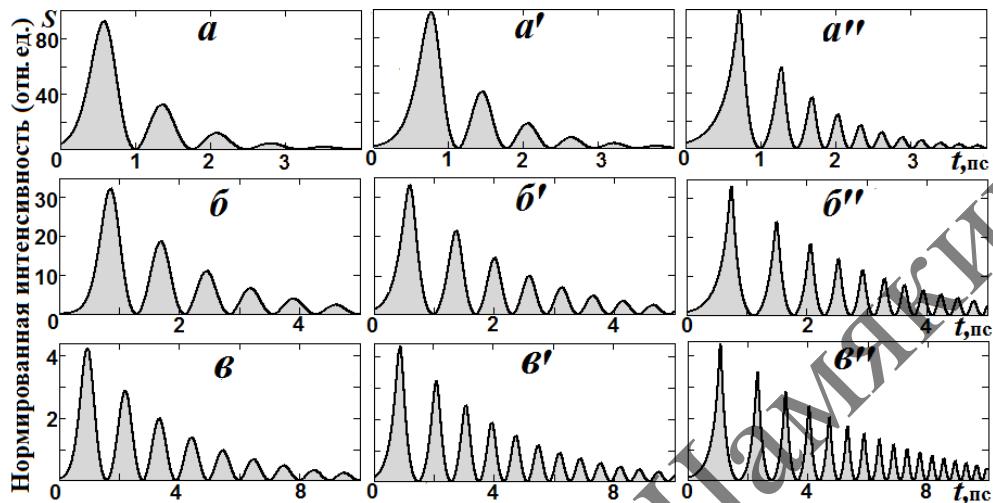


Рисунок 1 – Временна́я структура сверхизлучения на пикосекундной шкале:
 $T_r = 5 \cdot 10^{-12}$ с (a), $3 \cdot 10^{-12}$ с (b), $2 \cdot 10^{-12}$ с (c), $\beta\gamma = 0$ (a - c), 0.1 (a' - b'), 0.2 (a'' - c''), $\pi_R = 1.0 \cdot 10^{-13}$ с

Список использованных источников

1. Wu, K. Pulse Generation and Compression Techniques for Microwave Electronics and Ultrafast Systems / K. Wu, M. Rahman // Electromagn. Science. – 2023. – Vol. 1, No. 1. – P. 0010131 – 1-24.
2. Fast switching between the ground- and excited-state lasing in a quantum-dot microdisk triggered by sub-ps pulses / A.E. Zhukov [et al.] // Opt. Letters. – 2024. – Vol. 49, No 2. – C. 330–333.
3. Quantum-dot supercrystals for future nanophotonics / A.S. Baimuratov [et al.] // Scientific Reports 3. – 2013. – N 1727. – P. 1–9.
4. Wilson, M. Half of Nobel prize in physics honors the inventors of chirped pulse amplification / M. Wilson // Physics Today. – 2018. – Vol. 71, No. 12. – P. 18–21.
5. Апанасевич, П.А. Основы теории взаимодействия света с веществом / П.А. Апанасевич. – Минск : Навука і тэхніка, 1977. – 496 с.
6. Андреев, В.А. Кооперативные эффекты в оптике / А.В. Андреев, В.И. Емельянов, Ю.А. Ильинский. – М. : Наука, 1988. – 288 с.
7. Suppressing spatio-temporal lasing instabilities with wavechaotic microcavities / S. Bittner [et al.] // Science. – 2018. – Vol. 361. – P. 1225–1230.

А.Л. Толстик

Белорусский государственный университет

ГОЛОГРАФИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ УПРАВЛЕНИЯ СВЕТОВЫМИ ПОЛЯМИ И ДИАГНОСТИКИ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ МАТЕРИАЛОВ

Представлены результаты теоретических и экспериментальных исследований голограммических методов управления световыми пучками и диагностики материалов современной фотоники и электроники. Рассмотрен нелинейно-оптический подход, позволяющий описать трансформацию волнового фронта световых пучков, в том числе сингулярных, мультиплексирование топологического заряда, а также частотное преобразование изображений. Проанализированы методы диагностики объемных и тонкопленочных полупроводников, фоторефрактивных кристаллов на основе динамических голограмм.

Ключевые слова: фоторефрактивные кристаллы, полупроводники, динамические голограммы, сингулярные пучки, пространственно-модуляционная спектроскопия.

Введение. Голограммические методы преобразования световых полей были предложены более 60 лет назад и основывались на записи и восстановлении классических (стационарных) голограмм. Новый импульс голограммические методы получили после совмещения принципов голографии и нелинейной оптики, позволившего открыть новое направление – динамическую голографию. Динамическая голография основана на записи голограмм в нелинейных средах и позволяет реализовывать управление волновым фронтом световых пучков в реальном времени. Используя разнообразные механизмы оптической нелинейности, можно отслеживать изменения световых полей в различных временных масштабах, работая как с медленно изменяющимися световыми полями, так и со сверхкороткими лазерными импульсами, вплоть до фемтосекундного диапазона. Уже в первой работе [1] была выбрана схема записи динамической голограммы попутно распространяющимися пучками при считывании встречным пучком, позволяющая восстановить действительное изображение и реализовать эффект обращения волнового фронта [2]. На основе этого явления были развиты методы адаптивной оптики, позволившие компенсировать искажения волнового фронта при распространении света через фазово-неоднородные среды, создать мощные лазерные системы с малой расходимостью, повысить качество астрономических наблюдений и разработать высокочувствительные методы адаптивной интерферометрии [3–5].

В настоящей статье представлен обзор теоретических и экспериментальных исследований в области динамической голографии, рассмотрены классические аспекты голографии, а также нелинейно-оптический подход, основанный на схемах многоволнового взаимодействия. Особое внимание уделено использованию динамических голограмм для управления лазерными пучками и для трансформации волнового фронта световых пучков, в том числе сингулярных, в реальном времени. На основе метода динамических решеток, называемого также методом пространственно-модуляционной спектроскопии, предложены новые схемы бесконтактной диагностики функциональных материалов.

Теоретическое рассмотрение процессов записи и восстановления динамических голограмм целесообразно проводить с использованием метода разложения пространственного распределения светоиндуцированного амплитудно-фазового отклика среды в ряд по гармоникам динамических решеток, формируемых взаимодействующими волнами в объеме среды. Указанный подход позволяет не ограничиваться кубической нелинейностью, а корректно учесть нелинейности высших порядков, приводящих к появлению вторых и более высоких компонент разложения нелинейной восприимчивости среды в ряд Фурье [6].

В условиях записи голограммы волнами E_1 и E_S и считывания волной E_2 формируется дифрагированная волна E_D , которая в общем случае определяется нелинейной поляризацией $P = \chi^{(N-1)}(E_1 E_S^*)^M E_2$, где $M = N/2 - 1$ – порядок дифракции, при этом реализуется N -волновое взаимодействие на нелинейности $N-1$ порядка. Направление распространения дифрагированной волны для объемной голограммы определяется брэгговской дифракцией и следует из условия фазового синхронизма для волновых векторов: $\vec{k}_D = M\vec{k}_1 - M\vec{k}_S + \vec{k}_2$, которое может быть выполнено за счет изменения направления распространения считающей волны или ее частоты.

Анализ укороченных волновых уравнений, выполненный с учетом брэгговского отражения от объемных динамических голограмм, позволил записать для взаимодействующих волн систему дифференциальных уравнений:

$$\left. \begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial}{V \partial t} + \frac{\Delta_\perp}{2ik} \right) E_{1,S} &= \frac{i2\pi\omega}{cn_0} [\chi_0 E_{1,S} + \chi_{\pm 1} E_{S,1}] \\ \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial}{V \partial t} + \frac{\Delta_\perp}{2ik} \right) E_{2,D} &= -\frac{i2\pi\omega}{cn_0} [\chi_0 E_{2,D} + \chi_{\mp M} E_{D,2}] \end{aligned} \right\}. \quad (1)$$

где компоненты разложения $\chi_m = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \chi_{nl}(a) \exp[-ima] da$; $a = (\vec{k}_1 - \vec{k}_S) \cdot \vec{r}$, χ_{nl} –

нелинейная восприимчивость среды, $V = c/n_0$ – скорость света в среде, n_0 – начальное значение показателя преломления.

Система уравнений (1) позволяют описать когерентное взаимодействие волн в среде с произвольным типом нелинейности, при этом использование различных порядков нелинейности позволяет осуществлять корректировку волнового фронта световых пучков [7]. При плоских опорной и считающей волн ($M\varphi_1 + \varphi_2 = const$) фаза дифрагированной волны кратна фазе сигнальной волны $\varphi_D = -M\varphi_S$, что приводит к усилинию неоднородностей волнового фронта. Так, например, если на среду падает расходящийся сигнальный пучок с радиусом кривизны волнового фронта R_0 , то при дифракции в первый порядок генерируется волна с обращенным волновым фронтом (сходящийся световой пучок с тем же радиусом кривизны R_0). При дифракции во второй и более высокие порядки дифрагированный пучок будет также сходящимся, но радиус кривизны уменьшится ($R_M \approx R_0 / M$). Ситуация меняется при использовании для считывания волны на частоте, кратной частоте записывающих голограмму волн. Например, при использовании удвоенной

частоты и дифракции в первый порядок сохранение фазы ($\varphi_D = -\varphi_S$) при увеличении частоты ($\omega_D = 2\omega$) означает сглаживание пространственной структуры волнового фронта. Дифракция во второй порядок позволяет автоматически выполнить условие фазового синхронизма при встречном распространении опорной и считающей волн и реализовать эффект обращения волнового фронта с одновременным удвоением частоты световой волны. В качестве примера на рисунке 1 представлены фотографии исходного изображения (a), а также изображений, полученных при дифракции в первый (b) и второй порядок (c).

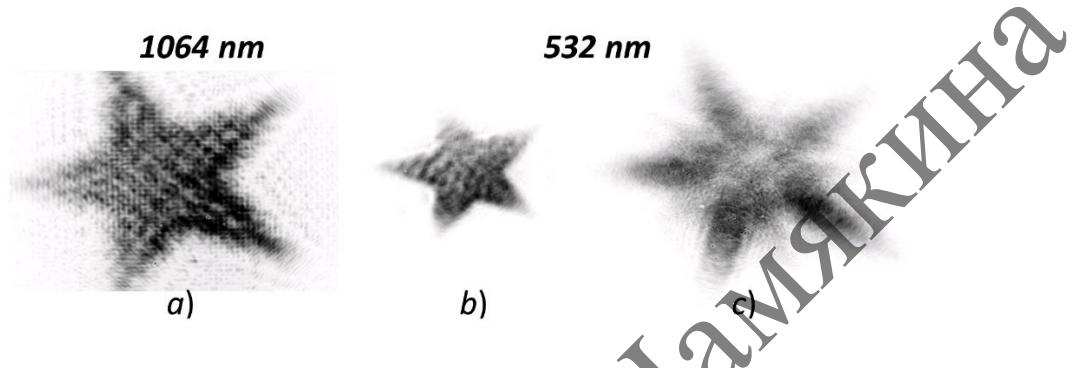


Рисунок 1 – Иллюстрация частотного преобразования изображений динамическими голограммами; a – исходное изображение, b, c – изображения, восстановленные в первом и втором порядке дифракции, соответственно

Заметим, что расширение возможностей динамической голографии для преобразования изображений связано с использованием сингулярных световых пучков (оптических вихрей), обладающих угловым моментом [8]. При интерференции такого пучка с плоской волной формируются вилки (разветвления интерференционных полос). Использование различных порядков дифракции позволяет мультилицировать топологический заряд. В случае использования сингулярных пучков с различными топологическими зарядами для записи и считывания динамической голограммы можно реализовать различные алгебраические операции – суммирование, вычитание, умножение на целое число, что перспективно для кодирования информации при рассмотрении топологического заряда в качестве информационного параметра.

С другой стороны, использование различных порядков дифракции позволяет выделить соответствующие компоненты нелинейной оптической восприимчивости и измерить нелинейности третьего, пятого и более высоких порядков [6; 7]. При считывании динамической голограммы непрерывным световым пучком можно получить информацию о кинетике происходящих в фоточувствительной среде нелинейных процессах. На рисунке 2 приведена осциллограмма дифрагированного сигнала при импульсной записи объемных решеток в фоторефрактивном кристалле силиката висмута, которая подтверждает проявление двух механизмов нелинейного изменения показателя преломления. Более быстрый механизм, с временами релаксации порядка сотен микросекунд можно связать с локальным заселением короткоживущих ловушечных уровней, в то время, как второй механизм с временами на уровне секунд можно объяснить диффузией электронов и заселением долгоживущих ловушек [9].

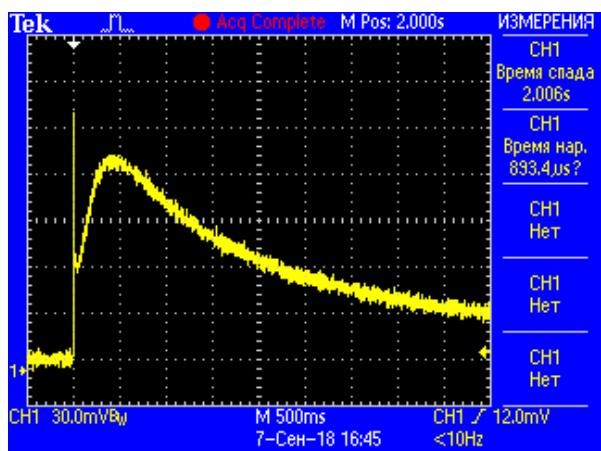


Рисунок 2 – Кинетика дифрагированного сигнала в фоторефрактивном кристалле силиката висмута

На рисунке 3 приведена типичная кинетика дифрагированного сигнала в монокристаллическом германии. Видно проявление двух механизмов нелинейности, различающихся знаком. Для разделения откликов был использован специальный метод с использованием дополнительной дифракционной решетки [10]. Полезный сигнал возникает вследствие дифракции пробного пучка на исследуемой динамической решетке и на дополнительной стационарной решетке – гомодине (периоды записываемой решетки и гомодина должны быть одинаковыми). Выделение полезного сигнала происходит за счет изменения фазы поля гомодина – поперечного смещения стационарной решетки на полпериода. На рисунке 3 также видно, что тепловая компонента дополнительно промодулирована акустической компонентой, которая возникает за счет нагрева тонкого приповерхностного слоя воздуха.

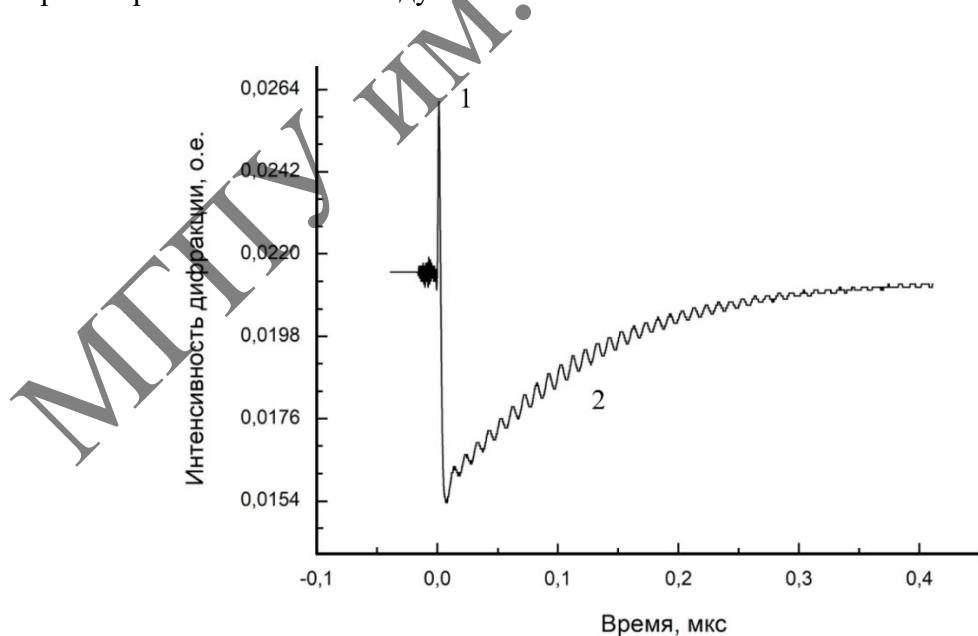


Рисунок 3 – Кинетика затухания дифрагированного сигнала в монокристаллическом германии:

1 – электронная компонента дифракции, 2 – тепловая компонента

Таким образом, использование метода динамической голограммии позволяет в реальном времени изменять фазу световых пучков, при этом пучки, дифрагированные на различных пространственных компонентах динамической решетки, различаются не только направлением распространения, но и пространственной структурой волнового фронта. Голографические методы позволяют реализовать инверсию и мультиплексирование топологического заряда, а также частотное преобразование изображений, визуализацию инфракрасных 3D-изображений и кодирование данных при использовании топологического заряда световых пучков в качестве информационного параметра. На основе метода динамических решеток (метода пространственно-модуляционной спектроскопии) предложены новые схемы бесконтактной диагностики материалов, используемых в современной фотонике и электронике. Показана возможность разделения различных механизмов нелинейности и измерения кинетических параметров объемных и тонкопленочных полупроводников.

Список использованных источников

1. Степанов, Б.И. О регистрации плоских и объемных динамических голограмм в просветляющихся веществах / Б.И. Степанов, Е.В. Ивакин, А.С. Рубанов // ДАН СССР. – 1971. – Т. 196. – С. 567–571.
2. Обращение волнового фронта методами динамической голограммии / Е.В. Ивакин, С.Г. Одолов, А.С. Рубанов, М.С. Соскин // Известия АН СССР. Сер. физическая. – 1981. – Т. 45, № 8. – С. 1403–1411.
3. Лазер с ВРМБ- и самонакачивающимся ОВФ-зеркалами / П.П. Пашинин, В.С. Сидорин, В.В. Туморин, Е.И. Шкловский // Квантовая электроника. – 1997. – Т. 24, № 1. – С. 55–56.
4. Ермолаева, Е.В. Адаптивная оптика / Е.В. Ермолаева, В.А. Зверев, А.А. Филатов. – СПб. : НИУ ИТМО, 2012. – 297 с.
5. Ромашко, Р.В. Адаптивная голографическая интерферометрия: техника, прогресс и приложения / Р.В. Ромашко // Вестник Дальневосточного отделения Российской академии наук. – 2021. – № 4. – С. 40–47.
6. Толстик, А.Л. Многоволновые взаимодействия в растворах сложных органических соединений / А.Л. Толстик. – Минск : БГУ, 2002. – 159 с.
7. Nonlinear formation of dynamic holograms and multiwave mixing in resonant media / A.S. Rubanov, A.L. Tolstik, S.M. Karpuk, O. Ormachea // Optics Commun. – 2000. – Vol. 181. – P. 183–190.
8. Tolstik, A.L. Singular Dynamic Holography / A.L. Tolstik // Russian Physics Journal – 2016. – V. 58, № 10. – P. 1431–1440.
9. Фотоиндущированное поглощение и импульсная запись динамических голограмм в кристаллах силиката висмута / И.Г. Даденков, А.Л. Толстик, Ю.И. Миксюк, К.А. Саечников // Оптика и спектроскопия. – 2020. – Т. 128. – С. 1290–1295.
10. Tolstik, A. Spatial modulation spectroscopy of semiconductors using dynamic gratings / A. Tolstik, I. Dadenkov, A. Stankevich // Journal of Optical Technology – 2022. – V. 89, № 5. – P. 250–254.

А.Н. Фурс

Белорусский государственный университет

ОДНОНАПРАВЛЕННОЕ РАСПРОСТРАНЕНИЕ ПОВЕРХНОСТНЫХ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН В РТ-СИММЕТРИЧНЫХ ГИРОТРОПНЫХ СТРУКТУРАХ

Выведено дисперсионное уравнение для поверхностных электромагнитных волн в РТ-симметричной структуре, состоящей из одинаковых гиротропных сред с противоположно направленными векторами гирации, ориентированными вдоль плоской границы раздела сред. Установлено, что такая структура проявляет вентильные свойства по отношению к поверхностным электромагнитным волнам.

Ключевые слова: РТ-симметричные структуры, поверхностные электромагнитные волны, оптические диоды.

Введение. В последнее время широко изучаются свойства РТ-симметричных систем, которые имеют большие перспективы для практического применения в качестве одномодовых лазеров, идеальных поглотителей и оптических сенсоров [1–3]. Неоднородная среда является РТ-симметричной, если для тензора диэлектрической проницаемости выполняется условие $\epsilon(-\mathbf{r}) = \epsilon^*(\mathbf{r})$, где \mathbf{r} – радиус-вектор, а звездочка обозначает комплексное сопряжение. В литературе, как правило, рассматриваются РТ-симметричные структуры, включающие одновременно как поглощающие, так и усиливающие среды, комплексная диэлектрическая проницаемость которых подчиняется приведенному выше условию. Для таких сред диэлектрическая проницаемость является неэрмитовой. В то же время для непоглощающих гиротропных сред тензор ϵ эрмитов [4; 5], однако для них также можно вести речь о РТ-симметрии, при этом неоднородность обуславливается уже различающейся в пространстве мнимой антисимметричной частью тензора ϵ (аналогично хиральным РТ-симметричным метаматериалам [6] с пространственно различающимся параметром хиральности).

Простейшим примером РТ-симметричной гиротропной структуры является совокупность двух однородных непоглощающих гиротропных сред, разделенных плоской границей, с противоположно направленными векторами гирации \mathbf{G} и описываемых диэлектрическими тензорами $\epsilon = \epsilon_0 + i\mathbf{G}^\times$ и $\epsilon' = \epsilon_0 - i\mathbf{G}^\times$. Здесь действительная симметричная часть ϵ_0 тензоров одна и та же для обеих сред. На границе раздела таких сред проявляется не только преломление и отражение плоских электромагнитных волн, но также оказывается возможным возбуждение поверхностных электромагнитных волн, локализованных по обе стороны границы. В работе исследуются эффекты невзаимности, обусловленные гиротропными свойствами РТ-симметричной структуры, и их влияние на характер распространения поверхностных волн. При этом предполагается, что среды аксиально симметричны, т.е. обратные тензоры диэлектрической проницаемости имеют вид

$$\epsilon^{-1} = a + (b - a)\mathbf{c} \otimes \mathbf{c} + ig\mathbf{c}^\times, \quad \epsilon'^{-1} = a + (b - a)\mathbf{c} \otimes \mathbf{c} - ig\mathbf{c}^\times, \quad (1)$$

где единичный вектор \mathbf{c} направлен вдоль оси симметрии, а a , b и g – материальные параметры (последний из них – параметр гирации; $a > 0$, $b > 0$ и, без потери общности, $g > 0$). В формулах (1) \mathbf{c}^\times обозначает антисимметричный тензор, дуальный вектору \mathbf{c} , а знак \otimes – тензорное произведение векторов [4].

Также предполагается, что осевая симметрия распространения поверхностных электромагнитных волн нарушена, а именно вектор \mathbf{c} не перпендикулярен границе раздела сред. Рассматривается простейший случай, когда \mathbf{c} параллелен этой границе. Вводя базис из взаимно перпендикулярных единичных векторов \mathbf{b} , \mathbf{q} и $\mathbf{a} = [\mathbf{b}\mathbf{q}]$, связанный с поверхностью волной, можно записать

$$\mathbf{c} = \mathbf{b} \cos \alpha + \mathbf{a} \sin \alpha,$$

где вектор \mathbf{b} определяет направление распространения поверхностной волны, \mathbf{q} – вектор нормали к границе раздела, направленный вовнутрь среды с тензором проницаемости ϵ' , а квадратные скобки обозначают векторное произведение. Угол α характеризует ориентацию вектора \mathbf{c} относительно \mathbf{b} и \mathbf{a} , и он может принимать значения от $-\pi$ до π (рисунок 1).

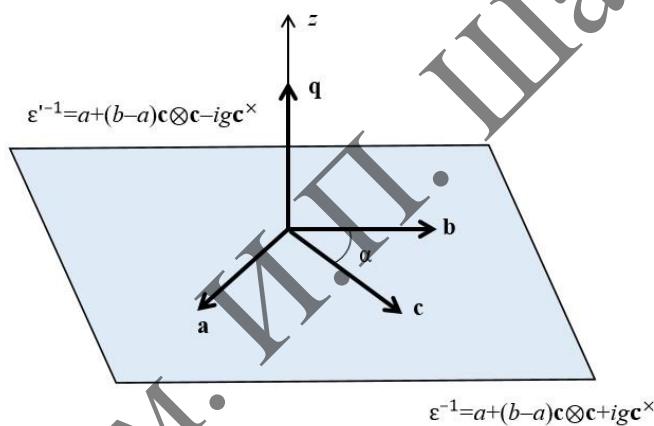


Рисунок 1 – Взаимное расположение поверхностно-волнового базиса $\{\mathbf{b}, \mathbf{q}, \mathbf{a}\}$ и оси с РТ-симметричной гиротропной структуры

В работе устанавливается важное свойство поверхностных электромагнитных волн в сдвоенных РТ-симметричных гиротропных структурах – односторонность их распространения. Это означает, что если поверхностная волна может распространяться в некотором направлении, задаваемом вектором \mathbf{b} , то в противоположном направлении $-\mathbf{b}$ она распространяться не может. Данный эффект является следствием невзаимности пограничных гиротропных сред. Таким образом, рассматриваемая структура может выступать оптическим вентилем в отношении поверхностных электромагнитных волн.

В работе устанавливается важное свойство поверхностных электромагнитных волн в сдвоенных РТ-симметричных гиротропных структурах – односторонность их распространения. Это означает, что если поверхностная волна может распространяться в некотором направлении, задаваемом вектором \mathbf{b} , то в противоположном направлении $-\mathbf{b}$ она распространяться не может. Данный эффект является следствием невзаимности

пограничных гиротропных сред. Таким образом, рассматриваемая структура может выступать оптическим вентилем в отношении поверхностных электромагнитных волн.

Нами исследуется как частный случай распространения поверхностных волн перпендикулярно направлению вектора \mathbf{c} , изученный ранее в работе [7] $\alpha = \pm\pi/2$, $\mathbf{c} = \pm\mathbf{a}$ или $\mathbf{b} = \pm[\mathbf{q}\mathbf{c}]$), так и более общий случай произвольных направлений распространения, для которого угол α принимает любые значения. Получаемое при этом дисперсионное уравнение оказывается неинвариантным относительно обращения хода поверхностной волны, т.е. относительно замены $\alpha \rightarrow \alpha - \pi$. Это означает, что для сдвоенных РТ-симметричных гиротропных структур характерны указанные выше вентильные свойства по отношению к поверхностным электромагнитным волнам.

Распространение поверхностных волн перпендикулярно оси симметрии гиротропной структуры. Пусть начало отсчета расположено на границе раздела сред, а декартова ось z направлена вдоль вектора \mathbf{q} . Гиротропная среда с обратным диэлектрическим тензором ε^{-1} расположена при этом в полупространстве $z < 0$, а среда, характеризуемая тензором ε'^{-1} — в полупространстве $z > 0$. Электромагнитное поле поверхностной волны при $z < 0$ описывается уравнениями

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \sum_{s=1}^2 C_s \mathbf{H}_s \exp\left[i\omega\left(\frac{\mathbf{m}_s \cdot \mathbf{r}}{c} - t\right)\right], \quad \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \sum_{s=1}^2 C_s \mathbf{E}_s \exp\left[i\omega\left(\frac{\mathbf{m}_s \cdot \mathbf{r}}{c} - t\right)\right], \quad (2)$$

где \mathbf{H}_s и \mathbf{E}_s — векторные амплитуды, а C_s — весовые коэффициенты парциальных волн. Векторы рефракции, входящие в (2), имеют вид $\mathbf{m}_s = (\mathbf{b} + \eta_s \mathbf{q})/\nu$, где $\nu = \omega/(ck)$ — безразмерная фазовая скорость поверхностной волны в единицах c , ω — частота, k — волновое число, а η_s — комплексные параметры локализации парциальных волн, при этом $\text{Im} \eta_s < 0$. При $z > 0$ электромагнитное поле $\mathbf{H}'(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{E}'(\mathbf{r}, t)$ описывается аналогичными уравнениями с заменой величин \mathbf{H}_s , \mathbf{E}_s , C_s , \mathbf{m}_s и η_s на штрихованные, причем $\text{Im} \eta'_s > 0$.

Из уравнений Максвелла следует, что $\mathbf{m}_s \cdot \mathbf{H}_s = 0$, $(\mathbf{m}_s^\times \varepsilon^{-1} \mathbf{m}_s^\times + 1) \mathbf{H}_s = 0$ и $\mathbf{E}_s = -\varepsilon^{-1} [\mathbf{m}_s \mathbf{H}_s]$, $s = 1, 2$ (см. [4]). С учетом того, что обратный тензор диэлектрической проницаемости ε^{-1} имеет вид (1), а направление распространения поверхностной волны перпендикулярно вектору \mathbf{c} (т.е. $\mathbf{c} = \pm\mathbf{a}$), из этих соотношений получаются выражения для параметров локализации парциальных волн $\eta_1 = -i\sqrt{(a-\nu^2)/a}$, $\eta_2 = -i\sqrt{(b-\nu^2)/b}$, а также для их векторных амплитуд:

$$\mathbf{H}_1 = \mathbf{E}_2 = \mathbf{a}, \quad \mathbf{H}_2 = \frac{1}{\nu}(\eta_2 \mathbf{b} - \mathbf{q}), \quad \mathbf{E}_1 = \frac{1}{\nu}((-a\eta_1 \mp ig)\mathbf{b} + (a \mp ig\eta_1)\mathbf{q}). \quad (3)$$

Верхние и нижние знаки в (3) соответствуют взаимно противоположным направлениям распространения поверхностной волны $\mathbf{b} = +[\mathbf{q}\mathbf{c}]$ и $\mathbf{b} = -[\mathbf{q}\mathbf{c}]$.

Аналогично парциальные волны в полупространстве $z > 0$ описываются параметрами локализации $\eta'_1 = -\eta_1 = i\sqrt{(a-\nu^2)/a}$, $\eta'_2 = -\eta_2 = i\sqrt{(b-\nu^2)/b}$, при этом

$$\mathbf{H}'_1 = \mathbf{E}'_2 = \mathbf{a}, \quad \mathbf{H}'_2 = \frac{1}{\nu}(-\eta_2 \mathbf{b} - \mathbf{q}), \quad \mathbf{E}'_1 = \frac{1}{\nu}((a\eta_1 \pm ig)\mathbf{b} + (a \mp ig\eta_1)\mathbf{q}). \quad (4)$$

Граничные условия состоят в том, что тангенциальные компоненты электрического и магнитного полей непрерывны на границе раздела, и в рассматриваемом случае принимают вид $C_1 \mathbf{H}_{1\tau} + C_2 \mathbf{H}_{2\tau} = C'_1 \mathbf{H}'_{1\tau} + C'_2 \mathbf{H}'_{2\tau}$ и $C_1 \mathbf{E}_{1\tau} + C_2 \mathbf{E}_{2\tau} = C'_1 \mathbf{E}'_{1\tau} + C'_2 \mathbf{E}'_{2\tau}$. При подстановке в них соотношений (3) и (4) получаем следующее простое дисперсионное уравнение

$$\sqrt{a(a-\nu^2)} = \pm g, \quad (5)$$

при этом коэффициенты C_2 и C'_2 обращаются в нуль, а коэффициенты C_1 и C'_1 произвольны и совпадают. Таким образом, поверхностная волна является однопарциальной, а из дисперсионного уравнения (5) следует, что она может распространяться только в направлении $\mathbf{b} = +[\mathbf{qc}]$, но в противоположном $\mathbf{b} = -[\mathbf{qc}]$ – нет. Квадрат безразмерной фазовой скорости волны $\nu^2 = \nu_s^2 = a - g^2/a$ при этом не зависит от параметра b .

Распространение поверхностных волн в произвольном направлении к оси симметрии гиротропной структуры. В работе [7] на основе общего симметрийного анализа волновых уравнений было установлено, что свойство односторонности распространения поверхностных электромагнитных волн характерно не только для рассмотренного выше случая $\alpha = \pm\pi/2$, но и для произвольных направлений распространения по отношению к вектору \mathbf{c} – оси симметрии гиротропной структуры (рисунок 1). Однако соответствующее дисперсионное уравнение там получено не было. Следует отметить, что оно может быть выведено на основе соотношений для векторов рефракции парциальных волн и граничных условий для тангенциальных компонент полей, представленных в предыдущем разделе. Но всё же более эффективным для этих целей является подход, основанный на интегральном представлении тензоров импедансов для поверхностных электромагнитных волн в линейных бианизотропных средах [8]. Окончательный результат представляется в следующем виде:

$$\frac{\Delta \sqrt{abC}}{(d-\nu^2)\Delta - \nu^2 g^2 \cos^2 \alpha} \left[1 - \frac{g}{\sqrt{\Delta}} \left(\frac{b-\nu^2}{\sqrt{C}} + \sqrt{\frac{b}{a}} \right) \sin \alpha + \frac{\nu^2 g^2}{\Delta} \sqrt{\frac{b}{aC}} \cos^2 \alpha \right] = 0, \quad (6)$$

где $\Delta = a(b+d) - g^2 \cos^2 \alpha - (a+b)\nu^2 + 2\sqrt{abC}$, $C = (a-\nu^2)(d-\nu^2) - g^2 \cos^2 \alpha$ и $d = a \cos^2 \alpha + b \sin^2 \alpha$. Решения уравнения (6) отыскиваются в интервале $(0, \nu_L)$, где

$$\nu_L^2 = \frac{1}{2} \left(a + d - \sqrt{(d-a)^2 + 4g^2 \cos^2 \alpha} \right).$$

При $\alpha = \pm\pi/2$ оно принимает вид (с учетом того, что в этом случае $d = b$, $C = (a-\nu^2)(b-\nu^2)$ и $\Delta = (\sqrt{b(a-\nu^2)} + \sqrt{a(b-\nu^2)})^2$)

$$\sqrt{\frac{ab(a-\nu^2)}{b-\nu^2}} \left[1 \pm \frac{g}{\sqrt{a(a-\nu^2)}} \right] = 0$$

и с точностью до множителя совпадает с дисперсионным уравнением (5).

В квадратных скобках уравнении (6) содержится $\sin \alpha$, поэтому оно неинвариантно относительно замены $\alpha \rightarrow \alpha - \pi$, т.е. при обращении хода поверхностной волны. Можно показать, что если это уравнение имеет решение $v = v_s$ при заданном значении угла α , то для угла $\alpha - \pi$ на интервале $v \in (0, v_L)$ решений нет. Таким образом, РТ-симметричная гиротропная структура проявляет вентильные свойства также для углов распространения α , отличных от прямого.

В то же время дисперсионное уравнение (6) инвариантно относительно замены $\alpha \rightarrow \pi - \alpha$. Отсюда следует, что если возможно возбуждение поверхностной волны, направленной под углом α по отношению к вектору \mathbf{c} , то также возможно и возбуждение поверхностной волны с той же фазовой скоростью под углом $\pi - \alpha$ по отношению к этому вектору (см. также [7]).

Заключение. Сдвоенные РТ-симметричные гиротропные структуры, характеризуемые обратными диэлектрическими тензорами (1), проявляют важное свойство одностороннего распространения поверхностных электромагнитных волн. Иными словами, такие структуры можно рассматривать как оптические диоды для поверхностных волн. Нами исследован случай, когда ось симметрии \mathbf{c} гиротропной структуры лежит в плоскости раздела сред, и для этого случая выведено дисперсионное уравнение (6). В дальнейшем планируется провести отдельный подробный анализ решений этого уравнения в зависимости от различных соотношений между материальными параметрами a , b и g .

Список использованных источников

1. Praveena, K. A review: Rise of PT-symmetry for laser applications / K. Praveena, K. Senthilnathan // Optik. – 2023. – V. 289. – P. 171260.
2. Зябловский, А.А. РТ-симметрия в оптике / А.А. Зябловский, А.П. Виноградов, А.А. Пухов, А.В. Дорофеенко, А.А. Лисянский // Успехи физ. наук. – 2014. – Т. 184, № 11. – С. 1177–1196.
3. Non-Hermitian physics and PT symmetry / R. El-Ganainy, K.G. Makris, M. Khajavikhan, Z.H. Musslimani, S. Rotter, D.N. Christodoulides // Nature Physics. – 2018. – V. 14. – P. 11–19.
4. Федоров, Ф.И. Теория гиротропии / Ф.И. Федоров. – Минск : Наука и техника, 1976. – 456 с.
5. Оптические свойства кристаллов / А.Ф. Константинова, Б.Н. Гречушников, Б.В. Бокутъ, Е.Г. Валяшко. – Минск : Наука и техника, 1995. – 302 с.
6. Chiral Metamaterials with PT Symmetry and Beyond / S. Droulias, I. Katsantonis, M. Kafesaki, C. M. Soukoulis, E. N. Economou // Phys. Rev. Lett. – 2019. – V. 122. – P. 213201.
7. Фурс, А.Н. Оптические вентили на поверхностных электромагнитных волнах в РТ-симметричных гиротропных структурах. I. Частные случаи / А.Н. Фурс, А.В. Новицкий // Кристаллография. – 2023. – Т. 68, № 1. – С. 62–67.
8. Galynsky, V.M. Integral formalism for surface electromagnetic waves in bianisotropic media / V.M. Galynsky, A.N. Furs, L.M. Barkovsky // J. Phys. A: Math. Gen. – 2004. – V. 37. – P. 5083–5096.

М.М. Хартон, А.В. Новицкий
Белорусский государственный университет

РАССЕЯНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН УПОРЯДОЧЕННОЙ СИСТЕМОЙ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ЦИЛИНДРОВ

В данной работе разработан метод полуаналитического расчета характеристик электромагнитных волн, рассеянных на упорядоченной системе параллельных цилиндров. С его помощью можно получать значения интегральных и дифференциальных характеристик с той же точностью, что и сами поля, а также одновременно изучать структуру поля как в ближней, так и в дальней зоне.

Ключевые слова: рассеяние, численные методы, периодические структуры, цилиндр, электромагнитные волны.

Введение. Периодические диэлектрические или металлические структуры являются предметом постоянного интереса для приложений к частотно-селективным или поляризационно-селективным устройствам в микроволнах и оптических волнах [1, 2]. Моделирование систем упорядоченных параллельных цилиндров для управления рассеянием электромагнитных волн обладает высокой актуальностью как в фундаментальной науке, так и в прикладных технологиях. Упорядоченные системы цилиндров позволяют изучать сложные взаимодействия волн с периодическими структурами, включая резонансы и интерференцию [3].

Моделирование таких систем позволяет связать микроскопические параметры (радиус, период, материал цилиндров) с макроскопическими свойствами, такими как эффективный показатель преломления [4]. Это критично для проектирования метаматериалов с экзотическими свойствами (отрицательное преломление, невидимость). Упорядоченные массивы цилиндров могут заменять объёмные линзы, обеспечивая фокусировку волн в ультракомпактных устройствах [5], что актуально для интегральной фотоники и миниатюризации оптических систем.

Целью данной работы является разработка полуаналитического метода расчета рассеянных на упорядоченной системе из параллельных круглых цилиндров электромагнитных волн.

Основная часть. Электромагнитное поле рассеянной на одном круглом диэлектрическом цилиндре волны описывается следующими формулами [6]

$$TM : \begin{pmatrix} \mathbf{H}(\mathbf{r}) \\ \mathbf{E}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}_{sc} = H_0^{TM} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} b_m^{TM} e^{im\varphi} \begin{pmatrix} \mathbf{e}_z H_m^{(1)}(k\rho) \\ -\frac{1}{2} [\mathbf{e}_+ H_{m-1}^{(1)}(k\rho) + \mathbf{e}_- H_{m+1}^{(1)}(k\rho)] \end{pmatrix}, \quad (1)$$

$$TE : \begin{pmatrix} \mathbf{H}(\mathbf{r}) \\ \mathbf{E}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}_{sc} = H_0^{TE} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} b_m^{TE} e^{im\varphi} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} [\mathbf{e}_+ H_{m-1}^{(1)}(k\rho) + \mathbf{e}_- H_{m+1}^{(1)}(k\rho)] \\ \mathbf{e}_z H_m^{(1)}(k\rho) \end{pmatrix}.$$

В (1) использованы обозначения $\mathbf{e}_\pm = \mathbf{e}_\rho \pm i\mathbf{e}_\varphi$ для комплексных векторов, введенных на основании ортонормированного базиса $\{\mathbf{e}_\rho, \mathbf{e}_\varphi, \mathbf{e}_z\}$ цилиндрической системы координат с осью, совпадающей с осью симметрии цилиндра, на котором происходит рассеяние, H_0 – амплитуда падающей волны, k – её волновой вектор.

Решётка, состоящая из параллельных цилиндров, является двумерной, поэтому её описание производится с помощью пары индексов (i, j) или соответствующего мультииндекса $\mu \equiv (i, j)$. Всюду, где идет суммирование по (i, j) , если не оговорено особо, подразумевается суммирование по всем цилиндрам.

Для описания суммарного поля, создаваемого системой, следует учесть повторные отражения рассеянных волн на других цилиндрах. Это особенно важно, если упаковка цилиндров плотная, например, если они расположены вплотную друг к другу. Получим выражение, позволяющее преобразовать цилиндрическую волну из одной системы координат в другую, отличающуюся параллельным смещением оси. Так, согласно теореме сложения Графа [7], имеем

$$H_m^{(1)}(k\rho_{\mu'})e^{im(\pi+\varphi_{\mu'}-\theta_{\mu,\mu'})} = \sum_{s=-\infty}^{+\infty} H_{m+s}^{(1)}(k\rho_{\mu,\mu'})J_s(k\rho_{\mu})e^{is(\theta_{\mu,\mu'}-\varphi_{\mu})}, \quad (2)$$

или

$$H_{m'}^{(1)}(k\rho_{\mu'})e^{im'\varphi_{\mu'}} = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} G_{m,m'}(\rho_{\mu,\mu'}, \theta_{\mu,\mu'})J_m(k\rho_{\mu})e^{im\varphi_{\mu}}, \quad (3)$$

где определена парциальная функция Грина

$$G_{m,m'}(\rho, \theta) = e^{i(m'-m)\pi} H_{m'-m}^{(1)}(k\rho) e^{i(m'-m)\theta}. \quad (4)$$

Здесь введены расстояния $\rho_{\mu}, \rho_{\mu'}$ от цилиндров μ, μ' до точки P соответственно и расстояние $\rho_{\mu,\mu'}$ между ними; углы $\varphi_{\mu}, \varphi_{\mu'}$ определяют направления от цилиндров на рассматриваемую точку, а угол $\theta_{\mu,\mu'}$ дает направление от цилиндра μ на μ' (см. рисунок 1).

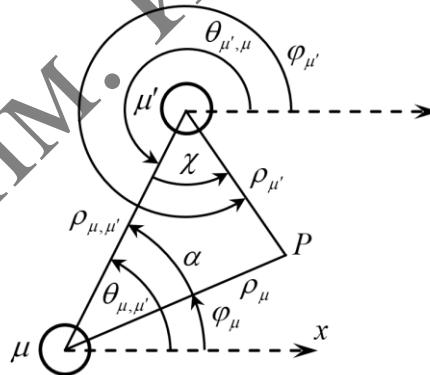


Рисунок 1 – Геометрия относительного расположения цилиндров

Выделенная на рисунке 1 пунктиром ось Ox введена вдоль направления распространения падающей плоской волны. Использование (2) и (3) приводит к системе линейных уравнений относительно парциальных коэффициентов рассеяния $b_{m',\mu'}$

$$\sum_{m'=-\infty}^{+\infty} \sum_{\mu'} \left[\delta_{m,m'} \delta_{\mu,\mu'} (1 + i\Omega_{\mu}) + (1 - \delta_{\mu,\mu'}) G_{m,m'}(\rho_{\mu,\mu'}, \theta_{\mu,\mu'}) \right] b_{m',\mu'} = -i^m e^{ikx_{\mu}} H_0, \quad (5)$$

где x_{μ} – координата вдоль оси Ox μ -го цилиндра, Ω_{μ} – коэффициенты, зависящие от поляризации и определенные следующим образом

$$\Omega_\mu = \frac{\beta J_m(k_v R_\mu) \Delta_m Y_m(kR_\mu) - Y_m(kR_\mu) \Delta_m J_m(k_v R_\mu)}{\beta J_m(k_v R_\mu) \Delta_m J_m(kR_\mu) - J_m(kR_\mu) \Delta_m J_m(k_v R_\mu)}. \quad (6)$$

Здесь $\beta = \sqrt{\epsilon}$ для ТМ-поляризации и $\beta = (\sqrt{\epsilon})^{-1}$ для ТЕ-поляризации; $\Delta_m F_m = F_{m-1} - F_{m+1}$ для любых функций Бесселя F_m ; волновое число $k_v = k\sqrt{\epsilon}$. ТЕ(ТМ)-поляризация соответствуют параллельности вектора напряженности электрического (магнитного) поля оси цилиндра. Отметим, что система (5) даёт бесконечное число уравнений: $\forall m \in \mathbb{Z}$, и дает точное решение для коэффициентов рассеяния $b_{m',\mu'}$, которыми следует заменить $b_m^{TM(TE)}$ в (1). Эти коэффициенты также определяют поле внутри цилиндра [6]. Для практических расчетов следует, конечно, ограничить максимальный порядок учитываемых слагаемых. Оценка может быть сделана исходя из физических соображений – величина $k_v R$ характеризует примерное значение минимального необходимого порядка. Метод наиболее эффективен, таким образом, при длине волны, сравнимой с радиусом цилиндров.

Если структура системы имеет достаточную степень симметрии, то повышение производительности достигается за счет совпадения значений функций, характеризующих взаимное рассеяние и переотражение (4), а также рассеяние на одиночном цилиндре (6). СЛАУ (5) может носить ленточный характер с сосредоточением элементов вблизи главной диагонали при больших числах элементов системы, что также может быть использовано для оптимизации вычислений в некоторых случаях. При фиксированном соотношении радиусов цилиндров и длины волны увеличение количества уравнений в (5) за счет принятия во внимание все большего числа мод с увеличивающимся порядком m (симметрично как в сторону положительных, так и в сторону отрицательных значений) гарантирует сходимость получаемого решения к истинному ввиду асимптотического характера (4) и (6), основанного на свойствах функций Бесселя и Ханкеля [7], причем точность решения крайне быстро растет после достижения минимального числа необходимых уравнений.

Для демонстрации и проверки работы метода были проведены расчеты для гексагональной системы расположенных вплотную диэлектрических цилиндров (см. рисунок 2). На рисунке 2 приведено распределение квадрата модуля напряженности электрического поля при падении плоской ТЕ-поляризованной электромагнитной волны на гексагональную систему из 19 диэлектрических цилиндров (волна распространяется в положительном направлении оси Ox). Значения нормированы на квадрат амплитуды падающей волны. Для демонстрируемых значений параметров эффективный показатель преломления близок к 2, поэтому наблюдается фокусировка электромагнитного излучения.

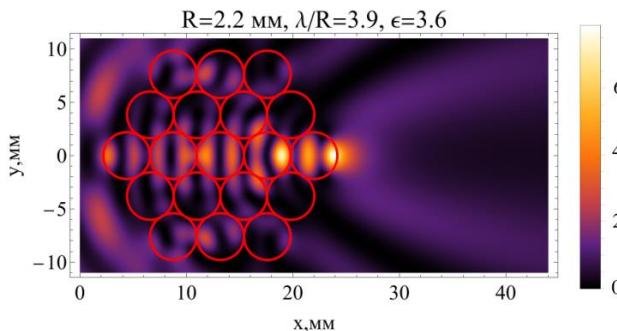


Рисунок 2 – Квадрат модуля напряженности электрического поля при рассеянии плоской ТЕ-поляризованной волны на системе диэлектрических цилиндров; $R=2.2$ мм, $\lambda/R=3.9$, $\epsilon=3.6$

Заключение. Разработан метод точного расчета электромагнитного поля волны, рассеянной на упорядоченной системе параллельных цилиндров. Поскольку результатом являются парциальные коэффициенты рассеяния, то многие дополнительные величины, такие как оптическая сила, значения градиентов полей, дифференциальное и интегральное сечения рассеяния, вектор Умова-Пойнтинга и другие могут быть вычислены с той же точностью, что и электрическое и магнитное поле. Наибольшая эффективность достигается при относительно небольшом числе цилиндров – в пределах нескольких десятков и длине волны, сравнимой с их радиусами. В иных случаях необходимо строить дополнительные предположения. Метод пригоден для расчетов в том числе с цилиндрами различных радиусов.

Представленный метод может быть применен для расчетов рассеяния электромагнитных волн на различных малоразмерных структурах, состоящих из параллельных круглых цилиндров, в том числе неоднородных, демонстрируя при этом высокую эффективность и точность.

Список использованных источников

1. Toyama, H. Electromagnetic scattering from periodic arrays of composite circular cylinders with internal cylindrical scatterers / H. Toyama, K. Yasumoto // Progress In Electromagnetics Research. – 2005. – Т. 52. – Р. 321–333.
2. Yasumoto, K. Modeling of Photonic Crystals by Multilayered Periodic Arrays of Circular Cylinders / K. Yasumoto, H. Jia // Electromagnetic Theory and Applications for Photonic Crystals. – CRC Press, 2006.
3. Yuan, L. Strong resonances on periodic arrays of cylinders and optical bistability with weak incident waves / L. Yuan, Y. Lu. // Physical Review A. – 2017. – Т. 95. – Р. 023834.
4. Choy, T.C. Effective medium theory: principles and applications / T.C. Choy. – Oxford University Press, 2015. – 256 p.
5. Gupta, B. Focusing of electromagnetic waves by periodic arrays of dielectric cylinders / B. Gupta, Z. Ye // Physical Review B. – 2003. – Т. 67. – Р. 153109.
6. Хартона, М.М. Влияние хиральности полуметаллов Вейля на рассеивающие свойства цилиндров / М.М. Хартона, А.В. Новицкий // Современные проблемы физики – 2024. XI Международная школа-конференция молодых учёных и специалистов : сб. науч. тр. (Минск, 24–26 апр. 2024) / под ред. Д.С. Василевской, Е.С. Жарниковой. – Минск, 2024. – С. 95–98.
7. Abramowitz, M. Handbook of mathematical functions: with formulas, graphs and mathematical tables: Dover books on advanced mathematics. Handbook of mathematical functions / M. Abramowitz, I.A. Stegun. – New York : Dover publ, 1972.

Е.А. Чудаков¹, Н.Н. Федосенко², Е.А. Кулеш², Н.И. Стаськов¹

¹*Могилевский государственный университет имени А.А. Кулешова*

²*Гомельский государственный университет имени Ф. Скорины*

ОБРАТНАЯ ЗАДАЧА СПЕКТРОФОТОМЕРИИ ДЛЯ ИНТЕРФЕРЕНЦИОННЫХ ПОКРЫТИЙ НА КРЕМНИИ

Методом электронно-лучевого испарения сформированы многослойные чередующиеся покрытия из двуокиси циркония и кремния на подложках КДБ12. Толщины и спектры показателей преломления 7-слойного интерференционного покрытия восстановлены путем обработки спектров отражательных способностей, измеренных для волн s- и р-поляризации при четырех углах падения света. Показатели преломления тонких слоёв ZrO₂ и SiO₂ 7-слойного интерференционного покрытия на кремнике зависят от условий электронно-лучевого синтеза. Наблюдаются различия известных показателей преломления диоксидов с полученными на практике.

Ключевые слова: спектрофотометрия, отражательная способность многослойного покрытия, интерференционные покрытия на кремниевой подложке.

Введение. Интерференционные покрытия на плоскопараллельных подложках широко используются в антибликовых, зеркальных и поляризационных системах. Качественное изготовление таких покрытий предполагает отслеживание технологического процесса в реальном времени. Для этой цели могут быть использованы системы спектрофотометрического контроля параметров покрытий, встроенные непосредственно в вакуумные установки.

Формирование многослойных покрытий на основе двуокиси циркония и кремния (ZrO₂ и SiO₂) осуществлялось с помощью установки вакуумного напыления ВУ-1А, оборудованной источником электронно-лучевого испарения УЭЛИ-І и системой контроля оптических характеристик модели Iris 0211 (ООО «ЭссентОптика», Республика Беларусь). Осаждение покрытий осуществлялось при максимальном ускоряющем напряжении 12 кВ, током эмиссии от 10 до 200 мА при остаточном давлении в камере $6 \cdot 10^{-3}$ Па и длине волн контроля оптической толщины слоев 568 нм. Разработанная конструкция поляризационного покрытия представляет собой последовательно осажденные на подложку чередующиеся тонкие слои тугоплавких окислов ZrO₂ и SiO₂ с количеством слоев N=7, где начальным и заключительным слоем выступает ZrO₂. В качестве подложки использовали промышленный кремний КДБ12 (ориентация <100>).

В процессе осаждения многослойных оптических покрытий необходимо постоянно контролировать оптическую толщину осаждаемого слоя, так как даже незначительные отклонения от рассчитанной конструкции или нестабильность режима осаждения неминуемо приводят к сдвигу спектральных свойств. Системы контроля позволяют осаждать слои с толщиной, совпадающей с расчётными значениями, добиваясь при этом минимальных расхождений между экспериментальными и расчетными значениями. Однако в процессе осаждения существуют некоторые погрешности в оптических толщинах

формируемых слоев и по мере осаждения последних слоев эффект носит накопительный характер. Данная проблема имеет значительное влияние лишь при осаждении первого слоя, для остальных слоев дрифт показателя преломления не имеет значительного эффекта и не отличается от расчетных значений. Таким образом, при осаждении финишных слоев можно провести компенсацию и изменить толщину покрытия с целью достижения соответствия расчетным параметрам (таблица 1).

Таблица 1 – Восстановленные толщины слоев d и показатели преломления ($\lambda=568\text{нм}$) для 7-слойного интерференционного покрытия на КДБ12

Материал	№ слоя	d, nm	n
ZrO ₂	1	12.19	2.080
SiO ₂	2	99.56	1.460
ZrO ₂	3	7.54	1.833
SiO ₂	4	108.65	1.365
ZrO ₂	5	10.62	2.277
SiO ₂	6	98.17	1.560
ZrO ₂	7	9.08	2.509

Отражательные способности 7-слойного интерференционного покрытия на кремниевой подложке в s- и p-поляризованном свете при углах падения от 15° до 60° ($\Delta\theta=15^\circ$) были измерены с помощью спектрофотометра Photon RT (Essent Optics) в диапазоне длин волн от 400 до 950 нм (рисунок 1).

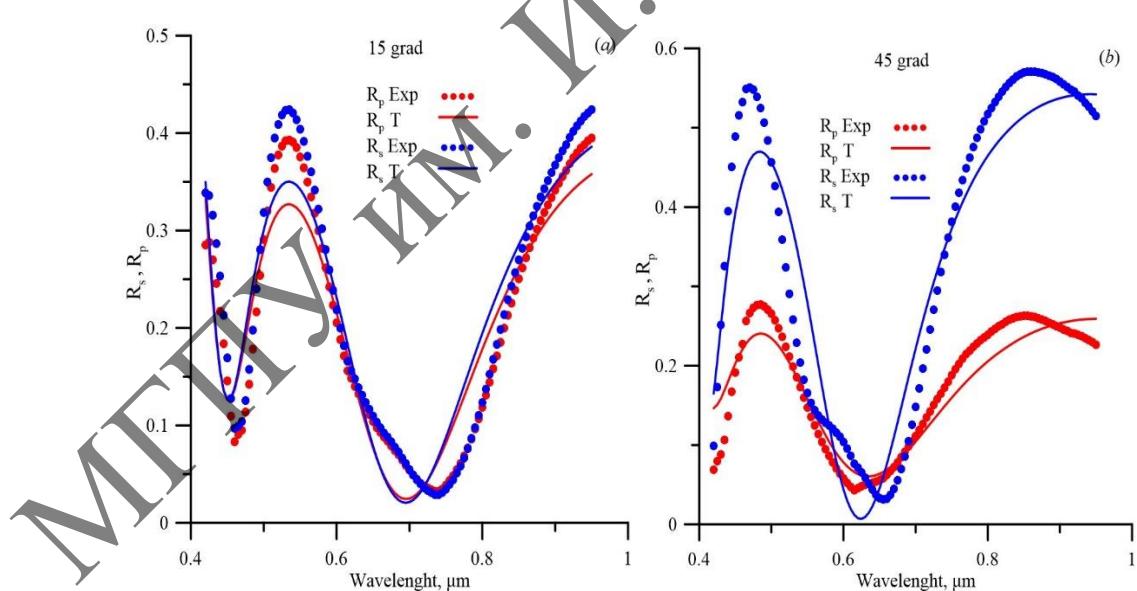


Рисунок 1 – Экспериментальные (точки) и теоретические (сплошные кривые) спектры R_s и R_p для 7-слойного интерференционного покрытия

Рассчитанные по спектрам отражения однослойных покрытий [1] показатели преломления ZrO₂ и SiO₂ имеют соответствующие величины 1.924 и 1.475, близкие к величинам, приведенным в таблице для первого слоя. Различие общепринятых показателей

преломления [2; 3] с полученными на практике связано с условиями вакуумного электронно-лучевого формирования покрытий, влияющих на их структуру [1].

На рисунке 1 приведены рассчитанные отражательные способности 7-слойного интерференционного покрытия на кремниевой подложке, полученные матричным методом [4–7] по данным таблицы 1 и восстановленным показателям преломления (рисунок 2).

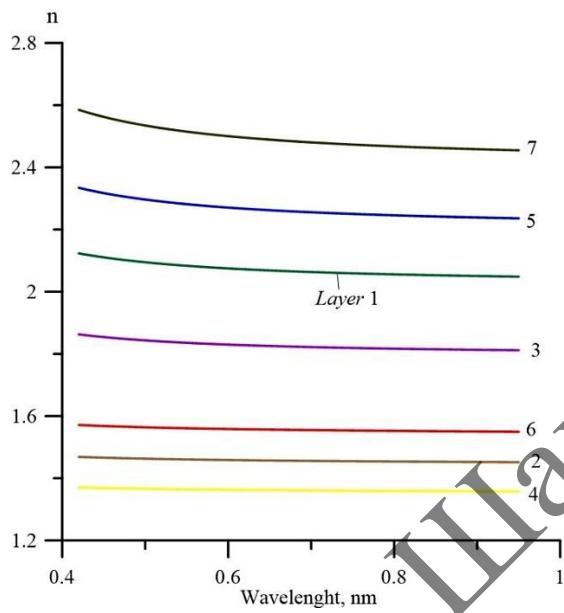


Рисунок 2 – Восстановленные спектры показателя преломления 7-слойного покрытия. Номера кривых соответствуют номерам слоев

Заключение. Разработанный метод решения обратной задачи многоугловой спектрофотометрии поляризованного света можно использовать для определения толщин и показателей преломления интерференционных покрытий на полупроводниковых и диэлектрических пластинах. В случае стеклянных пластин (К8, кварц и т.д.) с 2-сторонним покрытием дополнительные измерения спектров пропускания позволяют учесть слабое поглощение в элементах структуры.

Работа выполнена в рамках Государственной программы научных исследований Республику Беларусь «1.15 Фотоника и электроника для инноваций» и в рамках ГПНИ «Фотоника и электроника для инноваций», задание 1.12.

Список использованных источников

1. Рогачев, А.В. Многослойные плёночные поляризаторы на основе тугоплавких оксидов / А.В. Рогачев, Н.Н. Федосенко, Д.Л. Горбачев // Проблемы физики, математики и техники. – 2015. – Т. 25, № 4. – С. 27–30.
2. Tan, C.Z. Determination of refractive index of silica glass for infrared wavelengths by IR spectroscopy / C.Z. Tan // Journal of Non-Crystalline Solids. – 1998. – Т. 223, № 1–2. – С. 158–163.
3. Wood, D.L. Refractive index of cubic zirconia stabilized with yttria / D.L. Wood, K. Nassau // Applied Optics. – 1982. – Vol. 21, № 16. – С. 2978–2981.

4. Модель Лорентц-Лоренца в обратной задаче спектрофотометрии неоднородного слоя / А.Б. Сотский, К.Н. Кривецкий, С.О. Парашков, Л.И. Сотская // ЖПС. – 2016. – Т. 83, № 5. – С. 809–817.

5. Сотская, Л.И. Задача спектрофотометрии растущего слоя / Л.И. Сотская, Е.А. Чудаков, А.Б. Сотский // Материалы, оборудование и ресурсосберегающие технологии : Материалы Междунар. науч.-техн. конф., Могилев, 21–22 апр. 2022 г. ; редкол.: М.Е. Лустенков (гл. ред.) [и др.]. – Могилев, 2022. – С. 417–418.

6. Спектрофотометрия интерференционного покрытия в ходе его изготовления / Л.И. Сотская, Е.А. Чудаков, А.Б. Сотский [и др.] // Современные методы и приборы контроля качества и диагностики состояния объектов : сб. ст. 8-й Междунар. науч.-техн. конф., Могилев, 29–30 сен. 2022 г. ; редкол.: М.Е. Лустенков (гл. ред.) [и др.]. – Могилев, 2022. – С. 256–261.

7. Спектроскопия слоев на плоскопараллельных подложках / А.Б. Сотский, С.С. Михеев, Н.И. Стаськов, Л.И. Сотская // Оптика и спектроскопия. – 2020. – Т. 128, № 8. – С. 1133–1143.

УДК 535.4, 53.5

**С.М. Шандаров¹, А.О. Злобин¹, Н.И. Буримов¹, Д.С. Колесников¹, В.Н. Навныко²,
М.А. Брюшинин³, И.А. Соколов⁴**

¹Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники

²Мозырский государственный педагогический университет имени И.П. Шамякина

³Физико-технический институт имени А.Ф. Иоффе РАН

ВЗАЙМОДЕЙСТВИЕ ВОЛН С ЦИРКУЛЯРНОЙ ПОЛЯРИЗАЦИЕЙ НА ФОТОРЕФРАКТИВНЫХ ГОЛОГРАММАХ В КУБИЧЕСКИХ ГИРОТРОПНЫХ КРИСТАЛЛАХ

Рассмотрено попутное взаимодействие волн с циркулярной поляризацией на фоторефрактивных голограммах в кубических гиротропных кристаллах класса силленитов, когда по всей его толщине коэффициенты двухлучковой связи остаются неизменными.

Ключевые слова: фоторефрактивный эффект, кубические гиротропные кристаллы, попутное двухволновое взаимодействие, адаптивная голографическая интерферометрия.

Эффекты динамической голографии в фоторефрактивных оптически активных кристаллах, относящихся к семейству силленитов, являются предметом теоретического анализа и экспериментальных исследований, направленных как на изучение механизмов нелинейного отклика и определение материальных параметров, так и на реализацию устройств адаптивной голографической интерферометрии в течение длительного периода [1–5]. Собственные волны в таких кубических гиротропных кристаллах имеют циркулярную поляризацию, однако в большинстве работ по взаимодействию световых

пучков на формирующихся при этом фоторефрактивных голограммах используется и рассматривается лазерное излучение с линейной поляризацией. Наблюдаемая в этом случае вследствие естественной оптической активности координатная зависимость коэффициента связи волн от длины их взаимодействия ограничивает возможности для улучшения выходных характеристик элементов динамической голографии простым увеличением размера кристалла [3]. В данном сообщении рассматривается попутное взаимодействие на фоторефрактивных голограммах для циркулярно поляризованных опорной и предметной волн, имеющих одинаковые знаки вращения, когда по всей толщине кубического гиротропного кристалла коэффициенты двухпучковой связи являются постоянными величинами.

При анализе попутного взаимодействия волн с одинаковой (например, левой, l) циркулярной поляризацией в приближении неистощаемой опорной волны с амплитудой C_{Rl} , волновым вектором \vec{k}_{Rl} и показателем преломления n_l суммарное световое поле в кристалле в лабораторной системе координат представим в виде

$$\vec{E}_l(x, z) = C_{Rl} \vec{e}_{Rl} \exp[-ik_0 n_l (x \cos \theta - z \sin \theta)] + C_{Sl}(x) \vec{e}_{Sl} \exp[-ik_0 n_l (x \cos \theta + z \sin \theta)], \quad (1)$$

где $k_0 = 2\pi/\lambda$, λ – длина световой волны и $\pm\theta$ – углы между осью x и волновыми векторами \vec{k}_{Sl} и \vec{k}_{Rl} сигнальной (с амплитудой $C_{Sl}(x)$ и вектором поляризации \vec{e}_{Sl}) и опорной волн соответственно. Картина интерференции этих волн характеризуется вектором решетки $\vec{K} = \vec{k}_{Rl} - \vec{k}_{Sl}$ и контрастом

$$m_l(x) = \frac{2C_{Sl}(x)C_{Rl}^*}{|C_{Rl}|^2} \cos^2 \theta. \quad (2)$$

Диффузионный механизм перераспределения заряда [2] приводит к формированию в кристалле следующего стационарного распределения электрического поля, сдвинутого относительно интерференционной картины на четверть пространственного периода:

$$E_z(x, z) = m_l(x) E_{SC} \sin(Kz), \quad (3)$$

где эффективное поле пространственного заряда определяется как

$$E_{SC} = \frac{E_D}{1 + E_D/E_q}. \quad (4)$$

Здесь $E_D = (k_B T/e)K$ – диффузионное поле и $E_q = eN_A/(\epsilon K)$ – поле насыщения ловушек; k_B – постоянная Больцмана; T – температура; e – элементарный электрический заряд; ϵ – статическая диэлектрическая проницаемость кристалла и N_A – концентрация в нем компенсирующих акцепторов.

Электрическое поле фоторефрактивной голограммы обеспечивает основной вклад в фазовую составляющую голографической решетки, связанную непосредственно с

линейным электрооптическим эффектом, а также с фотоупругостью, вклад которой пропорционален как полю пространственного заряда $E(x, z)$ (благодаря обратному пьезоэффекту), так и его градиенту $dE(x, z) / dz$ (за счет обратного флексоэлектрического эффекта) [6]:

$$\Delta\epsilon_{mn}^{(phb)}(x, z) = -n_0^4 \left\{ \left[r_{mnp}^S p_p + p_{mnkl}^E p_l \gamma_{kl} e_i \right] E(x, z) + p_{mnkl}^E p_l \gamma_{ki} f_i \frac{d}{dz} E(x, z) \right\}. \quad (5)$$

Здесь n_0 – невозмущенный показатель преломления; r_{mnp}^S и p_{mnkl}^E – компоненты тензоров линейного электрооптического эффекта для механически зажатого и фотоупругости для электрически закороченного кристалла; p_p – компоненты единичного вектора, определяющего направление оси Z в кристаллографических координатах; γ_{ki} – компоненты тензора, обратного к тензору Кристоффеля $\Gamma_{ik} = C_{ijkr}^E p_j p_r$; $e_i = e_{pij} p_p p_j$ и $f_i = f_{ijpr} p_j p_p p_r$ – составляющие пьезоэлектрического и флексоэлектрического векторов соответственно; e_{pij} и f_{ijpr} – компоненты тензоров пьезоэлектрических констант и коэффициентов флексоэлектрической связи кристалла.

Для описания дополнительного вклада в фазовую составляющую фоторефрактивной голограммы эффектов электротогирации [7] и флексогирации [8] воспользуемся следующим разложением компонент псевдотензора гирации:

$$g_{kl} = g_0 \delta_{kl} + \gamma_{klj} E_j + \beta_{klji} \frac{\partial E_j}{\partial x_i}, \quad (6)$$

где $g_0 \delta_{kl}$ – тензор гирации кристалла симметрии 23 в отсутствие поля и $g_0 = 2n_0 \rho / k_0$ – его параметр гиротропии; тензор третьего ранга γ_{klm} описывает эффект электротогирации [7], а тензор четвертого ранга с компонентами β_{klmn} , с такой же симметрией, как и тензор коэффициентов флексоэлектрической связи f_{klmn} , назван в [8] тензором флексогирации. Следуя известному подходу [9], дополнительные возмущения фазовой составляющей фоторефрактивной голограммы в кристалле симметрии 23 представим в виде

$$\Delta\epsilon_{mn}^{(phad)}(x, z) = -i n_0^4 \delta_{mnk} \left[\gamma_{klj} p_j E(x, z) + \beta_{klji} p_j p_i \frac{\partial E(x, z)}{\partial z} \right] w_l, \quad (7)$$

где δ_{mnk} – единичный асимметричный тензор третьего ранга и w_l – компоненты единичного вектора волновой нормали \vec{w} , относящегося к световому полю.

Для учета возмущений диэлектрического тензора, связанных с абсорбционной компонентой фоторефрактивной голограммы в кристалле семейства силленитов, воспользуемся выражением [10]

$$\Delta\epsilon_{mn}^{(a)}(x, m_l) = -i m_l(x) \left(\frac{n_0}{k_0} \alpha_{gl} \delta_{mn} \right), \quad (8)$$

в котором параметр α_{gl} характеризует пространственно-неоднородные фотоиндуцированные изменения оптического поглощения в кристалле для волны с левой циркулярной поляризацией.

С учетом приведенных соотношений компоненты диэлектрического тензора кубического фотопрефрактивного гиротропного кристалла могут быть представлены в виде

$$\begin{aligned}\varepsilon_{mn}(x, z) = & n_0^2 \delta_{mn} - i \frac{2n_0 \rho}{k_0} \delta_{mnp} p_p + \frac{\Delta\varepsilon_{mn}^{(phb)}(x) + \Delta\varepsilon_{mn}^{(phad)}(x) + \Delta\varepsilon_{mn}^a(x, m_l)}{2} \exp(iKz) + \\ & + \frac{\Delta\varepsilon_{mn}^{(phb)*}(x) + \Delta\varepsilon_{mn}^{(phad)*}(x) + \Delta\varepsilon_{mn}^a(x, m_l^*)}{2} \exp(-iKz).\end{aligned}\quad (9)$$

Использование приведенных соотношений (1)–(3), (5) и (7)–(9) и условия синхронизма $\vec{K} = \vec{k}_{Rl} - \vec{k}_{Sl}$ позволяет в рамках метода медленно меняющихся амплитуд найти из волнового уравнения для кубического гиротропного кристалла следующее уравнение для эволюции амплитуды сигнальной волны с левой циркулярной поляризацией, взаимодействующих на фотопрефрактивной решетке с опорной волной, имеющей такую же поляризацию:

$$\frac{dC_{Sl}}{dx} = -\frac{1}{2} (\Gamma_{El} + \Gamma_{al} - i\Gamma_{fl}) C_{Sl}, \quad (10)$$

где коэффициенты связи на фазовых составляющих голограммы Γ_{El} и Γ_{fl} зависят от используемых ориентаций среза кристалла и вектора решетки \vec{K} , а коэффициент связи на абсорбционной компоненте является постоянной величиной, $\Gamma_{al} = \alpha_{gl}$. Аналогичное уравнение для эволюции амплитуды сигнала при взаимодействии волн с правой циркулярной поляризацией,

$$\frac{dC_{Sr}}{dx} = -\frac{1}{2} (\Gamma_{Er} + \Gamma_{ar} - i\Gamma_{fr}) C_{Sr}, \quad (11)$$

характеризуется другими коэффициентами связи, Γ_{Er} , Γ_{fr} и Γ_{ar} .

В качестве характерного примера рассмотрим попутное взаимодействие волн с одинаковой циркулярной поляризацией в кристалле среза (110) для двух ориентаций вектора фотопрефрактивной решетки, $\vec{K} \parallel [001]$ и $\vec{K} \parallel [00\bar{1}]$, помечая относящиеся к ним величины индексами (+) и (–) соответственно. При экспериментальном исследовании характеристик такого взаимодействия может быть использован метод адаптивной голографической интерферометрии [2; 8], позволяющий определить зависимости относительных амплитуд первой и второй гармоник в сигнале фазовой демодуляции, $M^{(1)}(\varphi_m)$ и $M^{(2)}(\varphi_m)$, от глубины фазовой модуляции сигнального пучка φ_m гармоническим сигналом с частотой Ω :

$$M^{(1)}(\varphi_m) = 4M_{1m} J_0(\varphi_m) J_1(\varphi_m), \quad (12)$$

$$M^{(2)}(\phi_m) = 4M_{2m}J_0(\phi_m)J_2(\phi_m), \quad (13)$$

где $J_n(\phi_m)$ – функция Бесселя n -го порядка, а эффективные параметры фазовой демодуляции на первой и второй гармониках определяются толщиной кристалла d и коэффициентами связи, входящими в уравнения (10) или (11), как

$$M_{1ml,r}^{+,-} = \exp\left(-\frac{\Gamma_{El,Er}^{+,-} + \Gamma_{al,ar}}{2}d\right) \sin\left(\frac{\Gamma_{fl,fr}^{+,-}}{2}d\right), \quad (14)$$

$$M_{2ml,r}^{+,-} = \exp\left(-\frac{\Gamma_{El,Er}^{+,-} + \Gamma_{al,ar}}{2}d\right) \cos\left(\frac{\Gamma_{fl,fr}^{+,-}}{2}d\right) - 1. \quad (15)$$

Данные коэффициенты связи следующим образом выражаются через материальные постоянные кристалла и параметры, характеризующие взаимодействие:

$$\Gamma_{El,Er}^+ = \frac{2\pi}{\lambda} n_0^3 \left(\frac{r_{41}^S}{2} \pm \gamma_{41} \cos^2 \theta \right) E_{SC}, \quad (16)$$

$$\Gamma_{fl,fr}^+ = \frac{2\pi}{\lambda} n_0^3 \left[\frac{p_{12} + p_{13} + 2p_{11}}{4C_{11}} f_{1111} \mp \frac{\beta_{1122} + \beta_{2211}}{2} \right] KE_{SC} \cos^3 \theta, \quad (17)$$

$$\Gamma_{El,Er}^- = -\frac{2\pi}{\lambda} n_0^3 \left(\frac{r_{41}^S}{2} \pm \gamma_{41} \cos^2 \theta \right) E_{SC}, \quad (18)$$

$$\Gamma_{fl,fr}^- = \frac{2\pi}{\lambda} n_0^3 \left[\frac{p_{12} + p_{13} + 2p_{11}}{4C_{11}} f_{1111} \mp \frac{\beta_{1122} + \beta_{2211}}{2} \right] KE_{SC} \cos^3 \theta. \quad (19)$$

Таким образом, получены общие соотношения, описывающие в приближении неистощаемой опорной волны ее попутное взаимодействие на фоторефрактивных голограммах с сигнальной волной для случая их циркулярной поляризации с одинаковым знаком вращения, когда по всей толщине кубического гиротропного кристалла коэффициенты двухлучковой связи являются постоянными величинами. Аналитические выражения для этих коэффициентов, соответствующие кристаллу среза (110) и двум ориентациям вектора фоторефрактивной решетки, $\vec{K} \parallel [001]$ и $\vec{K} \parallel [00\bar{1}]$, показывают их зависимость от знака циркулярной поляризации вследствие эффектов электро- и флексоэгирации.

Список использованных источников

1. Huignard, J.P. High-sensitivity read-write volume holographic storage in $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$ and $\text{Bi}_{12}\text{GeO}_{20}$ crystals / J.P. Huignard, F. Misheron // Appl. Phys. Lett. – 1976. – Vol. 29, № 9. – P. 591–593.
2. Петров, М.П. Фоторефрактивные кристаллы в когерентной оптике / М.П. Петров, С.И. Степанов, А.В. Хоменко. – СПб. : Наука, 1992. – 320 с.

3. Шепелевич, В.В. Голография в фоторефрактивных оптически активных кристаллах / В.В. Шепелевич. – Минск : Изд. центр БГУ, 2012. – 254 с.
4. Кульчин, Ю.Н. Адаптивные методы обработки спекл-модулированных оптических полей / Ю.Н. Кульчин, О.Б. Витрик, А.А. Камшилин, Р.В. Ромашко. – М. : ФИЗМАТЛИТ, 2009. – 288 с.
5. Влияние обратного пьезоэлектрического эффекта и фотоупругости на когерентное взаимодействие гауссовых (1+1)D световых пучков в кристалле $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$ / А.А. Голуб, В.Н. Навыко, В.В. Давыдовская [и др.] // ЖПС. – 2025. – Т. 92, № 1. – С. 114–119.
6. Revealing of the flexoelectric parameters in cubic photorefractive crystals using two-beam coupling / S.M. Shandarov [et al.] // Photorefractive Photonics. – 2015.
7. Влох, О.Г. Явления пространственной дисперсии в параметрической кристаллооптике / О.Г. Влох. – Львов : Вища шк. Изд-во при Львов, ун-те, 1984. – 156 с.
8. Определение материальных параметров фоторефрактивных кристаллов на основе метода адаптивной голограммической интерферометрии / С.М. Шандаров, А.О. Злобин, А.А. Шмидт [и др.] // Оптика и спектроскопия. – 2021. – Т. 129, № 4. – С. 413–417.
9. Ландау, Л.Д. Электродинамика сплошных сред / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – М. : Наука, 1982.
10. Фоторефрактивные эффекты в электрооптических кристаллах / С.М. Шандаров, В.М. Шандаров, А.Е. Мандель, Н.И. Буримов. – Томск : Томск. гос. ун-т систем упр. и радиоэлектроники, 2007. – 242 с.

УДК 669.71.535.241

П.С. Шаповалов

Гомельский государственный технический университет имени П.О. Сухого

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ В ВЕЩЕСТВЕ ПРИ НАГРЕВЕ КРУГОВЫМ И КОЛЬЦЕВЫМ ЛАЗЕРНЫМ ПУЧКОМ

Найдено путем дифференцирования эллиптического уравнения теплопроводности аналитическое распределение температуры в веществе при нагреве лазерного осесимметричного гауссова пучка произвольного профиля. Представлены распределение температуры обычного гауссова и кольцевого гауссова пучка.

Ключевые слова: уравнение теплопроводности, нагрев лазерным пучком, распределение температуры, круговой гауссов пучок.

В промышленном производстве широко применяются лазеры для различных технологических процессов. Лазеры находят применение для резки материалов, лазерной сварки, термообработки и наплавки [1]. Лазеры в первую очередь используются в промышленности в тех процессах, которые неосуществимы с помощью других способов, и

там, где применение лазера обеспечивает большую эффективность работы и большую производительность труда.

Для лучшей оптимизации использования лазеров в технологии нагрева и плавления вещества необходимо знать точное распределение температур в использованном материале в зависимости от распределения интенсивности света в поперечном сечении лазерного пучка. Важнейшей физической характеристикой процесса нагрева при воздействии лазерного излучения является распределение температурного поля в материале. Если распределение температуры в веществе известно для разных типов лазерных пучков, то это позволяет выбрать наиболее оптимальные и эффективные технологические режимы обработки материалов.

Для нахождения распределения температуры в веществе, создаваемом лазерным пучком, используем неоднородное эллиптическое уравнение теплопроводности [2]. Для нагрева вещества применяем осесимметричный лазерный пучок. Исходное уравнение в полярной системе координат имеет вид:

$$\frac{d^2T}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dT}{dr} = -\frac{1}{\lambda} I(r), \quad (1)$$

где T – искомая функция распределения температуры в веществе, λ – коэффициент теплопроводности материала, $I(r)$ – поперечное распределение интенсивности света в лазерном пучке используемого в качестве теплового источника нагрева вещества, r – радиус полярной системы координат.

Лазерный тепловой источник представим в виде произведения круговой гауссовой функции на многочлен четной степени от r .

$$I = (C_0 + C_1 r^2 + C_2 r^4 + \dots + C_n r^{2n}) \exp\left(-\frac{2r^2}{w^2}\right). \quad (2)$$

Здесь w – радиус пучка. В случае $C_0 \neq 0$, а $C_i = 0$, ($i = \overline{1, n}$) имеем простейший гауссов круговой пучок, где C_0 – является интенсивностью лазерного излучения на оси пучка $r = 0$. Если $C_0 = 0$, а $C_i \neq 0$, то имеем произвольный кольцевой лазерный пучок. Такое представление теплового источника позволяет подобрать любую произвольную форму пучка с круговой симметрией.

Учитывая постановку задачи для решения уравнения (1), граничные условия могут быть записаны в виде:

$$T(r = b) = 0, \quad (3a)$$

$$\frac{dT(r = 0)}{dr} = 0. \quad (3b)$$

В первом граничном условии (3a) следует, что температура при удалении в поперечном направлении при $b \rightarrow \infty$ стремится к нулю. Второе граничное условие (3b) следует из круговой симметрии лазерного теплового источника при нагревании вещества.

Интегрируя дифференциальное уравнение (1), с учетом граничного условия (3б), получим

$$\frac{dT}{dr} = \frac{w^2}{4\lambda} re^{-\frac{2r^2}{w^2}} \sum_{k=1}^n C_k \left[r^{2k} + \sum_{i=1}^k k(k-1)\cdots(k-i+1) \frac{w^{2i}}{2^i} r^{2(k-i)} \right]. \quad (4)$$

Повторно интегрируя исходное уравнение, с учетом первого граничного условия (3а), получим решение уравнения (4) в аналитическом виде:

$$T = -\frac{\lambda w^2}{8} \left[e^{-\frac{2r^2}{w^2}} \sum_{k=2}^n S_k(r) - e^{-\frac{2a^2}{w^2}} \sum_{k=2}^n S_k(b) + \left(Ei\left(\frac{2r^2}{w^2}\right) - Ei\left(\frac{2b^2}{w^2}\right) - 2\ln(r) + 2\ln(b) \right) \times \right. \\ \left. \sum_{k=1}^{n+1} (-1)^{k-1} \frac{C_{k-1} w^{2(n-1)}}{2^{k-1}} k(k-1)\cdots2\cdot1 \right], \quad (5)$$

где $S_k(r) = C_k \sum_{i=1}^k \left((-1)^{k-1} \frac{w^{2(r-i+1)} r^{2(i-1)}}{2^{r-i+1}} \sum_{m=i}^k \frac{1}{m} k(k-1)\cdots(i+1)i \right)$, $Ei(x)$ –

интегральная показательная функция [3]. В случае, когда используется обыкновенный круговой гауссов пучок ($C_0 \neq 0, C_i = 0, i = \overline{1, n}$), распределение температурного поля имеет вид:

$$T = -\frac{\lambda w^2 C_0}{8} \left[Ei\left(\frac{2r^2}{w^2}\right) - Ei\left(\frac{2b^2}{w^2}\right) - 2\ln\left(\frac{r}{b}\right) \right], \quad (6)$$

При численном исследовании решений (5, 6) использовались круговые и кольцевые гауссовые пучки (рисунок 1).

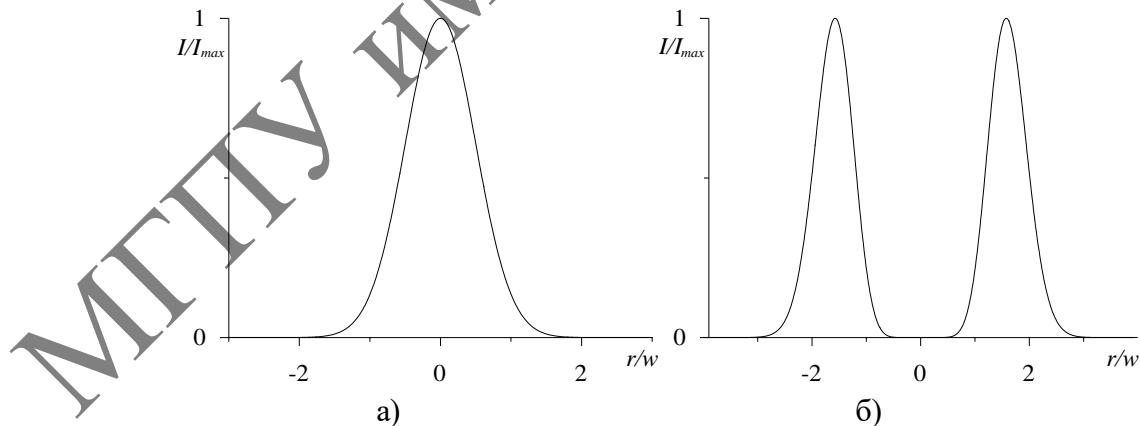


Рисунок 1 – Распределение интенсивности излучения в поперечном сечении кругового (а) $C_0 \neq 0$ и кольцевого гауссова пучка (б) $C_0 = 0; C_1 \neq 0; C_i = 0$

Качественное распределение температурного поля при воздействии таких пучков на поверхность материала имеет вид:

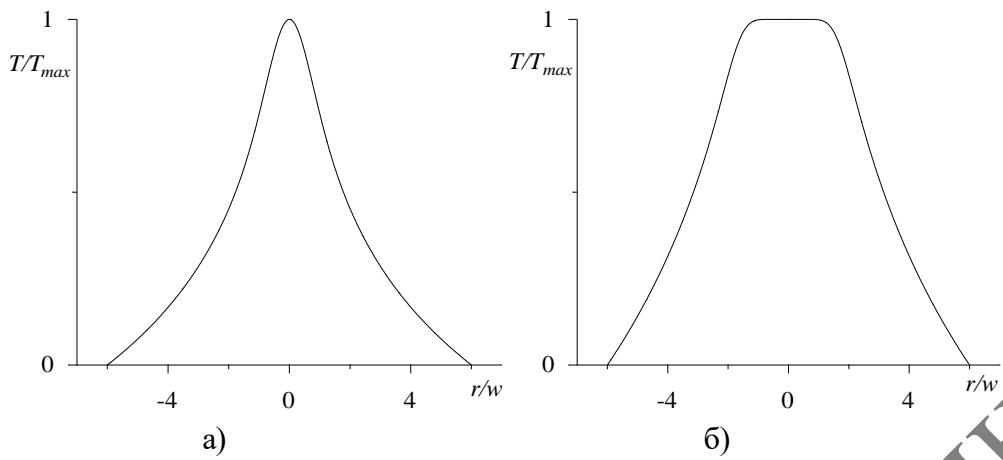


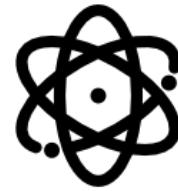
Рисунок 2 – Распределение температурного поля на поверхности материала при нагревании круговым (а) $C_0 \neq 0, b=6r/w$ и кольцевым гауссовым пучком (б) $C_1 \neq 0, b=6r/w$

Из рисунка 2, а следует, что использование кругового пучка приводит к более узкому отверстию в материале, и при одинаковой мощности с кольцевым пучком к более глубокому отверстию, что выгодно для резки материалов. Использование кольцевых пучков выгодно для равномерного нагрева и плавления (наплавки) материала.

Список использованных источников

1. Григорьянц, А.Г. Технологические процессы лазерной обработки / А.Г. Григорьянц, И.Н. Шиганов, А.И. Мисюров. – М. : МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2006. – 663 с.
2. Моделирование теплофизических процессов импульсного лазерного воздействия на металлы / А.А. Углов, И.Ю. Смурров, А.М. Лашин, А.Г. Гуськов. – М. : Наука, 1991. – 288 с.

Секция 2



Теоретическая физика

UDC 537.8

A.V. Ivaskevich¹, V.M. Red'kov¹, E.M. Ovsyuk²

¹B.I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus

²Mozyr State pedagogical University named after I.P. Shamyakin

COMPLETELY AND PARTIALLY POLARIZED LIGHT, JONES 4-SPINOR, STOKES VECTOR AND TENSOR

In the present paper, starting with the Lorentz group theory, we introduce the concept of 4-dimensional Jones spinor, first for a completely polarized light. To such Jones bispinor, there correspond isotropic Stokes 4-vector, and antisymmetric Stokes tensor, the last is equivalent to isotropic complex 3-vector. This approach is extended to the partially polarized light as well. We introduce corresponding 4-spinor of Jones type and 4-vector and antisymmetric tensor of Stokes types.

Keywords: polarized light, Jones 4-spinor, Stokes 4-vector, antisymmetric Stokes tensor.

Let us start with the well-known relations between a 2-rank bispinor and simplest tensors. The bispinor of second rank $U = \Psi \otimes \Psi$ can be decomposed into the scalar Φ , vector Φ_b , pseudoscalar $\tilde{\Phi}$, pseudovector $\tilde{\Phi}_b$, and skew-symmetric tensor Φ_{ab} , as follows

$$U = \Psi \otimes \Psi = (-i\Phi + \gamma^b S_b + i\sigma^{ab} S_{ab} + \gamma^5 \tilde{S} + i\gamma^b \gamma^5 \tilde{S}_b) E^{-1}, E = \begin{vmatrix} i\sigma^2 & 0 \\ 0 & -i\sigma^2 \end{vmatrix}; \quad (1)$$

we shall refer all the subsequent considerations to the spinor basis

$$U = \begin{vmatrix} \xi & \Delta \\ H & \eta \end{vmatrix}, \quad \gamma^a = \begin{vmatrix} 0 & \bar{\sigma}^a \\ \sigma^a & 0 \end{vmatrix}, \quad \gamma^5 = \begin{vmatrix} -I & 0 \\ 0 & +I \end{vmatrix}, \quad \sigma^{ab} = \begin{vmatrix} \bar{\sigma}^a \sigma^b - \bar{\sigma}^b \sigma^a & 0 \\ 0 & \sigma^a \bar{\sigma}^b - \sigma^b \bar{\sigma}^a \end{vmatrix}.$$

The inverses of the relations (1) have the form

$$\begin{aligned} S_a &= \frac{1}{4} Sp[E\gamma_a U], \quad \tilde{S}_a = \frac{1}{4i} Sp[E\gamma^5 \gamma_a U], \\ S &= \frac{i}{4} Sp[EU], \quad \tilde{S} = \frac{1}{4} Sp[E\gamma^5 U], \quad S^{mn} = -\frac{1}{2i} Sp[E\sigma^{mn} U]. \end{aligned}$$

In order that the vector and the tensor be both real, one should impose additional restrictions; the first constraint of Majorana type may be taken in the form

$$\Psi = \begin{vmatrix} \eta \\ \xi \end{vmatrix}, \quad \eta = -i \sigma^2 \xi^* \quad \Rightarrow \quad \eta_1 = -\xi^{2*}, \quad \eta_2 = +\xi^{1*},$$

which implies (note that $\Phi_0 > 0$):

$$\begin{aligned}\Psi = & \begin{vmatrix} \xi \\ \eta = -i \sigma^2 \xi^* \end{vmatrix}, \quad \Psi \otimes \Psi \Rightarrow S_a \neq 0, \quad S_{mn} \neq 0, \\ S_0 = & (\xi^1 \xi^{1*} + \xi^2 \xi^{2*}) > 0, \quad S_3 = -(\xi^1 \xi^{1*} - \xi^2 \xi^{2*}), \\ S_1 = & -(\xi^1 \xi^{2*} + \xi^2 \xi^{1*}), \quad S_2 = -i (\xi^1 \xi^{2*} - \xi^2 \xi^{1*}), \\ a_1 = S^{01} = & \frac{i}{4} [(\xi^1 \xi^1 - \xi^2 \xi^2) + (\xi^{2*} \xi^{2*} - \xi^{1*} \xi^{1*})], \\ b_1 = S^{23} = & \frac{1}{4} [(\xi^1 \xi^1 - \xi^2 \xi^2) - (\xi^{2*} \xi^{2*} - \xi^{1*} \xi^{1*})], \\ a_2 = S^{02} = & -\frac{1}{4} [(\xi^1 \xi^1 + \xi^2 \xi^2) + (\xi^{2*} \xi^{2*} + \xi^{1*} \xi^{1*})], \\ b_2 = S^{31} = & -\frac{1}{4i} [(\xi^1 \xi^1 + \xi^2 \xi^2) - (\xi^{2*} \xi^{2*} + \xi^{1*} \xi^{1*})], \\ a_3 = S^{03} = & -\frac{i}{2} (\xi^1 \xi^2 - \xi^{2*} \xi^{1*}), \quad b_3 = S^{12} = -\frac{1}{2} (\xi^1 \xi^2 + \xi^{2*} \xi^{1*}).\end{aligned}$$

The last case seems to be appropriate to describe the Stokes 4-vector and to determine the Stokes 2-rank tensor (existence of the Stokes-type 2-rank tensor seems to be unexpected). Additionally, let us calculate the main invariant for the 4-vector, which turns to be equal to zero

$$\begin{aligned}S_0 S_0 - S_j S_j = & \frac{1}{4} [(\xi^1 \xi^{1*} + \xi^2 \xi^{2*})^2 - (\xi^1 \xi^{1*} - \xi^2 \xi^{2*})^2 \\ & - (\xi^1 \xi^{2*} + \xi^2 \xi^{1*})^2 + (\xi^1 \xi^{2*} - \xi^2 \xi^{1*})^2] = (\xi^1 \xi^{1*})(\xi^2 \xi^{2*}) - (\xi^1 \xi^{2*})(\xi^2 \xi^{1*}) \equiv 0;\end{aligned}$$

so the quantity S_a may be considered as a Stokes 4-vector for completely polarized light.

In turn, the 4-tensor S_{mn} , being constructed from the Jones bi-spinor Ψ , will be called a Stokes 2-rank tensor [1], [2]. Let us calculate the two invariants for S_{mn} :

$$I_1 = \frac{1}{2} S_{mn} S_{mn} \equiv 0, \quad I_2 = \frac{1}{4} \epsilon_{abmn} S^{ab} S^{mn} = a \cdot b \equiv 0.$$

Instead of considering the Stokes 4-tensor S_{ab} one may introduce a complex Stokes 3-vector with the following components

$$\begin{aligned}s_1 &= a^1 + i b^1 = S^{01} + i S^{23} = \frac{i}{2} (\xi^1 \xi^1 - \xi^2 \xi^2), \\ s_2 &= a^2 + i b^2 = S^{02} + i S^{31} = -\frac{1}{2} (\xi^1 \xi^1 + \xi^2 \xi^2), \\ s_3 &= a^3 + i b^3 = S^{03} + i S^{12} = -i \xi^1 \xi^2;\end{aligned}$$

whence it follows

$$s_1 + i s_2 = -i \xi^2 \xi^2, \quad s_1 - i s_2 = +i \xi^1 \xi^1, \quad s_3 = -i \xi^1 \xi^2.$$

The quantity \vec{s} transforms as a vector under the complex rotation group $SO(3, C)$, recall that this group is isomorphic to the Lorentz group. This allows to employ additionally to the Jones spinor and Stokes vector formalisms one other technique, based on the use of complex 3-vector under the complex rotation group $SO(3, C)$: $\vec{s} = \vec{a} + i \vec{b}, \vec{s}^2 \equiv 0$.

Let us define the Jones 4-spinor for partially polarized light. To this end, let us examine other possibility to construct tensors from 4-spinors:

$$U = \Psi \otimes \Psi^c = \begin{vmatrix} \xi^1 \\ \xi^2 \\ \eta_i \\ \eta_j \end{vmatrix} \otimes \begin{vmatrix} +\eta_2^* \\ -\eta_i^* \\ -\xi^{2*} \\ +\xi^{1*} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{vmatrix} \otimes \begin{vmatrix} +D^* \\ -C^* \\ -B^* \\ +A^* \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} AD^* & -AC^* & -AB^* & +AA^* \\ BD^* & -BC^* & -BB^* & +BA^* \\ CD^* & -CC^* & -CB^* & +CA^* \\ DD^* & -DC^* & -DB^* & +DA^* \end{vmatrix}.$$

We readily derive expression for corresponding tensors:

the scalar and the pseudo-scalar

$$S = -\frac{1}{4i}(AC^* + BD^* + CA^* + DB^*), \quad \tilde{S} = -\frac{1}{4}(AC^* + BD^* - CA^* - DB^*);$$

the 4-vector (real-valued)

$$\begin{aligned} S^0 &= \frac{1}{4}(AA^* + BB^* + DD^* + CC^*), \quad S^3 = \frac{1}{4}(AA^* - BB^* + DD^* - CC^*), \\ S^1 &= \frac{1}{4}(AB^* + BA^* - CD^* - DC^*), \quad S^2 = -\frac{i}{4}(-AB^* + BA^* + CD^* - DC^*); \end{aligned}$$

the pseudo-vector (imaginary)

$$\begin{aligned} \tilde{S}^0 &= \frac{1}{4i}(AA^* + BB^* - DD^* - CC^*), \quad \tilde{S}^3 = \frac{1}{4i}(AA^* - BB^* - DD^* + CC^*), \\ \tilde{S}^1 &= \frac{1}{4i}(AB^* + BA^* + CD^* + DC^*), \quad \tilde{S}^2 = -\frac{i}{4}(-AB^* + BA^* - CD^* + DC^*), \end{aligned}$$

the skew-symmetric tensor (real)

$$\begin{aligned} S^{01} &= \frac{i}{4}(AD^* + BC^* - CB^* - DA^*), \quad S^{23} = \frac{1}{4}(AD^* + BC^* + CB^* + DA^*), \\ S^{02} &= -\frac{1}{4}(AD^* - BC^* - CB^* + DA^*), \quad S^{31} = \frac{i}{4}(AD^* - BC^* + CB^* - DA^*), \\ S^{03} &= -\frac{i}{4}(-AC^* + BD^* + CA^* - DB^*), \quad S^{12} = -\frac{1}{4}(-AC^* + BD^* - CA^* + DB^*), \\ s_1 &= \frac{i}{2}(AD^* + BC^*), \quad s_2 = -\frac{1}{2}(AD^* - BC^*), \quad s_3 = \frac{i}{2}(AC^* - BD^*). \end{aligned}$$

We find the expression for the invariant of Ψ^a :

$$S_0^2 - S_1^2 - S_2^2 - S_3^2 = \frac{1}{16}(AA^*CC^* + BB^*DD^* + ADB^*C^* + A^*D^*BC),$$

which can be rewritten as a product

$$S^a S_a = \frac{1}{16}(AC^* + BD^*)(A^*C + B^*D) = \frac{1}{16}|AC^* + BD^*|^2 \geq 0,$$

which means that the vector is time-like.

Bearing in mind that $\Psi^0 > 0$, we conclude that the 4-vector Ψ^a can be considered as a Stokes (Mueller) 4-vector of partially polarized light. The complex 3-vector s is not isotropic:

$$s^2 = -\frac{1}{4}(\xi^1 \eta_1^* + \xi^2 \eta_2^*)^2 = -\frac{1}{4}(AC^* + BD^*)^2 \neq 0.$$

With the use of the explicit form of the (imaginary) pseudo-vector $\tilde{\Psi}^a$,

$$\begin{aligned}\tilde{S}^0 &= \frac{1}{4i} [(AA^* - DD^*) + (BB^* - CC^*)], \tilde{S}^3 = \frac{1}{4i} [(AA^* - DD^*) - (BB^* - CC^*)], \\ \tilde{S}^1 &= \frac{1}{4i} [(AB^* + CD^*) + (BA^* + DC^*)], \tilde{S}^2 = \frac{1}{4} [(AB^* + CD^*) - (BA^* + DC^*)],\end{aligned}$$

for its invariant we find

$$\tilde{\Psi}^a \tilde{\Psi}_a = \tilde{\Psi}_0^2 - \tilde{\Psi}_1^2 - \tilde{S}_2^2 - \tilde{S}_1^3 = \frac{1}{4} (AC^* + BD^*)(A^*C + B^*D) > 0.$$

Both these facts mean that the corresponding real 4-pseudo-vector $i\tilde{\Psi}^a$ cannot be considered as being of Stokes type.

This approach allows for the further development.

We can introduce the concept of the minimal Jones bispinor

$$\Psi^{min} = \begin{vmatrix} a e^{+i(\alpha-\beta)/2} \\ b e^{-i(\alpha-\beta)/2} \\ b e^{+i(s-t)/2} \\ a e^{-i(s-t)/2} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a e^{+i\tau/2} \\ b e^{-i\tau/2} \\ b e^{+i\sigma/2} \\ a e^{-i\sigma/2} \end{vmatrix};$$

it provides us with the following Stokes 4-vector

$$\begin{aligned}S_0 &= \frac{1}{2}(a^2 + b^2), \quad S_3 = \frac{1}{2}(a^2 - b^2), \\ S_1 &= \frac{\cos \sigma - \cos \tau}{\sqrt{2(\cos^2 \sigma + \cos^2 \tau)}}, \quad S_2 = \frac{\cos \sigma + \cos \tau}{\sqrt{2(\cos^2 \sigma + \cos^2 \tau)}}.\end{aligned}$$

The angular parameters τ_1, σ_1 are determined by the explicit formulas (there exist two different solutions)

$$\begin{aligned}\cos \sigma_1 &= \frac{+S_1(S_1^2 + S_2^2) + S_2 \sqrt{(S_1^2 + S_2^2)(S_0^2 - S_1^2 - S_2^2 - S_3^2)}}{(S_1^2 + S_2^2) \sqrt{S_0^2 - S_3^2}}, \\ \sin \sigma_1 &= \frac{S_2(S_1^2 + S_2^2) - S_1 \sqrt{(S_1^2 + S_2^2)(S_0^2 - S_1^2 - S_2^2 - S_3^2)}}{(S_1^2 + S_2^2) \sqrt{S_0^2 - S_3^2}}; \\ \cos \tau_1 &= \frac{-S_1(S_1^2 + S_2^2) + S_2 \sqrt{(S_1^2 + S_2^2)(S_0^2 - S_1^2 - S_2^2 - S_3^2)}}{(S_1^2 + S_2^2) \sqrt{S_0^2 - S_3^2}}, \\ \sin \tau_1 &= \frac{-S_2(S_1^2 + S_2^2) - S_1 \sqrt{(S_1^2 + S_2^2)(S_0^2 - S_1^2 - S_2^2 - S_3^2)}}{(S_1^2 + S_2^2) \sqrt{S_0^2 - S_3^2}}.\end{aligned}$$

Resolving this system, we obtain two different solutions

$$\begin{aligned}e^{i\sigma_2} &= -e^{i\tau_1}, \quad e^{i\tau_2} = -e^{i\sigma_1}; \\ e^{i\sigma_2/2} &= ie^{i\tau_1/2}, \quad e^{-i\sigma_2/2} = -ie^{-i\tau_1/2}; \quad e^{i\tau_2/2} = ie^{i\sigma_1/2}, \quad e^{-i\tau_2/2} = -ie^{-i\sigma_1/2}.\end{aligned}$$

So we get relationship between Ψ_2^{min} and Ψ_1^{min} :

$$\Psi_1^{min} = \begin{vmatrix} a e^{+i\tau_1/2} \\ b e^{-i\tau_1/2} \\ b e^{+i\sigma_1/2} \\ a e^{-i\sigma_1/2} \end{vmatrix}, \quad \Psi_2^{min} = \begin{vmatrix} a e^{+i\tau_2/2} \\ b e^{-i\tau_2/2} \\ b e^{+i\sigma_2/2} \\ a e^{-i\sigma_2/2} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} ia e^{+i\sigma_1/2} \\ -ib e^{-i\sigma_1/2} \\ ib e^{+i\tau_1/2} \\ -ia e^{-i\tau_1/2} \end{vmatrix},$$

they are related as follows

$$\Psi_2^{min} = - \begin{vmatrix} e^{-(\tau_1-\sigma_1)/2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -ie^{+(\tau_1-\sigma_1)/2} & 0 & \frac{b}{a} \\ 0 & 0 & ie^{+(\tau_1-\sigma_1)/2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -ie^{-(\tau_1-\sigma_1)/2} \end{vmatrix} \Psi_1^{min}. \quad (2)$$

Now let us turn to Stokes tensor, it turned out that this tensor depends on a more complicated bispinor than minimal one:

$$\Psi = \begin{vmatrix} e^{i\Gamma} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{i\Gamma} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-i\Gamma} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i\Gamma} \end{vmatrix} \Psi^{min} = \exp(i\Gamma\gamma^5) \Psi^{min}, \quad \Gamma = \frac{\alpha-t}{4} + \frac{\beta-s}{4}.$$

Correspondingly, the components of the Stokes tensor read

$$\begin{aligned} S^{01} &= -\frac{a^2 \sin(\alpha-t) + b^2 \sin(\beta-s)}{2}, & S^{23} &= \frac{a^2 \cos(\alpha-t) + b^2 \cos(\beta-s)}{2}, \\ S^{02} &= -\frac{a^2 \cos(\alpha-t) - b^2 \cos(\beta-s)}{2}, & S^{31} &= -\frac{a^2 \sin(\alpha-t) - b^2 \sin(\beta-s)}{2}, \\ S^{03} &= \frac{-ab \sin(\alpha-s) + ab \sin(\beta-t)}{2}, & S^{12} &= \frac{ab \cos(\alpha-s) - ab \cos(\beta-t)}{2}; \end{aligned} \quad (3)$$

this tensor is parameterized by six parameters $\{a, b; \alpha-t, \beta-s\}$ and $\alpha-s, \beta-t$. The Stokes 4-vector is parameterized by four parameters $\{a, b, \tau = \alpha - \beta, \sigma = s - t\}$.

The four tensor components from (3) may be presented differently through S_a and angular variables $\rho = \alpha - t$, $\delta = \beta - s$:

$$\begin{aligned} S^{01} &= -\frac{1}{2}[(S_0 + S_3) \sin \rho + (S_0 - S_3) \sin \delta], \\ S^{23} &= \frac{1}{2}[(S_0 + S_3) \cos \rho + (S^0 - S^3) \cos \delta], \\ S^{02} &= -\frac{1}{2}[(S_0 + S_3) \cos \rho - (S^0 - S^3) \cos \delta], \\ S^{31} &= -\frac{1}{2}[(S_0 + S_3) \sin \rho - (S^0 - S^3) \sin \delta]; \end{aligned} \quad (4)$$

the inverse formulas for (4) have the form (there arise two possibilities):

$$\rho_1 = \arg \left(\frac{S^{23} - S^{02}}{S_0 + S_3} - i \frac{S^{31} + S^{01}}{S_0 + S_3} \right) \in [0, 2\pi], \quad \delta_1 = \rho_1 - (\tau + \sigma),$$

$$\delta_2 = \arg \left(\frac{S^{23} + S^{02}}{S_0 - S_3} + i \frac{S^{31} - S^{01}}{S_0 - S_3} \right) \in [0, 2\pi], \quad \rho_2 = \delta_2 + (\tau + \sigma).$$

With the help of (2), one can express the angular variables τ, σ through Stokes vector S_a .

The two formulas below permit to calculate the components S^{03} and S^{12} through four components $S^{01}, S^{31}, S^{02}, S^{23}$ and the known S_0, S_1, S_2, S_3

$$S^{03} = \frac{S_1(S^{01} - S^{31}) + S_2(S^{02} + S^{23})}{S_0 - S_3}, \quad S^{12} = \frac{S_2(S^{31} - S^{01}) + S_1(S^{02} + S^{23})}{S_0 - S_3}.$$

Numerical simulation

Example 1. For given $a, b, \tau, \sigma: a=1, b=2, \tau=\frac{\pi}{3}, \sigma=\frac{\pi}{6}$ we find

$$S_0 = \frac{5}{2}, \quad S_3 = -\frac{3}{2}, \quad S_1 = \frac{1}{2}(\sqrt{3}-1), \quad S_2 = \frac{1}{2}(1-\sqrt{3}),$$

thus, the Stokes 4-vector is

$$(S_0, S_1, S_2, S_3) \approx (2.5, +0.366, -0.366, -1.5).$$

In order to fix the Stokes tensor, we should add two parameters; let they be

$$\delta = \frac{5\pi}{12}, \quad \rho = -\frac{\pi}{12};$$

so we find the first four components

$$S^{01} = -\frac{5+3\sqrt{3}}{4\sqrt{2}}, \quad S^{02} = \frac{3\sqrt{3}-5}{4\sqrt{2}}, \quad S^{23} = \frac{5\sqrt{3}-3}{4\sqrt{2}}, \quad S^{31} = \frac{3+5\sqrt{3}}{4\sqrt{2}},$$

then find two remaining ones

$$S^{03} = -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2}}(\sqrt{3}-1), \quad S^{12} = -\frac{\sqrt{3}-1}{2\sqrt{2}}.$$

Thus, the Stokes tensor is given as

$$\begin{aligned} S^{01} &= -1.80244, & S^{23} &= 1.0006, \\ S^{02} &= 0.0346752, & S^{31} &= 2.06126, \\ S^{03} &= -0.448288, & S^{12} &= -0.258819. \end{aligned}$$

Example 2. Let $a=1, b=\frac{1}{2}, \tau=\frac{\pi}{4}, \sigma=\frac{\pi}{8}$; then the Stokes 4-vector is

$$S_0 = \frac{5}{8}, \quad S_1 = \frac{1}{8}(2\cos(\frac{\pi}{8}) - \sqrt{2}), \quad S_2 = \frac{1}{8}(2\sin(\frac{\pi}{8}) - \sqrt{2}), \quad S_3 = \frac{3}{8}.$$

Thus, the components of Stoke vector are

$$S_0 = 0.625, \quad S_1 \approx 0.054, \quad S_2 \approx -0.081, \quad S_3 = 0.375.$$

In order to fix the Stokes tensor, we should add two parameters, let they be

$$\delta = \frac{7\pi}{24}, \quad \rho = 0.$$

Further we obtain

$$S^{01} = -\frac{1}{8}\cos\frac{5\pi}{24}, \quad S^{02} = \frac{1}{8}(\sin\frac{5\pi}{24} - 4), \quad S^{23} = \frac{1}{8}(4 + \sin\frac{5\pi}{24}), \quad S^{31} = \frac{1}{8}\cos\frac{5\pi}{24},$$

and remaining ones

$$S^{03} = \frac{1}{8}(-1 - \sqrt{2} \sin \frac{5\pi}{24} + \sqrt{2} \cos \frac{5\pi}{24}), S^{12} = \frac{1}{8}(\sqrt{3} - \sqrt{2} \sin \frac{5\pi}{24} - \sqrt{2} \cos \frac{5\pi}{24}).$$

So the Stokes tensor is given as

$$\begin{aligned} S^{01} &= -0.099, & S^{23} &\approx 0.576, \\ S^{02} &= -0.423, & S^{31} &= 0.099, \\ S^{03} &= -0.092, & S^{12} &= -0.031. \end{aligned}$$

These examples prove correctness of the performed study.

References

1. Red'kov, V.M. Majorana-Oppenheimer approach to Maxwell electrodynamics. Part I. Minkowski space / V.M. Red'kov, N.G. Tokarevskaya, G.J. Spix // Advances in Applied Clifford Algebras. – 2012. – Vol. 22, no 4. – P. 1129–1149.
2. Spinor Structures in Geometry and Physics / O.V. Veko, E.M. Ovsyuk, A. Oana [et al.]. – New York : Nova Science Publishers Inc., 2015. – 415 p.
3. Spinor methods in the theory of group, and polarization optics / O.V. Veko, E.M. Ovsyuk, V.V. Kisel, V.M. Red'kov. – Minsk : Belarus Science, 2019. – 409 p. (in Russian).

UDC 539.12

V.V. Kisel¹, A.V. Bury², P.O. Sachenok¹, E.M. Ovsyuk¹

¹*Mozyr State pedagogical University named after I.P. Shamyakin*

²*B.I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus*

SPIN 1/2 PARTICLE WITH ANOMALOUS MAGNETIC MOMENT AND POLARIZABILITY IN THE EXTERNAL MAGNETIC FIELD

In the present paper, we examine the Dirac-like equation for a spin 1/2 particle with two additional characteristics, anomalous magnetic moment μ and polarizability σ in presence of external uniform magnetic field. After separating the variables, we derive the system of four differential equations in the polar coordinate. To resolve the system of equations, we apply the method by Fedorov – Gronskiy. According to this approach, four polar components are expressed through only two different functions, the last reduce to the confluent hypergeometric equation; at this there arises a definite quantization rule due to the presence of the uniform magnetic field. We have constructed two types of the wave functions, the corresponding energy spectra are found in analytical form.

Keywords: Dirac-like equations, two additional, electromagnetic characteristics, external magnetic fields, projective operators, exact solutions, generalized energy spectra.

In the paper [1], within the general method by Gel'fand – Yaglom [2], starting with the extended set of representations of the Lorentz group, it was constructed a generalized equation for a spin 1/2 particle with two additional characteristics (concerning general formalism see in [3], [4]). After eliminating the accessory variables of the complete wave function, it was derived the generalized Dirac-like equation, the last includes two additional interaction terms which are

interpreted as related to anomalous magnetic moment and a second additional characteristics:

$$\{\gamma^c i(\partial_c + ieA_c) + \frac{e\mu}{2M} j^{[ab]} F_{[ab]} + \frac{e\sigma}{2M^2} \gamma^c i(\partial_c + ieA_c) j^{[ab]} F_{[ab]} - M\} \Psi = 0; \quad (1)$$

the parameter μ corresponds to anomalous magnetic moment of a spin 1/2 particle, and the second parameter σ looks as related to a polarizability of the particle.

Let us consider this equation in presence of the uniform magnetic field. We will apply the cylindrical coordinates and the tetrad formalism. Let the field be oriented along the axis z , $A_\phi = +eBr^2/2$, $F_{12} = B$. Then the above equation (1) takes on the form

$$\begin{aligned} & \{[\gamma^0 i\partial_t + \gamma^1 (\partial_r + \frac{1}{2r}) + \frac{\gamma^2}{r} + (i\partial_\phi - eBr^2/2 + ij^{12}) + \\ & + \gamma^3 i\partial_z](1 + \frac{e\sigma}{M^2} j^{12} F_{12}) + \frac{e\mu}{M} j^{12} F_{12} - M\} \Psi = 0. \end{aligned} \quad (2)$$

We will apply the following substitution for the wave function

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{r}} e^{-ict} e^{im\phi} e^{ikz} \begin{vmatrix} f_1(r) \\ f_2(r) \\ f_3(r) \\ f_4(r) \end{vmatrix} = \frac{1}{\sqrt{r}} e^{-ict} e^{im\phi} e^{ikz} F(r).$$

Let us simplify the notations

$$eB \Rightarrow B, \quad eF_{12} \Rightarrow +B, \quad e\mu \Rightarrow \mu, \quad e\sigma \Rightarrow \sigma,$$

$$a_{m+1/2} = \frac{d}{dr} + \frac{m+1/2 + Br^2/2}{r}, \quad b_{m-1/2} = \frac{d}{dr} - \frac{m-1/2 + Br^2/2}{r},$$

the equation (2) leads to

$$\begin{aligned} -a_{m+1/2} f_4(r) \left(\frac{B\sigma}{2M^2} + i \right) + f_3(r)(k + \epsilon)(1 - \frac{iB\sigma}{2M^2}) + f_1(r)(-\frac{iB\mu}{2M} - M) &= 0, \\ b_{m-1/2} f_3(r) \left(\frac{B\sigma}{2M^2} - i \right) + f_4(r)(\epsilon - k)(1 + \frac{iB\sigma}{2M^2}) + f_2(r)(+\frac{iB\mu}{2M} - M) &= 0, \\ a_{m+1/2} f_2(r) \left(\frac{B\sigma}{2M^2} + i \right) + f_1(r)(\epsilon - k)(1 - \frac{iB\sigma}{2M^2}) + f_3(r)(-\frac{iB\mu}{2M} - M) &= 0, \\ -b_{m-1/2} f_1(r) \left(\frac{B\sigma}{2M^2} - i \right) + f_2(r)(\epsilon + k)(1 + \frac{iB\sigma}{2M^2}) + f_4(r)(+\frac{iB\mu}{2M} - M) &= 0. \end{aligned}$$

In order to resolve this system, we will apply the method by Fedorov – Gronskiy [5]. It is based on the use of projective operators related to the third spin projection

$$Y = ij^{12} = \begin{vmatrix} 1/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1/2 \end{vmatrix}; \quad P_+ = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}, \quad P_- = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix};$$

according to this approach, each projective constituent is determined through one function:

$$\Psi_+(r) = \begin{vmatrix} f_1 \\ 0 \\ f_3 \\ 0 \end{vmatrix} F_1(r), \quad \Psi_-(r) = \begin{vmatrix} 0 \\ f_2 \\ 0 \\ f_4 \end{vmatrix} F_2(r).$$

We impose differential constraints that permit us to transform all equations into algebraic ones:

$$a_{m+1/2}F_2(r) = C_1 F_1, \quad b_{m-1/2}F_1(r) = C_2 F_2,$$

taking into account these constraints we get the algebraic system

$$\begin{aligned} -C_1\left(\frac{B\sigma}{2M^2} + i\right)f_4 + (k+\epsilon)\left(1 - \frac{iB\sigma}{2M^2}\right)f_3 + \left(-\frac{iB\mu}{2M} - M\right)f_1 &= 0, \\ C_2\left(\frac{B\sigma}{2M^2} - i\right)f_3 + (\epsilon - k)\left(1 + \frac{iB\sigma}{2M^2}\right)f_4 + \left(+\frac{iB\mu}{2M} - M\right)f_2 &= 0, \\ C_1\left(\frac{B\sigma}{2M^2} + i\right)f_2 + (\epsilon - k)\left(1 - \frac{iB\sigma}{2M^2}\right)f_1 + \left(-\frac{iB\mu}{2M} - M\right)f_3 &= 0, \\ -C_2\left(\frac{B\sigma}{2M^2} - i\right)f_1 + (\epsilon + k)\left(1 + \frac{iB\sigma}{2M^2}\right)f_2 + \left(+\frac{iB\mu}{2M} - M\right)f_4 &= 0. \end{aligned}$$

Without loss of generality, we can equate two parameters, $C_2 = C_1 = C$, so obtaining

$$(a_{m+1/2}b_{m-1/2} - C^2)F_1(r) = 0, \quad (b_{m-1/2}a_{m+1/2} - C^2)F_2(r) = 0; \quad (3)$$

then the above algebraic system reads simpler

$$\begin{aligned} -\left(\frac{iB\mu}{2M} + M\right)f_1 + 0 \cdot f_2 + (k+\epsilon)\left(1 - \frac{iB\sigma}{2M^2}\right)f_3 - C\left(\frac{B\sigma}{2M^2} + i\right)f_4 &= 0, \\ 0 \cdot f_1 + \left(\frac{iB\mu}{2M} - M\right)f_2 + C\left(\frac{B\sigma}{2M^2} - i\right)f_3 + (\epsilon - k)\left(1 + \frac{iB\sigma}{2M^2}\right)f_4 &= 0, \\ (\epsilon - k)\left(1 - \frac{iB\sigma}{2M^2}\right)f_1 + C\left(\frac{B\sigma}{2M^2} + i\right)f_2 - \left(\frac{iB\mu}{2M} + M\right)f_3 + 0 \cdot f_4 &= 0, \\ -C\left(\frac{B\sigma}{2M^2} - i\right)f_1 + (\epsilon + k)\left(1 + \frac{iB\sigma}{2M^2}\right)f_2 + 0 \cdot f_3 + \left(\frac{iB\mu}{2M} - M\right)f_4 &= 0. \end{aligned} \quad (4)$$

In explicit form the equations (3) read

$$\begin{aligned} \frac{d^2F_1}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dF_1}{dr} + \left[-\frac{1}{4}B^2r^2 - \frac{1}{2}B - mB - C^2 - \frac{(m-1/2)^2}{r^2}\right]F_1 &= 0, \\ \frac{d^2F_2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dF_2}{dr} + \left[-\frac{1}{4}B^2r^2 - \frac{1}{2}B - mB - C^2 - \frac{(m+1/2)^2}{r^2}\right]F_2 &= 0. \end{aligned}$$

Let us transform them to the variable, $x = -Br^2/2$. These equations are related by simple symmetry $B \Rightarrow -B$, $m \Rightarrow -m$, $F_1 \Rightarrow F_2$; so it suffices to solve the equation for $F_1(x) = x^A e^{Dx} f_1(x)$:

$$\begin{aligned} f'' + \left(\frac{2A+1}{x} + 2D\right)f' + \frac{A^2}{x^2}f - \frac{1}{4} \frac{(1/2-m)^2}{x^2}f + \\ + D^2f - \frac{1}{4}f + \frac{(2A+1)D}{x}f + \frac{1}{4} \frac{1+2m+2C^2/B}{x}f &= 0. \end{aligned}$$

In order to have finite solutions, we should use $A = +\frac{|m-1/2|}{2}$, $D = +1/2$ (let $B > 0$). In this

way, in the variable $y = -x$ we get a confluent hypergeometric equation with parameters

$$c = |m - 1/2| + 1, \quad a = \frac{|m - 1/2| + m + 1/2}{2} + \frac{C^2}{2B} + \frac{1}{2}.$$

The polynomial condition $a = -n$ gives the following quantization rule

$$C^2 = -2B(n + \frac{|m - 1/2| + m + 1/2}{2} + \frac{1}{2}), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Let us turn to the algebraic system (4). It is convenient to apply dimensionless quantities

$$\frac{\epsilon}{M} = E, \quad \frac{k}{M} = K, \quad \frac{C}{M} = c, \quad b = \frac{B^2}{2M}, \quad \frac{B\sigma}{2M^2} = ib\sigma, \quad \frac{iB\mu}{2M^2} = ib\mu;$$

then the system (4) in matrix form reads

$$\begin{vmatrix} -(ib\mu + 1) & 0 & (E + K)(1 - ib\sigma) & -c(b\sigma + i) \\ 0 & (ib\mu - 1) & c(b\sigma - i) & (E - K)(1 + ib\sigma) \\ (E - K)(1 - ib\sigma) & c(b\sigma + i) & -(ib\mu + 1) & 0 \\ -c(b\sigma - i) & (E + K)(1 + ib\sigma) & 0 & (ib\mu - 1) \end{vmatrix} \begin{vmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ f_4 \end{vmatrix} = 0. \quad (5)$$

From vanishing its determinant, we derive a bi-quadratic equation

$$\det A = b^4 \left[(E^2 - K^2 + c^2) \sigma^2 - \mu^2 \right]^2 + (E^2 - K^2 + c^2 - 1)^2 + b^2 \left\{ 2(E^2 - K^2 - c^2 + 1) \mu^2 + 2 \left[(E^2 - K^2 + c^2)^2 + E^2 - K^2 - c^2 \right] \sigma^2 + 8(E^2 - K^2) \sigma \mu \right\} = 0.$$

For parameters $E_{1,2} > 0$, we obtain expressions

$$E_{1,2} = E_{\pm} = \frac{1}{1 + b^2 \sigma^2} [\pm 2b(\sigma + \mu) \sqrt{c^2 (1 + b^2 \sigma^2)^2 - (b^2 \mu \sigma - 1)^2} + + ((-c^2 + K^2) \sigma^4 + \sigma^2 \mu^2) b^4 + ((-1 - 2c^2 + 2K^2) \sigma^2 - 4\sigma \mu - \mu^2) b^2 - c^2 + 1 + K^2]^{1/2}.$$

Substituting expression for $E_{1,2}$ in the system (5) we can find two types of the wave functions. The energy spectra depend in a complicated way on additional characteristics; by this reason these spectra may be studied numerically. By physical reason, two additional parameters should be imaginary; only then we get the physically interpretable positive energies.

References

1. Spin 1/2 particle with anomalous magnetic moment and polarizability / V.V. Kisel, A.V. Bury, P.O. Sachenok, E.M. Ovsiyuk // Vesnik of Brest University. Series 4. Physics. Mathematics. – 2024. – № 2. – P. 7–27. (in Russian).
2. Gel'fand, I.M. General relativistically invariant equations and infinite dimensional representations of the Lorentz group / I.M. Gel'fand, A.M. Yaglom // J. Experimental and Theoretical Physics. – 1948. – Vol. 18. – P. 703–733 (1948). (in Russian).
3. Pletukhov, V.A. Relativistic wave equations and intrinsic degrees of freedom / V.A. Pletukhov, V.M. Red'kov, V.I. Strazhev. – Minsk : Belarusian Science, 2015. – 327 p. (in Russian).
4. Spin 1/2 particle with anomalous magnetic moment in a uniform magnetic field, exact solutions / E.M. Ovsiyuk, V.V. Kisel, Y.A. Voynova, O.V. Veko, V.M. Red'kov // Nonlinear Phenomena in Complex Systems. – 2016. – Vol. 19, no 2. – P. 153–165.

5. Gronskiy, V.K. Magnetic properties of a particle with spin 3/2 / V.K. Gronskiy, F.I. Fedorov // Doklady of the National Academy of Sciences of Belarus. – 1960. – Vol. 4, no 7. – P. 278–283. (in Russian).

UDC 537.8

N.G. Krylova¹, E.M. Ovsyuk², A.V. Ivashkevich³, V.M. Red'kov³

¹*Belarusian State Agrarian Technical University*

²*Mozyr State pedagogical University named after I.P. Shamyakin*

³*B.I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus*

GEOMETRICAL MODELLING ON THE MEDIA IN ELECTRODYNAMICS

This paper includes the following items: Riemannian geometry and Maxwell theory; Maxwell equations in Riemannian space and effective media; metrical tensor $g_{\alpha\beta}(x)$ and constitutive relations; inverse constitutive equations; geometric simulation of inhomogeneous media; geometrical modeling of anisotropic uniform media; the moving medium and anisotropy.

Keywords: Maxwell equations, Riemannian space, effective media, geometrical modeling.

Introduction. Note that Gordon [1] was the first interested in trying to describe dielectric media by an effective metrics. Gordon tried to use a gravitational field to simulate a dielectric medium. The idea was taken up and developed by Tamm and Mandel'stam [2]–[4], and by many others.

Let us start with the Maxwell equations in Minkowski space for the uniform medium

$$\text{div}\mathbf{B} = 0, \quad \text{rot}\mathbf{E} = -\frac{\partial\mathbf{B}}{\partial t}, \quad \epsilon\epsilon_0\text{div}\mathbf{E} = \rho, \quad \frac{1}{\mu\mu_0}\text{rot}\mathbf{B} = \mathbf{J} + \epsilon\epsilon_0\frac{\partial\mathbf{E}}{\partial t}. \quad (1)$$

With the use of constitutive relations $\mathbf{H} = \frac{\mathbf{B}}{\mu\mu_0}$, $\mathbf{D} = \epsilon\epsilon_0\mathbf{E}$, eqs. (1) can be written as

$$\text{div}\mathbf{c}\mathbf{B} = 0, \quad \text{rot}\mathbf{E} = -\frac{\partial c\mathbf{B}}{\partial x^0}, \quad \text{div}\mathbf{D} = j^0, \quad \text{rot}\frac{\mathbf{H}}{c} = \frac{\mathbf{J}}{c} + \frac{\partial\mathbf{D}}{\partial x^0} \quad (x^0 = ct). \quad (2)$$

We represent the electric displacement \mathbf{D} and the magnetic field \mathbf{H} by the antisymmetric tensor H^{ik} , the electric \mathbf{E} and the magnetic induction \mathbf{B} are accounted for by the tensor F^{ik} :

$$(F^{\alpha\beta}) = \begin{vmatrix} 0 & -E^1 & -E^2 & -E^3 \\ E^1 & 0 & -cB^3 & cB^2 \\ E^2 & cB^3 & 0 & -cB^1 \\ E^3 & -cB^2 & cB^1 & 0 \end{vmatrix}, \quad (H^{\alpha\beta}) = \begin{vmatrix} 0 & -D^1 & -D^2 & -D^3 \\ D^1 & 0 & -H^3/c & H^2/c \\ D^2 & H^3/c & 0 & -H^1/c \\ D^3 & -H^2/c & H^1/c & 0 \end{vmatrix};$$

where $E^i = -E_i$, $D^i = -D_i$, $B^i = +B_i$, $H^i = +H_i$, $j^a = (\rho, \mathbf{J}/c)$. Then eqs. (2) may be presented in relativistic covariant tensor form

$$\partial_a F_{bc} + \partial_b F_{ca} + \partial_c F_{ab} = 0, \quad \partial_b H^{ba} = j^a. \quad (3)$$

For the vacuum case, the constitutive relations $\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E}$, $\mathbf{H} = \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B}$, read in tensor form as follows

$$H^{ab}(x) = \epsilon_0 F^{ab}(x), \text{ and eqs. (3) contain only one tensor}$$

$$\partial_a F_{bc} + \partial_b F_{ca} + \partial_c F_{ab} = 0, \quad \partial_b F^{ba} = \frac{1}{\epsilon_0} j^a.$$

The situation is quite different in presence of media. Even for simplest case of the uniform medium, relativizing the above constitutive equations $\mathbf{D} = \epsilon_0 \epsilon \mathbf{E}$, $\mathbf{H} = \frac{1}{\mu_0 \mu} \mathbf{B}$ requires a subsidiary (4×4) -matrix with presumed properties of a 2-rank tensor:

$$\eta^{am} = \sqrt{\epsilon} \begin{vmatrix} 1/k & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -k & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -k & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -k \end{vmatrix}, \quad k = \frac{1}{\sqrt{\epsilon \mu}}, \quad H^{ab} = \epsilon_0 \eta^{am} \eta^{bn} F_{mn}.$$

A class of linear inhomogeneous electromagnetic media characterized by a 4-rank tensor may be postulated as [3], [4]:

$$H^{ab}(x) = \epsilon_0 \Delta^{abmn}(x) F_{mn}(x), \quad \Delta^{abmn}(x) = -\Delta^{bamn}(x) = -\Delta^{bnam}(x),$$

When extending Maxwell theory to a space-time with non-Euclidean geometry, which describes gravity according to General Relativity, one must change previous equations to a more general form. In particular, the vacuum Maxwell equations read

$$\nabla_\alpha f_{\beta\gamma} + \nabla_\beta f_{\gamma\alpha} + \nabla_\gamma f_{\alpha\beta} = 0, \quad \nabla_\beta h^{\beta\alpha} = j^\alpha, \quad h_{\alpha\beta} = \epsilon_0 f_{\alpha\beta},$$

where ∇_β stands for the covariant derivative. In order to distinguish formulas referring to a flat and curved models we will use small letters to designates electromagnetic tensors in curved model, f_{ab} and h^{ab} .

1. Maxwell equations in Riemannian space and effective media. Let us discuss the possibility to consider the vacuum Maxwell equations in a curved space-time as Maxwell equations in flat space-time but specified for an effective medium, the properties of which are determined by metrical structure of the initial curved model $g_{\alpha\beta}(x)$. We will restrict ourselves to the case of curved space-time models which are parameterized by some quasi-Cartesian coordinates.

Vacuum Maxwell equations in a Riemannian space-time, parameterized by some quasi-Cartesian coordinates can be brought to the form [5], [6]

$$\partial_a f_{bc} + \partial_b f_{ca} + \partial_c f_{ab} = 0, \quad \frac{1}{\sqrt{-g}} \partial_b \sqrt{-g} f^{ba} = \frac{1}{\epsilon_0} j^a. \quad (4)$$

Indeed, one can immediately see that introducing new variables

$$\sqrt{-g} j^a \rightarrow j^a, \quad f_{ab} \rightarrow F_{ab}, \quad \epsilon_0 \sqrt{-g} g^{am}(x) g^{bn}(x) f_{mn}(x) \rightarrow H^{ba},$$

equations (4) in the curved space can be re-written as Maxwell equations for the flat space but in a medium:

$$\partial_a F_{bc} + \partial_b F_{ca} + \partial_c F_{ab} = 0, \quad \partial_b H^{ba} = \frac{1}{\epsilon_0} j^a.$$

Relations playing the role of constitutive equations are determined by the metrical structure of the geometrical model:

$$H^{\beta\alpha}(x) = \epsilon_0 \left[\sqrt{-g(x)} g^{\alpha\rho}(x) g^{\beta\sigma}(x) \right] F_{\rho\sigma}(x). \quad (5)$$

2. Metrical tensor and constitutive relations. Let us consider the constitutive equations for electromagnetic fields which are generated by the metrical structure of the space-time model. For an arbitrary metrical tensor $g_{\alpha\beta}(x)$ we may obtain a 3-dimensional form:

$$D^i = \epsilon_0 \epsilon^{ik}(x) E_k + \epsilon_0 c \alpha^{ik}(x) B_k, \quad H^i = \epsilon_0 c \beta^{ik}(x) E_k + \mu_0^{-1} (\mu^{-1})^{ik}(x) B_k.$$

Four dimensionless (3×3) -matrices $\epsilon^{ik}(x)$, $\alpha^{ik}(x)$, $\beta^{ik}(x)$, $(\mu^{-1})^{ik}(x)$ are not independent because they are bilinear functions of only 10 components of the symmetrical tensor $g_{\alpha\beta}(x)$.

After simple calculation, for these tensors one produces expressions

$$\begin{aligned} \epsilon^{ik}(x) &= \sqrt{-g} (g^{00}(x) g^{ik}(x) - g^{0i}(x) g^{0k}(x)), \quad (\mu^{-1})^{ik}(x) = \frac{1}{2} \sqrt{-g} \epsilon_{ilm} g^{ml}(x) g^{nj}(x) \epsilon_{ljk}, \\ \alpha^{ik}(x) &= +\sqrt{-g} g^{ij}(x) g^{0l}(x) \epsilon_{ljk}, \quad \beta^{ik}(x) = -\sqrt{-g} g^{0j}(x) \epsilon_{jil} g^{lk}(x). \end{aligned}$$

The tensor $\epsilon^{ik}(x)$ is evidently symmetrical; it is easy to demonstrate the same property for $(\mu^{-1})^{ik}(x)$. Indeed, we have

$$(\mu^{-1})^{ki}(x) = \frac{1}{2} \epsilon_{kmn} g^{ml}(x) g^{nj}(x) \epsilon_{lji},$$

making changes in mute indices, $m \leftrightarrow j$, $n \leftrightarrow l$, we get

$$(\mu^{-1})^{ki}(x) = \frac{1}{2} \epsilon_{kjl} g^{jn}(x) g^{lm}(x) \epsilon_{mni} \epsilon_{lmn} g^{lm}(x) g^{jn}(x) \epsilon_{ljk} = (\mu^{-1})^{ik}(x).$$

In the same manner, one can verify the identity $\beta^{ki}(x) = +\alpha^{ik}$:

$$\beta^{ki} = -g^{0j}(x) \epsilon_{jkl} g^{li}(x) = g^{il}(x) g^{0j}(x) \epsilon_{jlk} = +\alpha^{ik}.$$

So, the tensors obey the constraints:

$$\epsilon^{ik}(x) = +\epsilon^{ki}(x), \quad (\mu^{-1})^{ik}(x) = +(\mu^{-1})^{ki}(x), \quad \beta^{ki}(x) = \alpha^{ik};$$

they mean that the (6×6) -matrix defining constitutive equations is symmetrical

$$\begin{vmatrix} D^i(x) \\ H^i(x) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \epsilon_0 \epsilon^{ik}(x) & \epsilon_0 c \alpha^{ik}(x) \\ \epsilon_0 c \beta^{ik}(x) & \mu_0^{-1} (\mu^{-1})^{ik}(x) \end{vmatrix} \begin{vmatrix} E_k(x) \\ B_k(x) \end{vmatrix}.$$

Making $(3+1)$ -splitting in the metrical tensor

$$g^{\alpha\beta}(x) = \begin{vmatrix} g^{00} & (g^{0i}) = \bar{g} \\ (g^{i0}) = \bar{g} & (g^{ik}) = g \end{vmatrix}, \quad (\bar{g}^\times)_{jk} \equiv g^{0l}(x) \epsilon_{ljk} = g^l(x) \epsilon_{ljk},$$

tensors (ϵ^{ik}) , (α^{ik}) , (β^{ik}) can be written in the form

$$\epsilon(x) = \sqrt{-g} [g^{00}(x) g(x) - \bar{g}(x) \cdot \bar{g}(x)], \quad \alpha(x) = \sqrt{-g} g(x) \bar{g}^\times(x), \quad \beta(x) = -\sqrt{-g} \bar{g}^\times(x) g(x).$$

Metrical tensors which are the most interesting in the context of General relativity [5] have a quasi-diagonal structure, then the effective constitutive relations simplify:

$$g^{\alpha\beta}(x) = \begin{vmatrix} g^{00} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & g^{11} & g^{12} & g^{13} \\ 0 & g^{21} & g^{22} & g^{23} \\ 0 & g^{31} & g^{32} & g^{33} \end{vmatrix}, \quad \alpha(x) = 0, \quad \beta(x) = 0,$$

$$\epsilon(x) = \sqrt{-g} g^{00}(x)g(x), \quad (\mu^{ik})(x) = -\frac{1}{2}\sqrt{-g} \operatorname{Sp}[\tau_i g(x)\tau_k g(x)]. \quad (6)$$

Explicit expressions for tensors $\epsilon^{ik}(x)$ and $(\mu^{-1})^{ik}(x)$ given by (6) are

$$(\epsilon^{ik}) = \sqrt{-g} g^{00} \begin{vmatrix} g^{11} & g^{12} & g^{13} \\ g^{21} & g^{22} & g^{23} \\ g^{31} & g^{32} & g^{33} \end{vmatrix}, \quad ((\mu^{-1})^{ik}) = \sqrt{-g} \begin{vmatrix} G^{11} & G^{12} & G^{13} \\ G^{21} & G^{22} & G^{23} \\ G^{31} & G^{32} & G^{33} \end{vmatrix},$$

where $G^{ik}(x)$ stand for (algebraic) co-factors to the elements $g^{ik}(x)$:

$$G^{ik}(x) = \begin{vmatrix} (g^{22}g^{33} - g^{23}g^{32}) & (g^{31}g^{23} - g^{21}g^{33}) & (g^{21}g^{32} - g^{22}g^{31}) \\ (g^{32}g^{13} - g^{33}g^{12}) & (g^{33}g^{11} - g^{31}g^{13}) & (g^{31}g^{12} - g^{32}g^{11}) \\ (g^{12}g^{23} - g^{13}g^{22}) & (g^{13}g^{21} - g^{11}g^{23}) & (g^{11}g^{22} - g^{12}g^{21}) \end{vmatrix}.$$

Therefore, two matrices, $\epsilon(x)$ and $\mu^{-1}(x)$, are not independent and obey the following constraint:

$$\epsilon(x)\mu^{-1}(x) = \frac{-g^{00}g_{00}}{\det g_{ik}} \begin{vmatrix} g^{11} & g^{12} & g^{13} \\ g^{21} & g^{22} & g^{23} \\ g^{31} & g^{32} & g^{33} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} (g^{22}g^{33} - g^{23}g^{32}) & (g^{31}g^{23} - g^{21}g^{33}) & (g^{21}g^{32} - g^{22}g^{31}) \\ (g^{32}g^{13} - g^{33}g^{12}) & (g^{33}g^{11} - g^{31}g^{13}) & (g^{31}g^{12} - g^{32}g^{11}) \\ (g^{12}g^{23} - g^{13}g^{22}) & (g^{13}g^{21} - g^{11}g^{23}) & (g^{11}g^{22} - g^{12}g^{21}) \end{vmatrix} = -I.$$

Thus, the metric tensors with quasi-diagonal structure effectively describe media with following constitutive relations (the sign minus may be eliminated by changing the notation)

$$\mathbf{D} = -\epsilon_0 \epsilon(x) \mathbf{E}, \quad \mathbf{B} = \mu_0 \mu(x) \mathbf{H}, \quad \mu(x) = -\epsilon(x),$$

$$(\epsilon^{ik})(x) = \sqrt{-g(x)} g^{00}(x) \begin{vmatrix} g^{11}(x) & g^{12}(x) & g^{13}(x) \\ g^{21}(x) & g^{22}(x) & g^{23}(x) \\ g^{31}(x) & g^{32}(x) & g^{33}(x) \end{vmatrix}.$$

3. Geometrical modeling of the inhomogeneous media. Let us consider a special form of the diagonal anisotropic metric

$$g_{\alpha\beta} = \begin{vmatrix} a^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -b_1^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -b_2^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -b_3^2 \end{vmatrix},$$

where a^2, b_i^2 are arbitrary numerical parameters. The constitutive equations generated by this geometry have the form $D^i = \epsilon_0 \epsilon^{ik} E_k, H^i = \mu_0^{-1} \mu^{ik} B_k$, where

$$(\epsilon^{ik}) = a^{-2} \begin{vmatrix} -b_1^{-2} & 0 & 0 \\ 0 & -b_2^{-2} & 0 \\ 0 & 0 & -b_3^{-2} \end{vmatrix}, \quad (\mu^{ik}) = \begin{vmatrix} b_2^{-2}b_3^{-2} & 0 & 0 \\ 0 & b_3^{-2}b_1^{-2} & 0 \\ 0 & 0 & b_1^{-2}b_2^{-2} \end{vmatrix},$$

or differently

$$D^1 = -\frac{\epsilon_0 E_1}{a^2 b_1^2}, \quad D^2 = -\frac{\epsilon_0 E_2}{a^2 b_2^2}, \quad D^3 = -\frac{\epsilon_0 E_3}{a^2 b_3^2}, \quad H^1 = \frac{B_1}{\mu_0 b_2^2 b_3^2}, \quad H^2 = \frac{B_2}{\mu_0 b_3^2 b_1^2}, \quad H^3 = \frac{B_3}{\mu_0 b_1^2 b_2^2}.$$

These equations should be compared with the physical ones

$$D^1 = -\epsilon_0 \epsilon_1 E_1, \quad D^2 = -\epsilon_0 \epsilon_2 E_2, \quad D^3 = -\epsilon_0 \epsilon_3 E_3, \quad H^1 = \frac{B_1}{\mu_0 \mu_1}, \quad H^2 = \frac{B_2}{\mu_0 \mu_2}, \quad H^3 = \frac{B_3}{\mu_0 \mu_3},$$

whence we obtain

$$\epsilon_1 = \frac{1}{a^2 b_1^2}, \quad \epsilon_2 = \frac{1}{a^2 b_2^2}, \quad \epsilon_3 = \frac{1}{a^2 b_3^2}, \quad \mu_1 = b_2^2 b_3^2, \quad \mu_2 = b_3^2 b_1^2, \quad \mu_3 = b_1^2 b_2^2.$$

One can readily obtain

$$\frac{\mu_1}{\epsilon_1} = \frac{\mu_2}{\epsilon_2} = \frac{\mu_3}{\epsilon_3} = (a^2 b_1^2 b_2^2 b_3^2) = -g, \quad -g = \sqrt{\frac{\mu_1^2 + \mu_2^2 + \mu_3^2}{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2 + \epsilon_3^2}}, \quad \frac{\mu_i}{\sqrt{\mu_1^2 + \mu_2^2 + \mu_3^2}} = \frac{\epsilon_i}{\sqrt{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2 + \epsilon_3^2}}.$$

The latter means that one may use four independent parameters ϵ, μ, n_i :

$$\epsilon_i = \epsilon n_i, \quad \mu_i = \mu n_i, \quad \mathbf{n}^2 = 1.$$

One can readily express b_i^2 in terms of μ_i :

$$b_1^2 = \sqrt{\frac{\mu_2 \mu_3}{\mu_1}} = \sqrt{\mu} \sqrt{\frac{n_2 n_3}{n_1}}, \quad b_2^2 = \sqrt{\frac{\mu_3 \mu_1}{\mu_2}} = \sqrt{\mu} \sqrt{\frac{n_3 n_1}{n_2}}, \quad b_3^2 = \sqrt{\frac{\mu_1 \mu_2}{\mu_3}} = \sqrt{\mu} \sqrt{\frac{n_1 n_2}{n_3}}. \quad (7)$$

In turn, from $a^2 b_1^2 b_2^2 b_3^2 = \mu / \epsilon$ it follows

$$a^2 = \frac{\mu}{\epsilon} \frac{1}{b_1^2 b_2^2 b_3^2} = \frac{1}{\epsilon \sqrt{\mu}} \frac{1}{\sqrt{n_1 n_2 n_3}}. \quad (8)$$

The formulas (7), (8) provide us with anisotropic metrical tensor

$$g_{ab}(x) = \frac{1}{\sqrt{\epsilon}} \begin{vmatrix} \frac{1}{\sqrt{\epsilon \mu}} \frac{1}{\sqrt{n_1 n_2 n_3}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\sqrt{\epsilon \mu} \sqrt{\frac{n_2 n_3}{n_1}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\sqrt{\epsilon \mu} \sqrt{\frac{n_3 n_1}{n_2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\sqrt{\epsilon \mu} \sqrt{\frac{n_1 n_2}{n_3}} \end{vmatrix}.$$

4. The moving medium and anisotropy. Starting point is that in Minkowski approach to electrodynamics, the constitutive relations explicitly depend on the 4-velocity of the reference frame motion under a medium. Gordon [2], Tamm and Mandel'stam [3], [4] noticed that for a moving observer the constitutive relations can be expressed with the help of effective metric as follows:

$$H^{ab}(x) = \epsilon_0 \Delta^{abmn} F_{mn}, \Delta^{abmn} = \epsilon_0 \frac{1}{\sqrt{\mu}} [g^{am} + (\epsilon\mu - 1) u^a u^m] \frac{1}{\sqrt{\mu}} [g^{bn} + (\epsilon\mu - 1) u^b u^n],$$

where $g^{ab} = \text{diag}(+1, -1, -1, -1)$. Corresponding constitutive 3-dimensional tensors are (let us use the notation $\epsilon\mu - 1 = \gamma$)

$$\epsilon^{ik} = \frac{1}{\mu} \begin{vmatrix} (-1 + \gamma u^1 u^1 - \gamma u^0 u^0) & \gamma u^1 u^2 & \gamma u^1 u^3 \\ \gamma u^1 u^2 & (-1 + \gamma u^2 u^2 - \gamma u^0 u^0) & \gamma u^2 u^3 \\ \gamma u^3 u^1 & \gamma u^3 u^2 & (-1 + \gamma u^3 u^3 - \gamma u^0 u^0) \end{vmatrix},$$

$$(\mu^{-1})^{ik} = \frac{1}{\mu} \begin{vmatrix} (1 - \gamma u^2 u^2 - \gamma u^3 u^3) & \gamma u^1 u^2 & \gamma u^1 u^3 \\ \gamma u^1 u^2 & (1 - \gamma u^3 u^3 - \gamma u^1 u^1) & \gamma u^2 u^3 \\ \gamma u^3 u^1 & \gamma u^3 u^2 & (1 - \gamma u^1 u^1 - \gamma u^2 u^2) \end{vmatrix},$$

$$\alpha^{ik} = \frac{1}{\mu} \begin{vmatrix} 0 & -\gamma u^0 u^3 & +\gamma u^0 u^2 \\ +\gamma u^0 u^3 & 0 & -\gamma u^0 u^1 \\ -\gamma u^0 u^2 & +\gamma u^0 u^1 & 0 \end{vmatrix}, \quad \beta^{ik} = \frac{1}{\mu} \begin{vmatrix} 0 & +\gamma u^0 u^3 & -\gamma u^0 u^2 \\ -\gamma u^0 u^3 & 0 & +\gamma u^0 u^1 \\ +\gamma u^0 u^2 & -\gamma u^0 u^1 & 0 \end{vmatrix}.$$

Further we deduce vector form for constitutive relations, applying the notation

$$V = v/c, \quad u^0 = \frac{1}{\sqrt{1-V^2}}, \quad u^i = \frac{V^i}{\sqrt{1-V^2}}, \quad (9)$$

$$\mathbf{D} = \frac{\epsilon_0}{\mu} \mathbf{E} + \frac{\epsilon_0 \gamma}{\mu} \frac{\mathbf{E} - (\mathbf{V}\mathbf{E})\mathbf{V}}{1-V^2} + \frac{\epsilon_0 c \gamma}{\mu} \frac{\mathbf{V} \times \mathbf{B}}{1-V^2},$$

$$\mathbf{H} = \frac{1}{\mu_0 \mu} \mathbf{B} + \frac{\gamma}{\mu_0 \mu} \frac{\mathbf{V} \times (\mathbf{V} \times \mathbf{B})}{1-V^2} + \frac{\epsilon_0 c \gamma}{\mu} \frac{\mathbf{V} \times \mathbf{E}}{1-V^2}. \quad (10)$$

Relations (9), (10) provide us with vector form of constitutive relations for the uniform medium moving with velocity \mathbf{V} . We may conclude that the motion is effectively equivalent to an anisotropic medium. Besides, these relations mean that the Maxwell relations in media depend explicitly on the velocity of the reference frame, therefore they are not invariant under the Lorentz transformation.

References

1. Gordon, W. Zur Lichtfortpflanzung nach der Relativitätstheorie / W. Gordon // Ann. Phys. (Leipzig). – 1923. – Vol. 72. – P. 421–456.
2. Tamm, I.E. The electrodynamics of anisotropic media in the special theory of relativity / I.E. Tamm // Zh. R, F, Kh. O, Fiz. dep. – 1924. – Vol. 56, no. 2–3. – P. 248–262.
3. Tamm, I.E. The crystal-optical theory of relativity, as it relates to the geometry of bi-quadratic forms / I.E. Tamm // Zh. R, F, Kh. O, Fiz. dep. – 1925. Vol. 54, no. 3–4. – P. 1.
4. Mandelstam, L.I. Elektrodynamik der anisotropen Medien und der speziellen Relativitätstheorie / L.I. Mandelstam, I.E. Tamm // Math. Annalen. – 1925. – Vol. 95. – P. 154–160.
5. Landau, L.D. Theoretical Physics. Vol. 2. Field theory / L.D. Landau, E.M. Lifshitz. – Moscow : Science, 1973. (in Russian).
6. Red'kov, V.M. Particle fields in Riemannian space and the Lorentz Group / V.M. Red'kov. – Minsk : Belarusian Science, 2009. (in Russian).

E.M. Ovsyuk¹, P.O. Sachenok¹, A.S. Martynenko¹, A.V. Ivashkevich²

¹*Mozyr State pedagogical University named after I.P. Shamyakin*

²*B.I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus*

S=0 PARTICLE WITH THE COX STRUCTURE AND POLARIZABILITY, IN PRESENCE OF MAGNETIC FIELD

In the present paper, we will specify the equations for a spin 0 particle with two additional characteristics, Cox structure and polarizability, to the cylindrical coordinates, and in presence of the external uniform magnetic field. After separating the variables, we derive the system of 5 first order differential equations in polar coordinate. This system may be reduced to a second order equation for a primary function, which is solved in terms of the confluent hypergeometric functions. We derive a formula for energies, it depends on two additional characteristics.

Keywords: spin 0 particle, Cox structure, polarizability, external magnetic field, exact solutions, generalized energy spectra.

Within the method by Gel'fand – Yaglom [1], [2], in [3] it was constructed a relativistic system of the first order equations for a spin 0 particle with two additional characteristics, Cox structure and polarizability. After eliminating the accessory variables of the complete wave function, it was derived the system of 5 equations, they include two additional interaction terms which are interpreted as related to Cox structure and polarizability [2]. In the present paper, we will specify this equations to the cylindrical coordinates, and in presence of the external uniform magnetic field. We start with the form of equations in any curvilinear coordinates; the tensor system of equations takes form

$$D_\alpha \Phi^\alpha - iM\Phi = 0, \quad D_\beta \Phi + ie\gamma F_{\alpha\beta} \Phi^\alpha + ie\sigma D^\alpha F_{\alpha\beta} \Phi - iM\Phi_\beta = 0;$$

note the notations $D_\alpha = \nabla_\alpha + ieA_\alpha$, $\hat{\partial}_\alpha = \partial_\alpha + ieA_\alpha$. In tetrad form, they read

$$\begin{aligned} \hat{\partial}_{(a)} \Phi^a + e^{(a)\alpha}_{;\alpha} \Phi_a - iM\Phi = 0, \quad \partial_{(c)} \Phi + ie\gamma F_{ac} \Phi^a - iM\Phi_c + \\ + ie\sigma [F_c^a \hat{\partial}_{(a)} \Phi + (\partial_{(a)} F_c^a) \Phi + F_c^a e_{(a)\alpha}^\alpha \Phi + F^{ab} (e_{(b)\beta;\alpha} e_{(c)}^\beta e_{(a)}^\alpha) \Phi] = 0, \end{aligned}$$

where we apply the notation $e_{(c)}^\beta \hat{\partial}_\beta = \partial_{(c)}$, and the short notation for the covariant derivative, $\nabla_\alpha = \alpha$. Cylindrical coordinates, corresponding tetrad, Ricci rotation coefficients and the uniform magnetic field are determined by relations

$$x^\alpha = (t, r, \phi, z), \quad dS^2 = dt^2 - dr^2 - r^2 d\phi^2 - dz^2,$$

$$g_{\alpha\beta} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -r^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}, \quad g_{\alpha\beta} = \eta^{ab} e_{(a)\alpha} e_{(b)\beta}, \quad e_{(a)}^\alpha = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{r} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix},$$

$$\gamma_{122} = \frac{1}{r}, \quad \gamma_{122} = -\gamma_{212} = +\gamma_{21}^2 = e_{(1);\alpha}^\alpha = \frac{1}{r},$$

$$A_\phi = -Br^2/2, F_{12} = e_{(1)}^r e_{(2)}^\phi F_{r\phi} = -B \quad (F_{12} = B_3 = -B).$$

We readily find an explicit form of the above equations for the case under consideration

$$\partial_0 \Phi_0 - (\partial_r + \frac{1}{r}) \Phi_1 - \frac{1}{r} \hat{\partial}_\phi \Phi_2 - \partial_z \Phi_3 - iM \Phi = 0,$$

$$\begin{vmatrix} \partial_0 \Phi \\ \partial_r \Phi \\ \frac{1}{r} \hat{\partial}_\phi \Phi \\ \partial_z \Phi \end{vmatrix} + ie\gamma B \begin{vmatrix} 0 \\ -\Phi_2 \\ +\Phi_1 \\ 0 \end{vmatrix} + ie\sigma B \begin{vmatrix} 0 \\ -\frac{1}{r} \hat{\partial}_\phi \Phi \\ +\partial_r \Phi \\ 0 \end{vmatrix} - iM \begin{vmatrix} \Phi_0 \\ \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \end{vmatrix} = 0,$$

where $\hat{\partial}_\phi = \partial_\phi + ieBr^2/2$. Let us apply the substitution (they correspond to diagonalization of operators of energy, third projection of the total angular momentum and the third projection of the linear momentum)

$$\Psi = \begin{vmatrix} H_1 \\ H_2 \end{vmatrix}, \quad H_1 = e^{-ict} e^{im\phi} e^{ikz} f(r), H_2 = e^{-ict} e^{im\phi} e^{ikz} \begin{vmatrix} f_0(r) \\ f_1(r) \\ f_2(r) \\ f_3(r) \end{vmatrix};$$

taking in mind the notation $i \frac{m+eBr^2/2}{r} = i\mu(r)$ we get 5 equations

$$\begin{aligned} \epsilon f + Mf_0 &= 0, \quad kf - Mf_3 = 0, \quad -ief_0 - \left(\frac{d}{dr} + \frac{1}{r}\right)f_1 - \frac{1}{r}i\mu f_2 - ikf_3 - iMf = 0, \\ \left(\frac{d}{dr} + e\sigma B \frac{\mu}{r}\right)f - ie\gamma Bf_2 - iMf_1 &= 0, \quad i\left(\frac{\mu}{r} + e\sigma B \frac{d}{dr}\right)f + ie\gamma Bf_1 - iMf_2 = 0. \end{aligned}$$

Eliminating the variables f_0, f_3 : $f_0 = -\frac{\epsilon}{M}f$, $f_3 = \frac{k}{M}f$, we derive a system of 3 equation:

$$\begin{aligned} +ie\frac{\epsilon}{M}f - \left(\frac{d}{dr} + \frac{1}{r}\right)f_1 - \frac{1}{r}i\mu f_2 - ik\frac{k}{M}f - iMf &= 0; \\ \left(\frac{d}{dr} + e\sigma B \frac{\mu}{r}\right)f - ie\gamma Bf_2 - iMf_1 &= 0, \quad i\left(\frac{\mu}{r} + e\sigma B \frac{d}{dr}\right)f + ie\gamma Bf_1 - iMf_2 = 0. \end{aligned} \quad (1)$$

By physical reason we make change $\gamma \rightarrow i\gamma$, then we get

$$\begin{aligned} f_1 &= \frac{1}{M^2 - e^2\gamma^2 B^2} \left[-ie\gamma B \left(\frac{\mu}{r} + e\sigma B \frac{d}{dr} \right) - iM \left(\frac{d}{dr} + e\sigma B \frac{\mu}{r} \right) \right] f, \\ f_2 &= \frac{1}{M^2 - e^2\gamma^2 B^2} \left[ie\gamma B \left(\frac{d}{dr} + e\sigma B \frac{\mu}{r} \right) + M \left(\frac{\mu}{r} + e\sigma B \frac{d}{dr} \right) \right] f. \end{aligned}$$

We substitute this result into the first equation in (1), allowing for the explicit form of $\mu(r)$; in this way we derive a second order equation for function f ,

$$\frac{d^2 f}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{df}{dr} + \left(-\frac{m^2}{r^2} - \frac{e^2 B^2 r^2}{4} + A \right) f = 0,$$

where

$$A = -meB + \frac{e^2 B^2 (\sigma M + \gamma)}{M + e^2 \gamma \sigma B^2} + \frac{(\epsilon^2 - k^2 - M^2)(-e^2 \gamma^2 B^2 + M^2)}{M(M + e^2 \gamma \sigma B^2)}.$$

In the variable $x = eBr^2 / 2$, this equation reads

$$\frac{d^2f}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{df}{dx} + \left(-\frac{1}{4} \frac{m^2}{x^2} - \frac{1}{4} + \frac{A}{2eBx}\right) f = 0;$$

its solution is searched in the form $f = x^a e^{cx} F(x)$:

$$x \frac{d^2F}{dx^2} + (2a+1+2cx) \frac{dF}{dx} + [(c^2 - \frac{1}{4})x + \frac{4a^2 - m^2}{4x} + 2ac + c + \frac{A}{2eB}] F = 0.$$

Let $a = |m/2|$, $c = -1/2$, then the equation simplifies

$$x \frac{d^2F}{dx^2} + (2a+1-x) \frac{dF}{dx} + (-a - \frac{1}{2} + \frac{A}{2eB}) F = 0$$

and it is confluent hypergeometric equations

$$x \frac{d^2F}{dx^2} + (\beta - x) \frac{dF}{dx} - \alpha F = 0, \quad \beta = 2a+1, \quad \alpha = a + \frac{1}{2} - \frac{A}{2eB}$$

Imposing the usual polynomial requirement $\alpha = -n$,

$$a + \frac{1}{2} - \frac{A}{2eB} = -n \Rightarrow \frac{|m|}{2} + \frac{1}{2} - \frac{A}{2eB} = -n, n = 0, 1, 2, \dots;$$

and allowing for explicit form of A , we obtain formula for energies

$$\epsilon^2 = M^2 + k^2 + \frac{MeB(N-1/2)(1+eB\sigma)}{(M-eB\gamma)} + \frac{MeB(N+1/2)(1-eB\sigma)}{(M+eB\gamma)}.$$

where $N = (2n + |m| + m + 1)/2$, $n = 0, 1, 2, \dots$; parameter N takes half-integer values:

$N = 1/2, 3/2, \dots$. This relation may be re-written differently

$$\epsilon^2 - M^2 - k^2 = (1 - \frac{\gamma^2 B^2}{M^2})^{-1} [\frac{2BN}{M^2} (1 + \sigma B \frac{\gamma B}{M}) - B(\sigma B + \frac{\gamma B}{M})].$$

In this presentation, we can readily describe conditions when the influence of the additional characteristics γ and σ will be small:

$$B\sigma \ll 1 \Rightarrow \sigma \ll \frac{1}{B}; \quad \frac{B\gamma}{M} \ll 1.$$

Let us transform the last formulas to dimensionless quantities:

$$E = \frac{\epsilon}{M}, \quad K = \frac{k}{M}, \quad x = \frac{X}{M^2}, \quad b = \frac{B}{M^2},$$

$$M\gamma = \Gamma, \quad M^2\sigma = \Sigma, \quad \frac{B\gamma}{M} = b\Gamma, \quad B\sigma = b\Sigma.$$

The influence of additional characteristic is small if two inequality are satisfy

$$\Gamma \ll \frac{1}{b}, \quad \Sigma \ll \frac{1}{b};$$

and the formula for energy levels takes on the form (recall that $x = 2bN$)

$$E = \sqrt{1 + K^2 + \frac{1}{1 - b^2 \nu^2} [x(1 + b\Sigma \cdot b\Gamma) - b(b\Sigma + b\Gamma)]}.$$

Let us study this spectrum numerically for several sets of parameters:

$$\Sigma = 0, \Gamma = 0, \quad K = 0.1, b = 0.2, \quad N = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots, \frac{15}{2},$$

$$1.1, 1.268, 1.417, 1.552, 1.676, 1.791, 1.9, 2.0025;$$

$$\Sigma = 0.02, \Gamma = 0.02, \quad K = 0.1, b = 0.2, \quad N = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots, \frac{15}{2},$$

$$1.099, 1.268, 1.417, 1.551, 1.675, 1.791, 1.899, 2.002;$$

$$\Sigma = 0.02, \Gamma = 0.02, \quad K = 0.01, b = 0.2, \quad N = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots, \frac{15}{2},$$

$$1.094, 1.264, 1.413, 1.548, 1.672, 1.788, 1.897, 1.999;$$

$$\Sigma = 0, \Gamma = 0.02, \quad K = 0.01, b = 0.2, \quad N = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots, \frac{15}{2},$$

$$1.0951, 1.264, 1.414, 1.549, 1.673, 1.788, 1.897, 1.999;$$

$$\Sigma = 0.02, \Gamma = 0, \quad K = 0.01, b = 0.2, \quad N = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots, \frac{15}{2},$$

$$1.095, 1.264, 1.414, 1.549, 1.673, 1.788, 1.897, 1.999.$$

References

- Elementary Particles with Internal Structure in External Fields. Vol I. General Theory / V.V. Kisel, E.M. Ovsiyuk, O.V. Veko [et al.]. – New York : Nova Science Publishers Inc., 2018. – 404 p.
- Elementary Particles with Internal Structure in External Fields. Vol II. Physical Problems / V.V. Kisel, E.M. Ovsiyuk, O.V. Veko [et al.]. – New York : Nova Science Publishers Inc., 2018. – 402 p.
- Scalar particle with the Cox structure and polarizability, in presence of the uniform magnetic field / E.M. Ovsiyuk, P.O. Sachenok, A.S. Martynenko, A.V. Ivashkevich // XXII International Conference «Foundations & Advances in Nonlinear Science» and VII International Symposium «Advances in Nonlinear Photonics» : Programme & Book of Abstracts Minsk, September 23–27, 2024 / Belarusian State University ; ed.: A.L. Tolstik, G.G. Krylov. – Minsk, 2024. – P. 26.

УДК 539.186.2, 539.196:539.12/17

В.В. Андреев¹, В.В. Макаренко²

¹Гомельский государственный университет имени Ф. Скорины

²Институт ядерных проблем Белорусского государственного университета

ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ ПОЛЯРИЗАЦИОННЫХ ФРАКЦИЙ W-БОЗОНОВ К СР-ЧЁТНЫМ АНОМАЛЬНЫМ КОНСТАНТАМ ТРЕХБОЗОННЫХ ВЕРШИН В ПРОЦЕССЕ ПАРНОГО РОЖДЕНИЯ НА CMS LHC

В работе рассмотрены эффекты влияния СР-чётных аномальных констант трёхбозонного и $WW\gamma$ и WWZ -взаимодействия на значения сечений и поляризационных фракций для процесса $pp \rightarrow W^+W^- + X \rightarrow \ell^+\ell^-\nu_\ell\bar{\nu}_\ell + X$ с поляризованным W^+ -бозоном в рамках экспериментальных ограничений на кинематические переменные для третьего сеанса работы эксперимента CMS.

Ключевые слова: бозон, кварк, партон, протон, аномальные параметры.

Введение. Изучение поляризационных и спиновых корреляций в бозонных системах, которые возникают при столкновениях частиц с высокими энергиями, является ключом к пониманию сложной структуры электрослабого сектора Стандартной модели. Именно поэтому такие исследования представляют собой важнейшую задачу современных коллайдерных экспериментов, таких как Большой адронный коллайдер и NICA (SPD) [1–3].

Подобные эксперименты служат чувствительным инструментом для обнаружения явлений новой физики, способных исказить тонкие взаимосвязи между калиброчным и скалярным секторами Стандартной модели. Одним из возможных параметров, которые могут быть исследованы в электрослабом секторе, являются аномальные параметры трёхбозонных взаимодействий. Эти параметры отражают отклонения от Стандартной модели, наблюдаемые в процессах с участием трёх бозонов: γ -квант, W^\pm - и Z^0 -бозоны.

В рамках Стандартной модели в рамках древесного приближения существует два типа трёхбозонных $W^+W^-\gamma$ и W^+W^-Z -вершины. Одной из задач современных экспериментов является получение ограничений на аномальные параметры этих взаимодействий.

Цель работы заключается в вычислении поляризационных наблюдаемых реакции парного рождения поляризованного W^+ -бозона и неполяризованного W^+ -бозона при столкновении протонов в рамках третьего сеанса эксперимента CMS. При этом учитывается наличие аномальных констант трёхбозонного $WW\gamma$ - и WWZ -взаимодействия.

Для исследования поляризационных наблюдаемых реакции парного рождения W^\pm -бозонов рассмотрим каскадный процесс вида

$$pp \rightarrow W_{\tau_1}^-(\ell^-\bar{\nu}_\ell)W_{\tau_2}^+(\ell^+\nu_\ell) + X \quad (1)$$

где поляризационные индексы τ_1, τ_2 могут принимать значения $L : \tau_1, \tau_2 = 0, T : \tau_1, \tau_2 = \pm 1, U$ (продольные, поперечные, неполяризованные).

Процесс (1) моделируется с использованием улучшенного приближения узкой ширины для промежуточных состояний W^\pm -бозонов, описанного в работах [4–6].

Дифференциальное сечение каскадного процесса. Для получения дифференциального сечения процесса $pp \rightarrow W^-W^+ \rightarrow F_1F_2 + F_3F_4 + XX$ используем подход Дрелла-Яна. В этом подходе сечение может быть представлено в виде

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{dM_{WW}} \frac{pp \rightarrow F_1F_2 + F_3F_4 + XX}{d\Omega_W d\Omega_1 d\Omega_3} &\equiv \frac{d\sigma_{pp \rightarrow 4\ell}}{dM_{WW} d\Omega_W d\Omega_1 d\Omega_3} = \\ &= \frac{2M_{WW}}{3S} K \sum_{ab} \int_{\log \tau_s}^{-\log \tau_s} dy_{\text{boost}} \{ f_{a,p}(\tau_s e^{y_{\text{boost}}}, \mu_F) f_{b,p}(\tau_s e^{-y_{\text{boost}}}, \mu_F) + \\ &+ f_{b,p}(\tau_s e^{y_{\text{boost}}}, \mu_F) f_{a,p}(\tau_s e^{-y_{\text{boost}}}, \mu_F) \} \text{BR } W^- \rightarrow F_1F_2 \text{ BR } W^+ \rightarrow F_3F_4 \times \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \times \frac{1}{16\pi^2 M_{WW}^2} \frac{\beta_{M_W^2, M_W^2}}{\beta_{m_a^2, m_b^2}} \frac{M_{WW}^2}{M_{WW}^2} \sum_{\tau_1, \tau_1'} \sum_{\tau_2, \tau_2'} \sum_{\lambda_a, \lambda_b} \mathcal{M}_{\tau_1, \tau_2}^{\lambda_a, \lambda_b} (q_a q_b \rightarrow W^- W^+) \times \\ & \times \mathcal{M}_{\tau_1, \tau_2}^{*, \lambda_a, \lambda_b} (q_a q_b \rightarrow W^- W^+) \left(d\Gamma_{\tau_1, \tau_1'}^{W^- \rightarrow F_i F_2} / d\Omega_1 \right) \left(d\Gamma_{\tau_2, \tau_2'}^{W^+ \rightarrow F_3 F_4} / d\Omega_3 \right), \end{aligned} \quad (2)$$

где τ_1, τ_2 – спиральности W^- и W^+ -бозонов, соответственно; λ_i – пуанкаре-инвариантные спиральности фермионов F_i ($i = 1, 2, 3, 4$); $d\Omega = d\cos\theta d\phi$ – дифференциал телесного угла с полярным углом θ и азимутальным углом ϕ . В формуле (2): величины $f_{a,A}(x_1, \mu_F)$ и $f_{b,B}(x_2, \mu_F)$ – функции распределения неполяризованных夸克ов a и b в протонах, соответственно; параметр μ_F – масштабный множитель (фактор); параметр K – фактор, зависящий от бегущей константы сильного взаимодействия α_s и вводится для учёта КХД-поправок.

Матрицы $d\Gamma_{\tau_1, \tau_1'}^{W^\mp \rightarrow F_{1,3} F_{2,4}}$ определяются соотношениями

$$\frac{d\Gamma_{\tau_1, \tau_1'}^{W^- \rightarrow F_1 F_2}}{d\Omega_1} = \frac{\sum_{\lambda_1, \lambda_2} \mathcal{M}_{\lambda_1, \lambda_2}^{\tau_1} (W^- \rightarrow F_1 F_2) \mathcal{M}_{\lambda_1, \lambda_2}^{*, \tau_1} (W^- \rightarrow F_1 F_2)}{\frac{1}{3} \int_{(4\pi)^{\tau_1, \lambda_1, \lambda_2}} \sum_{\lambda_1, \lambda_2} \left| \mathcal{M}_{\lambda_1, \lambda_2}^{\tau_1} (W^- \rightarrow F_1 F_2) \right|^2 d\Omega_1}, \quad (3)$$

$$\frac{d\Gamma_{\tau_2, \tau_2'}^{W^+ \rightarrow F_3 F_4}}{d\Omega_3} = \frac{\sum_{\lambda_3, \lambda_4} \mathcal{M}_{\lambda_3, \lambda_4}^{\tau_2} (W^+ \rightarrow F_3 F_4) \mathcal{M}_{\lambda_3, \lambda_4}^{*, \tau_2} (W^+ \rightarrow F_3 F_4)}{\frac{1}{3} \int_{(4\pi)^{\tau_2, \lambda_3, \lambda_4}} \sum_{\lambda_3, \lambda_4} \left| \mathcal{M}_{\lambda_3, \lambda_4}^{\tau_2} (W^+ \rightarrow F_3 F_4) \right|^2 d\Omega_3}. \quad (4)$$

Быстрота центра инерции партонов y_{boost} связана с $x_{1,2}$ посредством соотношений

$$x_1 = \sqrt{\tau_s} e^{y_{boost}}, \quad x_2 = \sqrt{\tau_s} e^{-y_{boost}},$$

где значение $\tau_s = x_1 x_2 = M_{WW}^2 / S$ фиксируется вследствие уравнения

$s = x_1 x_2 S = M_{WW}^2$ для энергии \sqrt{s} партонной пары ab в системе центра инерции.

Для исследования поляризационных состояний W -бозонов представим сечение (2) в виде

$$\frac{d\sigma_{pp \rightarrow 4\ell}}{dM_{WW} d\Omega_W d\Omega_1 d\Omega_3} = \sum_{\tau_1, \tau_1'} \sum_{\tau_2, \tau_2'} \frac{d\sigma_{\tau_2, \tau_2'}^{*, \tau_1}}{d\chi} \left(\frac{d\Gamma_{\tau_1, \tau_1'}^{W^- \rightarrow F_1 F_2}}{d\Omega_1} \right) \left(\frac{d\Gamma_{\tau_2, \tau_2'}^{W^+ \rightarrow F_3 F_4}}{d\Omega_3} \right), \quad d\chi = dM_{WW} d\Omega_W, \quad (5)$$

$$\begin{aligned}
\frac{d\sigma^{\tau_2, \tau'_2}}{d\chi^{\tau_1, \tau'_1}} &= \frac{2M_{WW}}{3S} K \sum_{ab} \int_{\log \tau_s}^{-\log \tau_s} dy_{\text{boost}} \{ f_{a,p}(\tau_s e^{y_{\text{boost}}}, \mu_F) f_{b,p}(\tau_s e^{-y_{\text{boost}}}, \mu_F) + \\
&+ f_{b,p}(\tau_s e^{y_{\text{boost}}}, \mu_F) f_{a,p}(\tau_s e^{-y_{\text{boost}}}, \mu_F) \} \frac{1}{16\pi^2 M_{WW}^2} \frac{\beta_{M_W^2, M_W^2}}{\beta_{m_a^2, m_b^2}} \frac{M_{WW}^2}{M_{WW}^2} \times \\
&\times \sum_{\lambda_a, \lambda_b} \mathcal{M}_{\tau_1, \tau_2}^{\lambda_a, \lambda_b}(q_a q_b \rightarrow W^- W^+) \mathcal{M}_{\tau_1, \tau_2}^{*\lambda_a, \lambda_b}(q_a q_b \rightarrow W^- W^+), \tag{6}
\end{aligned}$$

Используя метод базисных спиноров, который был разработан для изучения каскадных реакций (см. [7–9]), мы вычислили матричные элементы и их квадратичные комбинации, необходимые для сечений (5) и (6). Результаты наших расчётов можно найти в работе [10].

Численные оценки. Для получения поляризационных фракций выпишем в необходимые для вычисления формулы.

Поляризационные фракции W^+ -бозона f_0, f_{\pm} определяются диагональными элементами матрицы плотности

$$f_0 = \rho_{0,0}^{W^+}, \quad f_{-1} = \rho_{-1,-1}^{W^+}, \quad f_1 = \rho_{1,1}^{W^+},$$

которые находятся из соотношения

$$\rho_{\tau_2, \tau_2}^{W^+} = \tilde{\sigma}^{\tau_2} \left(\sum_{\tau_2} \tilde{\sigma}^{\tau_2} \right)^{-1},$$

с сечением

$$\tilde{\sigma}^{\tau_2} = \int_{M_{WW}^{\min}}^{M_{WW}^{\max}} dM_{WW} \int_{-z_{\text{cut},1}^W}^{z_{\text{cut},2}^W} dz_{\text{cut},2}^W \int_0^{2\pi} d\cos \theta_W \int_0^{2\pi} d\phi_W \int_{(z_{\text{cut}}^1)} d\Omega_1 \int_{(z_{\text{cut}}^3)} d\Omega_3 \sum_{\tau_1, \tau_{1,2}} \frac{d\sigma^{\tau_2, \tau'_2}}{d\chi^{\tau_1, \tau'_1}} \frac{d\Gamma^{W^- \rightarrow F_1 F_2}}{d\Omega_1} \frac{d\Gamma^{W^+ \rightarrow F_3 F_4}}{d\Omega_3}. \tag{7}$$

Оценку аномальных констант проведем для набора $\Delta k_z, \lambda_z, \Delta g_1^z, \Delta k_{\gamma}, \lambda_{\gamma}$, определяемого соотношениями (так называемая LEP параметризация) [11]. Для численных расчётов для элементов матрицы плотности рождения резонансных бозонов выберем сечение (7), где кинематические характеристики определяются условиями проведения третьего сеанса на установке CMS LHC.

Вычисления проводились при $\sqrt{S} = 14$ ТэВ с светимостью $L_{int} = 170$ фбн⁻¹ и с интервалом изменения инвариантной массы пары векторных бозонов

$$[M_{WW}^{\min}, M_{WW}^{\max}] = [900 \text{ ГэВ}, 4500 \text{ ГэВ}].$$

Ограничения на угловые переменные $z_{\text{cut}}^W, z_{\text{cut}}^{\ell}$ определяются соотношениями, которые представлены в работе [12].

Доверительные интервалы для отдельных аномальных параметров строятся с явной фиксацией остальных равных нулю и с учётом требования $SU(2)_L \times U(1)_Y$ -симметрии лагранжиана трёхбозонных взаимодействий. Процедура получения ограничений отображена на рисунке 1.

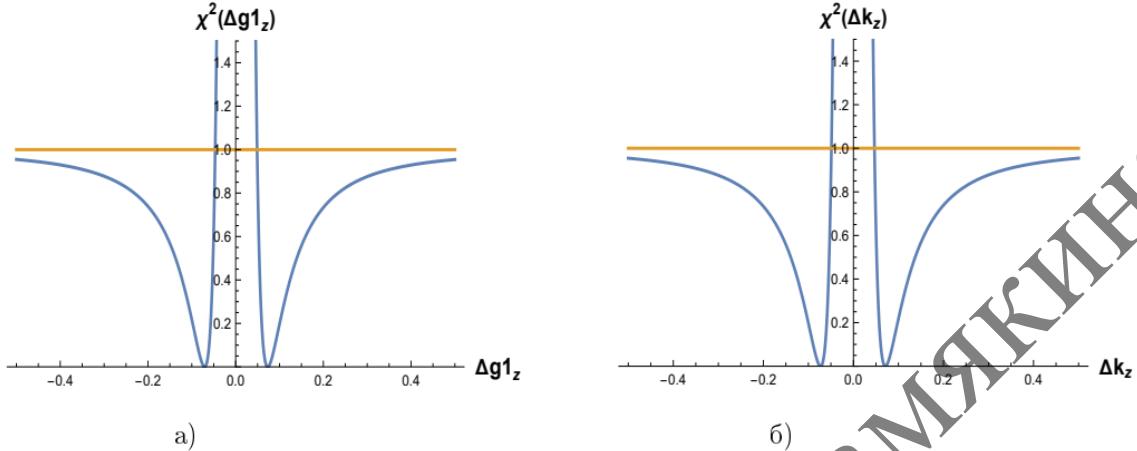


Рисунок 1 – Поведение χ^2 -функции одномерных ограничений

для поляризационной фракции f_0 : а) функция $\chi^2(\Delta g_1^Z)$; б) функция $\chi^2(\Delta k_z)$

Одномерные пределы параметров при С.Л. = 68,3 % для LEP параметризации приведены в таблице 1. Сравнительный анализ показывает, что все фракции дают близкие друг к другу ограничения на аномальные параметры.

Таблица 1 – Одномерные ограничения для трёх СР-чётных аномальных констант связи трёхбозонных взаимодействий в LEP параметризации

C.L.	Фракция	λ_z	Δg_1^Z	Δk_z
68,3 %	f_1	$[-0,043505; 0,043683]$	$[-0,036746; 0,038884]$	$[-0,038821; 0,036749]$
	f_0	$[-0,015792; 0,014828]$	$[-0,046665; 0,048973]$	$[-0,048874; 0,046733]$
	f_{-1}	$[-0,043904; 0,044092]$	$[-0,031055; 0,033255]$	$[-0,033199; 0,031028]$

Приведённые примеры демонстрируют, что поляризационные фракции обладают высокой чувствительностью к явлениям, которые могут быть связаны с новой физикой, например, к СР-четным аномальным константам трёхбозонного взаимодействия.

Заключение. На основе разработанной методики для извлечения поляризационных фракций в каскадных процессах парного рождения векторных бозонов с последующим их распадом в лептонную пару были получены формулы для расчета поляризационных фракций W-бозонов. Эти формулы учитывают аномальные константы трехбозонного WWγ и WWZ-взаимодействия.

В работе были рассмотрены эффекты влияния аномальных констант трехбозонного $WW\gamma$ и WWZ -взаимодействия на значения сечений и поляризационных фракций для процесса с поляризованным W^+ -бозоном и получены одномерные ограничения на эти константы. Эти ограничения были оценены в рамках экспериментальных ограничений на кинематические переменные для третьего сеанса работы эксперимента CMS.

Список использованных источников

1. W^+W^- boson pair production in proton-proton collisions at $\sqrt{s} = 13$ TeV / A.M. Sirunyan [et al.] // Phys. Rev. D. – 2020. – Vol. 102, № 9. – P. 092001.
2. Measurement of the W boson polarisation in $t\bar{t}$ events from pp collisions at $\sqrt{s} = 8$ TeV in the lepton + jets channel with ATLAS / M. Aaboud [et al.] // Eur. Phys. J. C. – 2017. – Vol. 77, № 4. – P. 264. [Erratum: Eur.Phys.J.C Vol.79, №19 (2019)].
3. Technical Design Report of the Spin Physics Detector at NICA / V. Abazov et al. [SPD Collaboration] // Natural Science Review Vol.1, №1. – 2024. – P. 325.
4. Denner, A. NLO QCD predictions for doubly-polarized WZ production at the LHC / A. Denner, G. Pelliccioli // Phys. Lett. B. – 2021. – Vol. 814. – P. 136107.
5. Denner, A. NLO EW corrections to polarised W^+W^- production and decay at the LHC / A. Denner, C. Haitz, G. Pelliccioli // Phys. Lett. B. – 2024. – Vol. 850. – P. 138539.
6. Pelliccioli, G. Polarised-boson pairs at the LHC with NLOPS accuracy / G. Pelliccioli, G. Zanderighi // Eur. Phys. J. C. – 2024. – Vol. 84, № 1. – P. 16.
7. Andreev, V.V. Analytic Calculation of Feynman Amplitudes / V.V. Andreev // Physics of Atomic Nuclei. – 2003. – Vol. 66. – P. 383–393.
8. Андреев, В.В. Методика вычисления сечения бинарных реакций с поляризованными частицами / В.В. Андреев // Проблемы физики, математики и техники. – 2021. – № 1(46). – С. 7–12.
9. Андреев, В.В. Вычисление сечения каскадной реакции $2 \rightarrow 4$ методом базисных спиноров / В.В. Андреев // Проблемы физики, математики и техники. – 2021. – № 2(47). – С. 7–13.
10. Андреев, В.В. Аномальные константы трёхбозонных вершин в процессе парного рождения W^\pm -бозонов на CMS LHC / В.В. Андреев // Весці Нацыянальнай акадэміі навук Беларусі. Серыя фіз.-мат. навук. – 2021. – Т. 57, № 1. – С. 33–45.
11. Effective Field Theory: A Modern Approach to Anomalous Couplings / C. Degrande, N. Greiner, W. Kilian [et al.] // Annals Phys. – 2013. – Vol. 335. – P. 21–32.
12. Andreev, V.V. Constraints on the anomalous CP-Even constants of three-boson vertices in W^+W^- -boson decays at CMS LHC / V.V. Andreev, V.V. Makarenko, N.V. Maksimenko // Physics of Particles and Nuclei. – 2024. – Vol. 55, № 1. – P. 137–142.

С.Е. Бойченко, В.Б. Тлячев
Адыгейский государственный университет

ОСОБЕННОСТИ УГЛОВОЙ ДЕКОНЦЕНТРАЦИИ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ПРИ РАДИАЦИОННОМ ТОРМОЖЕНИИ В УЛЬТРАРЕЛИАТИВИСТСКОМ СЛУЧАЕ

Рассмотрен вопрос наличия эффекта деконцентрации в угловом распределении мощности компонент синхротронного излучения при наличии радиационного торможения. Вычислительный эксперимент, основанный на известных из астрофизики выражениях не подтвердил данный эффект в релятивистском и ультраквантитативистских случаях. Обнаружено увеличение значений мощности излучения с ростом номера импульса излучения.

Ключевые слова: синхротронное излучение, радиационное торможение, спектрально-угловое распределение, гармоники, максимум, мощность.

Введение. Как известно, общая теория синхротронного излучения (СИ) построена в прошлом XX веке, и все предсказанные свойства обнаружены в экспериментах. Они широко и подробно описаны, применяются на практике (см., например, монографии [1; 2] и работы [3; 4]. В развитие теории СИ большой вклад внесли участники томской школы физиков-теоретиков под руководством профессора В.Г. Багрова.

К началу XXI уже считалось, что новых теоретических результатов в теории СИ уже не удастся получить. Однако в пионерских работах [5; 6] было продемонстрировано, что это не так, в рамках классической электродинамики было обнаружено новое особое свойство СИ, так называемый эффект угловой деконцентрации. Он заключается в отклонении максимума мощности в угловом распределении каждой гармоники СИ от плоскости орбиты. При этом для неизменной энергии электрона значение максимума уменьшается с увеличением номера гармоники, то есть деконцентрация спадает. Этот эффект в корне противоречил поведению угловых профилей для полной мощности СИ.

Заметим, что для обнаружения новых свойств СИ были использованы весьма хорошо известные опубликованные формулы. Обзор, посвященный теоретическому изучению новых особенностей СИ, дан в работе [7].

Результаты этих работ стимулировали более детальное изучение поведения спектрального максимума излучения, а также справедливости данного утверждения для отдельных поляризационных компонент. Например, в [8] рассмотрено спектральное распределение мощности синхротронного излучения круговой поляризации в верхней полуплоскости. А в [9] обосновано введение для точного количественного описания спектральных свойств (СИ) нового понятия – эффективной ширины спектра. Эта характеристика позволяет получать новую физически важную количественную информацию о структуре спектральных распределений.

В недавних работах [10; 11] для заряда, движущегося по спирали, определена пространственная структура мгновенного углового распределения СИ и дан анализ поведения угловых профилей для компонент поляризации.

Настоящая работа посвящена изучению присутствия эффекта деконцентрации в угловом распределении мощности компонент СИ при наличии явления радиационного торможения.

Постановка задачи и основные результаты исследования. Рассмотрим движение и излучение заряженной частицы (электрона) в постоянном и однородном магнитном поле $\vec{H} = H\vec{k}$, направленном вдоль оси z с учетом радиационного торможения. Заметим, в основном изучение влияния радиационной силы представлено в работах по астрофизике, что объясняется наличием соответствующих условий в астрофизических объектах [12; 13].

Получение выражений для спектрально-углового распределения мощности СИ, учитывающих радиационное торможение связано с определенными трудностями, обусловленными постановкой и решением в рамках классической электродинамики основных уравнений, описывающих движение заряженной частицы, на которую воздействует собственное поле излучения. В этом вопросе до настоящего времени существует ряд дискуссионных моментов, которые постоянно присутствуют в научной литературе. В частности, почти все решения уравнений, которые содержат радиационное трение, являются динамически нестабильными. Как показано в книге [14], устойчивые решения можно аппроксимировать с помощью сингулярной теории возмущений, и наиболее привлекательным, с физического точки зрения и смысла, здесь выглядит уравнение Ландау-Лифшица. Поэтому в данной работе используется устоявшаяся теория Ландау-Лифшица. Все вычисления проводятся на основе результатов работ [12; 15; 16].

Спектрально-угловое распределение для σ и π -компонент поляризации мощности синхротронного излучения электрона, полученное с учетом радиационного торможения, может быть представлено в виде, удобном для численного анализа:

$$\frac{dW_i(\beta, \theta)}{d\Omega} = Q_0 \sum_{\nu=1}^N f_i(\nu, \beta; \theta) = F_i(\beta, \theta), \quad (1)$$

где $i = 2, 3$ означает, соответственно компоненты σ - и π -поляризаций СИ,

$$f_\sigma(\nu, \beta; \theta) = \frac{\nu^2}{(1 + 4\pi\nu R_0)} \left[a_\nu^2(\theta) K_{2/3}^2(x) + a_\nu(\theta) \cdot \left(\frac{R_0}{\gamma_0} \right)^2 K_{1/3}^2(x) \right], \quad (2)$$

$$f_\pi(\nu, \beta; \theta) = \frac{\nu^2}{(1 + 4\pi\nu R_0)} a_\nu(\theta) (\gamma_0 \theta)^2 K_{1/3}^2(x), \quad (3)$$

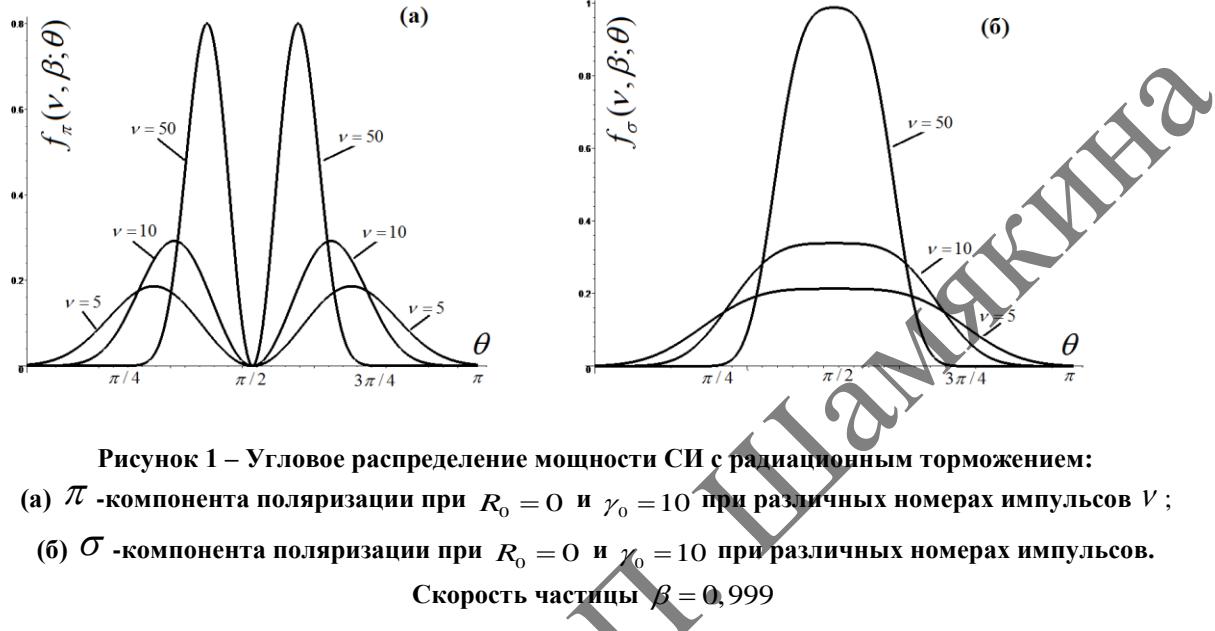
$Q_0 = \frac{e^2}{3\pi^2 c \gamma_0^2 \gamma^2}$, ν – номер отдельного импульса излучения, который приходит к наблюдателю (см. [17]), $a_\nu(\theta) = (\gamma_0 \theta)^2 + (1 + 4\pi\nu R_0)$, γ_0 и R_0 – постоянные, определяемые начальными условиями, $K_{2/3}$ и $K_{1/3}$ – модифицированные функции

Бесселя второго рода (функции Макдональда), $x = \frac{\nu \left[a_\nu(\theta) - (R_0 / \gamma_0)^2 \right]^{3/2}}{3\gamma_0^2 (1 + 4\pi\nu R_0)^{1/2}}$, $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}}$ –

лоренц-фактор, $\theta = \pi/2 - \theta_{SR}$, θ_{SR} – угол между осью z и направлением излучения, так как это дается в формуле Шотта для СИ.

Выражения (2) и (3) получены для релятивистского и ультрарелятивистского случаев, когда $R_0 / \gamma_0 \ll 1$. Поэтому это неравенство позволяет нам выбирать значения γ_0 и R_0 для численного анализа выражений (2) и (3) в соответствии с данными наблюдений из работ [12; 15].

$$\theta = \pi/2 - \theta_{SR}, \quad \pi/4 \quad 3\pi/4 \quad \pi \quad f_\sigma(\nu, \beta; \theta) \quad \nu = 5 \quad \nu = 10 \quad \nu = 50$$



Анализ углового распределения π -компоненты поляризации показал, что с ростом номера ν максимум в мощности СИ приближается к плоскости орбиты (см. рисунок 1 (а)), но не достигает её. В тоже время σ -компонента всегда имеет максимум в плоскости орбиты (см. рисунок 1 (б)), и картина роста мощности с номером ν сохраняется.

Таким образом, основная доля в СИ с радиационным торможением приходится на более высокие номера ν , так же как это наблюдается для СИ без радиационного торможения. Только смысл ν меняется уже на номер гармоники. Выяснить физический смысл можно из сравнения с выражением (1) после суммирования по ν как это сделано в [5–7].

Для подтверждения данных вычислительного эксперимента в работе проведено аналитическое исследование спектрально-углового распределения в двух крайних случаях $x \ll 1$ и $x \gg 1$, когда известны асимптотические приближения функций

Макдональда, при малых значениях x $K_s(x) \approx \frac{\Gamma(s)}{2} \left(\frac{x}{2}\right)^{-s}$, а при больших значениях x

$K_s(x) \approx \left(\frac{\pi}{2x}\right)^{1/2} e^{-x}$, здесь $\Gamma(s)$ – гамма-функция. Результаты расчетов подтвердили численный анализ.

Заключение. Гипотеза авторов о наличии эффекта деконцентрации СИ [5–7] при радиационном торможении в ультрарелятивистском случае для номеров отдельных

импульсов излучения не подтвердилась. Оказалось, что картина поведения угловых профилей совпадает с общим классическим выводом. Отмечено, что в этом случае на величину углового распределения, приходящегося на определенный номер импульса излучения, существенно влияют радиус и скорость частицы в начальный момент времени.

Список использованных источников

1. Bordovitsyn, V.A. Synchrotron Radiation Theory And Its Development, In Memory Of I M Ternov (1921–1996). – Singapore: World Scientific Publishing Company, 1999. – 448 p.
2. Теория излучения релятивистских частиц / В.Г. Багров, Г.С. Бисноватый-Коган, В.А. Бордовицын [и др.] ; под ред. В.А. Бордовицына. – М. : Физматлит, 2002. – 575 с.
3. Caciuffo, R. Synchrotron radiation techniques and their application to actinide materials / R. Caciuffo, G. Lander, G. van der Laan // Review Modern Physics. – 2023. – Vol. 95.
4. Li, F. Synchrotron Radiation: A Key Tool for Drug Discovery / F. Li, R. Liu, W. Li, M. Xie, S. Qin // Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters. – 2024. – Vol. 114. – 129990.
5. Bagrov, V.G. Angular behavior of synchrotron radiation harmonics / V.G. Bagrov, V.G. Bulenok, D.M. Gitman, Jose Acosta Jara, V.B. Tlyachev, and A.T. Jarovoi // Physical Review. E. – 2004. – Vol. 69. – 046502.
6. Багров, В.Г. Эволюция угловых распределений компонент поляризации синхротронного излучения при изменении энергии заряда / В.Г. Багров, Д.М. Гитман, В.Б. Тлячев, А.Т. Яровой // Новейшие проблемы теории поля. Труды XV Международной летней школы-семинара «Волга» по современным проблемам теоретической и математической физики «Петровские чтения» под редакцией проф. А.В. Аминовой. Т. 4. – Казань, 2004. – С. 9–24.
7. Багров, В.Г. Особенности углового распределения мощности синхротронного излучения отдельных гармоник спектра // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2008. – Т. 51, № 4. – С. 5–19.
8. Бойченко, С.Е. Физические особенности спектрального распределения мощности синхротронного излучения круговой поляризации // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2011. – Т. 54, № 7. – С. 87–91.
9. Bagrov, V.G. Effective spectrum width of the synchrotron radiation / V.G. Bagrov, D.M. Gitman, A.D. Levin, A.S. Loginov, A.D. Saprykin // The European Physical Journal. C. – 2015. – Vol. 75, Article number 555.
10. Багров, В.Г. О пространственных особенностях мгновенного углового распределения синхротронного излучения / В.Г. Багров, А.Н. Касаткина, А.А. Печерицын // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2020. – Т. 63, № 4. – С. 120–125.
11. Багров, В.Г. Угловые распределения компонент поляризации излучения заряда, движущегося по спирали / В.Г. Багров, А.Н. Касаткина, А.Д. Сапрыкин // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2020. – Т. 63, № 6. – С. 123–129.
12. Nelson, R.W. Synchrotron radiation with radiation reaction / R.W. Nelson and I. Wasserman // Astrophysical Journal. – 1991. – Vol. 371. – P. 265–276.
13. Sheffer, Y. Asymptotic Precision Corrections to Radiation Reaction / Y. Sheffer, Y. Hadad, M.H. Lynch, L.J. Wong, I. Kaminer // arXiv:1812.10188v3 [physics.class-ph]. 2023. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1812.10188>.

14. Spohn, H. Dynamics of Charged Particles and their Radiation Field. – Cambridge : Cambridge University Press, 2004. – 380 p.
15. Shen, C.S. Magnetic Bremsstrahlung in an Intense Magnetic Field // Physical Review. D. – 1972. – Vol. 6, № 10. – P. 2736–2754.
16. Lieu, R. Synchrotron radiation reaction / R. Lieu // Journal of Physics A: Mathematical and General. – 1987. – Vol. 20, № 9. – P. 2405–2413.
17. Гинзбург, В.Л. Теоретическая физика и астрофизика: Дополнительные главы. – Изд. 4. – М. : Издательская группа URSS, 2020. – 488 с.

УДК 539.12

В.Ю. Гавриш¹, В.В. Андреев²

¹Гомельский государственный технический университет имени П.О. Сухого

²Гомельский государственный университет имени Ф. Скорины

ПАРАМЕТРЫ ПУАНКАРЕ-КОВАРИАНТНОЙ КВАРКОВОЙ МОДЕЛИ МЕЗОНОВ ТЯЖЕЛОГО СЕКТОРА

В работе представлена методика описания мезонов с одним тяжелым кварком в модели, основанной на точечной форме Пуанкаре-инвариантной квантовой механики. Развитый формализм использован для оценки массы c -кварка и β – параметра волновой функции псевдоскалярного D^\pm – мезона. Показано, что использование кварк-антикваркового потенциала, константы распада $P(q\bar{Q}) \rightarrow \ell\nu_\ell$ приводит к сопоставимым с другими подходами значениям массы m_c .

Ключевые слова: кварк, точечная форма, кварк-антикварковый потенциал, D^\pm – мезон.

Введение. Расчет наблюдаемых электрослабых характеристик связанных кварковых систем является нетривиальной задачей физики элементарных частиц. Для мезонов легкого сектора объем высокоточных экспериментальных данных дает возможность проводить вычисление параметров моделей с использованием наблюдаемых псевдоскалярных и векторных π^\pm –, π^0 –, K^\pm –, η –, η' – мезонов [1]. Для мезонов тяжелого сектора объем экспериментальных данных значительно меньше, что привело к использованию альтернативных подходов, в том числе основанных на КХД-мотивированных потенциалах, для описания спектра масс тяжелых D^- , D_s^- , B^- , η_c – и J/ψ – мезонов.

В работе представлена методика расчета масс конституентных夸克ов в модели, основанной на составной кварковой модели и на точечной форме Пуанкаре-инвариантной квантовой механики (далее ПиКМ) [2]. Указанная форма ПиКМ наиболее естественным образом обобщается для описания связанных кварк-антикварковых систем, поскольку оператор 4-ре скорости $V^\mu = \{V_0, V_Q\}$ без взаимодействия и с ним совпадают. В ходе работы авторами из условия соответствия массы $D^\pm(cd)$ – мезона и константы распада $D^\pm(cd) \rightarrow \ell^\pm \nu_\ell$ получены значения параметров развивающейся модели.

Расчет выполнен для различных видов волновых функций. По результатам проведен сравнительный анализ полученных значений: показано, что использование КХД-мотивированного потенциала [3] и феноменологической константы $\alpha_s(q^2)$ приводит к значениям для массы конституентного c -кварка, сопоставимым с другими подходами и моделями.

Описание модели. Ниже определим вектор состояния мезона массы M , импульсом $Q^\mu = \{\omega_M(\mathbf{Q}), \mathbf{Q}\}$ и спином $J\mu$ в точечной форме ПиКМ. В разрабатываемом подходе вектор состояния мезона определим с использованием базиса прямого произведения двухчастичного представления $|\mathbf{p}_1, \lambda_1, a, \mathbf{p}_2, \lambda_2, b\rangle$ кварков с массами $m_q, m_{\bar{q}}$, импульсами $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$, проекциями спинов λ_1, λ_2 и цветовыми квантовыми числами a и b соответственно как [3]

$$|\mathbf{Q}, J\mu, M\rangle = \sum_{\lambda_1, \lambda_2} \sum_{\nu_1, \nu_2} \int d\mathbf{k} \Phi_{\ell S}^J(\mathbf{k}, \beta_{q\bar{Q}}) \Omega \begin{pmatrix} \ell & S & J \\ \nu_1 & \nu_2 & \mu \end{pmatrix} (\theta_k, \phi_k) \times \sqrt{\frac{\omega_{m_q}(\mathbf{p}_1)\omega_{m_{\bar{q}}}(\mathbf{p}_2)}{\omega_{m_q}(\mathbf{k})\omega_{m_{\bar{q}}}(\mathbf{k})V_0}} D_{\lambda_1, \nu_1}^{1/2}(\mathbf{n}_{W_1}) D_{\lambda_2, \nu_2}^{1/2}(\mathbf{n}_{W_2}) |\mathbf{p}_1, \lambda_1, a, \mathbf{p}_2, \lambda_2, b\rangle. \quad (1)$$

В выражении (1) использовано обозначение $\omega_m(\mathbf{p}) = \sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2}$ совместно с относительным импульсом относительного движения кварков \mathbf{k} [3,4] и 4-скоростью мезона $V^\mu = Q^\mu M$. Для краткости в (1) введены функции

$$\Omega \begin{pmatrix} \ell & S & J \\ \nu_1 & \nu_2 & \mu \end{pmatrix} (\theta_k, \phi_k) = Y_{\ell m}(\theta_k, \phi_k) C \begin{pmatrix} s_1 & s_2 & S \\ \nu_1 & \nu_2 & \mu \end{pmatrix} C \begin{pmatrix} \ell & S & J \\ m & \lambda & \mu \end{pmatrix},$$

где $Y_{\ell m}(\theta_k, \phi_k)$ – сферические функции определяемые углами вектора \mathbf{k} , $C \begin{pmatrix} s_1 & s_2 & S \\ \nu_1 & \nu_2 & \mu \end{pmatrix}$,

$C \begin{pmatrix} \ell & S & J \\ m & \lambda & \mu \end{pmatrix}$ – коэффициенты Клебша-Гордана группы $SU(2)$, $D_{\lambda, \nu}^{1/2}(\mathbf{n}_W)$ – функции

вращения Вигнера вектор параметра \mathbf{n}_W [4]. Волновая функция мезона $\Phi_{\ell S}^J(\mathbf{k}, \beta_{q\bar{Q}})$ в (1) нормируется условием

$$\sum_{\ell, S} \int d\mathbf{k} k^2 |\Phi_{\ell S}^J(\mathbf{k}, \beta_{q\bar{Q}})|^2 = I, \quad k = |\mathbf{k}|. \quad (2)$$

Параметры разрабатываемой модели определим с использованием интегрального представления лептонной константы распада псевдоскалярного мезона $P^\pm(q\bar{Q}) \rightarrow \ell^\pm \nu_\ell$ [5, 6]

$$f_I(m_q, m_{\bar{Q}}, \beta_{q\bar{Q}}^P) = \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{1}{\pi} \int d\mathbf{k} k^2 \Phi(\mathbf{k}, \beta_{q\bar{Q}}^P) \sqrt{\frac{W_{m_q}^+(\mathbf{k})W_{m_{\bar{Q}}}^+(\mathbf{k})}{M_0 \omega_{m_q}(\mathbf{k})\omega_{m_{\bar{Q}}}(\mathbf{k})}} \left(1 - \frac{k^2}{W_{m_q}^+(\mathbf{k})W_{m_{\bar{Q}}}^+(\mathbf{k})} \right), \quad (3)$$

где

$$W_m^\pm(\mathbf{k}) = \omega_m(\mathbf{k}) \pm m, \quad M_0 = \omega_{m_q}(\mathbf{k}) + \omega_{m_{\bar{Q}}}(\mathbf{k}). \quad (4)$$

Для мезонов с одним тяжелым夸克ом потенциал определим как [3]

$$\hat{V}_{q\bar{Q}}(\mathbf{r}) = \hat{V}_{coul.}(\mathbf{r}) + \hat{V}_{lin.}(\mathbf{r}) + \hat{V}_{SS}(\mathbf{r}), \quad (5)$$

с кулоновской (*coul.*), спин-спиновой (*SS*) и запирающей (*lin.*) частями [5]

$$\begin{aligned} \hat{V}_{coul.}(\mathbf{r}) &= -\frac{4}{3} \sum_{i=1}^7 \alpha_i \operatorname{erf}(\tau_i \mathbf{r}), \\ \hat{V}_{SS}(\mathbf{r}) &= -\frac{32(S\bar{S})}{9\sqrt{\pi} m_q m_{\bar{Q}}} \sum_{i=1}^7 \alpha_i \tau_i^3 \exp[-\tau_i^2 \mathbf{r}^2], \\ \hat{V}_{lin.}(\mathbf{r}) &= \sigma \mathbf{r} \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{\exp[-b^2 \mathbf{r}^2]}{b \mathbf{r}} + \left(1 + \frac{1}{2 b^2 \mathbf{r}^2}\right) \operatorname{erf}(b \mathbf{r}) \right) + w_0, \end{aligned} \quad (6)$$

где $\operatorname{erf}(x)$ – функция ошибок, σ – параметр линейной части, значение которого выберем $\sigma = 0,19 \pm 0,01 \text{ ГэВ}^2$ [5; 6], а константа w_0 определяет ненулевые значения глюонных и кварковых конденсатов. Отметим, что выражения (6) были получены путем процедуры «размазки» с параметром b [7] и параметризацией бегущей константы сильного взаимодействия [7–9]

$$\alpha_s(q^2) = \sum_{i=1}^7 \alpha_i \exp[-q^2 / 4\gamma_i^2], \quad (7)$$

с критическим значением $\alpha_s(q^2 = 0) = 0,692$. Также для краткости в (6) определена величина $\tau_i = b \gamma_i / \sqrt{b^2 + \gamma_i^2}$.

Приведенные в разделе соотношения позволяют проводить расчет массы псевдоскалярного мезона из выражения

$$M(m_q, m_{\bar{Q}}, \beta_{q\bar{Q}}^P) = \langle \psi(\beta_{q\bar{Q}}^P) | \hat{M}_0 | \psi(\beta_{q\bar{Q}}^P) \rangle + \langle \psi(\beta_{q\bar{Q}}^P) | \hat{V}_{q\bar{Q}} | \psi(\beta_{q\bar{Q}}^P) \rangle, \quad (8)$$

где \hat{M}_0 – оператор кинетической энергии, определяемый с использованием массы кварков

$$\langle \psi(\beta_{q\bar{Q}}^P) | \hat{M}_0 | \psi(\beta_{q\bar{Q}}^P) \rangle = \langle \psi(\beta_{q\bar{Q}}^P) | \hat{T}_{m_q} | \psi(\beta_{q\bar{Q}}^P) \rangle + \langle \psi(\beta_{q\bar{Q}}^P) | \hat{T}_{m_{\bar{Q}}} | \psi(\beta_{q\bar{Q}}^P) \rangle. \quad (9)$$

Ниже обобщим методику расчета на случай псевдоскалярного D^\pm -мезона.

Расчет массы ℓ -кварка. Для прикладных расчетов волновая функция мезона может быть выбрана в виде [10–12]

$$\Phi^{osc.}(k, \beta_{q\bar{Q}}^P) = N_{osc.} \exp\left[-\frac{k^2}{2 (\beta_{q\bar{Q}}^P)^2}\right], \quad N_{osc.} = \frac{2}{\pi^{1/4} (\beta_{q\bar{Q}}^P)^{3/2}}, \quad (10)$$

$$\Phi^{coul.}(k, \beta_{q\bar{Q}}^P) = \frac{N_{coul.}}{\left(1 + \left(\frac{k}{\beta_{q\bar{Q}}^P}\right)^2\right)^2}, \quad N_{coul.} = 4 \sqrt{\frac{2}{\pi (\beta_{q\bar{Q}}^P)^3}}, \quad (11)$$

$$\Phi^{pl.}(k, \beta_{q\bar{Q}}^P) = \frac{N_{pl.}}{\left(1 + \left(\frac{k}{\beta_{q\bar{Q}}^P}\right)^2\right)^3}, \quad N_{pl.} = 16 \sqrt{\frac{2}{7 \pi (\beta_{q\bar{Q}}^P)^3}}. \quad (12)$$

с советующими индексами для осцилляторной (*osc.*), кулоновской (*coul.*) и степенной (*pl.*) волновой функции [10]. Расчеты проведем с использованием экспериментальных значений массы D^\pm -мезона и константы распада $D^\pm(cd) \rightarrow \ell \nu_\ell$ [1]

$$M_{D^\pm} = 1869,66 \pm 0,05 \text{ МэВ}, f_{D^\pm} = 209,78 \pm 6,79 \text{ МэВ}. \quad (13)$$

Используя параметры развиваемой модели, полученные с использованием тождества Уорда $(\hat{m}_q + \hat{m}_Q)g_{P^\pm} = M_{P^\pm}^2 f_{P^\pm}$, где \hat{m}_q, \hat{m}_Q – токовые массы夸克ов [1] и g_{P^\pm} – константа псевдоскалярной плотности [11]

$$m_u = (219,48 \pm 9,60) \text{ МэВ}, m_d = (221,98 \pm 9,60) \text{ МэВ}, \quad (14)$$

а также выражения (3)–(12), совместно с экспериментальными значениями (13) и параметрами модели (14), получаем следующие значения массы ℓ -кварка в зависимости от выбора волновой функции (таблица 1).

Таблица 1 – Значения массы ℓ -кварка для различных видов волновых функций

Вид волновой функции	Масса ℓ -кварка, МэВ	Значение β -параметра, МэВ
<i>osc.</i> (10)	$1961,37 \pm 12,70$	$480,56 \pm 12,70$
<i>coul.</i> (11)	$1588,98 \pm 12,70$	$497,04 \pm 12,70$
<i>pl.</i> (12)	–	–

Отметим, что расчеты значений проводились из условия требования минимума функционала

$$\chi^2 = \left(\frac{M(m_c, m_{\bar{d}}, \beta_{cd}^P) - M_{D^\pm}}{\Delta M_{D^\pm}} \right)^2 + \left(\frac{f_L(m_c, m_{\bar{d}}, \beta_{cd}^P) - f_{D^\pm}}{\Delta f_{D^\pm}} \right)^2. \quad (15)$$

Из таблицы 1 следует, что кулоновская (*coul.*) волновая функция приводит к рациональным результатам в сравнении с массой D^\pm -мезона (13).

Ниже проведем сравнение результатов развитой модели с другими подходами, в том числе основанными на релятивистских кварковых моделях (таблица 2).

Таблица 2 – Сопоставление параметров модели $m_u + m_d = 440$

Модель	Масса u -кварка, МэВ	Масса d -кварка, МэВ	Масса ℓ -кварка, МэВ
Релятивизированная кварковая модель [7]	$m_u + m_d = 440$		1628
Динамика на световом фронте [12]	250	250	1445
Квазипотенциальный подход [13]	330	330	1550
Динамика на световом фронте [14,15]	220	220	1800
Эта работа	$219,48 \pm 9,60$	$221,98 \pm 9,60$	$1588,98 \pm 12,70$

Анализ таблицы 2 показывает, что предложенная методика расчета конституентных масс夸克ов в модели, основанной на точечной форме ПиКМ, приводит к удовлетворительным результатам в сравнении с другими подходами и моделями.

Заключение. В работе изложена методика расчета параметров модели, основанной на составной кварковой модели и на точечной форме ПиКМ. Авторами кратко изложены

базовые соотношения, а также приведены выражения для потенциала кварк-антинваркового взаимодействия. Предложенный алгоритм использован для вычисления значения массы конституентного s -кварка из условия соответствия теоретических расчетов с экспериментальными данными. Сравнительный анализ показал, что развитая модель приводит к коррелирующим с другими подходами значениям.

Список использованных источников

1. Review of Particle Physics / S. Navas [et al.] (PDG group) // Phys. Rev. D. – 2024. – Vol. 110 – P. 030001.
2. Polyzou, W.N. Mini review of Poincaré invariant quantum theory / W.N. Polyzou, Y. Huang, Ch. Elster [et al.] // Few Body Syst. – 2011. – Vol. 49. – P. 129–147.
3. Andreev, V.V. Nonperturbative region of effective strong coupling / V.V. Andreev // arXiv: 1305.4266 – 2013.
4. Keister, B.D. Relativistic Hamiltonian dynamics in nuclear and particle physics / B.D. Keister, W.N. Polyzou // Adv. Nucl. Phys. – 1991. – Vol. 20. – P. 225–279.
5. Ebert, D. Quark – anti-quark potential with retardation and radiative contributions and the heavy quarkonium mass spectra / D. Ebert, R.N. Faustov, V.O. Galkin // Phys. Rev. D. – 2000. – Vol. 62. – P. 034014.
6. Kalashnikova, Yu.S. QCD string in light – light and heavy – light mesons / Yu.S. Kalashnikova, A.V. Nefediev, Yu.A. Simonov // Phys. Rev. D. – 2001. – Vol .64. – P. 014037.
7. Godfrey, S. Mesons in a relativized quark model with chromodynamics / S. Godfrey, N. Isgur // Phys. Rev. D. – 1985. – Vol. 32. – P. 189–231.
8. Deur, A. The QCD running coupling / A. Deur // JLAB-PHY-24-4226. – 2025. – 20 p.
9. Barnes, T. Higher charmonia / T. Barnes, S. Godfrey, E.S. Swanson // Phys. Rev. D. – 2005. – Vol. 72. – P. 054026.
10. Krutov, A.F. Magnetic moment of the ρ – meson in instant-form relativistic quantum mechanics / A.F. Krutov, R.G. Polezhaev, V.E. Troitsky // Phys. Rev. D. – 2018. – Vol. 97. – P. 033007.
11. Andreev, V.V. Constituent quark masses in Poincaré-invariant quantum mechanics / V.V. Andreev, V.Yu. Haurish // J. Phys. Conf. Ser. – 2017. – Vol. 938. – P. 012030.
12. Jaus, W. Semileptonic, radiative, and pionic decays of B, B^* and D, D^* mesons / W. Jaus // Phys. Rev. D. – 2001. – Vol. 53. – P. 1349–1365.
13. Ebert, D. Strong decays of vector mesons to pseudoscalar mesons in the relativistic quark model / D. Ebert, R.N. Faustov, V.O. Galkin // Physics Letters B. – 2015. – Vol. 744. – P. 1–6.
14. Ryu, H.-Y. Systematic twist expansion of $\eta_c, \eta_b \rightarrow \gamma^* \gamma$ transition form factors in light-front quark model // H.-Y. Ryu, H.-M. Choi, Ji, Ch.-R. Ji // Phys. Rev. D. – 2018. – Vol. 98. – P. 034018.
15. Choi, H.-M. Spacelike and timelike form factors for the $(\pi^0, \eta, \eta') \rightarrow \gamma^* \gamma$ transitions in the light-front quark model / H.-M. Choi, H.-Y. Ryu, Ch.-R. Ji // Phys. Rev. D. – 2017. – Vol. 96. – P. 056008.

Д.С. Галинская, В.Д. Кособуцкий, П.В. Еременко, Г.А. Пицевич
Белорусский государственный университет

НЕЛИНЕЙНЫЕ ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЖК МОЛЕКУЛЫ C₃₂H₅₉NO

Исследованы нелинейные оптические свойства жидкокристаллической молекулы N4OYBDHA. Проведены квантово-химические расчеты для оптимизации геометрии молекулы и ее ассоциатов, а также для определения первой и второй гиперполяризуемости. Исследована генерация второй гармоники.

Ключевые слова: нелинейные оптические свойства, хиральные жидкие кристаллы, гиперполяризуемость, оптическая активность.

Введение. Жидкокристаллические устройства с улучшенными электрооптическими свойствами сегодня активно разрабатываются. Одно из перспективных направлений – сегнетоэлектрические жидкие кристаллы. Распространение интенсивных световых пучков в таких средах может сопровождаться их взаимодействием, и такое взаимодействие может управляться или переключаться только оптическими способами. Целый ряд нелинейных оптических эффектов в конечном итоге обусловлен такими характеристиками, как первая и вторая гиперполяризуемость молекул. И хотя впервые нелинейные оптические эффекты были детектированы в кристаллических средах, очень скоро аналогичные явления были установлены в средах из органических и жидкокристаллических молекул [1]. Хотя такие молекулы не центросимметричны, они, как правило, характеризуются наличием π – электронов, благодаря чему отличаются сильной гиперполяризуемостью первого порядка. Росту этой молекулярной характеристики также способствует сильная асимметрия в распределении электрического заряда. В свою очередь это способствует эффективной генерации второй гармоники и быстрой электрооптической модуляции. Все это побудило синтезировать и исследовать спектральными и теоретическими методами новую оптически активную молекулу [2], содержащую четверичную аммонийную группу, перспективную в том числе для жидкокристаллических систем.

Нелинейные оптические характеристики молекулы N4OYBDHA рассчитывались с помощью квантово-химических пакетов. Геометрические параметры молекулы N4OYBDHA оптимизировались на уровне теории B3LYP/3-21G. Оптимизированная конфигурация молекулы приведена на рисунке 1.

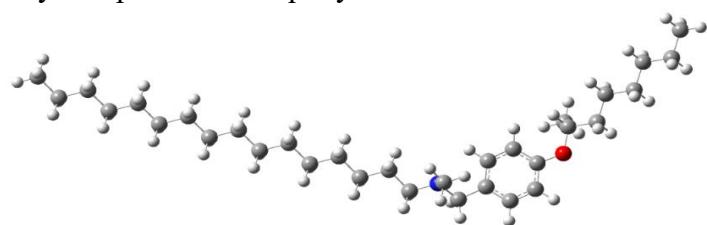


Рисунок 1 – Оптимизированная на уровне теории B3LYP/3-21G конфигурация хиральной молекулы N4OYBDHA

Молекула содержит 93 атома, при этом число колебательных степеней свободы равно 285. Дополнительно для последующей оценки влияния среды на компоненты тензоров первой и второй гиперполяризуемости рассчитывались равновесные конфигурации димера и тримера анализируемой молекулы.

Оптическая активность хиральной молекулы N4OYBDHA рассчитывалась на трех уровнях теории: B3LYP/STO-3G, B3LYP/3-21G и B3LYP/6-311G. Использование квантово-химического пакета Gaussian 16, позволяет построить кривые оптической дисперсии, позволяющие оценить оптическую активность для любой длины волны в оптическом диапазоне с высокой точностью. В качестве опорных точек были выбраны следующие длины волн в оптическом диапазоне: 780, 730, 680, 630, 580, 530, 480, 430 и 380 нм. Рассчитанные дисперсионные кривые оптической активности хиральной молекулы N4OYBDHA представлены на рисунке 2.

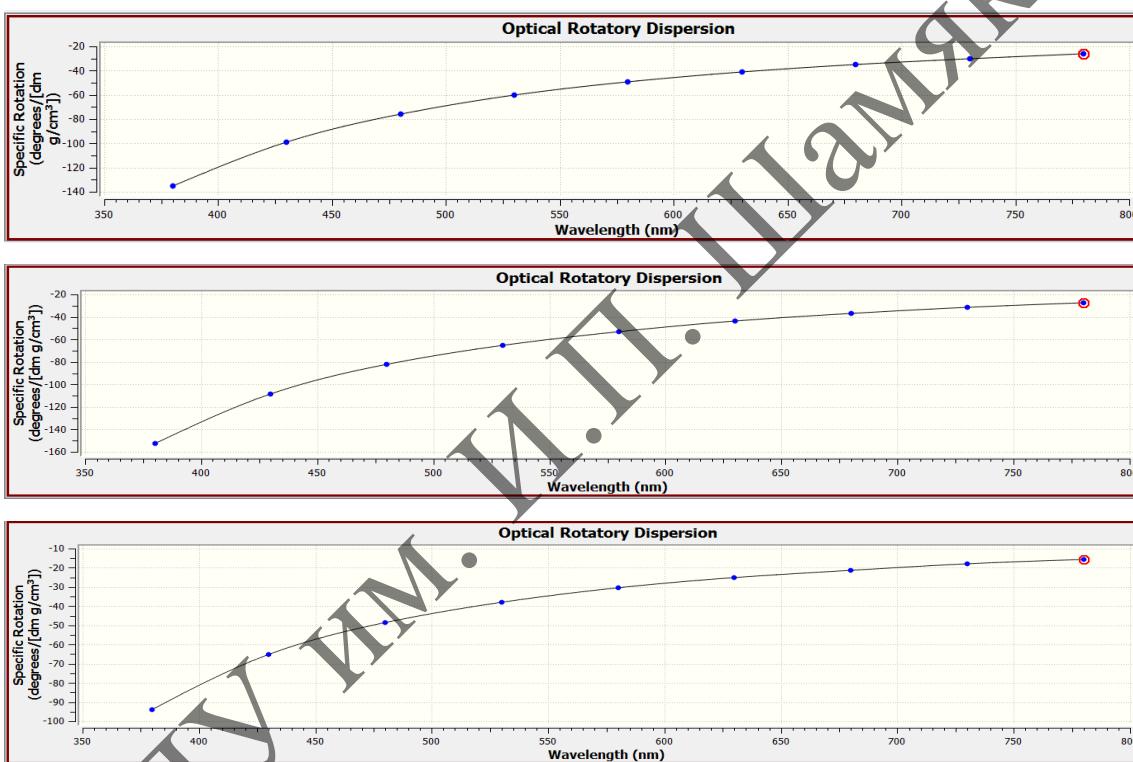


Рисунок 2 – Рассчитанные на уровнях теории B3LYP/STO-3G (верхний рисунок), B3LYP/3-21G (средний рисунок) и B3LYP/6-311G (нижний рисунок) ИК дисперсионные кривые оптической активности хиральной молекулы N4OYBDHA

Квантово-химические расчеты на всех уровнях теории предсказывают нелинейный рост оптической активности хиральной молекулы N4OYBDHA с уменьшением длины волны падающего излучения. Оптимальным оказывается использование базисного набора 3-21G. Для анализа зависимости эффективности оптического вращения от числа молекул N4OYBDHA были оптимизированы конфигурации димера и тримера этой молекулы на уровне теории B3LYP/3-21G. Следует отметить, что димер молекулы ЖК содержит 186, а тример – 279 атомов, а число варьируемых параметров составило 552 и 831, соответственно. Равновесные конфигурации мономера, димера и тримера ЖК молекулы N4OYBDHA представлены на рисунках 3 и 4.

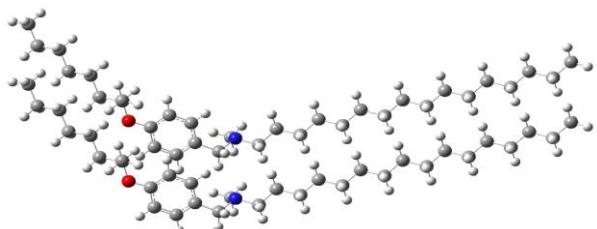


Рисунок 3 – Оптимизированная на уровне теории B3LYP/3-21G конфигурация димера хиральной молекулы N4OYBDHA

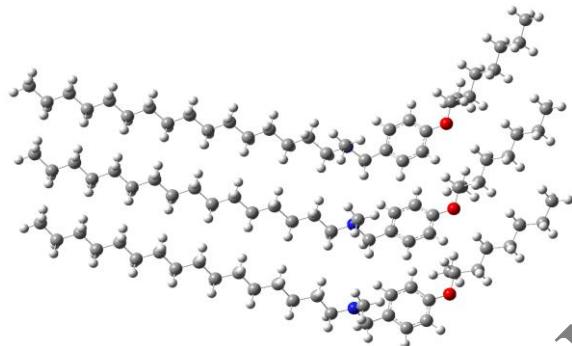


Рисунок 4 – Оптимизированная на уровне теории B3LYP/3-21G конфигурация тримера хиральной молекулы N4OYBDHA

Рассчитанные на уровне теории B3LYP/3-21G дисперсионные кривые оптической активности для следующих длин волн в оптическом диапазоне: 780, 730, 680, 630, 580, 530, 480, 430 и 380 нм для мономера, димера и тримера хиральной молекулы N4OYBDHA представлены на рисунке 5.

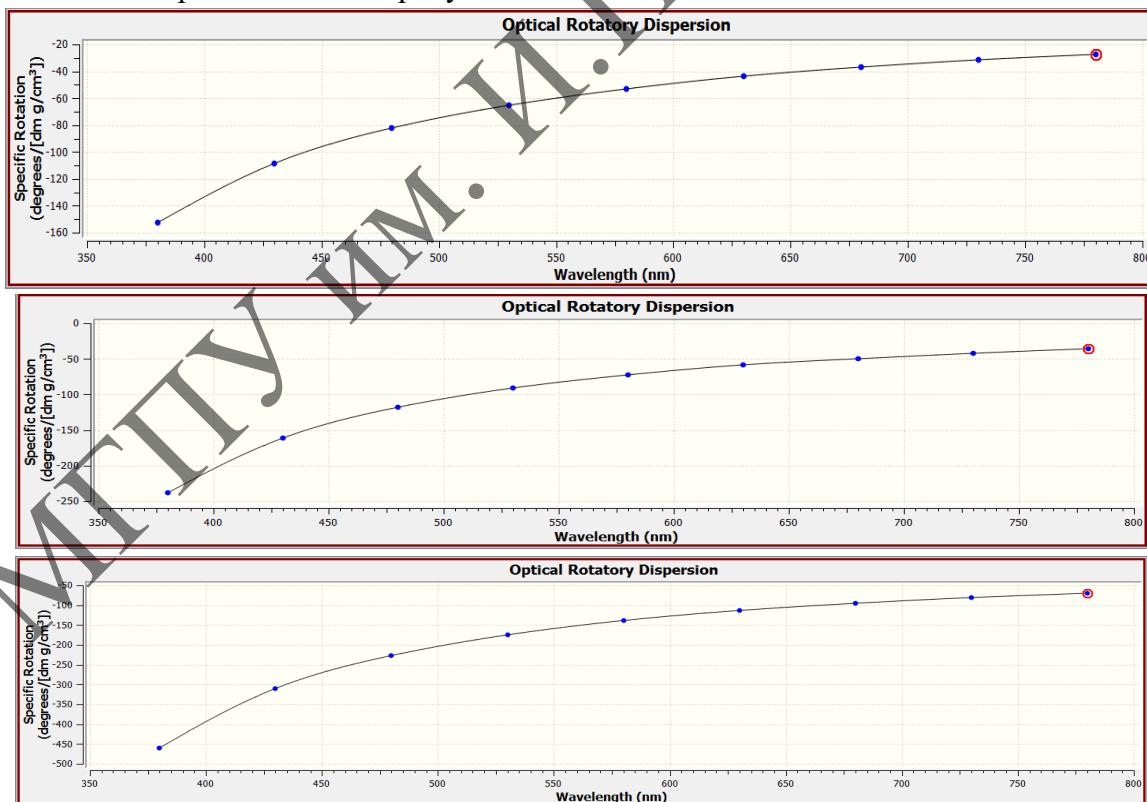


Рисунок 5 – Рассчитанные на уровне теории B3LYP/3-21G дисперсионные кривые оптической активности мономера хиральной молекулы N4OYBDHA (верхний рисунок), димера хиральной молекулы N4OYBDHA (средний рисунок) и тримера хиральной молекулы N4OYBDHA (нижний рисунок)

Как следует из рисунка 5, квантово-химические расчеты для всех рассчитанных кластеров молекулы N4OYBDHA предсказывают нелинейный рост оптической активности хиральной молекулы с уменьшением длины волны падающего излучения. Интервал вращения плоскости поляризации в оптическом диапазоне составил 140, 210 и 425 градусов для мономера, димера и тримера молекулы N4OYBDHA в расчете на один дециметр слоя активного вещества или 1.4, 2.1 и 4.25 градуса на один миллиметр слоя вещества. Эти показатели для кластеров с малым числом ЖК молекул отвечают высокой эффективности оптической активности.

Генерация второй гармоники (second harmonic generation – SHG), также называемая удвоением частоты, представляет собой нелинейный оптический процесс. SHG была впервые продемонстрирована Франкеном и его коллегами в 1961 году. SHG недавно стала использоваться как биофизический инструмент для конформационного зондирования целевых биомолекул при связывании с лигандами, такими как малые молекулы, фрагменты, белки, пептиды и олигонуклеотиды. Расчет для мономера и некоторых ассоциатов молекулы N4OYBDHA компонентов тензора первой кубической и второй четверичной гиперполяризуемости вида $\beta(-2\omega, \omega, \omega)$ и $\gamma(-2\omega, \omega, \omega, 0)$, определяющих эффективность генерации второй гармоники (в том числе индуцированной внешним электрическим полем $\gamma(-2\omega, \omega, \omega, 0)$), осуществлялся с использованием квантово-химического пакета Gaussian 16 на уровне теории B3LYP/3-21G для следующих длин волн 759.4, 569.5 и 455.6 нм. В таблице 1 приведены рассчитанные значения инвариантов и некоторых компонент этого тензора в атомных единицах для мономера молекулы C₃₂H₅₉NO для указанных выше длин волн.

Таблица 1 – Рассчитанные на уровне теории B3LYP/3-21G значения компонент и инвариантов тензоров первой $\beta(-2\omega, \omega, \omega)$ и второй $\gamma(-2\omega, \omega, \omega, 0)$ гиперполяризуемости молекулы ЖК

$\lambda=[\text{нм}]$	$\beta(-2\omega, \omega, \omega)$								
759.4	$\beta_{ }(z)$	$\beta_{\perp}(z)$	β_x	β_y	β_z	β_{\parallel}	β_{xxx}	β_{yxx}	β_{yyx}
	-135	-48	-2301	-738	-677	502	-736	-203	-169
569.5	$\beta_{ }(z)$	$\beta_{\perp}(z)$	β_x	β_y	β_z	β_{\parallel}	β_{xxx}	β_{yxx}	β_{yyx}
	-244	-100	-3573	-1181	-1221	791	-1096	-326	312
455.6	$\beta_{ }(z)$	$\beta_{\perp}(z)$	β_x	β_y	β_z	β_{\parallel}	β_{xxx}	β_{yxx}	β_{yyx}
	-550	-163	$1*10^4$	4497	-2752	2630	-3488	-1246	-915
$\gamma(-2\omega, \omega, \omega, 0)$									
759.4	$\gamma_{ }$	γ_{\perp}	γ_{xxxx}	γ_{yxxx}	γ_{zxxy}	γ_{xyxx}	γ_{yyxx}	γ_{yyyy}	γ_{zzzz}
	$6*10^4$	$2*10^4$	$2*10^5$	$5*10^4$	-8029	$5*10^4$	$2*10^4$	$1*10^4$	$2*10^4$
569.5	$\gamma_{ }$	γ_{\perp}	γ_{xxxx}	γ_{yxxx}	γ_{zxxy}	γ_{xyxx}	γ_{yyxx}	γ_{yyyy}	γ_{zzzz}
	$9*10^4$	$3*10^4$	$2*10^5$	$8*10^4$	-7397	$8*10^4$	$4*10^4$	$2*10^4$	$2*10^4$
455.6	$\gamma_{ }$	γ_{\perp}	γ_{xxxx}	γ_{yxxx}	γ_{zxxy}	γ_{xyxx}	γ_{yyxx}	γ_{yyyy}	γ_{zzzz}
	$2*10^5$	61393	$7*10^5$	$2*10^5$	$1*10^5$	$2*10^5$	$1*10^4$	$3*10^4$	$3*10^4$

Анализ данных таблицы 1 показывает, что эффективность SHG растет нелинейно с уменьшением длины волны падающего света. Наибольший эффект достигается

при направлении светового потока перпендикулярно направлению дипольного момента молекулы ЖК (вдоль оси X), который направлен вдоль оси Y. Включение внешнего электрического поля не меняет тенденций, описанных выше, но согласно данным Табл.1, существенно увеличивает эффективность процесса SHG. Аналогичные расчеты были выполнены для димера и тримера молекулы C₃₂H₅₉NO, которые показали, что значения компонент соответствующих тензоров первой и второй гиперполяризуемости линейно растут с ростом числа молекул в кластере. С учетом того, что ориентация ЖК молекул в кластерах параллельная и это характерная черта ЖК сред, нет необходимости выполнять усреднение по различным ориентациям в среде. Все это указывает на то, что эффективность SHG в среде анализируемых ЖК молекул должна быть высокой.

Список использованных источников

1. Vivas, M.G. Interpreting the First-Order Electronic Hyperpolarizability for a Series of Octupolar Push-Pull Triarylamine Molecules Containing Trifluoromethyl / D.L. Silva, M.G. Vivas // Journal of Physics Chemistry. – 2015. – Vol. 119. – P. 12589.
2. Pitsevich, G. Structure, IR and Raman spectra of the optically active quaternized ammonium salt – promising object for liquid crystal systems / G. Pitsevich, G.I. Doroshenko // Molecular Crystals and Liquid Crystals. – 2022. – Vol. 748. – P. 73.

УДК 539.194:547.262

Е.А. Жук, А.В. Ильясов, К.Д. Ломако, Г.А. Пицевич, А.Э. Малевич
Белорусский государственный университет

ТОРСИОННЫЙ ИК СПЕКТР МОЛЕКУЛЫ МЕТАНТИОЛА

В данной работе исследуется торсионный инфракрасный спектр молекулы метантиола (CH₃SH). Проведены расчёты спектрально-структурных характеристик на уровне теории MP2/dAug-cc-pVDZ, включая гармоническое и ангармоническое приближения. Определены частоты и интенсивности фундаментальных торсионных колебаний, а также туннельные расщепления энергетических уровней. Полученные данные позволяют уточнить параметры молекулярной симметрии и потенциальных барьеров внутреннего вращения.

Ключевые слова: торсионный ИК спектр, фундаментальные колебания, туннельные расщепления, ангармонизм, молекулярная симметрия.

Введение. Молекула метантиола (CH₃SH) представляет интерес по ряду причин. Молекула может существовать в межзвездной среде. Астробиологами ММТ рассматривается в качестве биомаркера при оценки возможной жизни на экзопланетах [1; 2]. ММТ является нежесткой и существует в трех эквивалентных конфигурациях, разделенных потенциальными барьерами. Переход между эквивалентными конфигурациями оказывается возможным за счет туннелирования. При этом ряд колебаний молекулы характеризуется большой амплитудой, что не позволяет анализировать их в рамках обычной гармонической модели. Спектральные исследования ММТ начались давно [3; 4] и продолжаются [5; 6]. Но единственная экспериментальная работа, в которой зарегистрирован и анализируется торсионно-вращательный спектр ММТ в низкочастотном спектральном диапазоне опубликована в 1989 году [7]. Поскольку ММТ является структурным аналогом молекулы метанола (CH₃OH), для

которой группа молекулярной симметрии (G6) была определена ранее [8], удалось классифицировать торсионные колебания по этому типам симметрии. Основным торсионным переходам соответствуют частоты 196.13 cm^{-1} (колебание типа E) и 214.69 cm^{-1} (колебание типа A2). Но отсутствует информация о высотах потенциальных барьеров, величинах туннельных расщеплений, возбужденных торсионных состояний. Эти аспекты анализируются в данной работе.

Во всех трех конфигурациях ММТ, представленных на рисунке 1, атомы H2-S1-C3-Hi лежат в одной плоскости. Точечная группа симметрии любой из трех конфигураций – CS. Но группа молекулярной симметрии G6 включает большее число инверсноперестановочных операций симметрии (таблица 1).

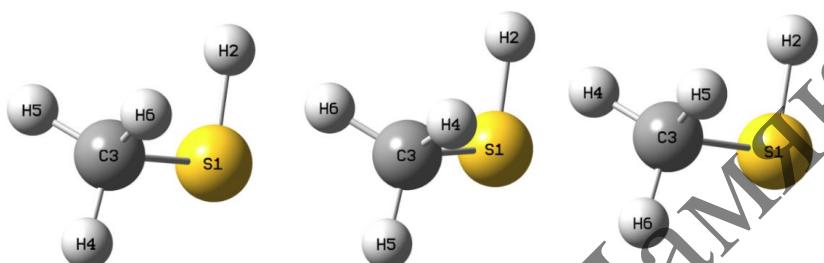


Рисунок 1 – Три эквивалентные равновесные конфигурации молекулы МТ, полученные за счет относительного вращения CH₃ и SH фрагментов вокруг C – S связи (i=4 – левый рисунок, 5 – средний рисунок и 6 – правый рисунок)

Таблица 1 – Характеры неприводимых представлений

G6	E	2(4,5,6)	3(4,5)*
A1	1	1	1
A2	1	1	-1
E	2	-1	0

Расчеты спектрально-структурных характеристик молекулы МТ выполнялись на уровне теории MP2/dAug-cc-pVDZ.

Рисунок 2 показывает, что учет эффектов ангармонизма ведет к красному сдвигу всех полос поглощения, при этом наибольший красный сдвиг предсказан для валентных C–H колебаний. Также ангармоническое приближение позволяет рассчитать частоты и интенсивности первых обертонов и составных колебаний, которые могут наблюдаться в спектральном интервале $3500\text{--}6000\text{ cm}^{-1}$. Расчеты предсказывают низкую относительную интенсивность этих колебаний, что согласуется с теорией. Значение частоты торсионного колебания тиольной группы в ангармоническом приближении (209.1 cm^{-1}) снизилось на 30 cm^{-1} по отношению к гармоническому значению (239.2 cm^{-1}). Была рассчитана частота первого обертона торсионного колебания, которая оказалась равной 385 cm^{-1} .

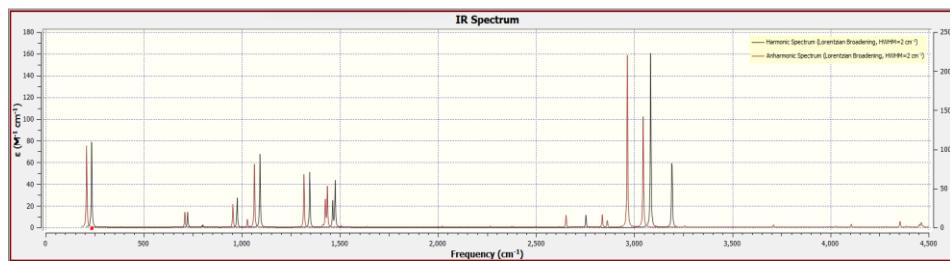


Рисунок 2 – Рассчитанные на уровне теории MP2/dAug-cc-pVDZ в гармоническом (черный цвет) и ангармоническом (красный цвет) приближениях ИК спектры ММТ

Как следует из таблицы 2, расчет предсказывает незначительную ангармоничность торсионного колебания тиольной группы. Сумма всех недиагональных элементов столбца матрицы ангармонических постоянных для этой моды оказалась равной -3.3 см^{-1} . Ожидаемый красный сдвиг частоты торсионного колебания за счет ангармонического взаимодействия всего 1.65 см^{-1} . В дальнейших расчетах с помощью рассчитанной потенциальной кривой будет учитываться только собственный ангармонизм торсионной моды. Ангармонические взаимодействия торсионной моды с остальными нормальными модами учитываться не будут.

Таблица 2 – Элементы столбца матрицы ангармонических постоянных ММТ, связанные с торсионной нормальной модой N1, рассчитанные на уровне теории MP2/dAug-cc-pVDZ (в см^{-1})

Номера мод	Мода N1	Номера мод	Мода N1	Номера мод	Мода N1
1	-16.5	5	-9.6	9	+1.9
2	+3.1	6	+0.8	10	+1.4
3	+2.1	7	+2.1	11	+2.1
4	-4.8	8	-3.0	12	+0.6

Потенциальная энергия $U(\tau)$ внутреннего вращения тиольной группы главным образом определяет положение $2\pi/3$ торсионных уровней энергии. Имеет место периодичность этих кривых с периодом, помимо периода, учитывающего цикличность торсионной координаты 2π . Кроме того, на каждом из периодов: $0^\circ - 120^\circ$, $120^\circ - 240^\circ$ и $240^\circ - 360^\circ$ имеет место следующая симметрия:

$$U(\tau + 2\pi n/3) = U(2\pi(n+1)/3 - \tau), n = 0, 1, 2 \quad (1)$$

Значения рассчитывались в точках $4^\circ, 12^\circ, 20^\circ, \dots, 348^\circ, 356^\circ$. Полученные значения для коэффициентов усредняются по периоду $2\pi/3$ и затем по симметрии (1). Результат расчета потенциальной кривой, обусловленной внутренним вращением в ММТ.

Как видно из рисунка 3, высоты потенциальных барьеров составили 423 см^{-1} , а полуширины этих барьеров – порядка 60° .

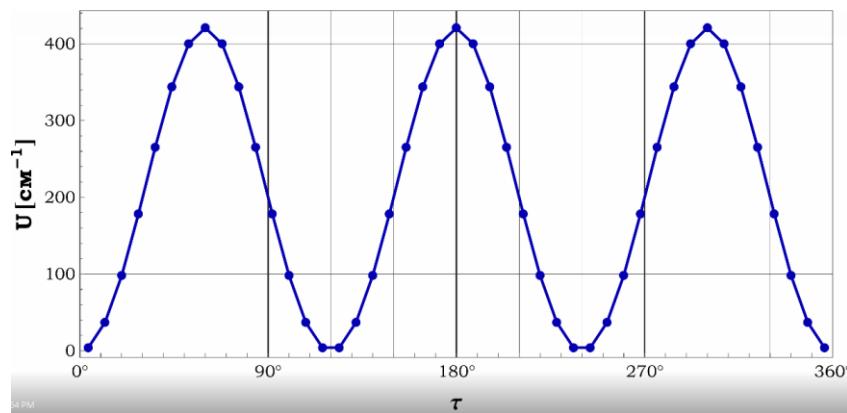


Рисунок 3 – Рассчитанная на уровне теории MP2/dAug-cc-pVDZ кривая потенциальной энергии ММТ, обусловленная внутренним вращением вокруг S–H связи

Колебательное уравнение Шредингера ограниченной размерности для торсионных колебаний молекулы МТ принимает следующий вид:

$$F(\tau) \partial^2 \Psi(\tau) / \partial \tau^2 + U(\tau) \Psi(\tau) = E \Psi(\tau), \quad (2)$$

где $F(\tau)$ – кинетический коэффициент, $U(\tau)$ – потенциальная энергия, $\Psi(\tau)$ – волновая функция, E – энергия торсионных состояний, τ – торсионная координата. Уравнение (2) решалось численно с помощью DVR метода [9; 10] путем составления матрицы Гамильтониана. Собственные значения матрицы Гамильтониана – это значения энергий стационарных торсионных состояний молекулы.

Таблица 3 – Рассчитанные на уровне теории MP2/dAug-cc-pVDZ значения энергий уровней стационарных торсионных состояний в [см⁻¹] молекулы МТ

Номер уровня	Квантовые числа	Рассчитанная энергия торсионного уровня	Туннельные расщепления уровней.
1	$n_a=0; n_e=0$	0	-
2	$n_a=0; n_e=0$	1.136	$3.12 \cdot 10^{-13}$
3	$n_a=0; n_e=0$	1.136	
4	$n_a=0; n_e=1$	186.88	$2.04 \cdot 10^{-12}$
5	$n_a=0; n_e=1$	186.88	
6	$n_a=1; n_e=0$	205.43	-
7	$n_a=2; n_e=0$	306.53	-
8	$n_a=0; n_e=2$	364.77	$2.27 \cdot 10^{-12}$
9	$n_a=0; n_e=2$	364.77	
10	$n_a=0; n_e=3$	490.36	$4.21 \cdot 10^{-12}$

11	$n_a=0; n_e=3$	490.36	
12	$n_a=3; n_e=0$	645.91	-
13	$n_a=4; n_e=0$	649.82	

Данные таблицы 3 показывают, что картина расположения энергетических уровней в случае молекулы МТ в целом аналогична ситуации с молекулой метилового спирта, что следовало ожидать ввиду их структурной эквивалентности. Существуют синглетные уровни энергии и дважды вырожденные дублетные уровни энергии, повторяющиеся в определенной последовательности. Синглетные уровни энергии отвечают торсионным колебаниям тиольных групп в пределах потенциальных ям, а дублетные уровни энергии – внутреннему вращению с туннелированием в двух возможных направлениях. Поскольку существует два типа движений, введем два колебательных числа: n_a – торсионное колебание и n_e – внутреннее вращение. При этом три первых торсионных состояния соответствуют основному колебательному состоянию. Расщепление основного колебательного состояния и предсказанная частота туннелирования равна 1.1 cm^{-1} . К частотам фундаментальных торсионных колебаний можно отнести переходы $\{n_a = 0, n_e = 0\} \Rightarrow \{n_a = 1, n_e = 0\}$ с частотой 205.4 cm^{-1} и $\{n_a = 0, n_e = 0\} \Rightarrow \{n_a = 0, n_e = 1\}$ с частотой 185.5 cm^{-1} .

Были также рассчитаны волновые функции, описывающие соответствующие торсионные состояния. Поэтому интенсивность перехода с начального уровня (i) на конечный (f) можно определить, используя следующую формулу:

$$I_{i \rightarrow f} = (\text{const} \cdot v_{if} \cdot (e^{-\frac{E_i - E_f}{kT}} - e^{-\frac{E_f - E_i}{kT}})) / Q(T) \cdot p_{if}^2, Q(T) = \sum_i e^{-\frac{E_i - E_f}{kT}} \quad (3)$$

Здесь $Q(T)$ – статистическая функция для торсионных состояний, T – температура среды, i и f – начальное и конечное состояния, v_{if} – волновое число, p_{if}^2 – квадрат матричного элемента оператора дипольного момента, который равен (4):

$$p_{if}^2 = \sum_{k=x,y,z} (\int_{\tau=0}^{2\pi} \Psi_i(\tau) p_k(\tau) \Psi_f(\tau) d\tau)^2 \quad (4)$$

Далее торсионные спектры при 300 К и 10К:

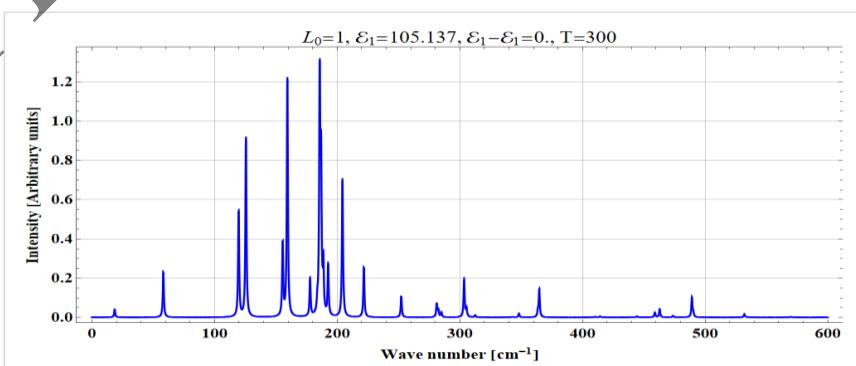


Рисунок 4 – Рассчитанный на уровне теории MP2/dAug-cc-pVDZ торсионный ИК спектр молекулы МТ при температуре 300 К

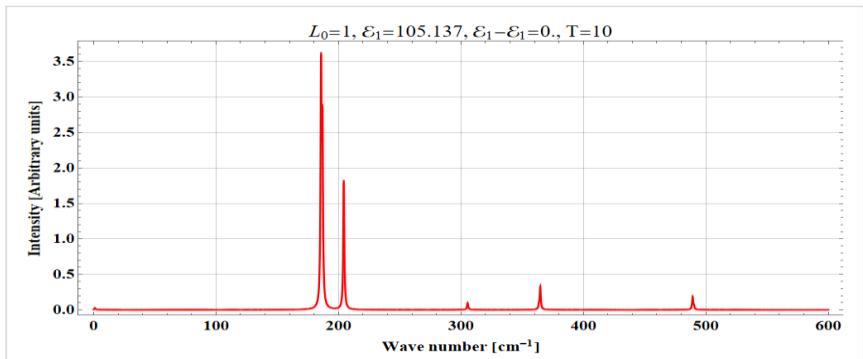


Рисунок 5 – Рассчитанный на уровне теории MP2/dAug-cc-pVDZ торсионный ИК спектр молекулы МТ при температуре 10 К

Ближе всего к классической картине нормальных колебаний является рисунок 5. Наиболее интенсивными являются две полосы поглощения вблизи 180 и 200 см⁻¹. Но в спектральном интервале 180–210 см⁻¹ присутствует три полосы поглощения, т. к. первая полоса является дублетом. Анализ показывает, что полоса с частотой максимума 185.7 см⁻¹ обусловлена переходами вида $2 \Rightarrow 4, 2 \Rightarrow 5, 3 \Rightarrow 4, 3 \Rightarrow 5$. Здесь цифры обозначают номера уровней в соответствии с табл. 3, 2, 1. Полоса с частотой максимума 186.9 см⁻¹ обусловлена переходами вида $1 \Rightarrow 4, 1 \Rightarrow 5$. Полоса с частотой максимума 204.3 см⁻¹ обусловлена переходами вида $2 \Rightarrow 6, 3 \Rightarrow 6$. Все эти полосы поглощения могут быть отнесены к фундаментальным торсионным колебаниям. Рассчитанные на уровне теории MP2/dAug-cc-pVDZ частоты фундаментальных торсионных переходов на 10 см⁻¹ ниже экспериментальных значений. Можно предположить, что последовательные расчеты на уровнях теории MP2/dAug-cc-pVTZ, MP2/dAug-cc-pVQZ и MP2/CBS(dAug DTQ) позволят улучшить согласие между рассчитанными и экспериментальными значениями.

Список использованных источников

1. Vance, S. Hydrothermal systems / S. Vance // Planetary Science. – 2011. – Vol. 59. – P. 299–326.
2. Domagal-Goldman, S.D. Using biogenic sulfur gases as remotely detectable biosignatures on planets / S.D. Domagal-Goldman, V.S. Meadows, M.W. Claire, J.F. Kasting // Astrobiology. – 2011. – Vol. 11. – P. 419–441.
3. May, I.W. Infrared spectra of matrix-isolated transition metal carbonyls / I.W. May, R.N. Walker, J.P. Thorne // Spectrochim. Acta Part A: Mol. Spectrosc. – 1968. – Vol. 24A. – P. 1605–1612.
4. May, I.W. Matrix isolation studies of transition metal carbonyls / I.W. May // Spectrochemical. – 1969. – Vol. 25A. – P. 1903.
5. Wolff, H. Quantum chemical studies on the electronic structure of conjugated systems / H. Wolff // J. Mol. Struct.: THEOCHEM. – 1987. – Vol. 160. – P. 221–234.
6. Fu, L. Theoretical study of graphene oxide / L. Fu // Chem. Phys. – 2012. – Vol. 137. – P. 234307.
7. Nakagawa, K. Microwave spectrum of the HCCCN radical / K. Nakagawa // J. Mol. Spectrosc. – 1989. – Vol. 138. – P. 102–107.
8. Lees, R.M. Microwave spectrum of formaldehyde / R.M. Lees // Journal of Chemistry Physics (J. Chem. Phys.) – 1968. – Vol. 48. – P. 5299–5307.
9. Meyer, R. Infrared spectrum of matrix-isolated ozone / R. Meyer // J. Chem. Phys. – 1970. – Vol. 52. – P. 67–74.
10. Pitsevich, G.A. Spectroscopic study of new organic compounds / G.A. Pitsevich, A.E. Malevich // J. Appl. Spectrosc. – 2016. – Vol. 82. – P. 893–899.

Н.Г. Крылова^{1,2}, Г.В. Грушевская³

¹Институт физики имени Б.И. Степанова НАН Беларуси

²Белорусский государственный аграрный технический университет

³Белорусский государственный университет

ТЕРМОДИНАМИКА ЧЕРНЫХ ДЫР С АКСИАЛЬНО-СИММЕТРИЧНОЙ ОБОБЩЕННОЙ МЕТРИКОЙ НЬЮМЕНА-УНТИ-ТАМБУРИНО

Исследована термодинамика черных дыр с НУТ-метрикой и аксиально-симметричной метрикой, обобщающей НУТ-метрику. Показано, что с ростом параметра НУТ энтропия Бекенштейна-Хокинга растет при том же значении температуры Хокинга. В отличие от черной дыры НУТ, для черной дыры с аксиально-симметричной метрикой имеются области значений метрических параметров, для которых зависимость энергии Гиббса от энтропии приобретает s-образный характер.

Ключевые слова: термодинамика черных дыр, аксиально-симметричная метрика, параметр Ньюмена-Унти-Тамбурино, энтропия Бекенштейна-Хокинга

Введение. Термодинамика черных дыр является одним из важных направлений исследования в космологических моделях и моделях квантовой гравитации. Особый интерес представляют метрики, в которых показано наличие критических явлений. Так, асимптотически анти-де-Ситтеровские черные дыры в зависимости от особенностей метрики могут демонстрировать фазовый переход Хокинга-Пейджа 1-го рода или существование фазового перехода типа Ван-дер-Ваальса 2-го рода [1–2].

Метрики Ньюмена-Унти-Тамбурино (НУТ) активно исследовались в качестве монопольного решения в рамках теорий Большого объединения. В последнее время НУТ-метрики рассматриваются не только как модельные, но и как физически допустимые. При этом параметр НУТ интерпретируется как гравимагнитный заряд (монополь) [3]. В работе [4] показано, что при наличии НУТ параметра метрика анти-де-Ситтера демонстрирует наличие фазового перехода 1-го рода.

Целью данной работы является изучение термодинамики обобщенной аксиально-симметричной метрики с параметром НУТ и выявление условий для появления областей критического поведения.

Термодинамика черной дыры с НУТ-метрикой. Пространство-времени Ньюмана-Унти-Тамбурино (НУТ):

$$ds^2 = \Phi \left(dt + 4a \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) d\phi \right)^2 - \frac{dr^2}{\Phi} - (a^2 + r^2)(d\theta^2 + \sin^2(\theta)d\phi^2), \quad \Phi = 1 - \frac{Mr + 2a^2}{r^2 + a^2}. \quad (1)$$

Внутренний и внешний горизонты событий r_{\pm} находим из уравнения $\Phi = 0$:

$$r_{\pm} = \frac{1}{2} \left(M \pm \sqrt{M^2 + 4a^2} \right).$$

Площадь (A) внешнего горизонта событий r_+ определяется по формуле:

$$A = \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} \sqrt{g_{\theta\theta} g_{\phi\phi}} d\phi = 4\pi (r_+^2 + a^2).$$

В соответствии с теоремой Хокинга, энтропия (S) Бекенштейна-Хокинга равна одной четвертой площади горизонта событий:

$$S = \frac{A}{4} = \pi(a^2 + r_+^2).$$

Температуру Хокинга для НУТ-черной дыры находим классическим методом на основании векторов Киллинга, с учетом симметрий получаем:

$$T = \left. \frac{1}{4\pi} \frac{d\Phi}{dr} \right|_{r=r_+} = \frac{1}{4\pi r_+} = \frac{1}{4\sqrt{\pi S - \pi^2 a^2}}; \quad (2)$$

видно, что формула для НУТ-черной дыры обобщает соответствующую величину для черной дыры Шварцшильда.

На основании первого закона термодинамики для черных дыр

$$dM = TdS + Vdp + FdQ + \Omega dJ$$

(здесь T , V , F и Ω – температура Хокинга, термодинамический объем, электрический потенциал и угловая скорость) найдем внутреннюю энергию M :

$$M = \int TdS = \frac{r_+}{2}.$$

Тогда в явном виде энергия Гиббса определяется формулой

$$G = M - TS = \frac{S - 2\pi a^2}{4\sqrt{\pi S - \pi^2 a^2}}.$$

На рисунке 1 представлены зависимости $G(T)$ и $T(S)$, полученные при различных значениях параметра НУТ (a).

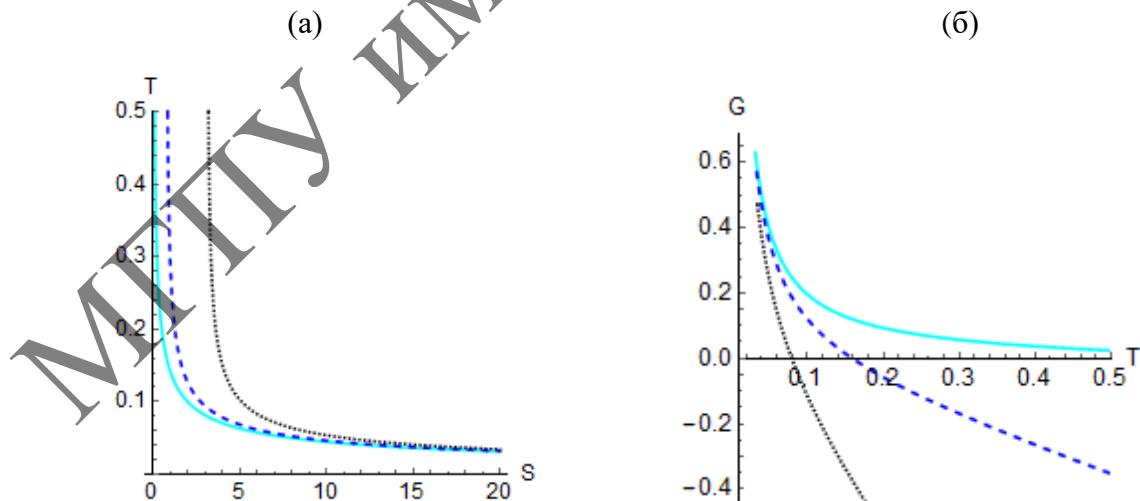


Рисунок 1 – Зависимость температуры Хокинга от энтропии Бекенштейна-Хокинга (а), и зависимость энергии Гиббса от температуры Хокинга для черной дыры с НУТ метрикой; $a = 0,1$ (голубая сплошная кривая), $0,5$ (синяя штриховая кривая), $1,0$ (черная пунктирная кривая)

Видно, что с ростом величины a энтропия черной дыры растет при том же значении температуры. Исследованные зависимости являются однозначными функциями во всей области значений и не имеют особенностей при любых величинах параметра НУТ. Таким образом, для черной дыры с метрикой Ньюмена-Унти-Тамбурино отсутствует критическое поведение (фазовые переходы).

Термодинамика черной дыры с аксиально-симметричной метрикой, обобщающей НУТ-метрику

Рассмотрим два возможных случая аксиально-симметричного обобщения пространства-время с НУТ-параметром:

$$ds^2 = \Phi \left(dt + 4a \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) d\phi \right)^2 - \frac{dr^2}{\Phi} - \frac{(a^2 + r^2)}{\Phi_1} (d\theta^2 + \sin^2(\theta) d\phi^2), \quad (3)$$

$$ds^2 = \Phi_1 \left(dt + 4a \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) d\phi \right)^2 - \frac{dr^2}{\Phi} - \frac{(a^2 + r^2)}{\Phi_1} (d\theta^2 + \sin^2(\theta) d\phi^2). \quad (4)$$

Внутренний и внешний горизонты событий в обоих случаях получаются из решения уравнения $\Phi = 0$, т.е. совпадают с горизонтом исходной НУТ черной дыры (1). Обращение в ноль функции Φ_1 соответствует эргосфере черной дыры.

Для черной дыры с метрикой (3) площадь A внешнего горизонта событий r_+ :

$$A = 4\pi \frac{(r_+^2 + a^2)}{\Phi_1|_{r=r_+}}.$$

В случае обобщенной метрики (4) будем рассматривать только такие функции Φ_1 , которые слабо отличаются от Φ : $\Phi_1 = \Phi + \Delta$. Тогда площадь A имеет приближенное выражение

$$A = 4\pi \frac{(r_+^2 + a^2)}{\Delta|_{r=r_+}}.$$

Оба случая (3),(4) будут вести себя одинаково с точки зрения термодинамики при $\Delta \equiv \Phi_1$. Поэтому далее ограничиваемся рассмотрением случая (3).

Энтропия (S) Бекенштейна-Хокинга равна

$$S = \frac{A}{4} = \pi \frac{(r_+^2 + a^2)}{\Phi_1|_{r=r_+}}. \quad (5)$$

Так как функция Φ не изменилась, температура Хокинга T определяется простой формулой (2), но зависимость температуры от энтропии определяется неявным образом из (5) и зависит от вида функции Φ_1 .

В таблице 1 представлены расчеты энергии Гиббса G и температуры Хокинга T при различном выборе функции Φ_1 . Анализ полученных зависимостей показывает, что для первых трех видов функции характер зависимостей $T(S)$ и $G(S)$ не изменяется относительно НУТ-пространства: зависимости остаются однозначными функциями во всей области значений и не имеют особенностей при любых величинах параметра НУТ.

Таблица 1 – Зависимости энергии Гиббса G и температуры Хокинга T от энтропии S при различных модельных функциях Φ_1

Вид модельной функции Φ_1	$T(S), G(S)$
$\Phi_1 = c_0 + c_1 r_+$	$T = \frac{1}{2\left(\sqrt{-4\pi^2 a^2 + c_1^2 S^2 + 4\pi c_0 S} + c_1 S\right)},$ $G = \frac{\sqrt{-4\pi^2 a^2 + c_1^2 S^2 + 4\pi c_0 S} + c_1 S}{4\pi} - \frac{S}{2\left(\sqrt{-4\pi^2 a^2 + c_1^2 S^2 + 4\pi c_0 S} + c_1 S\right)}$
$\Phi_1 = c_0 + c_1 r_+ + c_2 r_+^2$	$T = \frac{\pi - c_2 S}{2\pi\left(\sqrt{S(c_1^2 S - 4c_0 c_2 S + 4\pi c_0)} - 4\pi a^2 (\pi - c_2 S) + c_1 S\right)},$ $G = \frac{\sqrt{S(c_1^2 S - 4c_0 c_2 S + 4\pi c_0)} - 4\pi a^2 (\pi - c_2 S) + c_1 S}{4(\pi - c_2 S)} - \frac{S(\pi - c_2 S)}{2\pi\left(\sqrt{S(c_1^2 S - 4c_0 c_2 S + 4\pi c_0)} - 4\pi a^2 (\pi - c_2 S) + c_1 S\right)}$
$\Phi_1 = c_0 + \frac{c_2}{r_+^2}$	$T = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}\sqrt{\sqrt{(\pi a^2 - c_0 S)^2 + 4\pi c_2 S} - \pi a^2 + c_0 S}},$ $G = \frac{\sqrt{(\pi a^2 - c_0 S)^2 + 4\pi c_2 S} - \pi a^2 + (c_0 - 1)S}{2\sqrt{2\pi}\sqrt{\sqrt{(\pi a^2 - c_0 S)^2 + 4\pi c_2 S} - \pi a^2 + c_0 S}}$
$\Phi_1 = c_0 + c_1 r_+^2 + \frac{c_2}{r_+^2}$	$T = \frac{\sqrt{\pi - c_1 S}}{2\sqrt{2\pi}\sqrt{\sqrt{(\pi a^2 - c_0 S)^2 + 4c_2 S(\pi - c_1 S)} - \pi a^2 + c_0 S}},$ $G = \frac{\pi\sqrt{(\pi a^2 - c_0 S)^2 + 4c_2 S(\pi - c_1 S)} - \pi^2 a^2 + \pi(c_0 - 1)S + c_1 S^2}{2\sqrt{2\pi}(\pi - c_1 S)\sqrt{\frac{\sqrt{(\pi a^2 - c_0 S)^2 + 4c_2 S(\pi - c_1 S)} - \pi a^2 + c_0 S}{\pi - c_1 S}}}$

В то же время, как видно из рисунка 2, для функции вида $\Phi_1 = c_0 + c_1 r_+^2 + \frac{c_2}{r_+^2}$

появляются области значений параметров, для которых зависимость $G(S)$ имеет с-образный характер.

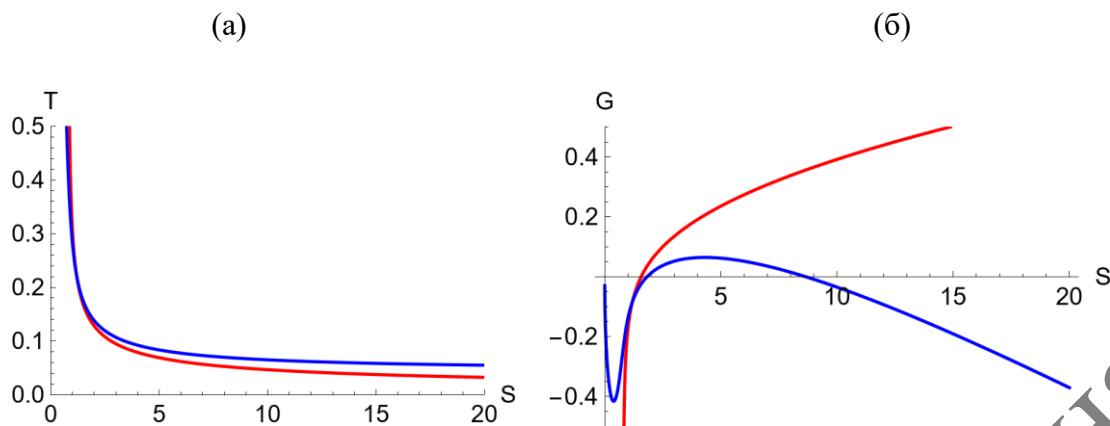


Рисунок 2 – Зависимость температуры Хокинга от энтропии Бекенштейна-Хокинга (а) и зависимость энергии Гиббса от энтропии для черной дыры с НУТ-метрикой (красная кривая)

и обобщенной НУТ метрикой ($\Phi_1 = c_0 + c_1 r_+^2 + \frac{c_2}{r_+^2}$, $c_1 < 0$) (синяя кривая)

Заключение. Исследована термодинамика черных дыр с НУТ-метрикой и аксиально-симметричной метрикой, обобщающей НУТ-метрику. Рассчитаны площади внешнего горизонта событий, и в соответствии с теоремой Хокинга получена энтропия Бекенштейна-Хокинга. На основании первого закона термодинамики для черных дыр найдены температура Хокинга и энергия Гиббса. Показано, что с ростом параметра НУТ энтропия черной дыры растет при том же значении температуры. Показано, что, в отличие от черной дыры НУТ для черной дыры с аксиально-симметричной обобщенной НУТ-метрикой имеются области значений метрических параметров, для которых зависимость энергии Гиббса от энтропии приобретает s-образный характер.

Список использованных источников

1. Cong, W. Thermodynamics of AdS black holes: critical behavior of the central charge / W. Cong, D. Kubizňák, R.B. Mann // Phys. Rev. Lett. – 2021. – Vol. 127. – Paper 091301.
2. Chaturvedi, P. Thermodynamic geometry and phase transitions of dyonic charged AdS black holes / P. Chaturvedi, A. Das, G. Sengupta // Eur. Phys. J. C. – 2017. – Vol. 77. – Paper 110.
3. Chakraborty, C. Geometric phase in Taub-NUT spacetime / C. Chakraborty, B. Mukhopadhyay // Eur. Phys. J. C. – 2023. – Vol. 83. – Paper 937.
4. Awad, A. Dyonic Taub-NUT-AdS: Unconstraint thermodynamics and phase Structure / A. Awad, E. Elkhateeb // Phys. Rev. D. – 2023. – Vol. 108. – Paper 064023.

О.В. Новикова, Г.Ю. Тюменков

Гомельский государственный университет имени Ф. Скорины

О ДЖОУЛЬ-ТОМСОНОВСКОМ РАСШИРЕНИИ ЗАРЯЖЕННОЙ АдС ЧЁРНОЙ ДЫРЫ И ЖИДКОСТИ БЕРТЛО

В работе рассмотрено джоуль-томсоновское расширение заряженной АдС черной дыры, а также жидкости Бертло. На основе уравнений состояния получены аналитические выражения для температур инверсии, построены инверсионные кривые в TP -плоскости и определены области охлаждения и нагрева. Дан краткий сравнительный анализ поведения заряженной АдС черной дыры и жидкости Бертло в данном процессе.

Ключевые слова: заряженная АдС чёрная дыра, уравнение состояния Бертло, расширение Джоуля-Томсона, изоэнталпический процесс, кривая инверсии, положительный эффект Джоуля-Томсона.

Введение. Начало термодинамике чёрных дыр было положено в классических работах Бекенстайна и Хокинга [1], [2]. Термодинамическое изучение чёрных дыр в пространстве анти-де-Ситтера (АдС), начатое в пионерской работе Хокинга и Пэйджа [3], было обобщено на случай наличия электрического заряда в работе [4], где авторы обнаружили аналогию между фазовыми диаграммами чёрных дыр и ван-дер-ваальсовской жидкости. Поэтому в последнее десятилетие делается акцент на возможность проведения сравнительного анализа поведения чёрных дыр и реальных жидкостей [5] в рамках процесса Джоуля-Томсона [6]. В данной работе мы изучим и сравним джоуль-томсоновское расширение заряженной АдС чёрной дыры и жидкости Бертло, причём, начнём с последней.

Джоуль-томсоновское расширение жидкости Бертло. Стандартное уравнение состояния Бертло [6] может быть записано в виде

$$P = \frac{k_B T}{\vartheta - b} - \frac{a}{T \vartheta^2}, \quad (1)$$

при условии введения параметра $\vartheta = V / N$, где V – объём, N – постоянное число частиц, P – давление, T – температура, k_B – постоянная Больцмана, а параметры сил парного межмолекулярного отталкивания и притяжения заданы заменами $b \Rightarrow b / N$, $a \Rightarrow a / N^2$.

В процессе Джоуля-Томсона газ при энталпии $H=Const$ из области высокого давления переходит в область более низкого давления, что сопровождается изменением его температуры. При понижении температуры (охлаждении) эффект Джоуля-Томсона считается положительным, при повышении температуры (нагревании) – отрицательным. Производная, характеризующая процесс, представима в виде

$$\left(\frac{\partial T}{\partial P} \right)_H = - \frac{\lambda}{c_p} \left(\frac{\partial \vartheta}{\partial P} \right)_T, \quad \lambda = \vartheta \left(\frac{\partial P}{\partial \vartheta} \right)_T + T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\vartheta, \quad (2)$$

где параметр процесса λ имеет знак, совпадающий со знаком эффекта. Уравнение (1) и определение (2) дают явный вид λ

$$\lambda = \frac{3a}{T\vartheta^2} - \frac{k_B Tb}{(\vartheta-b)^2}. \quad (3)$$

Области положительного и отрицательного эффекта разделяются инверсионной кривой, удовлетворяющей условию $\lambda=0$, при этом $T=T_i$. Тогда из (3) следуют выражение для T_i , а из него находим ϑ :

$$T_i = \sqrt{\frac{3a}{k_B b}} \frac{\vartheta-b}{\vartheta}, \quad \vartheta = \sqrt{\frac{3ab}{k_B}} \left(\sqrt{\frac{3a}{k_B b}} - T_i \right)^{-1}.$$

Подстановка ϑ в (1) приводит к уравнению

$$P = \sqrt{\frac{25ak_B}{3b^3}} - \frac{4k_B T_i}{3b} - \frac{a}{b^2 T_i},$$

которое переписывается в удобном виде

$$T_i^2 + \left(\frac{3b}{4k_B} P - \sqrt{\frac{75a}{16k_B b}} \right) T_i + \frac{3a}{4k_B b} = 0. \quad (4)$$

Решения уравнения (4) задают вид верхней и нижней кривых инверсии

$$T_i^{upper/lower} = \left(\sqrt{\frac{75a}{64k_B b}} - \frac{3b}{8k_B} P \right) \pm \sqrt{\left(\sqrt{\frac{75a}{64k_B b}} - \frac{3b}{8k_B} P \right)^2 - \frac{3a}{4k_B b}}, \quad (5)$$

а также позволяют выделить физическую область некомплексных и неотрицательных температур в TP -плоскости, что изображено на рисунке 1. Физические и максимальные значения давления следующие

$$0 \leq P \leq \sqrt{\frac{ak_B}{3b^3}}, \quad P_{max} = \sqrt{\frac{ak_B}{3b^3}}.$$

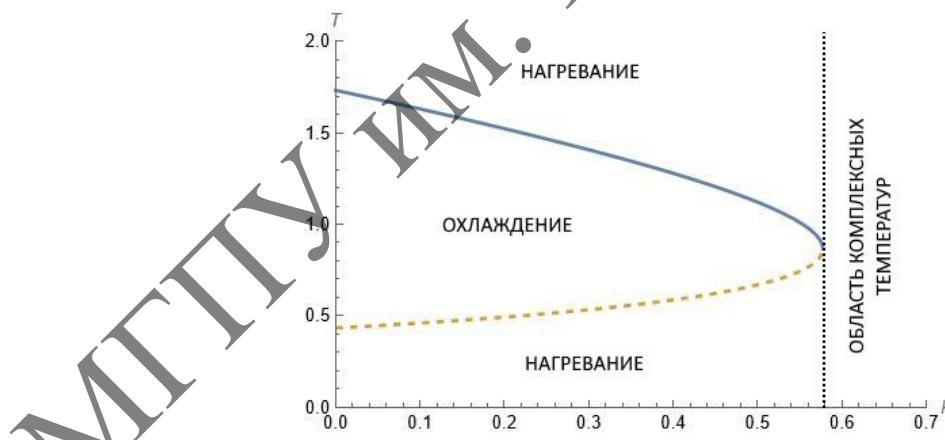


Рисунок 1 – Нижняя (пунктирная линия) и верхняя (непрерывная линия) кривые инверсии для уравнения состояния Бертло с фиксацией параметров $a=b=k_B=1$, аналогично [5]

При этом предельные значения температур также становятся известны:

$$T_i(P_{max}) = \sqrt{\frac{3a}{4k_B b}}, \quad T_i^{lower}(0) = \sqrt{\frac{3a}{16k_B b}}, \quad T_i^{upper}(0) = \sqrt{\frac{3a}{k_B b}}.$$

Ранее приведенная форма уравнения Бертло, полученная с использованием критических параметров

$$P_{kp} = \left(\frac{ak_B}{216b^3} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad T_{kp} = \left(\frac{8a}{27k_B b} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad V_{kp} = 3b$$

изучалась в рамках процесса Джоуля-Томсона в работе [7]. Полученная в этой работе приведенная кривая инверсии изображена на рисунке 2.

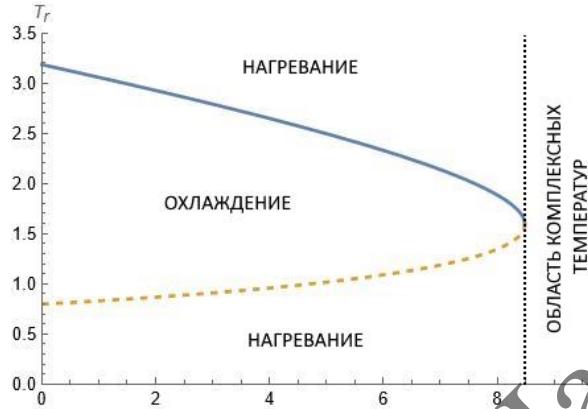


Рисунок 2 – Нижняя (пунктирная линия) и верхняя (непрерывная линия) кривые инверсии для приведенного уравнения состояния Бертло, согласно [7]

В этом случае верхние и нижние кривые инверсии имеют вид

$$T_{i,r}^{upper/lower}(P_{i,r}) = \frac{3}{64} \left[(30\sqrt{2} - P_{i,r}) \pm \sqrt{(30\sqrt{2} - P_{i,r})^2 - 1152} \right].$$

Идентификация на графиках областей нагревания и охлаждения в обоих случаях не требует явного вида изоэнталпийских кривых, а очевидна из (3), так как $\lambda_{T \rightarrow \infty} < 0$.

Джоуль-томсоновское расширение заряженной АдС чёрной дыры. Вначале кратко опишем заряженную АдС (анти-де ситтеровскую) чёрную дыру и основные её термодинамические свойства. Далее используем рациональную систему единиц с $G = \hbar = k_B = c = 1$. Геометрия четырёхмерного пространства в этом случае определяется метрикой

$$ds^2 = -f(r)dt^2 + f^{-1}(r)dr^2 + r^2d\Omega^2,$$

где $d\Omega^2 = d\theta^2 + \sin^2(\theta)d\varphi^2$ и функция $f(r)$ имеет вид

$$f(r) = 1 - \frac{2M}{r} + \frac{Q^2}{r^2} + \frac{r^2}{l^2}. \quad (6)$$

В выражении (6) l , M и Q - анти-де ситтеровские радиус, масса и заряд чёрной дыры. А радиус горизонта событий r_+ находится как наибольший корень уравнения $f(r_+) = 0$.

Масса чёрной дыры оказывается равной

$$M = \frac{r_+}{2} \left(1 + \frac{Q^2}{r_+^2} + \frac{r_+^2}{l^2} \right) \quad (7)$$

и в нашем случае сопоставляется с энталпиею [8] с дифференциалом

$$dM = TdS + VdP + \Phi dQ, \quad \Phi = Q / r_+. \quad (8)$$

Космологическая константа Λ связана с давлением, и в АдС случае она отрицательна

$$P = -\frac{\Lambda}{8\pi} = \frac{3}{8\pi l^2},$$

энтропия представима в виде $S = \pi r_+^2$, температура, согласно (8), приобретает вид

$$T = \left(\frac{\partial M}{\partial S} \right)_{P,Q} = \frac{l^2 (r_+^2 - Q^2) + 3r_+^4}{4\pi l^2 r_+^3}.$$

И, наконец, уравнение состояния вида $P = P(V, T)$ для заряженной АдС чёрной дыры записывается как

$$P = \frac{T}{2r_+} - \frac{1}{8\pi r_+^2} + \frac{Q^2}{8\pi r_+^4}, \quad r_+ = \left(\frac{3V}{4\pi} \right)^{\frac{1}{3}}. \quad (9)$$

Обратимся непосредственно к джоуль-томсоновскому расширению заряженной АдС чёрной дыры. Параметр λ теперь используем в классическом виде [6], аналог (2). Используя уравнение состояния (9) в определении (2) при условии инверсии $\lambda = 0$, мы получаем выражение для температуры инверсии

$$T_i = \frac{1}{3} \left(\frac{6}{\pi} \right)^{\frac{1}{3}} V^{\frac{1}{3}} \left[\left(\frac{\pi}{6} \right)^{\frac{1}{3}} \frac{Q^2}{V^{\frac{4}{3}}} - \left(\frac{6}{\pi} \right)^{\frac{1}{3}} \frac{1}{12V^{\frac{2}{3}}} + P_i \right] = \frac{Q^2}{4\pi r_+^3} - \frac{1}{12\pi r_+} + \frac{2P_i r_+}{3}, \quad (10)$$

которое можно упростить, сняв зависимость от r_+ , используя вид (9) на кривой инверсии,

$$T_i = \frac{1}{3} \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{\frac{2}{3}} V^{\frac{1}{3}} \left[8\pi \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{\frac{2}{3}} P_i + \frac{1}{V^{\frac{2}{3}}} - \left(\frac{4\pi}{3} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{Q^2}{V^{\frac{4}{3}}} \right] = -\frac{Q^2}{4\pi r_+^3} + \frac{1}{4\pi r_+} + 2P_i r_+. \quad (11)$$

Приравнивая (10) и (11), получаем условие в виде уравнения $8\pi P_i r_+^4 + 2r_+^2 - 3Q^2 = 0$, имеющего только один из четырёх положительный некомплексный корень

$$r_+ = \frac{1}{2\sqrt{2}} \sqrt{\frac{\sqrt{1+24P_i\pi Q^2} - 1}{P_i\pi}}. \quad (12)$$

Используя решение (12) в выражении (11), получаем окончательный вид кривой инверсии TP -плоскости. Семейство кривых инверсии (13) приведено на рисунке 3.

$$T_i = \frac{\sqrt{P_i}}{\sqrt{2\pi}} \frac{\left(1 + 16\pi P_i Q^2 - \sqrt{1 + 24\pi P_i Q^2} \right)}{\left(-1 + \sqrt{1 + 24\pi P_i Q^2} \right)^{\frac{3}{2}}}. \quad (13)$$

Заключение. В статье изучены расширение Джоуля–Томсона жидкости Бергло и заряженной AdS черной дыры. Масса черной дыры в AdS пространстве отождествлялась с энталпией и считалась постоянной. В обоих случаях получены кривые инверсии знака эффекта Джоуля–Томсона и определены области охлаждения и нагревания. Чёрные дыры всегда остывают выше кривой инверсии, что было показано для различных значений заряда Q и массы M (рисунок 4). Видно, что при низких температурах обе системы имеют «нехорошее» поведение: у чёрной дыры область охлаждения резко уменьшается, а у

жидкости Бергло отсутствует аналогично с жидкостью ван-дер-Ваальса [5]. Повышение же температуры до определенных значений приводит к обоюдному увеличивает области охлаждения, что радует. Однако точное наложение областей положительного эффекта сложно реализовать из-за использования различного масштабирования шкал. Однако эта проблема техническая, и в ближайшее время возможно её решение.

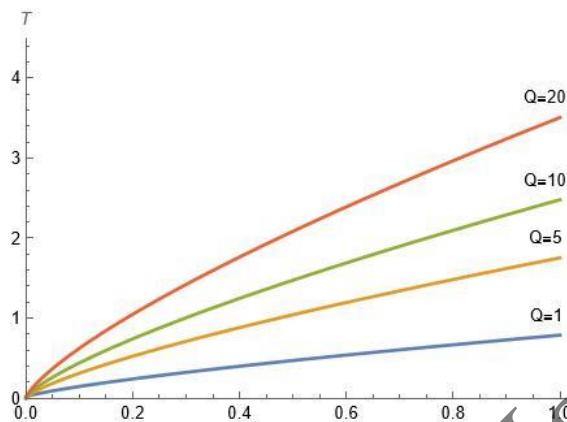


Рисунок 3 – Семейство кривых инверсии для заряженной АдС чёрной дыры, параметризованное зарядом Q

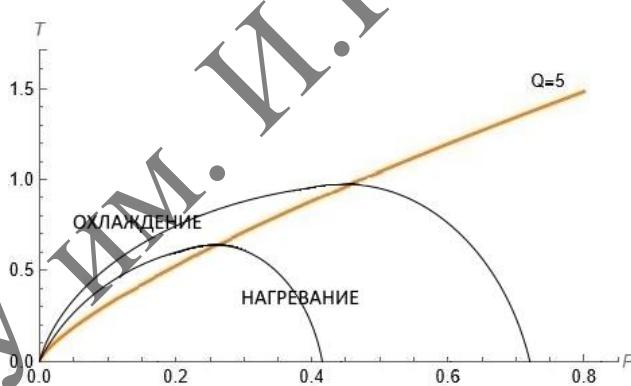


Рисунок 4 – Кривая инверсии для заряженной АдС чёрной дыры с $Q=5$, областями положительного (охлаждение) и отрицательного (нагревание) эффекта Джоуля-Томсона и видом изоэнталп

Список использованных источников

1. Bekenstein, J.D. Black holes and the second law / Bekenstein J.D. // Lett. Nuovo Cimento. – 1972. – V. 4. – P. 737–740.
2. Hawking, S.W. Black hole explosions? / S.W. Hawking // Nature. – 1974. – V. 248. – P. 30–31.
3. Hawking, S.W. Thermodynamics of black holes in anti-de Sitter space / S.W. Hawking, D.N. Page // Commun. Math. Phys. – 1983. – V. 87. – P. 577–588.
4. Charged AdS Black Holes and Catastrophic Holography / A. Chamblin, R. Emparan, C.V. Johnson, R.C. Myers // Phys. Rev. D. – 1999. – V. 60. – P. 064018.

5. Ökcü, Ö. Joule-Thomson expansion of the charged AdS black holes / Ö. Ökcü, E. Aydiner // Eur. Phys. J. C. – 2017. – V. 77. – Art. N. 24. – P. 1–7.
6. Румер, Ю.Б. Термодинамика, статистическая физика и кинетика / Ю.Б. Румер, М.Ш. Рывкин. – Новосибирск : НГУ, 2000. – 608 с.
7. Скачёк, Т.В. Об эффекте Джоуля-Томсона в газах Бертло и Дитеричи-І / Т.В. Скачёк, С.В. Станкевич, Г.Ю. Тюменков // Известия Гомельского государственного университета имени Ф. Скорины. – 2009. – № 4 (55). – Ч. 2. – С. 184–187.
8. Kastor, D. Enthalpy and the Mechanics of AdS Black Holes / D. Kastor, S. Ray, J. Traschen // Class. Quantum Gravity. – 2009. – V. 26. – P. 195011.

УДК 537.8

Е.М. Овсиюк¹, А.В. Ивашкевич², В.М. Редьков²

¹Мозырский государственный педагогический университет имени И.П. Шамякина

²Институт физики имени Б.И. Степанова НАН Беларуси

СПИНОРНЫЙ ПОДХОД В ТЕОРИИ МАКСВЕЛЛА

Изложен подход к электродинамике Максвелла на основе использования спинорного формализма.

Ключевые слова: спинорный формализм, электродинамика Максвелла, тетрадный формализм.

Цель работы – кратко изложить сущность подхода к электродинамике Максвелла на основе использования спинорного формализма [1], [2]. Введем необходимые спинорные обозначения, исходя из уравнения Дирака:

$$(i\gamma^a \partial_a - m)\Psi = 0, \quad \gamma^a = \begin{pmatrix} 0 & \bar{\sigma}^a \\ \sigma^a & 0 \end{pmatrix}, \quad \Psi = \begin{pmatrix} \xi^\alpha \\ \eta_{\dot{\alpha}} \end{pmatrix}, \quad \{\alpha, \dot{\alpha}\} = 1, 2;$$

$$\sigma^a = (I, \sigma^j), \quad \bar{\sigma}^a = (I, -\sigma^j).$$

В расщепленном виде имеем два уравнения

$$i\sigma^a \partial_a \xi = m\eta, \quad i\bar{\sigma}^a \partial_a \eta = m\xi. \quad (1)$$

Удобно приписать спинорные индексы элементам матриц Паули: $\sigma^a = (\sigma^a)_{\dot{\beta}\alpha}$, $\bar{\sigma}^a = (\bar{\sigma}^a)^{\beta\dot{\alpha}}$, тогда уравнения (1) записываются в спинорном ковариантном виде так:

$$i(\sigma^a \partial_a)_{\dot{\beta}\alpha} \xi^\alpha = m\eta_{\dot{\beta}}, \quad i(\bar{\sigma}^a \partial_a)^{\beta\dot{\alpha}} \eta_{\dot{\alpha}} = m\xi^\beta.$$

Электромагнитный тензор эквивалентен паре симметричных и комплексно-сопряженных друг другу спиноров: $F_{mn} \Leftrightarrow \{\xi^{\alpha\beta}, \eta_{\dot{\alpha}\dot{\beta}}\}$; при этом 8 уравнений Максвелла записываются как

$$(\sigma^a \partial_a)_{\dot{\rho}\alpha} \xi^{\alpha\beta} = (\sigma^b)_{\dot{\rho}\alpha} \epsilon^{\alpha\beta} J_b, \quad (\bar{\sigma}^a \partial_a)^{\rho\dot{\alpha}} \eta_{\dot{\alpha}\dot{\beta}} = (\bar{\sigma}^b)^{\rho\dot{\alpha}} \epsilon_{\dot{\alpha}\dot{\beta}} J_b; \quad (2)$$

второе уравнение является комплексно-сопряженным первому. В (2) использованы спинорные метрические матрицы:

$$(\epsilon_{\alpha\beta}) = i\sigma^2, \quad (\epsilon^{\alpha\beta}) = -i\sigma^2, \quad (\epsilon_{\dot{\alpha}\dot{\beta}}) = i\sigma^2, \quad (\epsilon^{\dot{\alpha}\dot{\beta}}) = -i\sigma^2.$$

Чтобы показать эквивалентность этих спинорных уравнений обычным векторным уравнениям Максвелла, удобнее перейти к безындексным обозначениям. Для этого учтем равенства $(\xi^{\alpha\beta}) = \Sigma^{mn} F_{mn} \sigma^2$, $(\eta_{\dot{\alpha}\dot{\beta}}) = -\bar{\Sigma}^{mn} F_{mn} \sigma^2$, где (см. [1])

$$\Sigma^{mn} = \frac{1}{4} (\bar{\sigma}^m \sigma^n - \bar{\sigma}^n \sigma^m), \quad \bar{\Sigma}^{mn} = \frac{1}{4} (\sigma^m \bar{\sigma}^n - \sigma^n \bar{\sigma}^m).$$

Тогда уравнения (2) записываются таким образом:

$$\sigma^a \partial_a \Sigma^{mn} F_{mn} = -\sigma^b J_b, \quad \bar{\sigma}^a \partial_a \bar{\Sigma}^{mn} F_{mn} = -\bar{\sigma}^b J_b. \quad (3)$$

Будем учитывать тождества

$$\begin{aligned} \Sigma^{mn} F_{mn} &= \sigma^1 (F_{01} - iF_{23}) + \sigma^2 (F_{02} - iF_{31}) + \sigma^3 (F_{03} - iF_{12}), \\ \bar{\Sigma}^{mn} F_{mn} &= \sigma^1 (-F_{01} - iF_{23}) + \sigma^2 (-F_{02} - iF_{31}) + \sigma^3 (-F_{03} - iF_{12}); \end{aligned}$$

в обозначениях

$$F_{01} = -E^1, F_{02} = -E^2, F_{03} = -E^3, F_{23} = B^1, F_{31} = B^2, F_{12} = B^3$$

они записываются короче:

$$\begin{aligned} \Sigma^{mn} F_{mn} &= -\sigma^1 (E^1 + iB^1) - \sigma^2 (E^2 + iB^2) - \sigma^3 (E^3 + iB^3) = -\sigma^j a_j, \\ \bar{\Sigma}^{mn} F_{mn} &= \sigma^1 (E^1 - iB^1) + \sigma^2 (E^2 - iB^2) + \sigma^3 (E^3 - iB^3) = +\sigma^j b_j. \end{aligned} \quad (4)$$

Таким образом, имеем симметричные спиноры:

$$(\xi^{\alpha\beta}) = \begin{vmatrix} -i(a_1 - ia_2) & ia_3 \\ ia_3 & +i(a_1 + ia_2) \end{vmatrix}, \quad (\eta_{\dot{\alpha}\dot{\beta}}) = \begin{vmatrix} -i(b_1 - ib_2) & ib_3 \\ ib_3 & i(b_1 + ib_2) \end{vmatrix}.$$

Учитывая (4), уравнения (3) можно представить в виде

$$(\partial_0 + \sigma^l \partial_l) (\sigma^k a_k) = J_0 + \sigma^j J_j, \quad (\partial_0 - \sigma^l \partial_l) (\sigma^k b_k) = -J_0 + \sigma^j J_j. \quad (5)$$

Из (5), воспользовавшись законом умножения матриц Паули, получим

$$\sigma^n \partial_0 a_n + (\delta_{lk} + i\epsilon_{nlk} \sigma^n) \partial_l a_k = J_0 + \sigma^n J_n,$$

$$\sigma^n \partial_0 b_n - (\delta_{lk} + i\epsilon_{nlk} \sigma^n) \partial_l b_k = -J_0 + \sigma^n J_n.$$

Отсюда следуют 4 уравнения:

$$\partial_l a_l = J_0, \quad \partial_0 a_n + i\epsilon_{nlk} \partial_l a_k = J_n,$$

$$\partial_l b_l = J_0, \quad \partial_0 b_n - i\epsilon_{nlk} \partial_l b_k = J_n,$$

или

- $$(1) \quad \partial_l (E^l + iB^l) = J_0,$$
- $$(2) \quad \partial_0 (E^l + iB^l) + i\epsilon_{nlk} \partial_l (E^k + iB^k) = J_n,$$
- $$(1') \quad \partial_l (E^l - iB^l) = J_0,$$
- $$(2') \quad \partial_0 (E^l - iB^l) - i\epsilon_{nlk} \partial_l (E^k - iB^k) = J_n.$$

Складывая и вычитая эти уравнения попарно, находим

$$1+1', \quad \partial_l E^l = J_0, \quad 1-1', \quad \partial_l B^l = 0,$$

$$2+2', \quad \partial_0 E^n - \epsilon_{nlk} \partial_l B^k = J_k, \quad 2-2', \quad \partial_0 B^n + \epsilon_{nlk} \partial_l E^k = 0,$$

что можно отождествить с векторной формой уравнений Максвелла:

$$\operatorname{div} E = J^0, \quad \operatorname{div} B = 0,$$

$$\operatorname{rot} B = \partial_0 E + J, \quad \operatorname{rot} E = -\partial_0 B,$$

где $E = (E^n)$, $B = (B^n)$, $J^0 = J_0$, $J = (J^n) = (-J_n)$.

Теперь кратко рассмотрим вопрос об обобщении этой спинорной формы уравнений Максвелла на случай использования криволинейных координат (либо в плоском пространстве Минковского, либо в моделях пространства с превдоримановой геометрией).

Такие общековариантные уравнения Максвелла в спинорном формализме можно получить, применив рецепт, используемый при обобщении уравнения Дирака (подробнее обозначения см. в [1]):

$$i\sigma^\alpha(x) [\partial_\alpha + \Sigma_\alpha(x)] \xi(x) = m\eta(x),$$

$$i\bar{\sigma}^\alpha(x) [\partial_\alpha + \bar{\Sigma}_\alpha(x)] \eta(x) = m\xi(x).$$

Уравнения Максвелла для двух спиноров 2-го ранга обобщаются таким образом (для общности учитываем возможные источники электромагнитного поля):

$$i\sigma^\alpha(x) [\partial_\alpha + \Sigma_\alpha(x) \otimes I + I \otimes \Sigma_\alpha(x)] \xi(x) = \sigma^\beta(x) (-i\sigma^2) J_\beta(x),$$

$$i\bar{\sigma}^\alpha(x) [\partial_\alpha + \bar{\Sigma}_\alpha(x) \otimes I + I \otimes \bar{\Sigma}_\alpha(x)] \eta(x) = \sigma^\beta(x) (+i\sigma^2) J_\beta(x). \quad (6)$$

Как и в пространстве Минковского, второе уравнение в (6) является комплексно-сопряженным первому, поэтому достаточно анализировать только первое. Далее для простоты будем рассматривать уравнение без источников

$$\sigma^\alpha(x) [\partial_\alpha + \Sigma_\alpha(x) \otimes I + I \otimes \Sigma_\alpha(x)] \xi(x) = 0. \quad (7)$$

В (7) величина $\xi(x)$ представляет симметричный спинор 2-го ранга, ее можно рассматривать как симметричную комплексную (2×2) -матрицу. Уравнение (7) удобнее записывать с использованием коэффициентов вращения Риччи $\gamma_{abc}(x)$ так:

$$\left[\sigma^c e_{(c)}^\alpha(x) \partial_\alpha + \sigma^c \left(\frac{1}{2} \Sigma^{ab} \otimes I + I \otimes \frac{1}{2} \Sigma^{ab} \right) \gamma_{abc}(x) \right] \xi(x) = 0.$$

Рассмотрим простой пример сферических координат $x^\alpha = (t, \theta, \phi, r)$ в пространстве Минковского

$$dS^2 = dt^2 - r^2(d\theta^2 + \sin^2\theta d\phi^2) - dr^2, \quad \varphi = (1 - r^2);$$

соответствующая этой метрике тетрада может быть выбрана такой:

$$e_{(0)\alpha} = (1, 0, 0, 0), \quad e_{(3)\alpha} = (0, 0, 0, 1), \quad e_{(1)\alpha} = (0, \frac{1}{r}, 0, 0), \quad e_{(2)\alpha} = (0, 0, \frac{1}{r \sin \theta}, 0),$$

тогда спинорное уравнение Максвелла примет вид

$$\begin{aligned} & \left\{ \frac{\partial}{\partial t} + \sigma^3 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{i}{r} \left(-\sigma^1 \frac{\sigma^2 \otimes I + I \otimes \sigma^2}{2} + \sigma^2 \frac{\sigma^1 \otimes I + I \otimes \sigma^1}{2} \right) + \right. \\ & \left. + \frac{1}{r} \left[\sigma^1 \partial_\theta F - i \sigma^2 \frac{i \partial_\phi + \cos \theta (\sigma^3 \otimes I + I \otimes \sigma^3) / 2}{\sin \theta} \right] \right\} \xi = 0. \end{aligned}$$

Следует специально отметить, что в обычной схеме уравнения Максвелла содержат 8 дифференциальных уравнений для 6-ти вещественных функций; спинорная форма заменяет их на 4 уравнения для трех комплексно-значных функций; фактически они строятся как комбинация из двух 3-векторов ($E + icB$) (при этом, как показывает анализ конкретных примеров, из 4-х уравнения только три являются независимыми).

Список использованных источников

1. Редьков, В.М. Поля частиц в римановом пространстве и группа Лоренца / В.М. Редьков. – Минск : Белорусская наука, 2009. – 486 с.
2. Спинорные методы в квантовой механике частиц с высшими спинами / А.В. Ивашкевич, Я.А. Войнова, Н.Г. Крылова [и др.]. – Минск : Белорусская наука, 2024. – 433 с.

УДК 537.8

Е.М. Овсиюк¹, А.В. Ивашкевич², В.М. Редьков²

¹Мозырский государственный педагогический университет имени И.П. Шамякина

²Институт физики имени Б.И. Степанова НАН Беларусь

РАЗДЕЛЕНИЕ ПЕРЕМЕННЫХ В СПИНОРНЫХ УРАВНЕНИЯХ МАКСВЕЛЛА, СФЕРИЧЕСКИЕ КООРДИНАТЫ

Развит метод построения решений спинорных уравнений Максвелла в пространствах с псевдоримановой геометрической структурой. Метод основан на использовании тетрадного формализма, при этом для определенности использована геометрия пространства де Ситтера. В качестве простого примера рассмотрено основное радиальное уравнение для электромагнитного поля в случае пространства Минковского.

Ключевые слова: спинорные уравнения Максвелла, тетрадный формализм, сферическая симметрия, разделение переменных, точные решения.

Будем рассматривать спинорное уравнение Максвелла в сферической системе координат (для определенности выберем случай пространства де Ситтера; меняя функцию φ можно перейти к другим геометрическим моделям: например, к метрике Шварцшильда):

$$dS^2 = \varphi dt^2 - r^2(d\theta^2 + \sin^2\theta d\phi^2) - \frac{dr^2}{\varphi}, \quad \varphi = (1-r^2).$$

Выбираем диагональную сферическую тетраду:

$$x^\alpha = (t, \theta, \phi, r), \varphi = 1 - r^2, \varphi' = \frac{d\varphi}{dr}, \quad e_{(0)\alpha} = (\frac{1}{\sqrt{\varphi}}, 0, 0, 0),$$

$$e_{(3)\alpha} = (0, 0, 0, \sqrt{\varphi}), \quad e_{(1)\alpha} = (0, \frac{1}{r}, 0, 0), \quad e_{(2)\alpha} = (0, 0, \frac{1}{r \sin \theta}, 0),$$

тогда спинорное уравнение Максвелла примет вид

$$\begin{aligned} & \left\{ \frac{\partial}{\partial t} + \varphi \left[\sigma^3 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{i}{r} \left(-\sigma^1 \frac{\sigma^2 \otimes I + I \otimes \sigma^2}{2} + \sigma^2 \frac{\sigma^1 \otimes I + I \otimes \sigma^1}{2} \right) + \frac{\varphi'}{2\varphi} \sigma^3 \otimes I + I \otimes \sigma^3 \right] + \right. \\ & \left. + \frac{\sqrt{\varphi}}{r} \left[\sigma^1 \partial_\theta F - i \sigma^2 \frac{i \partial_\phi + \cos \theta (\sigma^3 \otimes I + I \otimes \sigma^3)/2}{\sin \theta} \right] \right\} \xi = 0. \end{aligned}$$

Будем строить решения со сферической симметрией, диагонализируя операторы квадрата и третьей проекции полного углового момента. В выбранном базисе компоненты полного углового момента имеют шредингеровский вид:

$$J_1 = l_1 + \frac{\cos \phi}{\sin \theta} S_3, \quad J_2 = l_2 + \frac{\sin \phi}{\sin \theta} S_3, \quad J_3 = -i \frac{\partial}{\partial \phi},$$

где матрица третьей проекции спина для спинора 2-го ранга равна

$$S_3 = ij^{12} = \frac{1}{2}(\sigma^3 \otimes I + I \otimes \sigma^3), \quad \sigma^3 = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}.$$

При этом угловая зависимость в решениях будет выделяться с помощью D -функций Вигнера. Следовательно, подстановка для спинора $\xi(x)$, являющегося собственной функцией для двух операторов $(J_1^2 + J_2^2 + J_3^2)\xi = j(j+1)\xi$, $J_3\xi = m\xi$, должна быть такой:

$$\xi(x) = e^{-ict} \begin{vmatrix} f(r)D_{-1} & h(r)D_0 \\ h(r)D_0 & g(r)D_{+1} \end{vmatrix}, \quad D_\sigma = D_{-m, -\sigma}^j(\phi, \theta, 0); \quad (1)$$

введены три зависящие от переменной r неизвестные функции f, g, h ; в обозначении функций Вигнера индексы $\{^j, _{-m}\}$ для краткости опускаются.

Подстановка (1) верна только для следующих значений квантовых чисел: $j = 1, 2, 3, \dots$; $m = -j, -j+1, \dots, j-1, j$; для функций с $j=0$ исходная подстановка должна быть более простой (в ней нет зависимости от угловых переменных):

$$j=0, \quad \xi(x) = e^{-ict} \begin{vmatrix} 0 & h(r) \\ h(r) & 0 \end{vmatrix}.$$

Теперь нужно найти уравнения для радиальных функций, исходя из основного уравнения (3). Используя известные формулы для функций Вигнера:

$$\begin{aligned}\partial_\theta D_{-1} &= \frac{1}{2}(bD_{-2} - aD_0), \quad (-m + \cos\theta)\sin^{-1}\theta D_{-1} = \frac{1}{2}(-bD_{-2} - aD_0), \\ \partial_\theta D_{+1} &= \frac{1}{2}(aD_0 - bD_{+2}), \quad (m + \cos\theta)\sin^{-1}\theta D_{+1} = \frac{1}{2}(aD_0 + bD_{+2}), \\ \partial_\theta D_0 &= \frac{1}{2}(aD_{-1} - aD_{+1}), \quad m\sin^{-1}\theta D_0 = \frac{1}{2}(aD_{-1} + aD_{+1}), \\ a &= \sqrt{j(j+1)}, \quad b = \sqrt{(j-1)(j+1)},\end{aligned}$$

получаем

$$\Sigma_{\theta,\phi}\xi = a \begin{vmatrix} hD_{-1} & gD_0 \\ -fD_0 & -hD_{+1} \end{vmatrix}.$$

Приводим основное уравнение к виду

$$\begin{aligned}& \begin{vmatrix} -i\epsilon f D_{-1} & -i\epsilon h D_0 \\ -i\epsilon h D_0 & -i\epsilon g D_{+1} \end{vmatrix} + \varphi \left\{ \begin{vmatrix} f D_{-1} & h' D_0 \\ -h' D_0 & -g' D_{+1} \end{vmatrix} + \right. \\ & \left. + \frac{1}{r} \begin{vmatrix} f D_{-1} & 2h D_0 \\ -2h D_0 & -g D_{+1} \end{vmatrix} + \frac{\varphi'}{2\varphi} \begin{vmatrix} f D_{-1} & 0 \\ 0 & -g D_{+1} \end{vmatrix} \right\} + \frac{\sqrt{\varphi}}{r} a \begin{vmatrix} h D_{-1} & g D_0 \\ -f D_0 & -h D_{+1} \end{vmatrix} = 0.\end{aligned}$$

Отсюда следуют четыре радиальных уравнения:

$$\begin{aligned}-i\epsilon f + \varphi \left(\frac{d}{dr} + \frac{1}{r} + \frac{\varphi'}{2\varphi} \right) f + a \frac{\sqrt{\varphi}}{r} h &= 0, \quad +i\epsilon g + \varphi \left(\frac{d}{dr} + \frac{1}{r} + \frac{\varphi'}{2\varphi} \right) g + a \frac{\sqrt{\varphi}}{r} h = 0, \\ -i\epsilon h + \varphi \left(\frac{d}{dr} + \frac{2}{r} \right) h + a \frac{\sqrt{\varphi}}{r} g &= 0, \quad +i\epsilon h + \varphi \left(\frac{d}{dr} + \frac{2}{r} \right) h + a \frac{\sqrt{\varphi}}{r} f = 0;\end{aligned} \quad (2)$$

напоминаем, что $a = \sqrt{j(j+1)}$. Уравнения для случая $j = 0$ можно найти из (2), если учесть $f = 0, g = 0$ и формально положить $a = 0$ (фактически это следует из равенства $\Sigma_{\theta,\phi}\Psi_{j=0} = 0$). Так, получаем

$$0 = 0, \quad 0 = 0, \quad -i\epsilon h + \varphi \left(\frac{d}{dr} + \frac{2}{r} \right) h = 0, \quad +i\epsilon h + \varphi \left(\frac{d}{dr} + \frac{2}{r} \right) h = 0.$$

Очевидно, что для этой системы существует только одно решение: $h(r) = 0$. Следовательно, уравнения Максвелла не допускают существования сферически-симметричных решений с $j = 0$.

Если в системе (2) сложить и вычесть уравнения 3 и 4, то получим

$$2\varphi \left(\frac{d}{dr} + \frac{2}{r} \right) h + a \frac{\sqrt{\varphi}}{r} (f + g) = 0, \quad h = \frac{ia}{2\epsilon} \frac{\sqrt{\varphi}}{r} (f - g). \quad (3)$$

Легко убедиться, что первое уравнение в (3) превратится в тождество $0 = 0$, если из третьего и четвертого уравнений из (2) выразить функции f и g через функцию h . Это означает, что независимыми являются только три уравнения:

$$h = \frac{ia}{2\epsilon} \frac{\sqrt{\varphi}}{r} (f - g),$$

$$-i\epsilon f + \varphi \left(\frac{d}{dr} + \frac{1}{r} + \frac{\varphi'}{2\varphi} \right) f + a \frac{\sqrt{\varphi}}{r} h = 0, \quad +i\epsilon g + \varphi \left(\frac{d}{dr} + \frac{1}{r} + \frac{\varphi'}{2\varphi} \right) g + a \frac{\sqrt{\varphi}}{r} h = 0. \quad (4)$$

С помощью первого уравнения в (4) из двух оставшихся уравнений можно исключить переменную h :

$$\left(\frac{d}{dr} + \frac{1}{r} + \frac{\varphi'}{2\varphi} - \frac{i\epsilon}{\varphi} \right) f + \frac{ia^2}{2\epsilon r^2} (f - g) = 0, \quad \left(\frac{d}{dr} + \frac{1}{r} + \frac{\varphi'}{2\varphi} + \frac{i\epsilon}{\varphi} \right) g + \frac{ia^2}{2\epsilon r^2} (f - g) = 0. \quad (5)$$

Сложим и вычтем уравнения в системе (5), попутно перейдем к новым комбинациям функций: $f + g = F, f - g = G$; тогда получим

$$\left(\frac{d}{dr} + \frac{1}{r} + \frac{\varphi'}{2\varphi} - \frac{i\epsilon}{\varphi} \right) F - \frac{i\epsilon}{\varphi} G + \frac{ia^2}{\epsilon r^2} G = 0, \quad \left(\frac{d}{dr} + \frac{1}{r} + \frac{\varphi'}{2\varphi} + \frac{i\epsilon}{\varphi} \right) G - \frac{i\epsilon}{\varphi} F = 0, \quad h = \frac{ia}{2\epsilon} \frac{\sqrt{\varphi}}{r} G. \quad (6)$$

Система (6) упрощается подстановками

$$F = \frac{1}{r\sqrt{\varphi}} \bar{F}, \quad G = \frac{1}{r\sqrt{\varphi}} \bar{G};$$

в результате приходим к

$$i\epsilon \frac{d}{dr} \bar{F} + \left(\frac{\epsilon^2}{\varphi} - \frac{a^2}{r^2} \right) \bar{G} = 0, \quad \varphi \frac{d}{dr} \bar{G} = i\epsilon \bar{F}.$$

Отсюда, исключая функцию \bar{F} , находим уравнение 2-го порядка для основной переменной \bar{G} :

$$\left(\frac{d}{dr} \varphi \frac{d}{dr} + \frac{\epsilon^2}{\varphi} - \frac{a^2}{r^2} \right) \bar{G} = 0,$$

или (учтем, что $a^2 = j(j+1)$)

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\varphi'}{\varphi} \frac{d}{dr} + \frac{\epsilon^2}{\varphi^2} - \frac{j(j+1)}{r^2 \varphi} \right) \bar{G} = 0, \quad \bar{F}(r) = \frac{\varphi(r)}{i\epsilon} \frac{d}{dr} \bar{G}(r). \quad (7)$$

В качестве простого примера рассмотрим основное радиальное уравнение для электромагнитного поля в случае пространства Минковского. Вычисления по разделению переменных повторять нет необходимости, достаточно положить $\varphi = 1$, тогда вместо (7) получаем уравнение

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \epsilon^2 - \frac{j(j+1)}{r^2} \right) \bar{G} = 0. \quad (8)$$

Это уравнение имеет две особые точки: точка $r = 0$ – регулярная, точка $r = \infty$ – нерегулярная ранга 2; оно принадлежит классу вырожденного гипергеометрического уравнения. В окрестности точки $r = 0$ возможны две асимптотики: $\bar{G} \sim r^{j+1}, r^{-j}$.

Чтобы найти асимптотики в окрестности точки $r = \infty$, преобразуем уравнение к обратной переменной $R = 1/r$:

$$\left(\frac{d^2}{dR^2} + \frac{2}{R} \frac{d}{dR} + \frac{\epsilon^2}{R^4} - \frac{j(j+1)}{R^2}\right) \bar{G} = 0.$$

В соответствии с рангом сингулярной точки $R=0$ асимптотику следует искать в виде $\bar{G} = R^A e^{B/R}$, далее получаем

$$\frac{A(A-1)}{R^2} - \frac{BA}{R^3} - \frac{(A-2)B}{R^3} + \frac{B^2}{R^4} + \frac{2A}{R^2} - \frac{2B}{R^3} + \frac{\epsilon^2}{R^4} - \frac{j(j+1)}{R^2} = 0.$$

Оставляем только главные сингулярные члены:

$$-\frac{BA}{R^3} - \frac{(A-2)B}{R^3} + \frac{B^2}{R^4} - \frac{2B}{R^3} + \frac{\epsilon^2}{R^4} = 0,$$

откуда следуют возможные значения для параметров A и B :

$$A = 0, \quad B = \pm i\epsilon, \quad \bar{G}(r \rightarrow \infty) \sim e^{\pm i\epsilon r/R} = e^{\pm i\epsilon r}.$$

Установим связь уравнения (8) с вырожденным гипергеометрическим уравнением. Для этого сделаем подстановку, учитывающую поведение решений около особых точек: $\bar{G} = r^a r^{br} g(r)$; требуя $a = j+1, -j$, $b = \pm i\epsilon$, получаем

$$r \frac{d^2}{dr^2} + (2a + 2br) \frac{d}{dr} g + 2abg = 0,$$

откуда после преобразования к переменной $x = -2br$ приходим к

$$x \frac{d^2}{dx^2} + (2a - x) \frac{d}{dx} g - ag = 0$$

что отождествляется с вырожденным гипергеометрическим уравнением

$$x \frac{d^2 F}{dx^2} + (c - x) \frac{dF}{dx} - aF = 0, \quad c = 2a.$$

Удобно зафиксировать параметры a и b :

$$a = j+1, \quad b = i\epsilon, \quad x = -2br = -2i\epsilon r,$$

тогда регулярное в точке $x = 0 (r = 0)$ решение может быть выбрано в виде

$$y_1(x) = \Phi(a, 2a; x), \quad \bar{G}_1(x) = x^{j+1} e^{-x/2} \Phi(a, c; x), \quad a = j+1, c = 2a.$$

Если воспользоваться тождеством Куммера $\Phi(a, c; x) = e^x \Phi(c - a, c; -x)$, то можно убедиться в вещественности полного решения (с точностью до множителя ± 1):

$$\begin{aligned} \bar{G}_1(x) &= x^{j+1} e^{-x/2} \Phi(j+1, 2j+2; x) = \\ &= (-1)^{j+1} (x^*)^{j+1} e^{-x^*/2} \Phi(j+1, 2j+2; x^*), \quad x^* = (-x). \end{aligned}$$

Поскольку параметр $c = 2(j+1)$ принимает целые значения, сингулярное в нуле решение может быть построено на основе другой функции:

$$g(x) = x^a e^{-x/2} \Psi(a, c; x), \quad a = -j, c = -2j;$$

поведение этого решения около нуля задается равенством

$$g(x \rightarrow 0) = x^{-j} \frac{\Gamma(1-c)}{\Gamma(a-c+1)} = x^{-j} \frac{\Gamma(1+2j)}{\Gamma(j+1)}.$$

Описание двух решений можно сделать более простым и симметричным, если преобразовать уравнение (8) к форме уравнения Бесселя. Для этого воспользуемся подстановкой

$$\bar{G}(r) = \sqrt{r} g(r), \quad \frac{d^2 \bar{G}}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d\bar{G}}{dr} + \left(\epsilon^2 - \frac{(j+1/2)^2}{r^2} \right) \bar{G} = 0,$$

отсюда после преобразования к переменной $z = \epsilon r$ приходим к уравнению Бесселя

$$\bar{G}(r) = \sqrt{r} g(r), \quad \frac{d^2 \bar{G}}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{d\bar{G}}{dz} + \left(1 - \frac{p^2}{z^2} \right) \bar{G} = 0, \quad p = (j+1/2). \quad (9)$$

Два независимых решения уравнения (9) – функции Бесселя $J_p(z)$ и $J_{-p}(z)$ – можно выразить через вырожденные гипергеометрические функции:

$$J_p(z) = \left(\frac{z}{2}\right)^{+p} \frac{e^{iz}}{\Gamma(1+p)} \Phi(p+1/2, 2p+1; -2iz),$$

$$J_{-p}(z) = \left(\frac{z}{2}\right)^{-p} \frac{e^{iz}}{\Gamma(1-p)} \Psi(-p+1/2, -2p+1; -2iz);$$

очевидно, что это вещественные функции. Известны явные разложения функций Бесселя в степенные ряды

$$J_{+p}(z) = \left(\frac{z}{2}\right)^{+p} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n! \Gamma(n+1+p)} \left(\frac{iz}{2}\right)^{2n}, \quad J_{-p}(z) = \left(\frac{z}{2}\right)^{-p} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n! \Gamma(n+1-p)} \left(\frac{iz}{2}\right)^{2n}.$$

Приведем главные члены асимптотик для функций Бесселя на бесконечности

$$J_{+p}(|z| \rightarrow \infty) = \sqrt{2\pi z} \cos[z - (12 + p)\pi/2], \quad J_{-p}(|z| \rightarrow \infty) = \sqrt{2\pi z} \cos[z - (12 - p)\pi/2].$$

Список использованных источников

1. Сpinорные методы в квантовой механике частиц с высшими спинами / А.В. Ивашкевич, Я. А. Войнова, Н. Г. Крылова [и др.]. – Минск : Белорусская наука, 2024. – 433 с.
2. Редьков, В.М. Тетрадный формализм, сферическая симметрия и базис Шредингера / В.М. Редьков. – Минск : Белорусская наука, 2011. – 339 с.

МАССИВНЫЕ КАЛИБРОВОЧНО-ИНВАРИАНТНЫЕ ПОЛЯ В ТЕОРИИ РЕЛЯТИВИСТСКИХ ВОЛНОВЫХ УРАВНЕНИЙ

Предлагаются калибровочно-инвариантные релятивистские квантово-механические уравнения, описывающие микрообъекты с ненулевой массой и спинами $s = 0, 1$. Волновая функция этих уравнений содержит расширенное число компонент волновой функции (одиннадцать) по сравнению с известными уравнениями Даффина – Кеммера.

Ключевые слова: релятивистские волновые уравнения, калибровочная инвариантность, волновая функция, группа Лоренца, спин, микрообъект.

Введение. Как известно, релятивистски-инвариантное описание микрообъектов с произвольным спином может быть сведено к системе дифференциальных уравнений первого порядка с постоянными коэффициентами, представимой в матрично-дифференциальной форме [1]

$$(\Gamma_\mu \partial_\mu + \Gamma_0) \Psi(x) = 0 \quad (\mu = 1 \div 4). \quad (1)$$

За формой (1) в литературе закрепилось название обобщенного релятивистского волнового уравнения (РВУ) [2]. Здесь $\Psi(x)$ – многокомпонентная волновая функция, преобразующаяся по некоторому приводимому представлению T группы Лоренца; Γ_μ и Γ_0 – квадратные матрицы.

РВУ (1) может описывать как массивный, так и безмассовый микрообъект. В случае, когда матрица Γ_0 – неособенная ($\|\Gamma_0\| \neq 0$), оно описывает микрообъект с ненулевой массой. Если же матрица Γ_0 – особенная, при использовании минимального необходимого набора неприводимых представлений в T уравнение (1) описывает безмассовый микрообъект [1; 2].

Существенным различием этих двух типов РВУ является то, что в случае безмассового микрообъекта часть компонентов волновой функции $\Psi(x)$ являются ненаблюдаемыми (потенциалы), а часть – наблюдаемыми (напряженности). На потенциалах можно задать так называемые калибровочные преобразования II рода и ввести дополнительные условия, исключающие “лишние” компоненты функции Ψ . При описании же микрообъектов с ненулевой массой указанное разграничение компонентов волновой функции не имеет места.

Однако с открытием всё большего числа новых частиц возникает потребность расширения подхода теории РВУ за счет включения в неё массивных уравнений с особенной матрицей Γ_0 .

Основная часть. Авторами проведено исследование данного вопроса, позволяющее сформулировать следующие общие положения:

(а) для построения калибровочно-инвариантных РВУ с особенной матрицей Γ_0 , которые могли бы описывать микрообъекты с заданным спином и ненулевой массой, необходимо использовать расширенный (по сравнению с минимально необходимым при

описании спина s) набор неприводимых зацепляющихся представлений группы Лоренца в пространстве представления волновой функции $\Psi(x)$;

(в) достаточным условием получения таких РВУ является наличие в произведении $\Gamma_0 \Psi$ набора лоренцевских ковариантов, обеспечивающего возможность построения обычного (с неособенной Γ_0) массивного РВУ для микрообъекта с заданным спином s .

Приведем примеры, подтверждающие и разъясняющие сказанное.

Рассмотрим схему зацеплений неприводимых представлений группы Лоренца

$$(0,0) \oplus \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \oplus (0,1) \oplus (1,0), \quad (2)$$

где представление $(0,0)$ соответствует скаляру ψ_0 ; $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$ – вектору ψ_μ ($\mu = 1 \div 4$); $(0,1) \oplus (1,0)$ – антисимметричному тензору второго ранга $\psi_{[\mu\nu]}$. На основе (2) можно построить не распадающуюся по группе Лоренца 11-компонентную систему тензорных уравнений

$$\partial_\mu \psi_\mu = 0, \quad (3)$$

$$\partial_\nu \psi_{[\mu\nu]} + \partial_\mu \psi_0 + m\psi_\mu = 0, \quad (4)$$

$$-\partial_\mu \psi_\nu + \partial_\nu \psi_\mu + m\psi_{\mu\nu} = 0, \quad (5)$$

которая после приведения её к матрично-дифференциальной форме (1) соответствует особенной матрице Γ_0 :

$$\Gamma_0 = \begin{pmatrix} 0 & & \\ & mI_4 & \\ & & mI_6 \end{pmatrix} \quad \text{в базисе } \Psi = \begin{pmatrix} \psi_0 \\ \psi_\mu \\ \psi_{[\mu\nu]} \end{pmatrix}. \quad (6)$$

Из системы (3)–(5) нетрудно получить уравнения второго порядка:

$$\square \psi_0 = 0, \quad (7)$$

$$\square \psi_\mu - m\partial_\mu \psi_0 - m^2 \psi_\mu = 0. \quad (8)$$

С другой стороны, система (3)–(5) инвариантна относительно калибровочных преобразований

$$\psi_0 \rightarrow \psi_0 - \Lambda(x), \quad \psi_\mu \rightarrow \psi_\mu + \frac{1}{m} \partial_\mu \Lambda(x), \quad (9)$$

где калибровочная функция $\Lambda(x)$ ограничена условием

$$\square \Lambda(x) = 0. \quad (10)$$

Сравнивая (10) с (7), заключаем, что скалярный компонент ψ_0 волновой функции Ψ выступает в роли калибровочной функции, т.е. физического поля не описывает.

Таким образом, калибровочная инвариантность системы (3)–(5) приводит к уменьшению физических степеней свободы с четырех до трёх, исключая состояния со спином 0. При этом матрица Γ_0 (6), действуя на расширенную волновую функцию Ψ (6), вырезает скаляр ψ_0 и оставляет лишь коварианты $\psi_\mu, \psi_{[\mu\nu]}$, минимально необходимые для построения массивной теории частиц со спином 1.

Данный вариант калибровочной инвариантной теории известен в литературе как подход Штюкельберга к описанию массивной частицы со спином 1. [3; 4]

Примером массивной калибровочно-инвариантной теории для частицы со спином 0 может служить базирующаяся на наборе представлений (2) тензорная система

$$\partial_\mu \psi_\mu + m\psi_0 = 0, \quad (11)$$

$$\partial_\nu \psi_{[\mu\nu]} + \partial_\mu \psi_0 + m\psi_\mu = 0, \quad (12)$$

$$-\partial_\mu \psi_\nu + \partial_\nu \psi_\mu = 0. \quad (13)$$

Свертывая уравнение (12) с ∂_μ и сравнивая полученный результат с (11), придем к уравнению второго порядка

$$\square \psi_0 - m^2 \psi_0 = 0, \quad (14)$$

которое означает, что система (11)–(13) описывает массивный микрообъект со спином 0.

Состояния, формально относящиеся к спину 1, в силу инвариантности системы (11)–(13) относительно калибровочных преобразований

$$\psi_{[\mu\nu]} \rightarrow \psi_{[\mu\nu]} - \Lambda_{[\mu\nu]}, \quad \psi_\mu \rightarrow \psi_\mu + \frac{1}{m} \partial_\nu \Lambda_{[\mu\nu]} \quad (15)$$

где произвол в выборе калибровочной функции $\Lambda_{[\mu\nu]}(x)$ ограничен условием

$$\partial_\alpha \partial_\nu \Lambda_{[\mu\nu]} - \partial_\mu \partial_\nu \Lambda_{[\alpha\nu]} = 0, \quad (16)$$

носят нефизический характер.

В матрично-дифференциальной форме система (11)–(13) соответствует матрице Γ_0 , имеющей в базисе (6) диагонально-блочную структуру

$$\Gamma_0 = \text{diag}(m, mI_4, 0_6), \quad (17)$$

вырезающую в произведении $\Gamma_0 \Psi$ «лишние» компоненты волновой функции, таковыми в данном случае являются компоненты тензора $\psi_{[\mu\nu]}$.

Заключение

Приведенные примеры подтверждают справедливость сформулированных выше общих положений (а) и (в), которые могут быть положены в основу отдельного направления в теории обобщенных РВУ – теории массивных калибровочно-инвариантных микрообъектов.

Список использованных источников

1. Федоров, Ф.И. Обобщенные релятивистские волновые уравнения / Ф.И. Федоров // ДАН СССР. – 1952. – Т. 82, № 1. – С. 37–40.
2. Богуш, А.А. Введение в теорию классических полей / А.А. Богуш, Л.Г. Мороз. – Минск : Наука и техника, 1952.
3. Stückelberg, E.C.G. Die Wechselwirkungskrakfte in der Electrodynamics und der Feldtheorie der Kernkraefte / E.C.G. Stückelberg // Helv. Phys. Acta. – 1938. – Bd. 11. – S. 225–236.
4. Ruegg, H. The Stückelberg field / H. Ruegg, M. Ruiz – Altabal // Int. J. Mod. Phys. A. – 2004. – Vol. 119. – P. 3265–3348.

А.И. Серый

Брестский государственный университет имени А.С. Пушкина

ОБ ЭФФЕКТЕ БАРЫШЕВСКОГО–ЛЮБОШИЦА В ВОДОРОДЕ В КОСМИЧЕСКИХ УСЛОВИЯХ

Получена расчетная формула для угла поворота плоскости поляризации фотона на единицу пройденного расстояния в эффекте Барышевского–Любошица в электронно-протонной среде с поляризованными по спину частицами. При этом несобственные интегралы, входящие в исходную формулу и относящиеся одновременно к первому и второму родам, преобразуются в несобственные интегралы первого рода от функций с устранимыми разрывами.

Ключевые слова: вращение плоскости поляризации, эффект Барышевского–Любошица, электронно-протонное вещество.

Введение. Эффектом Барышевского–Любошица называется вращение плоскости линейной поляризации фотонов, которое, в отличие от эффекта Фарадея, обусловлено разницей между амплитудами комптоновского рассеяния фотона на фермионе для сонаправленных и противоположно направленных спинов фотона и фермиона. Теоретически предсказанный в 1965 г. В.Г. Барышевским и В.Л. Любошицем для фотона, распространяющегося в среде с поляризованными электронами (для магнитных полей, индукция которых мала по сравнению со швингеровской), эффект был обнаружен в 1970-е годы в жестком рентгеновском диапазоне [1, с. 88–99].

Дальнейшие теоретические исследования велись по следующим направлениям: 1) учет влияния квантующего магнитного поля [2, с. 41–46; 3, с. 43–48; 4, с. 30–36; 5, с. 36–42; 6, р. 420–422; 7, с. 40–49; 8, р. 101–103]; 2) учет влияния квантующего магнитного поля и температуры [9, р. 1036–1038; 10, с. 97–102]; 3) учет вклада со стороны поляризованных по спину нуклонов [11, с. 418–423; 12, с. 386–390; 13, с. 357–358; 14, с. 15–17]. Актуальность исследований в последнем из перечисленных направлений обусловлена предсказываемой возможностью спонтанной спиновой поляризации нуклонов в астрофизических условиях [15, р. 506–512; 16, с. 549–555]. Часть идей, лежащих в основе работы, принадлежат В.Г. Барышевскому и В.В. Тихомирову.

Основная часть. Рассмотрим модель электронно-протонной (т.е. водородной) плазмы с поляризованными по спину частицами, в которой вдоль оси x распространяется фотон плоскополяризованный (направление движения задается единичным вектором \vec{n}). Спиновая поляризация нуклонов предполагается спонтанной, поэтому индукция магнитного поля невелика, ее влиянием на расчетные формулы можно пренебречь (в этом случае степень поляризации электронов мала). Выражение для угла $d\varphi$ поворота плоскости поляризации фотона на единицу пройденного пути dx в общем виде может быть записано следующим образом:

$$\frac{d\varphi}{dx} = \frac{2\pi n_p c}{\omega} \sum_{j=e,p} (\vec{p}_j \cdot \vec{n}) R e F_j(\omega), \quad R e F_j(\omega) = s_j^{(a)}(\omega, \Delta\mu_j) + s_j^{(d)}(\omega), \quad j = e, p. \quad (1)$$

В (1) приняты следующие обозначения: n_p – концентрация протонов (которая равна концентрации электронов, поскольку среда считается электрически нейтральной); c – скорость света в вакууме; ω – частота фотона; \vec{p}_e и \vec{p}_p – векторы спиновой поляризации электронов и протонов, соответственно; $ReF_e(\omega)$ и $ReF_p(\omega)$ – действительные части функций, определяющих спин-зависимые вклады в амплитуды комптоновского рассеяния фотона на электроне и протоне, соответственно. В указанных действительных частях можно выделить составляющие, зависящие от аномальных магнитных моментов ($s_e^{(a)}(\omega, \Delta\mu_e)$ и $s_p^{(a)}(\omega, \Delta\mu_p)$, соответственно), а также дисперсионные ($s_e^{(d)}(\omega)$ и $s_p^{(d)}(\omega)$, соответственно).

Выражения для $s_e^{(a)}(\omega, \Delta\mu_e)$ и $s_e^{(d)}(\omega)$ приведены в [1, с. 93]. Выражение для $s_p^{(a)}(\omega, \Delta\mu_p)$ было получено в [11, с. 419–421]; выражение для $s_p^{(d)}(\omega)$ было получено в [12, с. 387–390] по аналогии с алгоритмом, изложенным в [1, с. 92–93], на основе сведений из [17, р. 64–67], в виде

$$s_p^{(d)}(\omega) = \frac{\hbar^2 \omega \alpha^2 m_{np} c^3}{\pi(m_{np} c^2 + 2E_\gamma)} \sum_{i=1}^4 \int_0^{+\infty} \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta \frac{y f_i(y, \theta) dy}{y^2 - \omega^2}. \quad (2)$$

Выражения (довольно громоздкие) для величин $f_i(y, \theta)$ приведены в [12, с. 388–389; 17, р. 64–67]. При этом m_{np} – приведенная масса протона и нейтрона, \hbar – постоянная Планка, α – константа электромагнитного взаимодействия. Для E_γ справедливо соотношение:

$$\hbar^2 \omega^2 (m_{np} c^2 + 2E_\gamma) = m_{np} c^2 E_\gamma^2.$$

Интегралы по y в (2) содержит сингулярность при $y = \omega$, т.е. относится одновременно к несобственным интегралам первого и второго родов. Для его вычисления можно поступить так же, как это было сделано в [1, с. 93] при устраниении аналогичной сингулярности в $s_e^{(d)}(\omega)$. Воспользуемся соотношением

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\int_0^{\omega-\varepsilon} \frac{dy}{y^2 - \omega^2} + \int_{\omega+\varepsilon}^{+\infty} \frac{dy}{y^2 - \omega^2} \right) = 0. \quad (3)$$

С учетом (3) вместо (2) можно записать

$$s_p^{(d)}(\omega) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\hbar^2 \omega \alpha^2 m_{np} c^3}{\pi(m_{np} c^2 + 2E_\gamma)} \sum_{i=1}^4 (G_i(\omega, 0, \omega - \varepsilon) + G_i(\omega, \omega + \varepsilon, +\infty)),$$

$$G_i(\omega, a, b) = \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta \left(\frac{af_i(\omega, \theta)}{y^2 - \omega^2} - \frac{yf_i(y, \theta)}{y^2 - \omega^2} \right) dy. \quad (4)$$

Разрыв в скобках подынтегрального выражения в (4) является устранимым при $y = \omega$, что упрощает дальнейшую процедуру вычисления интеграла.

Полученный результат носит оценочный характер, поскольку требуется переход к лабораторной системе отсчета, в которой центр масс макроскопической водородной системы покойится, после чего выполнить температурное усреднение по импульсам электронов и протонов.

Заключение. Получена формула для расчета угла поворота плоскости поляризации фотона на единицу пройденного расстояния в эффекте Барышевского–Любошица в электронно-протонной среде с поляризованными по спину электронами и протонами в пренебрежении влиянием внешнего магнитного поля на амплитуды и сечения рассеяния. При этом выполнена процедура преобразования исходных несобственных интегралов, входящих в формулу и относящихся одновременно к первому и второму родам, в несобственные интегралы первого рода от функций с устранимыми разрывами. Это позволяет упростить дальнейшие вычисления. Результаты могут найти применение при анализе и интерпретации данных, получаемых при астрономических наблюдениях областей ионизированного водорода.

Список использованных источников

1. Барышевский, В.Г. Ядерная оптика поляризованных сред / В.Г. Барышевский. – М. : Энергоатомиздат, 1995. – 320 с.
2. Серый, А.И. К вопросу о комптоновском вращении плоскости поляризации рентгеновских фотонов в магнитном поле / А.И. Серый // Весник Брэсцкага універсітэта. Серыя 4 «Фізіка. Матэматыка». – 2014. – № 1. – С. 41–46.
3. Серый, А.И. О комптоновском вращении при движении фотонов под произвольным углом к линиям индукции магнитного поля. / А.И. Серый // Весник Брэсцкага універсітэта. Серыя 4 «Фізіка. Матэматыка». – 2011. – № 2. – С. 43–48.
4. Серый, А.И. О комптоновском вращении в магнитном поле с учетом ширины резонанса / А.И. Серый // Весник Брэсцкага універсітэта. Серыя 4 «Фізіка. Матэматыка». – 2012. – № 2. – С. 30–36.
5. Серый, А.И. О некоторых поляризационных эффектах в астрофизической плазме / А.И. Серый // Весник Брэсцкага універсітэта. Серыя 4 «Фізіка. Матэматыка». – 2014. – № 1. – С. 30–43.
6. Sery, A.I. To the Problem of Compton Rotation of Photons in a Strong Magnetic Field: Limit of Total Spin Polarization of Electrons / A.I. Sery // Nonlinear Phenomena in Complex Systems. – 2014. – Vol. 17, № 4. – P. 420–422.
7. Серый, А.И. Влияние резонансного комптоновского рассеяния в магнитном поле на вращение плоскости поляризации фотонов / А.И. Серый // Весник Брэсцкага універсітэта. Серыя 4 «Фізіка. Матэматыка». – 2020. – № 2. – С. 40–49.
8. Sery, A.I. Influence of resonance Compton scattering in a magnetic field on rotation of the polarization plane of photons / A.I. Sery // Materials Physics and Mechanics. – 2020. – Vol. 45, № 1. – P. 101–103.

9. Sery, A.I. Baryshevsky–Luboshitz Effect in Spin-Polarized Electron Gas at High Temperatures in Quantizing Magnetic Field / A.I. Sery // Astronomy Reports. – 2021. – Vol. 65, № 10. – P. 1036–1038.

10. Серый, А.И. Эффект Барышевского–Любошица при низких отличных от нуля температурах / А.И. Серый // Научная конференция, посвященная 110-летию со дня рождения Ф.И. Федорова (Гомель, 25 июня 2021 года) [Электронный ресурс] : сб. материалов / Гомельский гос. ун-т им. Ф. Скорины, отделение физики, математики и информатики Национальной академии наук Беларусь, государственное научное учреждение «Институт физики имени Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларусь» ; редкол. : С. А. Хахомов (гл. ред.) [и др.]. – Электронные текстовые данные (12 МБ). – Гомель : ГГУ им. Ф. Скорины, 2021. – Системные требования: IE от 11 версии и выше или любой актуальный браузер, скорость доступа от 56 кбит. – Режим доступа: <http://conference.gsu.by>. – Заглавие с экрана. – С. 97–102.

11. Sery, A.I. To the Problem of the Contribution of Spin-Polarized Hadrons to Baryshevsky–Luboshits Effect at Low Energies of Photons / A.I. Sery // Nonlinear Dynamics and Applications : Proceedings of the Twenty eight Anniversary Seminar NPCS'2021, Minsk, May 18–21, 2021 = Нелинейная динамика и приложения : труды XXVIII Междунар. семинара, Минск, 18–21 мая 2021 г. / редкол.: В.А. Шапоров [и др.] ; под ред. В.А. Шапорова, А.Г. Трифонова ; Объединенный институт энергетических и ядерных исследований – «Сосны» НАН Беларусь. – Минск : Право и экономика, 2021. – С. 418–423.

12. Sery, A.I. To the problem of the contribution of spin-polarized protons to Baryshevsky–Luboshits effect / A.I. Sery // Nonlinear Dynamics and Applications : Proceedings of the Twenty nine Anniversary Seminar NPCS'2022, Minsk, June 21–24, 2022 = Нелинейная динамика и приложения : труды XXIX Международного семинара, Минск, 21–24 июня 2022 г. / редкол.: В.А. Шапоров [и др.] ; под ред. В.А. Шапорова, А.Г. Трифонова ; Объединенный институт энергетических и ядерных исследований – «Сосны» НАН Беларусь. – Минск : Право и экономика, 2022. – С. 386–390.

13. Серый, А.И. Сравнительная характеристика эффектов Барышевского–Любошица на электронах и протонах / А. И. Серый // Материалы докладов 55-й Международной научно-технической конференции преподавателей и студентов : в 2 т. / УО «ВГТУ». – Витебск, 2022. – Т. 1. – С. 357–358.

14. Серый, А.И. О комбинированном эффекте Барышевского–Любошица в водороде / А.И. Серый // Актуальные вопросы современной науки : сб. ст. XVIII Междунар. науч.-практ. конф. – Пенза, 2024. – С. 15–17.

15. Sery, A.I. Spin Polarization of Nucleons: Limits of Low and High Temperatures / A.I. Sery // Bulletin of the Russian Academy of Sciences. Physics. – 2015. – Vol. 79, No 4. – P. 506–512.

16. Серый, А.И. Спиновая поляризация нуклонов. Пределы низких и высоких температур / А.И. Серый // Известия РАН. Серия физическая. – 2015. – Т. 79, № 4. – С. 549–555.

17. Bernard, V. Chiral Dynamics in Nucleons and Nuclei / V. Bernard // [Electronic resource]. – Mode of access: <https://arxiv.org/pdf/hep-ph/9501384.pdf>. – P. 0–153. – Date of access: 10.03.2025.

Д.В. Синегрибов^{1,2}, В.В. Андреев¹, И.А. Серенкова²

¹Гомельский государственный университет имени Ф. Скорины

²Гомельский государственный технический университет имени П.О. Сухого

**ОПТИМАЛЬНЫЕ НАБЛЮДАЕМЫЕ
ДЛЯ ФЕНОМЕНОЛОГИИ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО Z' -БОЗОНА
НА КОМПАКТНОМ ЛИНЕЙНОМ КОЛЛАЙДЕРЕ**

Изучена перспектива методики оптимальных наблюдаемых для извлечения ограничений на эффективные параметры дополнительного Z' -бозона. Проведено сравнение традиционного критерия χ^2 и методики оптимальных наблюдаемых на основе планируемого эксперимента на CLIC для процесса $e^+e^- \rightarrow \bar{b}b$.

Ключевые слова: оптимальные наблюдаемые, весовые функции, дополнительный Z' -бозон, косвенные эффекты, Компактный линейный коллайдер.

Введение. Оптимальные наблюдаемые являются достаточно известной методикой извлечения ограничений. Первоначально методика была применена для анализа магнитного и электрического дипольного момента t кварка [1]. Недавно оптимальные наблюдаемые использовались для исследования CP -инвариантности бозона Хиггса на LHC (Большой адронный коллайдер, ЦЕРН) [2]. Однако, методике не уделяется должное внимание при установлении ограничений на характеристики дополнительного Z' -бозона [3]. Задача поиска Z' -бозона содержится в программе исследований CLIC (Компактный линейный коллайдер, ЦЕРН) [4]. Прямое резонансное рождение Z' -бозона недоступно на CLIC, поскольку ожидаемые масштабы теории великого объединения и массы Z' -бозона значительно больше планируемой максимальной энергии коллайдера. Поэтому, в настоящей работе оптимальные наблюдаемые применяются для получения ограничений на параметры, характеризующие отклонение дифференциального сечения от предсказания Стандартной модели (СМ). То есть, в качестве сигнала «новой» физики рассматривается отклонение от СМ, другими словами, СМ рассматривается в качестве фона. Особенностью методики являются оптимальные весовые функции, позволяющие заменить стандартную процедуру бинирования исследуемой наблюдаемой. С помощью описанной методики можно без особого труда получить стандартные отклонения и коэффициент корреляции. В работе проведено сравнение традиционного критерия χ^2 [5] и методики оптимальных наблюдаемых на основе планируемого эксперимента на CLIC для процесса $e^+e^- \rightarrow \bar{b}b$.

Оптимальные наблюдаемые. Оптимальные наблюдаемые являются эквивалентной заменой традиционного критерия χ^2 . Для извлечения ограничений используются оптимальные весовые функции. Другими словами, вместо стандартного разбиения на угловые бины числа событий можно напрямую суммировать все события с заранее определенными весами, зависящими от фазового параметра. Таким образом,

предложенную методику можно рассматривать как удобную альтернативу анализа дифференциального сечения рассеяния для установления ограничений на параметры, характеризующие физику за пределами СМ.

Для того, чтобы использовать оптимальные весовые функции для извлечения сигнала «новой» физики, необходимо записать дифференциальное сечение рассматриваемого процесса в виде:

$$d\sigma/d\varphi \equiv \Sigma(\varphi) = \Sigma^{SM}(\varphi) + \Delta\Sigma(\varphi) = \sum_i c_i^{SM} f_i(\varphi) + \sum_i \Delta c_i f_i(\varphi). \quad (1)$$

В уравнении (1): $\Sigma^{SM}(\varphi)$ – значение дифференциального сечения, предсказанное СМ; $\Delta\Sigma(\varphi)$ – отклонение дифференциального сечения от предсказания СМ; $f_i(\varphi)$ – известные функции положения конечного состояния в фазовом пространстве φ ; c_i^{SM} – безразмерные параметры СМ; Δc_i – безразмерные параметры, характеризующие отклонения от предсказаний СМ. Неизвестные параметры Δc_i можно извлечь, используя весовые функции $\omega_i(\varphi)$, удовлетворяющие условию:

$$\int_{\varphi_{min}}^{\varphi_{max}} \omega_i(\varphi) \Sigma(\varphi) d\varphi = \Delta c_i. \quad (2)$$

В общем, возможны разные варианты выбора $\omega_i(\varphi)$. Однако можно найти уникальные весовые функции, позволяющие интегрировать дифференциальное сечение без потери информации. Другими словами, статистическая ошибка при определении Δc_i минимизируется. Для нахождения такого варианта необходимо выполнение условия:

$$\int_{\varphi_{min}}^{\varphi_{max}} \omega_i(\varphi) F_j(\varphi) d\varphi = \delta_{ij}. \quad (3)$$

Оптимальные весовые функции $\tilde{\omega}_i(\varphi)$, удовлетворяющие условию (3), определяются:

$$\tilde{\omega}_i(\varphi) = \left(\sum_i M_{ij}^{-1} F_i(\varphi) \right) / \Sigma^{SM}(\varphi), \quad M_{ij} \equiv \int_{\varphi_{min}}^{\varphi_{max}} \left(F_i(\varphi) F_j(\varphi) / \Sigma^{SM}(\varphi) \right) d\varphi. \quad (4)$$

Используя обратную матрицу M_{ij}^{-1} , можно получить матрицу ковариации V_{ij} и обратную матрицу ковариации V_{ij}^{-1} :

$$V_{ij} \equiv \Delta c_i \Delta c_j = M_{ij}^{-1} \sigma^{SM} / N^{SM} \quad \text{и} \quad V_{ij}^{-1} = M_{ij} N^{SM} / \sigma^{SM}, \quad (5)$$

где N^{SM} – число событий СМ и $\sigma^{SM} = \int_{\varphi_{min}}^{\varphi_{max}} \Sigma^{SM}(\varphi) d\varphi$ – полное сечение рассеяния.

Когда оцениваются два параметра Δc_1 и Δc_2 , матрица ковариации записывается в виде:

$$V = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & \rho_{12}\sigma_1\sigma_2 \\ \rho_{12}\sigma_1\sigma_2 & \sigma_2^2 \end{pmatrix}, \quad (6)$$

Следовательно, из матрицы (6) можно извлечь коэффициент корреляции ρ_{12} и стандартные отклонения σ_1 и σ_2 .

Применение методики для планируемого эксперимента на компактном линейном коллайдере. Дифференциальное сечение для безмассового случая исследуемого процесса $e^+e^- \rightarrow \gamma, Z, Z' \rightarrow \bar{b}b$ записывается в виде:

$$d\sigma^{SM+Z'} / dz = \Sigma^{SM}(z) + \Delta\Sigma(z) = \sum_i Q_i^{SM} f_i(z) + \sum_i \Delta Q_i f_i(z). \quad (7)$$

В сечении (7), $f_i(z)$ – известные функции, зависящие от косинуса угла рассеяния $z \equiv \cos\theta$:

$$f_1(z) = N_b \left(1 - P_{e^-} P_{e^+}\right) \alpha_{em}^2 \pi / 8s \cdot (1-z)^2, \quad (8)$$

$$f_2(z) = N_b \left(1 - P_{e^-} P_{e^+}\right) \alpha_{em}^2 \pi / 8s \cdot (1+z)^2, \quad (9)$$

где $N_b = 3$ – цветовой фактор, α_{em} – постоянная тонкой структуры, P_{e^-} и P_{e^+} – степени продольной поляризации электронного и позитронного пучка; \sqrt{s} – энергия столкновения.

Эффективные параметры СМ ($Q_{1,2}^{SM}$) определяются эффективной поляризацией P_{eff} и спиральными параметрами СМ (q_{LR}^{SM} , q_{RL}^{SM} , q_{LL}^{SM} , q_{RR}^{SM}):

$$Q_1^{SM} = p_{eff}^- |q_{LR}^{SM}|^2 + p_{eff}^+ |q_{RL}^{SM}|^2, \quad Q_2^{SM} = p_{eff}^- |q_{LL}^{SM}|^2 + p_{eff}^+ |q_{RR}^{SM}|^2, \quad (10)$$

$$q_{\lambda_e \lambda_b}^{SM} = \sum_{V=\gamma, Z} g_{V,e}^{\lambda_e} g_{V,b}^{\lambda_b} \frac{s}{s - M_V^2 + iM_V \Gamma_V}, \quad (11)$$

где $p_{eff}^\pm = 1 \pm P_{eff}$ и $P_{eff} = P_{e^-} - P_{e^+} / 1 - P_{e^-} P_{e^+}$.

В выражении (11) индексами λ_e и λ_b обозначены спиральности начального и конечного состояний, $g_{V,e}^{\lambda_e}$ и $g_{V,b}^{\lambda_b}$ – константа связи электрона и b кварка с бозонами СМ с соответствующими массами M_V и полными ширинами распада Γ_V .

Безразмерными параметрами ΔQ_1 и ΔQ_2 определяются отклонения дифференциального сечения от предсказаний СМ, которые вызваны обменом Z' . Для получения матрицы ковариации (6) необходимо определить число событий СМ:

$$N^{SM} = L_{eff} \int_{z_{min}}^{z_{max}} \Sigma^{SM}(z) dz, \quad (12)$$

где L_{eff} – эффективная светимость, зависящая от полной интегральной светимости, эффективности идентификации конечного фермиона и начальной поляризации.

Если на кинематическое фазовое пространство (по которому производится интегрирование) накладывается сокращение, то процедура оценки отклонений не изменяется. Мы оценили возможные отклонения от предсказания СМ ($\Delta Q_{1,2}$) для энергий 1.5 и 3 ТэВ на CLIC. Кинематическая область в выражении (12) определяется величиной $|z| \leq 1$. Поскольку на CLIC не предполагается опция позитронной поляризации, рассматриваются только неполяризованные и поляризованные ($\pm 80\%$) электроны. Распределение времени работы коллайдера для отрицательной и положительной электронной поляризации предполагается в отношении 80:20. В качестве конечного состояния рассматриваются b кварки, имеющие эффективность идентификации 80%. Полные интегральные светимости для стадий работы коллайдера с энергиями 1.5 и 3 ТэВ предполагаются равными 2.5 и 5 ab^{-1} . Все перечисленные параметры эксперимента можно найти в работе [4]. Учитывая все вышесказанное, рассчитанные значения эффективной светимости для процесса $e^+e^- \rightarrow \bar{b}b$ представлены в таблице 1.

Таблица 1 – Значения эффективной светимости для процесса $e^+e^- \rightarrow \bar{b}b$ при различной поляризации электронного пучка и энергии столкновений

P_{e^-}	$L_{\text{eff}} (\text{ab}^{-1})$ для	$L_{\text{eff}} (\text{ab}^{-1})$ для
	$\sqrt{s} = 1.5 \text{ ТэВ}$	$\sqrt{s} = 3 \text{ ТэВ}$
0	2	4
-0.8	1.6	3.2
0.8	0.4	0.8

В таблице 2 приведены расчеты $\Delta Q_1 \equiv \sigma_1$ и $\Delta Q_2 \equiv \sigma_2$ на уровне 1σ , полученные из матрицы ковариации (6) для различной поляризации электронного пучка.

Таблица 2 – Отклонения ΔQ_1 и ΔQ_2 для различной поляризации и энергии столкновений в процессе $e^+e^- \rightarrow \gamma, Z, Z' \rightarrow \bar{b}b$ на CLIC, которые извлечены из матрицы ковариации (6)

$\sqrt{s}, \text{ ТэВ}$	$P_{e^-} = 0$		$P_{e^-} = -0.8$		$P_{e^-} = 0.8$	
	$\pm \Delta Q_1$	$\pm \Delta Q_2$	$\pm \Delta Q_1$	$\pm \Delta Q_2$	$\pm \Delta Q_1$	$\pm \Delta Q_2$
1.5	0.00251	0.00671	0.00295	0.00930	0.00517	0.01017
3	0.00354	0.00948	0.00418	0.01312	0.00727	0.01437

Значения корреляции ρ_{12} различаются в зависимости от поляризации электронного пучка: для неполяризованного -0.18, для отрицательно поляризованного

–0.17, а для положительно поляризованного –0.20. В качестве аprobации результата мы получили аналогичные ограничения, используя критерий χ^2 (таблица 3). Сравнивая таблицы 2 и 3, можно заметить, что интервалы практически идентичны. Однако, используя оптимальные наблюдаемые, проще получить матрицу ковариации и впоследствии извлечь стандартные отклонения $\sigma_{1,2}$ и коэффициент корреляции ρ_{12} .

Таблица 3 – Отклонения ΔQ_1 и ΔQ_2 для различной поляризации и энергии столкновений в процессе $e^+e^- \rightarrow \gamma, Z, Z' \rightarrow \bar{b}b$ на CLIC, которые получены с помощью критерия χ^2

\sqrt{s} , ТэВ	$P_{e^-} = 0$		$P_{e^-} = -0.8$		$P_{e^-} = 0.8$	
	$\pm\Delta Q_1$	$\pm\Delta Q_2$	$\pm\Delta Q_1$	$\pm\Delta Q_2$	$\pm\Delta Q_1$	$\pm\Delta Q_2$
1.5	0.00253	0.00699	0.00298	0.00976	0.00518	0.01021
3	0.00356	0.00967	0.00420	0.01346	0.00728	0.01440

Заключение. В настоящей работе рассмотрена методика оптимальных наблюдаемых для феноменологии дополнительного Z' -бозона. Оптимальными наблюдаемыми являются сечения (1), проинтегрированные по фазовому пространству с соответствующими оптимальными весовыми функциями (4). С помощью представленной методики мы оценили параметры отклонения в процессе $e^+e^- \rightarrow \gamma, Z, Z' \rightarrow \bar{b}b$ для различной энергии и поляризации на CLIC. С помощью сравнения показано, что оптимальные наблюдаемые являются альтернативной методикой извлечения ограничений на параметры, характеризующие физику за пределами СМ. Однако, методику можно использовать только для случая, когда параметры содержатся в сечении линейно.

Список использованных источников

1. D. Atwood. Analysis for magnetic moment and electric dipole moment form factors of the top quark via $e^+e^- \rightarrow \bar{t}t$ / D. Atwood and A. Soni // Phys. Rev. D 45. – 1992. – 2405.
2. G. Aad. Test of CP Invariance in vector-boson fusion production of the Higgs boson using the Optimal Observable method in the ditau decay channel with the ATLAS detector / Aad, Georges and others (ATLAS) // Eur. Phys. J. C 76. – no. 12. – 2016.
3. S. Navas. Review of particle physics / Particle Data Group Collaboration, S. Navas and others // Phys. Rev. D 110. – no. 3. – 2024. – P. 658–660.
4. The Compact Linear Collider (CLIC) – 2018 Summary Report / T.K. Charles and others // CERN-2018-005-M, CERN-2018-005. – V. 2/2018.
5. Model-independent constraints on effective parameters of extra neutral heavy bosons at future e^+e^- colliders / D.V. Sinegribov, V.V. Andreev, I.A. Serenkova, V.R. Kurylenko // Phys. Part. Nucl. Lett. 21. – no. 4. – 2024. – P. 658–660.

Секция 3



Компьютерное моделирование физических процессов и явлений

UDC 661.66: 620.5

H. Grushevskaya, G. Krylov

Belarusian state university

CONFINEMENT OF MAJORANA-LIKE STATES IN GRAPHENE P-N JUNCTIONS

The paper theoretically describes the confinement of vortex topologically nontrivial graphene charge carriers in a hexagonal graphene p-n-junction region under the influence of an external electrostatic superlattice potential. The existence of stationary atom-like localized bound Majorana states and their confinement through Majorana resonances of Klein scattering is proven.

Ключевые слова: майорановская частица, графен, квантовая точка, confinement.

Introduction. Electrostatically confined graphene quantum dots, being p-n graphene junctions, are large artificial atoms. Some features which are inherently attributed to Majorana particles with non-Abelian statistics are experimentally observed in the behavior of graphene quantum dots (GQDs). This makes the use of p-n graphene junctions relevant in the development of devices for robust quantum computing [1]. However, identification of graphene quantum dots parameter region where their behavior becomes Majorana-like one is still an unsolved problem. The goal of this work is to construct a theory of pseudo-Majorana p-n graphene junctions and study the confinement of vortex topologically non-trivial graphene charge carriers in a hexagonal graphene p-n-junction region under the impact of an external electrostatic superlattice potential.

Model

A Hamiltonian, H_{GQD} , of GQD reads

$$H_{GQD} = H_M + V. \quad (1)$$

Here H_M is a quasi-relativistic Hamiltonian of pseudo-Majorana graphene model [2], is V is a pseudopotential [3]. Wave functions of GQD being hexagonally symmetrical belong to the

states of the graphene superlattice that is formed under an impact of an electrically polarized substrate. Therefore, eigenstates of the quantum dot must satisfy the periodicity conditions imposed by the superlattice potential on the wave vectors \vec{k} of the graphene states. For the case of a torus-like GQD, they are as follows:

$$(2n_1 + 1)(\vec{A}_1 \cdot \vec{k}) = 2\pi m_1, (2n_2 + 1)(\vec{A}_2 \cdot \vec{k}) = 2\pi m_2, \quad (2)$$

where m_1, m_2 are integer, \vec{A}_1 and \vec{A}_2 are two basis vectors of the rhombic unit supercell. The solutions have been constructed for 2500 wavevectors satisfying system (2). Eigenenergies $\varepsilon_{i,GQD}$ for graphene state corresponding to these found wavevectors $\vec{k}_{i,GQD}$, were found by mapping their to the reduced graphene Brillouin zone. The eigenfunctions of GQD were searched by using a series expansion in bispinor Bloch plain wave functions $\Psi_j(\vec{k}_{j,GQD}, \vec{r}) \exp(i(\vec{k}_{j,GQD} \cdot \vec{r}))$ of graphene pseudo-Majorana vortex particles possessing the wave vector $\vec{k}_{j,GQD}$ and the energy $\varepsilon_{j,GQD}$. Here $\Psi(\vec{k}_{i,GQD}, \vec{r})$ is a momentum representation of the solution of two-dimensional equation of motion of the pseudo-Majorana single-particle excitation in the quasi-relativistic graphene model (1) without the pseudopotential V . Eigenproblem has been solved for linear combinations comprising 40 constructed basis Bloch functions with found $\vec{k}_{i,GQD}$ and $\varepsilon_{i,GQD}$. These 40 base function were chosen in several ways: 1) with smallest $\varepsilon_{i,GQD}$, 2) with highest $\varepsilon_{i,GQD}$, 3) with smallest $\vec{k}_{i,GQD}$. Box normalization conditions have been used for the eigenstates.

For the selected linear combinations, the matrix elements of the pseudopotential operator were calculated in the energy representation using the following formula [3]:

$$V_{n,m} = \sum_i \langle \Psi_n | \Psi_i \rangle E^0_i \langle \Psi_i | \Psi_n \rangle \delta_{i,v}$$

where the index v is used for the level being occupied by a valence electron.

Results. Figure 1 shows the squared modulus of the wave function of graphene p-n junction for a representative localized atomic-like state of the quantum dot. In this case, the localization is stipulated by a constructive interference of wave functions of graphene charge carriers on “torus”,

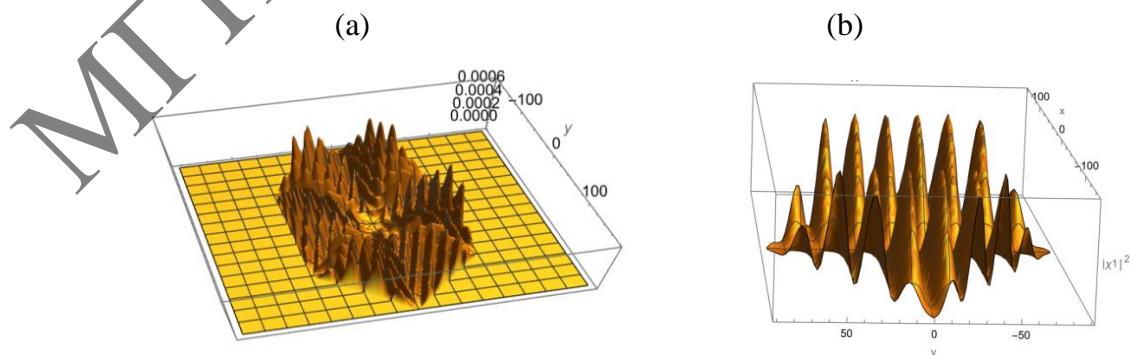


Figure 1 – Square module of the hole (electron) wave function of hexagonal p-n junction (a) consisting of three unit cells of superlattice and square module of the hole(electron) wave function in the supercell (b). This atom-like state corresponds to the energy level 0.933 eV.

A localized atom-like GQD state can appear as a Klein scattering resonance in a process of scattering of the Dirac pair consisting of bound Majorana particles. This state is presented in Figure 2a. The fact that this state is the Klein resonance is proven by its free passing through the potential barrier at normal incidence on the supercell boundary for phases which are multiples of $\pi \pm 2\pi n$; $n = 0, 1, \dots$ [4] as Inset to the figure 2a shows. The bound states of two Majorana-like particles represent themselves hole (electron) states possessing a total zero topological charge and with the hexagonal symmetry as shown in Figure 2a.

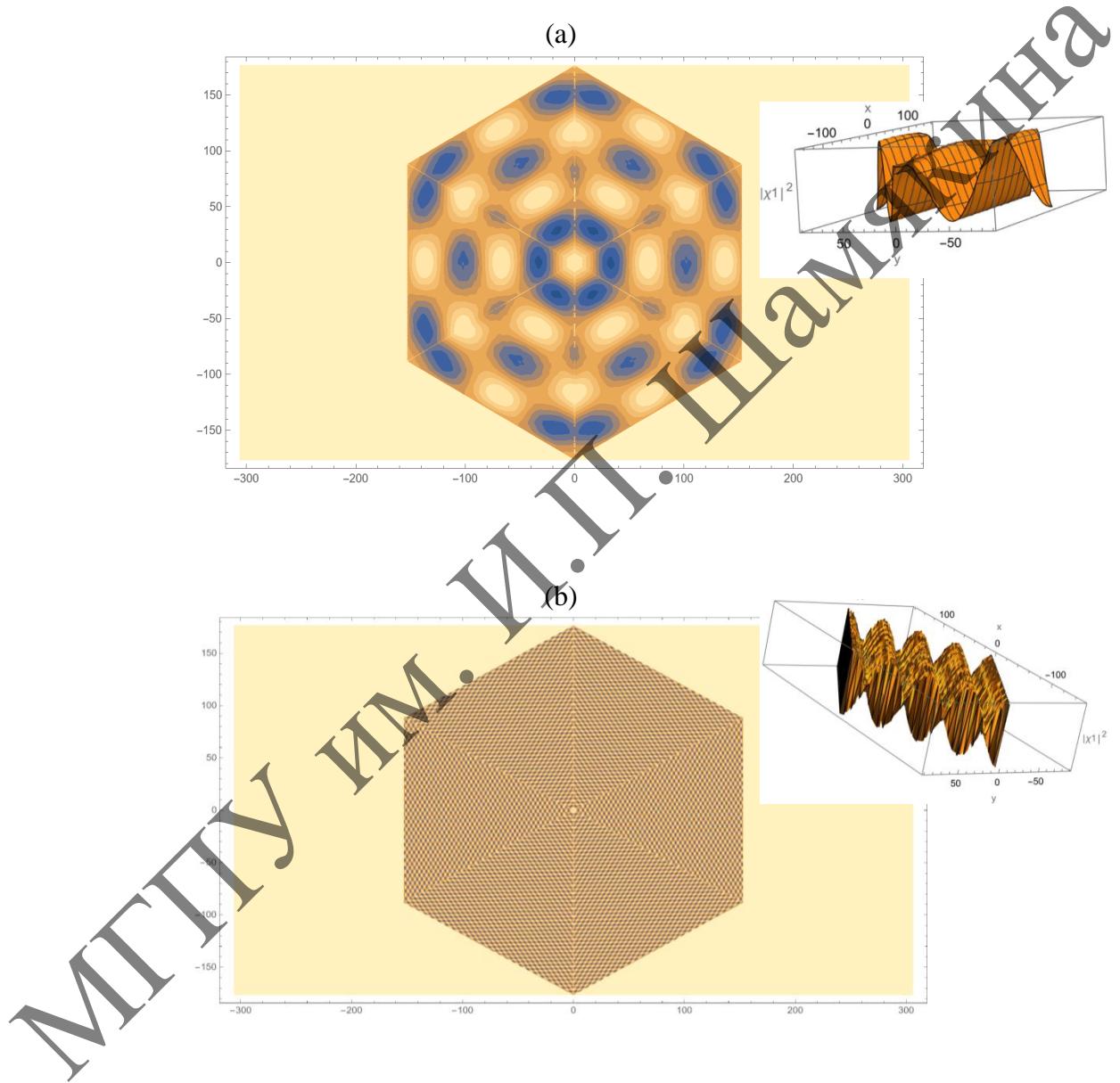


Figure 2 – Contour plots for the squared modulus of hole (electron) (a) and pseudo-Majorana (b) states of the hexagonal p-n junction; energies of the states are of 0.313 and 0.059 eV, respectively. The squared modulus of the hole (electron) wave functions in the unit cell of superlattice are shown in Insets to the figures (a) and (b).

The pseudo-Majorana free state of the electrostatically confined graphene quantum dot is a superposition of vortex states possessing non-zero topological charges. Since the total topological charge of the states is non-zero, the wave function of such a superposition has the electron-hole symmetry, as can be seen in the inset to Figure 2b. The electron-hole symmetry is an evidence that the Majorana configuration is electrically neutral. These Majorana-like states are wave packet of high-frequency (low-frequency) states with amplitude low-frequency (high-frequency) modulation.

The translational symmetry of the high-frequency states with a high value of the GQD wave vector $\vec{q}_h \equiv \vec{k}_{i,GQD}$, $\vec{q}_h >> 1$ is distorted by the superlattice potential due to the addition of a small basis wave vector \vec{Q} , $\vec{Q} \ll \vec{q}_h$ of the superlattice unit cell to \vec{q}_h . However, since the vector \vec{Q} is small, the wave vectors of the graphene dot become periodically multiples of \vec{q}_h , and this periodicity manifests itself as a Moiré pattern of the electron density of the graphene quantum dot as Figure 2b shows.

Contrary to Dirac hole (electron) states, which can annihilate with Dirac electron (hole) states from the graphene sheet surrounding the quantum dot, the law of conservation of topological charge prohibits the Majorana states from annihilating with the external graphene environment. This means that the escape of Dirac particles from the atomic-like orbitals of the graphene p-n junction to the continuum of delocalized graphene states happens through the electrically neutral topologically nontrivial pseudo-Majorana states and is accomplished by confinement of these Dirac particles within the region of the p-n junction.

Conclusion. So, a theory of pseudo-Majorana hexagonal p-n graphene junctions formed under the impact of an external electrostatic superlattice potential has been offered. A mechanism for confinement of vortex topologically nontrivial graphene charge carriers in these regions is proposed. It is shown that the stability of atomic-like localized bound Majorana-like states is ensured by their confinement through Majorana resonances emerging in a Klein scattering process.

References

1. Interplay between correlations and Majorana mode in proximitized quantum dot / G. Górski [et al.] // Scientific Rep. – 2018. – Vol. 8. – P. 15717.
2. Grushevskaya, H.V. Anomalous charge transport properties and band flattening in graphene: A quasi-relativistic tight-binding study of pseudo-Majorana states / H.V. Grushevskaya, G. Krylov // Graphene: A Wonder Material for Scientists and Engineers" / Eds. M. Ikram, A.Maqsood, A. Bashir. – London : IntechOpen, 2023. – Pp. 101–120.
3. Electronic properties and quasi-zero-energy states of graphene quantum dots / H.V. Grushevskaya [et al.] // Phys. Rev. B. – 2021. – Vol. 103. – P. 235102.
4. A. Calogeracos, N. Dombey, and K. Imagawa // Phys. Atom. Nucl. – 1996. – Vol. 59. – P. 1275.

D.A. Zernica

Mozyr State Pedagogical University named after I.P. Shamyakin

**FEATURES OF STRUCTURE FORMATION OF MULTI-COMPONENT ALLOYS,
 $\text{Sn}_{55,18}\text{Zn}_{44,50}\text{Si}_{0,23}\text{Al}_{0,09}$, OBTAINED UNDER STRONGLY NON-EQUILIBRIUM
CRYSTALLIZATION CONDITIONS**

A solidification mechanism is proposed and a mathematical model of crystallization of foil under nonequilibrium conditions is considered. The microstructure in the transverse layer, phase analysis, and component distribution in the initial state and during heat treatment of the rapidly solidified $\text{Sn}_{55,18}\text{Zn}_{44,50}\text{Si}_{0,23}\text{Al}_{0,09}$ alloy are studied. The effect of ultra-high cooling rates (up to 10^6 K/s) on the structure and mechanical properties is shown.

Keywords: foil; structure; Sn-Zn-Si-Al; crystallization, cooling rate; supercooling; cluster; microhardness.

Enormous practical interest in alloys obtained in the high crystallization rate mode remains to this day due to the formation of a unique structure and properties unattainable under equilibrium conditions. Due to the fact that ultra-fast quenching allows increasing the strength of alloys, one can expect to obtain by this method such alloys with a homogeneous and dispersed structure, with a narrow melting range, which is important for reducing the negative temperature effect on the elements of microcircuits during soldering. Dispersity and uniformity of phase distribution are especially important in the production of solder paste powders with fine and ultrafine grain, ensuring the overall miniaturization of products in the micron ranges of integrated circuits.

Due to the fact that multicomponent alloys based on the binary tin-zinc system are widely used in industry, small additions of alloying components can lead to improved technological and operational properties. In this regard, the aim of this work was to analyze the kinetics of crystallization with a proposal for a solidification mechanism and a description of a mathematical model of foil crystallization, as well as microstructural studies under natural and forced conditions.

In this work, we investigated rapidly solidified $\text{Sn}_{55,18}\text{Zn}_{44,50}\text{Si}_{0,23}\text{Al}_{0,09}$ (wt.%) alloys from components with a purity of no more than 99.99%. The fabrication was carried out by fusing the components in quartz ampoules. The foils were obtained by ultrafast quenching from the liquid phase by solidifying a drop of melt (~ 0.2 g) on the inner polished surface of a copper rotating cylinder. The thickness of the studied foils was 40-90 μm . The cooling rate of the melt, as shown by the calculation of [1], was not less than 10^6 K/s.

The chemical composition and surface structure were studied using a LEO1455VP scanning electron microscope. X-ray spectral microanalysis of the alloy was performed using a Rontec detector. X-ray structural analysis was performed on a Rigaku Ultima IV diffractometer. Microhardness H_μ was studied using the Vickers method on a PMT-3 hardness tester. The relative measurement error of H_μ was no more than 5%.

Let us consider the processes occurring during ultrafast crystallization of thin layers of molten metal. The process of cooling the melt can be divided into two stages. The first stage of cooling the liquid solution begins with the removal of heat through the "melt – Cu- substrate" boundary. This process is accompanied by strong supercooling of the molten metal [2].

An analytical solution to the one-dimensional problem of heat conduction under conditions of cooling of thin foil can be obtained under the assumption that the heat characteristics "molten metal – Cu-substrate – contact area" do not depend on temperature. Also, there will be no heat flow through the outer surface of the thin foil, but through the contact surface of the molten metal with the Cu-substrate, the heat flow is directly proportional to the temperature difference in the contact zone "foil – Cu-substrate". We will also assume that the temperature is constant in areas remote from the contact surface of the thin foil and the Cu-substrate.

A foil of $\text{Sn}_{55,18}\text{Zn}_{44,50}\text{Si}_{0,23}\text{Al}_{0,09}$ alloy of thickness d , heated to temperature T_{10} , is brought into contact with a copper substrate having temperature T_{20} . In this case, the temperature of the investigated foil $T_1(x, t)$ and the copper substrate $T_2(x, t)$ at an arbitrary point x (the x axis is perpendicular to the contact plane, the outer surface of the foil $x = 0$, the contact surface $x = d$) and at an arbitrary time t are determined by the following relationship:

$$T_1(s, \tau) = T_{20} + \frac{(T_{10} - T_{20})n}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\{\sin[(1-s)\xi] + \sin[(1+s)\xi]\} e^{-\xi^2 \tau}}{\xi [(g\xi \sin \xi - \cos \xi)^2 + n^2 \sin^2 \xi]} d\xi, \quad 0 < s < 1, \quad (1)$$

$$T_2(s, \tau) = T_{20} + \frac{2(T_{10} - T_{20})}{\pi} \times \\ \times \int_0^{\infty} \frac{\{n(\cos \xi - g\xi \sin \xi) \cos[m\xi(s-1)] - n^2 \sin \xi \sin[m\xi(s-1)]\} \sin \xi e^{-\xi^2 \tau}}{\xi [(g\xi \sin \xi - \cos \xi)^2 + n^2 \sin^2 \xi]} d\xi, \quad 1 < s < \infty, \quad (2)$$

where index 1 refers to the rapidly solidified foil; index 2 – to the Cu-substrate;

$s = x/d$ и $\tau = ta_1/d^2$ – dimensionless distance and time respectively;

$m = \sqrt{a_1/a_2}$, $n = \sqrt{a_2/a_1} \lambda_1/\lambda_2$, – dimensionless parameters characterizing the heat transfer process;

h – heat transfer coefficient at the alloy-substrate interface, depending on the substrate material, alloy composition and ultra-rapid solidification method;

a и λ – coefficients of thermal diffusivity and thermal conductivity;

ξ – variable of integration.

Let's change the problem statement. Let the cooling surface (in this case, the Cu-substrate) have a constant temperature, then the solution will have the form of the sum of an infinite series:

$$T_1(s, \tau) = T_{20} + 2(T_{10} - T_{20}) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin \mu_n}{\mu_n + \sin \mu_n \cos \mu_n} \cos(\mu_n s) e^{-\mu_n^2 \tau}, \quad (3)$$

where μ_n — successive solutions of the equation $\operatorname{ctg} \mu_n = g \mu_n$.

It should be noted that the homogeneity of cooling is expressed by the Bio number, which determines whether cooling can be considered homogeneous (at small Bio numbers), or whether the condition (at $h \rightarrow \infty$) of good thermal contact between the melt and the substrate.

The cooling rate of the melt in this case during ultrafast crystallization with uniform cooling is estimated as the following ratio:

$$u = \langle \dot{T}_l \rangle = \frac{h\Delta T}{c_l \rho d} = \frac{a_l h \Delta T}{\lambda_l d}. \quad (4)$$

For the alloy under study $\text{Sn}_{55,18}\text{Zn}_{44,50}\text{Si}_{0,23}\text{Al}_{0,09}$ $h = (1 \div 2) \cdot 10^5 \text{ W}/(\text{m}^2 \cdot \text{K})$ [2]. Other thermophysical characteristics were taken from reference materials.

Ultra-high cooling rates u lead to an increase in the degree of supercooling of the alloy ΔT_{sup} , necessary for the start of the crystallization process. Then, according to the study of data [3] for the components of a multicomponent alloy, the dependence of ΔT_{sup} on $\lg u$ in the range of $10^2 \div 10^6 \text{ K/s}$ can be approximated by a power function of the form:

$$\Delta T_{nep.} = (1,09 \pm 0,14) (\lg u [\text{K/c}])^{3,09 \pm 0,09}. \quad (5)$$

According to calculations, the amount of supercooling of the system is about $100 \text{ }^\circ\text{C}$.

Based on the analysis of diffraction patterns, it was found that the rapidly solidified foil of the $\text{Sn}_{55,18}\text{Zn}_{44,50}\text{Si}_{0,23}\text{Al}_{0,09}$ alloy has tin and zinc diffraction lines, therefore, the rapidly solidified alloy consists of solid solutions of tin and zinc. There are also low-intensity reflexes of silicon and aluminum phases.

An image of the microstructure in the cross section of the rapidly solidified foil of the $\text{Sn}_{55,18}\text{Zn}_{44,50}\text{Si}_{0,23}\text{Al}_{0,09}$ alloy, obtained one day after production, is shown in Figure 1, a. The photograph shows dark and light areas that correspond to zinc precipitates (dark areas) and tin precipitates (light areas). Silicon and aluminum are uniformly distributed in tin as a solid solution.

The formation of the structure shown in Figure 1, a, is associated with high supercooling of the liquid. Supercooled liquid melt is a supersaturated liquid solution in which clusters are formed at temperatures close to eutectic. The structure of such clusters is close to the structure of crystalline phases. At temperatures exceeding eutectic, clusters are unstable and dissolve due to thermal atomic motion. Cluster stability is in the regions of hypoeutectic temperatures. Under such conditions, clusters grow with the formation of crystallites. Cluster formation is random, which is the reason for the homogeneity of the crystalline phases of the rapidly solidified alloy.

In rapidly solidified foils of the alloys under study, a preferential orientation of the grains of both phases is observed. The maximum values of the pole density are found in the diffraction lines of tin 200 and zinc $10\bar{1}0$, which indicates the formation of the texture (100) of tin and $(10\bar{1}0)$ of zinc. Such a pronounced character of the forming texture is observed during the crystallization of pure components [4].

Rapidly solidified $\text{Sn}_{55,18}\text{Zn}_{44,50}\text{Si}_{0,23}\text{Al}_{0,09}$ alloy is in a thermodynamically unstable state [5]. During isothermal annealing, the structure of the rapidly solidified alloy (Fig. 1, b-d) changes and becomes more dispersed. According to the results of X-ray spectral microanalysis, it was established that zinc atoms dissolve in the matrix solution of the tin phase.

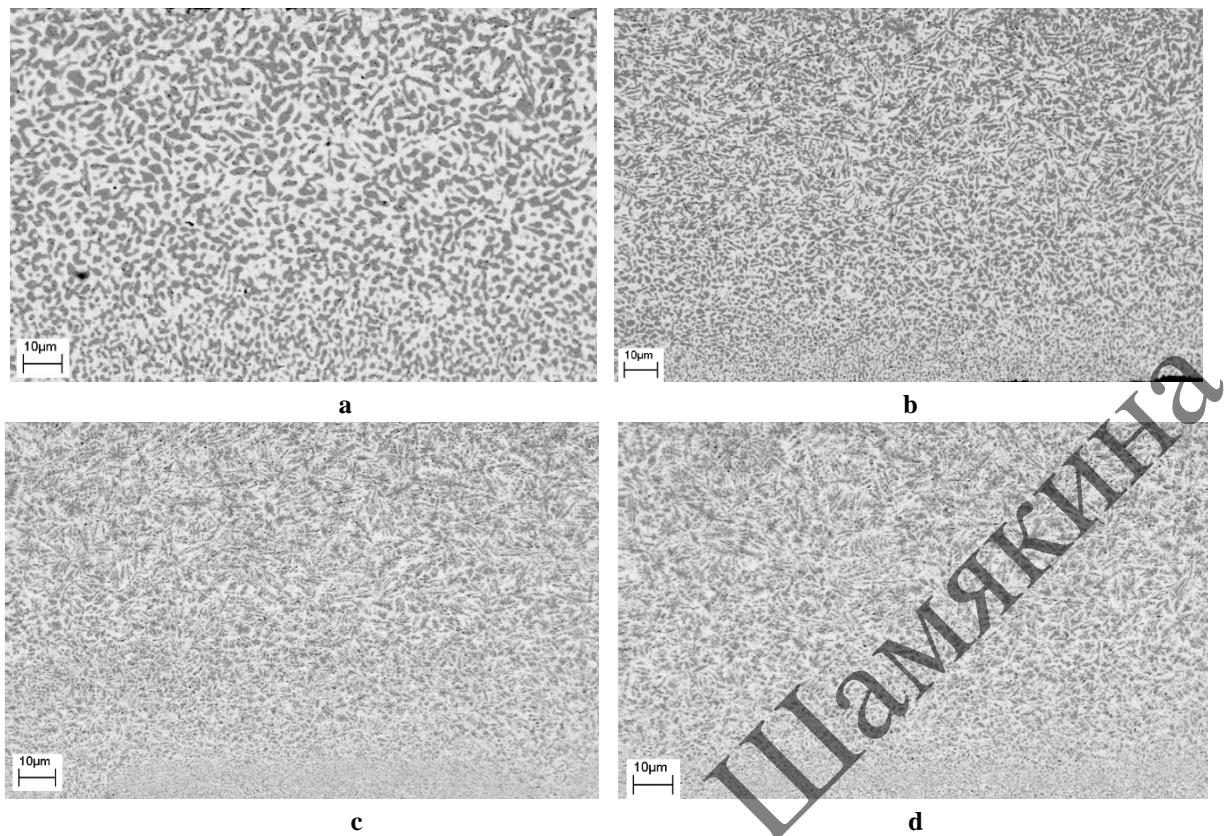


Figure 1 – Image of the microstructure of the cross section of rapidly solidified foil of the $\text{Sn}_{55.18}\text{Zn}_{44.50}\text{Si}_{0.23}\text{Al}_{0.09}$ alloy: a – in the initial (freshly quenched) state; b – after annealing for 30 min/150 °C; c – after annealing for 90 min/150 °C; d – after annealing for 170 min/150 °C

When analyzing the microhardness during natural aging of the rapidly solidified $\text{Sn}_{55.18}\text{Zn}_{44.50}\text{Si}_{0.23}\text{Al}_{0.09}$ alloy (Figure 2, a), an initial rise in the graph is noted during the first 2 hours of holding, and subsequent stabilization of the H_μ parameter. Some growth in the graph during subsequent holding time intervals is explained by the measurement error. At the first stage of holding, the growth of microhardness is due to the formation of a large number of tin (zinc) clusters due to zinc (tin) supersaturation, as well as the reinforcing effect of alloying elements. Then, the clusters of areas enriched with tin (zinc) turn into tin (zinc) precipitations.

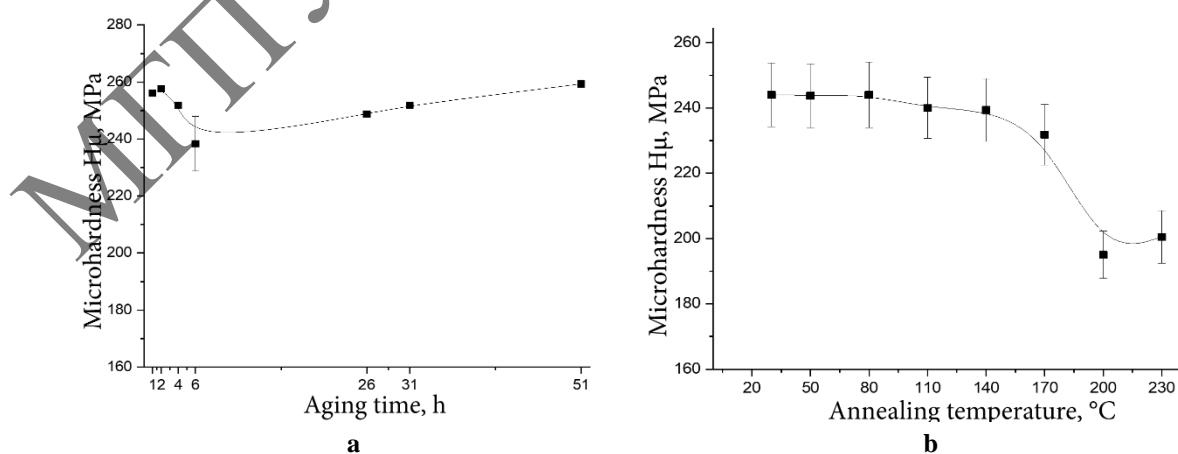


Figure 2 – Graph of change in microhardness of rapidly solidified foil of $\text{Sn}_{55.18}\text{Zn}_{44.50}\text{Si}_{0.23}\text{Al}_{0.09}$ alloy: a – during natural aging; b – during isochronous annealing

Isochronous annealing (Figure 2, b) leads to a sharp decrease in microhardness at temperatures starting from 170 °C. Zinc dissolves in the matrix phase, with a decrease in its volume, while the proportion of the softening phase of tin increases, which leads to a decrease in microhardness during heat treatment.

Thus, ultra-high cooling rates u lead to an increase in the degree of alloy supercooling ΔT_{sup} , necessary for the onset of the crystallization process. The supercooling value of the studied alloy is about 100 °C. The rapidly solidified Sn_{55,18}Zn_{44,50}Si_{0,23}Al_{0,09} alloy has a dispersed structure consisting, after production and holding at room temperature, of solid solutions of tin and zinc, and dispersed particles of alloying elements. The grinding of phase precipitates is due to the high degree of liquid supercooling. It was revealed that during isothermal annealing at 150 °C, the average size of zinc precipitates decreases by 3 times, and the volume fraction of Zn zinc decreases.

The work was carried out with the financial support of the BRFFR within the framework of grant No. F24MP-054.

References

1. German, G. Ultrafast hardening of liquid alloys / G. German. – M. : Metallurgy, 1986. – 375 p.
2. Vasiliev, V.A. High-speed solidification of the melt (theory, technology and materials) / V.A. Vasiliev, B.S. Mitin, I.N. Pashkov. – Moscow : Intemet Engineering, 1998. – 400 p.
3. Suzuki, K. Amorphous metals / K. Suzuki, H. Dujimori, K. Hashimoto. – M. : Metallurgy, 1987. – 328 p.
4. Zernitsa, D.A. Study of the Structure and Properties of Rapidly Solidified Tin–Zinc Eutectic Alloys Doped with Antimony / D.A. Zernitsa, V.G. Shepelevich // Inorganic Materials : Applied Research. – 2023. – Vol. 14, № 1. – P. 86–95.
5. Shepelevich, V.G. Effect of decomposition of supersaturated liquid solutions on the structure and microhardness of rapidly solidifying alloys of the Pb–Sn system / V.G. Shepelevich, O.N. Belya, E.Yu. Neumerzhitskaya // Bulletin of the National Academy of Sciences of Belarus. Series of physical and technical sciences. – 2019. – No. 4. – P. 391–397.

УДК 547.455:535.33/34:539.194

В.М. Андрианов, М.В. Королевич

Белорусский государственный аграрный технический университет

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И ИНФРАКРАСНЫХ СПЕКТРОВ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ МОЛЕКУЛ КЛАССА ФИТОГОРМОНАЛЬНЫХ СТЕРОИДОВ

Для установления спектро-структурных корреляций практически важных биологически активных стероидных фитогормонов – молекул (22S,23S)-24-эпикастастерона и (22S,23S)-28-гомокастастерона – проведен сравнительный анализ экспериментальных ИК спектров и теоретических спектральных кривых поглощения этих близких по химическому строению

молекул. Это позволило оценить влияние структурных особенностей в пределах боковой цепи исследуемых молекул на формирование инфракрасных спектров.

Ключевые слова: инфракрасная спектроскопия, характеристические частоты, фитогормональные стероиды

Введение. Биологически активные гормоны класса фитогормональных стероидов (ФС) рассматриваются как потенциально антраканцерогенные фармакологические средства. Известно [1], что высокая биологическая активность этих соединений связана с 22R, 23R-диольной структурой в стероидной боковой цепи. В то же время соединения с 24S-метил- или этилгруппой показывают большую биоактивность, чем соответствующие гормоны с 24R-алкил функцией [2].

Цель данной работы заключалась в получении структурных параметров, проведении полного расчета колебательных спектров и моделировании спектральных кривых оптической плотности близких по строению представителей стероидных гормонов, обладающих биологической активностью – молекул (22S,23S)-24-эпикастастерона и (22S,23S)-28-гомокастастерона для детальной интерпретации и сопоставительного анализа их экспериментальных ИК спектров.

Основная часть. Для решения поставленной задачи применен оригинальный комбинированный подход к анализу ИК спектров сложных органических соединений, реализованный в виде комплекса программ при исследовании спектров углеводородов [3]. Он сочетает классический анализ частот нормальных колебаний многоатомных молекул с квантово-химической оценкой абсолютных интенсивностей, соответствующих интегральным интенсивностям ИК полос поглощения.

Для получения структурных параметров и декартовых координат атомов исследуемых молекул использован современный пакет программ для молекулярного моделирования “HyperChem 7.5”, оптимизация геометрии проведена квантово-химическим методом РМ3. Исходя из этих данных, нами построены молекулярные структуры исследуемых соединений, представленные на рисунке 1.

Молекулы (22S,23S)-эпикастастерона (I) и (22S,23S)-28-гомокастастерона (II) образуют остов и объемную боковую цепь (рисунок 1). Их структурные различия локализованы в пределах боковой цепи: природа заместителя в положении 24 (метильный (I), этильный (II)) и его конфигурация (24R (I), 24S (II)) (рисунок 1).

По результатам решения колебательной задачи смоделированы спектральные кривые оптической плотности исследуемых молекул. Теоретические спектры удовлетворительно описывают основные, наиболее интенсивные характеристические полосы поглощения экспериментальных спектров (22S,23S)-24-эпикастастерона, что демонстрирует рисунок 2, и (22S,23S)-28-гомокастастерона в спектральном диапазоне 1500–900 см⁻¹. Так, для молекулы (22S,23S)-24-эпикастастерона, как следует из рисунка 2, четырем наиболее интенсивным полосам поглощения 1465, 1445, 1438 и 1383 см⁻¹ экспериментального спектра в интервале 1500–1200 см⁻¹ можно поставить в соответствие полосы с частотами их максимумов 1459, 1429, 1394 см⁻¹ теоретического спектра, соответственно. В то же время три наиболее интенсивных полосы поглощения 1082, 1045 и 1014 см⁻¹ экспериментального спектра в интервале 1200–950 см⁻¹ можно соотнести с полосами теоретического спектра с частотами их максимумов 1104, 1048,

1009 см⁻¹. При этом максимальный частотный сдвиг соответствующих полос $\nu_{\text{расч.}}$ и $\nu_{\text{эксп}}$ для этой молекулы составляет от 11 см⁻¹ (диапазон 1500–1200 см⁻¹) до 22 см⁻¹ (1200–950 см⁻¹).

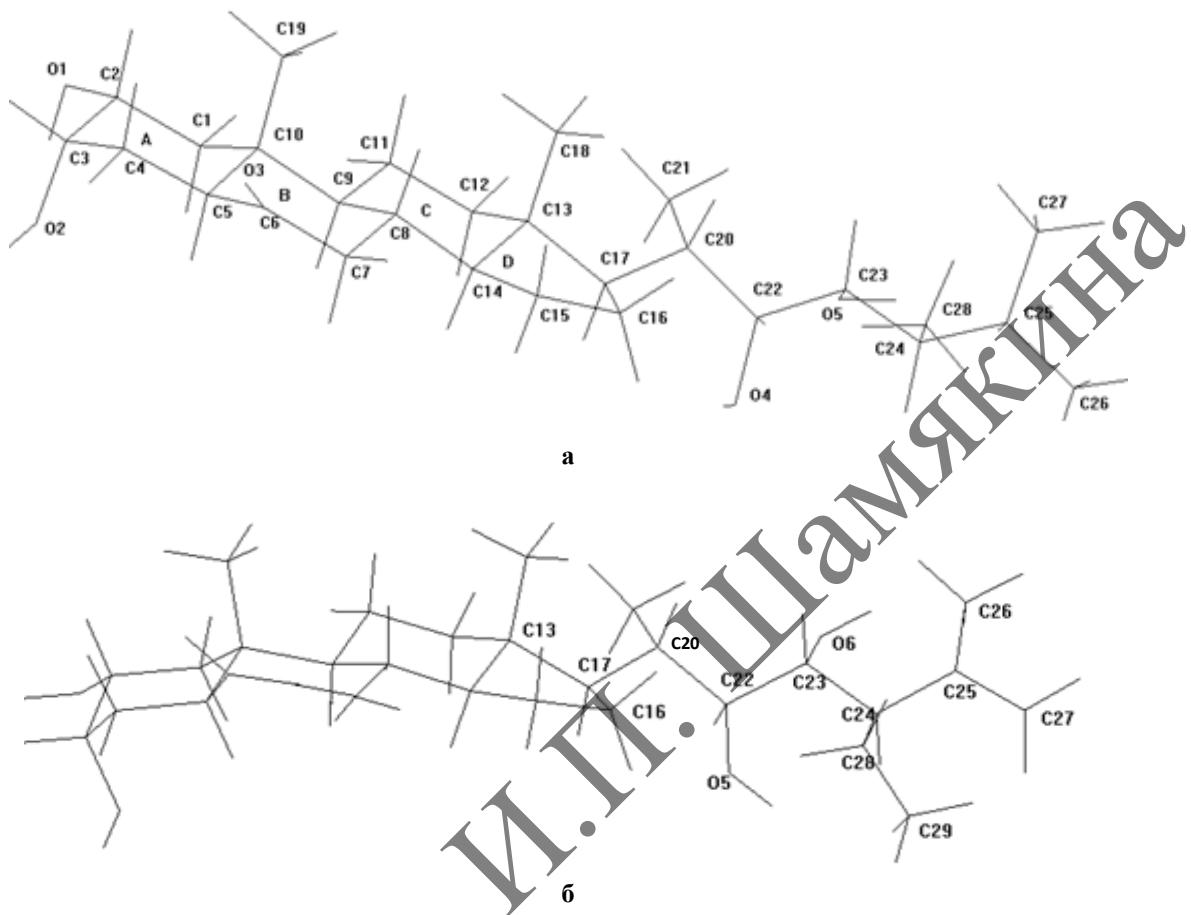


Рисунок 1 – Молекулярные структуры (22S,23S)-24-эпикастастерона (а) и (22S,23S)-28-гомокастастерона (б)

В таблице 1 дана интерпретация наиболее интенсивных характеристических полос поглощения ИК спектра исследуемых молекул в области 1500–900 см⁻¹.

Таблица 1 – Экспериментальные (наиболее интенсивные) характеристические ($\nu_{\text{эксп}}$) и рассчитанные ($\nu_{\text{расч}}$) частоты (см⁻¹) ИК полос поглощения, абсолютные интенсивности А ($10^{16} \cdot \text{см}^2 \cdot \text{моль}^{-1} \cdot \text{сек}^{-1}$) и РПЭ нормальных колебаний молекулы (22S,23S)-24-эпикастастерона (I) и (22S,23S)-28-гомокастастерона (II) в спектральной области 1500–900 см⁻¹. В скобках указаны частоты $\nu_{\text{расч}}$ максимумов полос поглощения теоретического спектра молекулы (I)

$\nu_{\text{эксп}}$	$\nu_{\text{расч}} \text{ (I)}$	$\nu_{\text{расч}} \text{ (II)}$	A (I)	A (II)	РПЭ(%) (I)	РПЭ(%) (II)
1465 (1459)	1497	1498	170	1	23 HC19H, 19 HC18H, 17 CC19H, 15 CC18H, 9 HC4H	26 HC19H, 19 CC19H, 18 HC18H, 14 CC18H, 7 HC4H, 7 HC11H
	1495	1496	81	9	20 HC18H, 17 HC19H, 20 CC18H, 13CC19H, 11HC4H	26 HC18H, 21 CC18H, 18 HC19H, 14 CC19H, 8 HC4H, 6HC11H
	1486	1485	31	92	55 HC4H, 20 HC19H	60 HC4H, 17 HC19H, 11 CC4H, 6 C10C19H
	1475	1476	37	2	56 HC12H, 12 HC1H, 10 CC12H, 8 HC11H	54 HC12H, 12 HC1H, 10 CC12H, 9 HC11H
	1473	1473	16	15	67 HC1H	65 HC1H, 8 HC12H, 6 CC1H2, 5 HC11H

1383 (1394)	1393 1390 1384 1376 1364 1363	1392 1392 1389 1384 1376 1376 1363 1362	74 77 96 120 239 1 16 96 19	51	27 CC1H, 18 C2O1H 31 C20C17H, 22 C13C17H 27 CC8H, 26 CC9H 36 CC5H, 28CC4H 28 CC22H, 14 CC25H 28 CC8H, 28 CC9H	18CC1H, 6 C2O1H, 6 C20C17H, 6 C24C25H, 5 HC21H ₂ 17 CC1H, 9 C24C25H, 6 C2O1H, 5 C28C24H 27 C20C17H, 19 C13C17H, 5 C17C20 29 CC8H, 23 CC9H 35 CC5H, 26 CC4H, 6 C4C5 44 C29C28H, 8 HC29H, 5 HC28H 27 CC8H, 23 CC9H 25 CC22H, 6 CC25H, 5 C23O5H, 5 C10C9H
1082 (1104)	1109 1101 1102 1098 1094	1108 35 3 7 39 39	78 3 7 6	17	16 C7C8, 13CC7H, 11C8C9 11 CC16H, 6 C17C20, 5 C8C14, 5 C20C21 39 CC4H, 7 C1C2, 5 C10C19 12 C11C12, 10 CC15H, 8 C16C17, 8 C7C8	14 CC7H, 12 C7C8, 11 C8C9, 5 C11C12H 6 C15C16H, 5 C17C20 39 C3C4H, 5 C1C2, 5 C10C19, 6 C2C1H 14 C14C15H, 8 C11C12, 8 C16C17, 5 C15C16
1045 (1048)	1077 1069 1060 1057	1078 1071 1066 1063	77 48 129 66	12	16 CC16H, 12CC15H, 8C20C21, 6 C14C15, 6 C15C16 47 CC15H, 7 C20C21, 5 C14C15 27 CC15H, 14 CC21H, 8 C20C21 17 C11C12, 9CC21H, 9 CC18H, 7 C16C17, 5 C14C15	19 CC16H, 18 C20C21, 8 C15C16, 7 CC15H, 6 C14C15, 5 C7C8 31 CC15H, 9 C20C21, 9 C22O, 7 O5C23H, 6 C23O 21 CC15H, 11 C25C27H, 11 C25C26H, 6 C29C28H, 5 C28C29 14 C25C27H, 13 C28C29, 12 C25C26H, 11 CC15H, 5 O5C23H 20 CC15H, 14 C11C12, 7 C14C15
1014 (1009)	1028 1027 1026 1011 1015 1009	1028 72 39 2 25 77	10 33 2 25 77	33	29 CC28H, 19 CC27H, 18 C24C28 9 C7C8, 7 CC7H, 7 C10C19H, 7 CC11H, 6 C8C9 23 CC21H, 20 CC28H, 8 C15C16	29 C28C29, 29 C28C29H, 11 C25C27H, 6 C24C29, 6 C25C26H 10 C10C19H, 8 C7C8, 7 C6C7H, 7 C12C11H, 6 C8C9 51 C28C29H, 14 C24C28H, 12 C20C21H 28 C15C16, 18 C16C17, 11 CC15H

Сопоставительный анализ результатов расчета колебательных спектров молекул (22S,23S)-24-эпикастастерона и (22S,23S)-28-гомокастастерона (наиболее интенсивных характеристических полос поглощения ИК спектров этих молекул в области 1500–900 cm^{-1}) показал, что небольшие различия их молекулярной структуры приводят к изменениям формы колебания в ряде нормальных колебаний с близкими или совпадающими частотами, следствием чего является изменение интенсивностей соответствующих полос поглощения. Поскольку каждая полоса экспериментального спектра имеет сложное происхождение и состоит из ряда полос разной интенсивности (в теоретическом спектре – сумма полос гауссовой формы по теоретически рассчитанным абсолютным интенсивностям и заданным полуширинам – от 8 до 25 cm^{-1}), то перераспределение интенсивностей составляющих полос при переходе к другому соединению приводит к изменению интенсивности суммарной полосы поглощения.

Так, например, из представленных в таблице результатов следует, что интенсивная полоса с максимумом 1465 cm^{-1} в экспериментальном спектре состоит из пяти составляющих полос, основной вклад в которые вносят деформационные колебания метильных (HC18H, HC19H, CC18H, CC19H) и метиленовых (HC4H, HC12H, HC1H) групп, входящих в состав шестичленных циклов А и С остова молекулы. Вторая интенсивная полоса этого спектрального диапазона с максимумом 1383 cm^{-1} в экспериментальном спектре, согласно расчету, состоит из шести (I) и восьми (II) составляющих полос, обусловленных главным образом деформационными колебаниями ССН метиновых групп, а также деформационными колебаниями СОН гидроксилов О1H и О5H. Что же касается интенсивных характеристических полос с максимумами 1082, 1045 и 1014 cm^{-1} в экспериментальном спектре, то по данным расчета (полосы в теоретическом спектре, представленном на рисунке 2, с максимумами 1104, 1048 и 1009 cm^{-1}) основной вклад в формирование этих полос вносят деформационные колебания

ССН метиленовых и метильных групп, а также валентные колебания связей С–С как остава, так и боковой цепи исследуемых молекул.

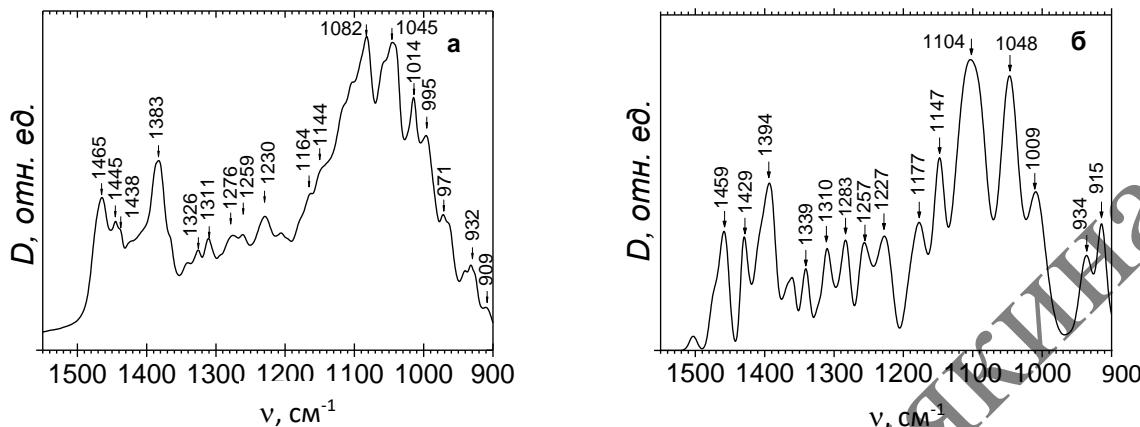


Рисунок 2 – Экспериментальный (а) и теоретический (б) ИК спектры поглощения (22S, 23S)-24-эпикастастерона в диапазоне частот 1550–900 см⁻¹

Важно отметить, что наличие дополнительной группы C₂₈H₂ в (22S,23S)-28-гомокастастероне непосредственно проявляется в виде основного вклада в РПЭ ряда нормальных колебаний (среди других нормальных колебаний), формирующих, в частности, такие интенсивные характеристические полосы поглощения ИК спектра, как полосы с максимумами 1383 и 1014 см⁻¹.

Заключение. Компьютерное моделирование молекулярной структуры и колебательных инфракрасных спектров исследуемых соединений показало, что наличие дополнительной группы C₂₈H₂ в (22S,23S)-28-гомокастастероне оказывается на интенсивности полос поглощения ИК спектра с максимумами 1383 и 1014 см⁻¹.

Список использованных источников

1. Drosihn S., Porzel A, Brandt W. Determination of preferred conformations of brassinosteroids by means of NMR investigations and Boltzmann statistical analysis of simulated annealing calculations // J. Mol. Model. – 2001. – Vol. 7. – P. 34–42.
2. Yokota T., Mori K. Molecular structure and biological activity of brassinolide and related brassinosteroids / T.Yokota // In: Molecular Structure and Biological Activity of Steroids. CRC Press, Boca Raton, FL, 1992. – P. 317–340.
3. Королевич, М.В. Аналитическая инфракрасная спектроскопия сахаридов М.В. Королевич : дис. ... д-ра физ.-мат. наук. – Минск, 2009. – 333 л.

И.В. Балыкин¹, А.А. Рыжевич^{1, 2}, О.А. Смехович³, А.П. Визгин³, Т.Д. Циркун³

¹Институт физики НАН Беларуси

²Белорусский государственный университет

³ГУО «Средняя школа № 4 г. Минска»

СТАЦИОНАРНЫЕ ТРАЕКТОРИИ МИКРОЧАСТИЦ В ДИНАМИЧЕСКОМ ЧЕТЫРЁХЛУЧЕВОМ ИНТЕРФЕРЕНЦИОННОМ ПОЛЕ

Оптическая схема на основе бипризм Френеля, вращающихся с разными угловыми скоростями вокруг общей оси, перпендикулярной входным плоскостям бипризм, позволяет сформировать динамическое четырёхлучевое интерференционное поле (ДЧИП). В среде Python 3.8 разработана программа для расчета и регистрации траекторий микрочастиц, помещенных в ДЧИП, в которой показана возможность установления стационарных траекторий.

Ключевые слова: микрочастица, бипризма, четырёхлучевое интерференционное поле, стационарная траектория.

Введение. Начиная с 1970 г. [1], лазерные световые пучки используются для воздействия градиентными силами светового поля на частицы различных размеров: от десятков микрометров до долей нанометра. В [2] были впервые выделены как отдельный класс многолучевые световые поля интерференционного типа. Данные пучки формируются при интерференции нескольких взаимно когерентных световых пучков, распространяющихся под некоторым углом к общей оси. Также в [2] было впервые показано, что многолучевые интерференционные поля в поперечном сечении содержат большое количество локальных максимумов интенсивности малых размеров, благодаря чему могут обеспечивать воздействие на объекты не только за счет высокой интенсивности, но и за счет градиентных сил. В данной работе представлена разработанная нами компьютерная программа для расчета траекторий микрочастиц, движущихся в динамическом четырехлучевом интерференционном поле (ДЧИП) интерференционного типа и показано, что в ряде случаев у микрочастиц, помещенных в ДЧИП, могут устанавливаться стационарные траектории.

1 Формирование динамического четырёхлучевого светового поля. В [3] был предложен метод формирования динамического поля с ячеистым распределением интенсивности на основе двух бипризм, расположенных почти вплотную друг к другу и при этом независимо вращающихся с различными угловыми скоростями ω_1 и ω_2 в плоскости, перпендикулярной оптической оси входного пучка (оптическая схема экспериментальной установки показана на рисунке 1).

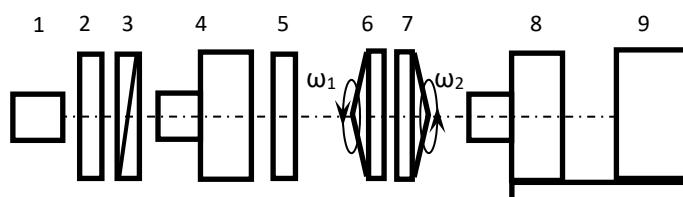


Рисунок 1 – Конструкция экспериментальной установки для формирования и исследования динамического интерференционного поля на основе двух вращающихся вокруг оптической оси бипризм: 1 – лазер; 2 – полуволнивая пластина; 3 – поляризатор; 4 – расширитель пучка/коллиматор; 5 – аттенюатор; 6 – первая бипризма; 7 – вторая бипризма; 8 – микроскоп; 9 – CCD-камера

В области перед микроскопом 8 формируется ДЧИП, которое регистрируется CCD-камерой 9.

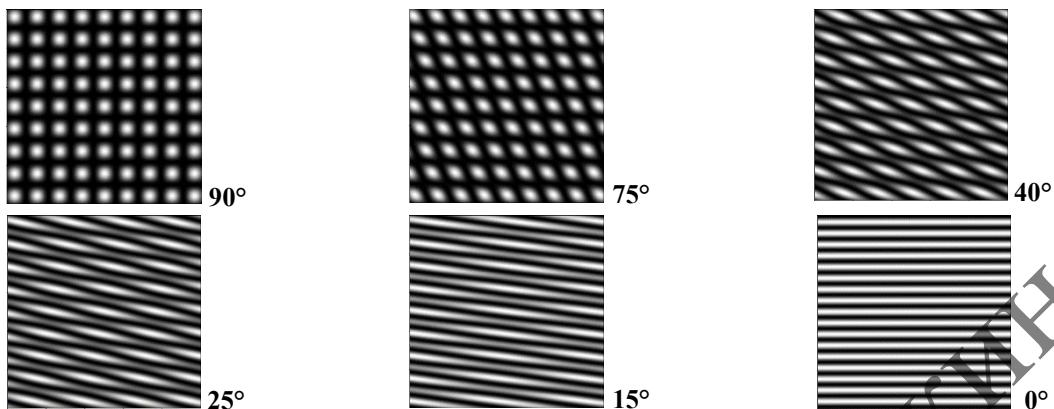


Рисунок 2 – Расчет ДЧИП при повороте одной из бипризм на указанный угол

Экспериментальные данные хорошо соответствуют расчету (рисунок 3).

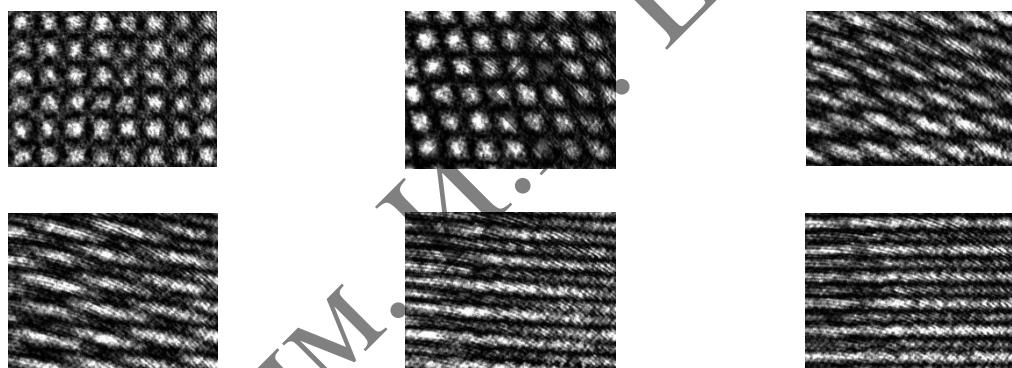


Рисунок 3 – ДЧИП в различные моменты времени (эксперимент)

На рисунке 2 показаны результаты расчетов в различные моменты времени поперечного распределения ДЧИП, формируемого парой бипризм, одна из которых неподвижна, а другая вращается вокруг оси. Первая картинка соответствует моменту, когда линия соприкосновения наклонных граней одной бипризмы перпендикулярна аналогичной линии другой бипризмы. Последняя - моменту, когда указанные линии параллельны друг другу. Выбирая угловую скорость вращения первой призмы так, чтобы она отличалась от скорости другой бипризмы, можно сформировать динамическое градиентное ячеистое световое поле для манипуляции микрочастицами, конфигурация которого может изменяться со скоростью, соответствующей таким характеристикам микрочастиц, как масса и поляризуемость.

2 Программа для расчёта траекторий микрочастиц. Микрочастицы, помещённые в ДЧИП, могут втягиваться градиентными силами в движущиеся и изменяющиеся по форме локальные максимумы интенсивности, описывая затем

различные по виду траектории. В связи с этим ДЧИП вызывает интерес с точки зрения его воздействия на ансамбли микрочастиц как искусственно созданные, так и естественно существующие в составе биотканей. В среде Python 3.8 нами разработана программа для расчета и регистрации траекторий микрочастиц, позволяющая задавать параметры лазерного излучения, бипризм, ДЧИП и частиц в допустимых экспериментальной практикой диапазонах. На рисунке 4 показан интерфейс разработанной и уже несколько раз усовершенствованной программы.

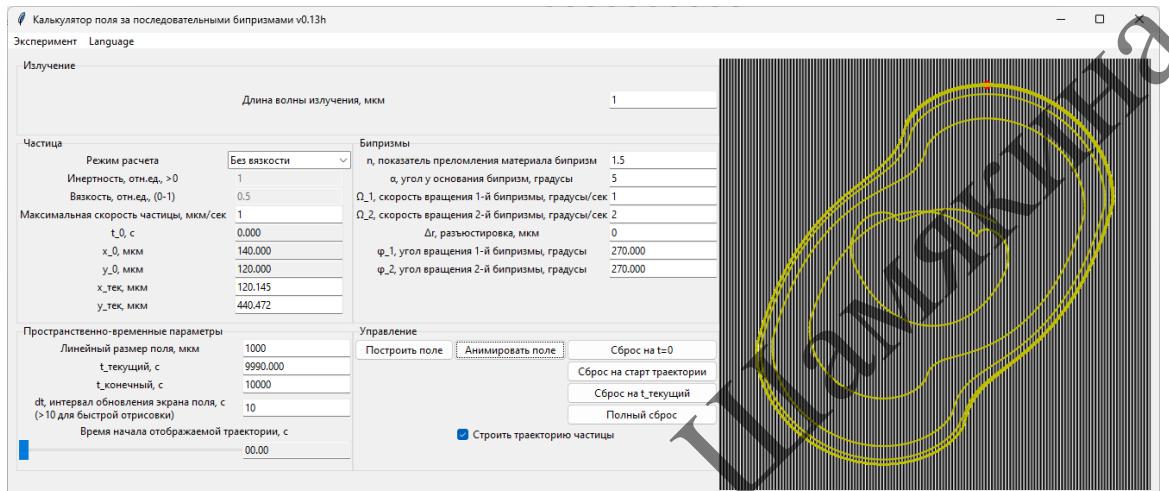


Рисунок 4 – Интерфейс программы для расчёта траекторий микрочастиц в ДЧИП

3 Результаты первых численных экспериментов. В самом простом случае ДЧИП, когда обе бипризмы врачаются в одном направлении с одинаковыми угловыми скоростями $\omega_1 = \omega_2$, все микрочастицы, попавшие в ДЧИП, обязательно втягиваются в первый попавшийся световой максимум интенсивности и начинают двигаться по окружности с радиусом, примерно равным расстоянию, на котором частица находилась в нулевой момент времени (рисунок 5).

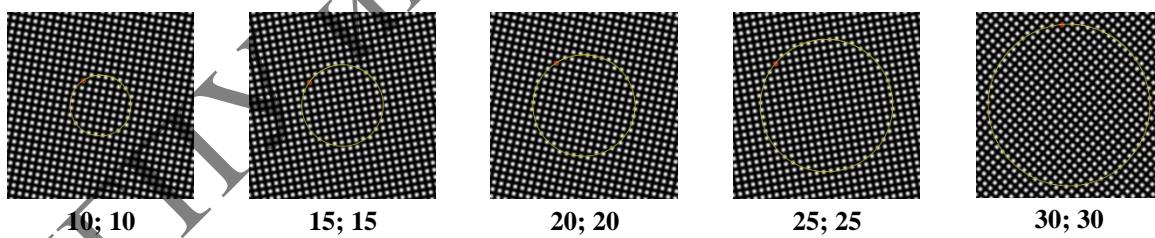


Рисунок 5 – Траектории частиц, находящихся в начальный момент на различных расстояниях от оси вращения бипризм

Постепенно увеличивая угловую скорость до того момента, когда даже находящиеся вблизи оси вращения бипризм, где линейная скорость перемещения световых ловушек минимальна, частицы будут не успевать двигаться за максимумом интенсивности по причине вязкого сопротивления жидкости, можно добиться статистически равномерного распределения микрочастиц в каждом поперечном сечении ДЧИП. Данная конфигурация схемы может эффективно использоваться для равномерного распределения микрочастиц во всём объёме суспензии, находящемся под

воздействием ДЧИП, учитывая тот факт, что вдоль оси вращения бипризм в ДЧИП также возможно формировать градиент интенсивности, который позволит двигать микрочастицы вдоль этой оси, например, поднимать частицы со дна кюветы по направлению к поверхности суспензии.

В случае различных угловых скоростей ω_1 и ω_2 наблюдаются другие интересные закономерности. Серия проведенных с помощью программы численных экспериментов показала, что если угловая скорость вращения одной из бипризм в целое число n раз больше скорости вращения второй бипризмы, в случае выхода движущейся в формируемом световом поле микрочастицы, находящейся от оси вращения бипризм на расстоянии нескольких десятков микрометров, на неизменную (стационарную) траекторию, эта траектория состоит из $2n - 2$ «лепестков». На рисунке 6 продемонстрированы рассчитанные с помощью программы траектории частиц при различных соотношениях угловых скоростей вращения бипризм. При незначительном увеличении начального расстояния между частицей и осью вращения бипризм стационарная траектория практически не изменяется. Траектория частицы, начинающей движение на расстоянии около 100 мкм, может иметь нестационарный характер на протяжении 10 и более витков, причем каждый следующий виток не повторяет ни одного из предыдущих.

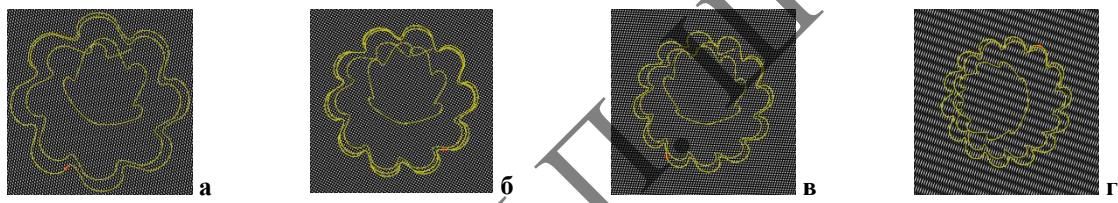


Рисунок 6 – Траектории микрочастицы в ДЧИП при соотношении угловых скоростей вращения бипризм: а – 1/5, б – 1/6, в – 1/7, г – 1/8.

В некоторых случаях зафиксированы стационарные траектории, состоящие из двух различных витков, переходящих друг в друга.

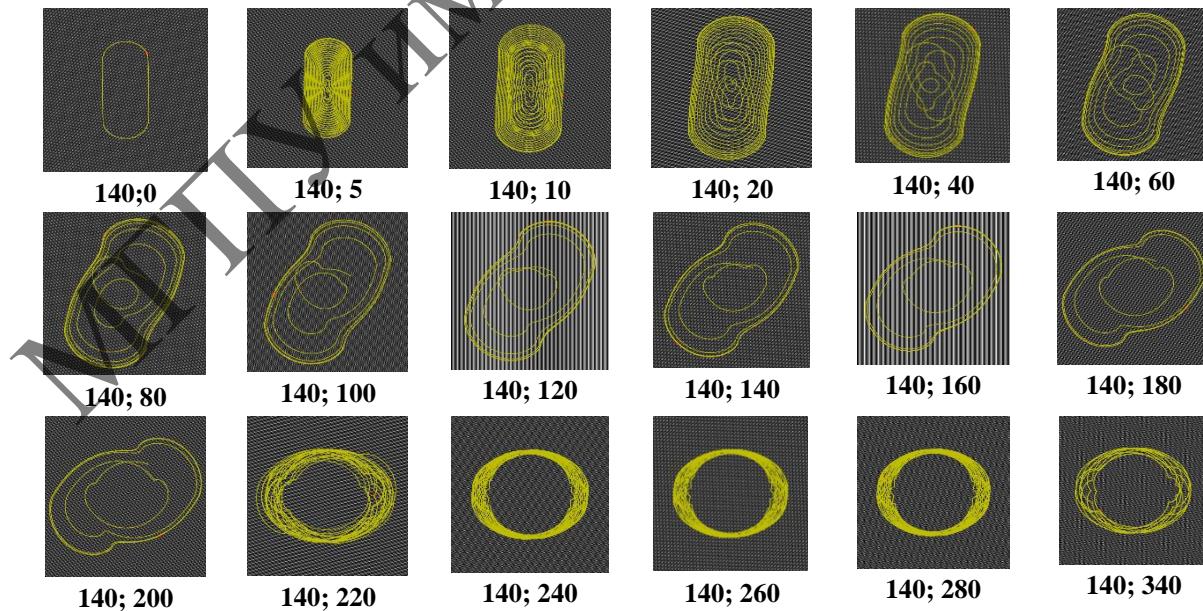


Рисунок 7 – Траектории микрочастицы в ДЧИП при соотношении угловых скоростей вращения бипризм 2/1 и различных начальных координатах микрочастицы (поле наблюдения на 1000 мкм)

При вариации с шагом 5 мкм одной из двух начальных координат при фиксированной второй координате установившаяся стационарная траектория слабо изменяется по форме и поворачивается на некоторый небольшой угол около 4° , однако при равенстве нулю координаты у стационарная траектория вырождается в овал, а при значениях у от 200 и выше стационарная траектория становится многовитковой, что вызвано слишком высокой линейной скоростью световых максимумов на таком расстоянии от оси вращения и многократными переходами микрочастицы из одного максимума в другой. На рисунке 7 показаны стационарные траектории микрочастицы при соотношении угловых скоростей вращения бипризм 2 к 1 для нескольких комбинаций начальных координат.

С помощью программы были исследованы траектории частицы для случаев, когда до начала вращения частица находится на различных расстояниях, меньших 200 мкм от оси вращения бипризм, а угловые скорости их вращения связаны соотношением $\omega_2 = 4 \omega_1$. Траектории частиц были рассчитаны для 6 начальных положений частицы вдоль диагонали поля на различных расстояниях от оси вращения бипризм. Координаты $x; y$ частицы принимали значения от 19,2; 19,2 до 115,2; 115,2 мкм. В нулевой момент времени ребра бипризм были перпендикулярны, ребро первой бипризмы было ориентировано вертикально. Рассчитанные траектории показаны на рисунке 8.

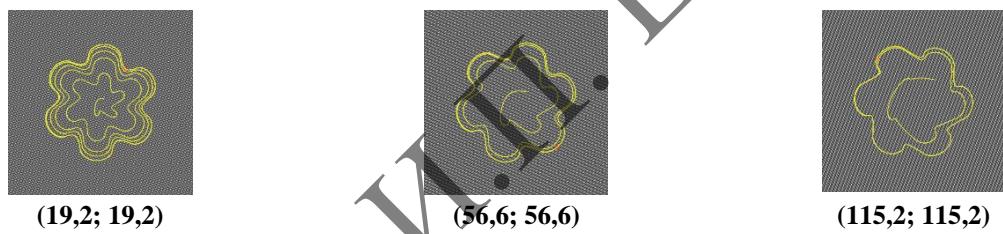


Рисунок 8 – Траектории движения частицы в ДЧИСП при различных координатах ($x; y$) в начальный момент времени

Результаты расчётов показали, что начальное местоположение частицы на диагонали поля в подавляющем большинстве случаев мало влияет на вид установившейся в итоге стационарной 6-лепестковой траектории. Радиальная координата вершин лепестков остается практически постоянной, с увеличением начального расстояния от оси сильнее изменяется крутизна левого и правого склонов каждого лепестка. При увеличении координат ($x; y$) частица быстрее выходит на стационарную траекторию, т.е. уменьшается количество нестационарных витков. Квазиинвариантность радиальной координаты вершин устанавливающейся стационарной траектории можно использовать при воздействии ДЧИСП на ансамбли микрочастиц для их перераспределения в среде, в частности, для сбора частиц со всей плоскости в заданной точке.

Заключение. Разработанная программа рассчитывает траектории микрочастиц, движущихся под воздействием динамического четырехлучевого интерференционного поля, в широком диапазоне параметров светового поля и свойств микрочастиц, что позволяет определить перспективы применения световых полей данного типа.

Авторы благодарят Институт физики НАН Беларуси за предоставленные возможности для проведения научно-исследовательских работ в рамках сотрудничества научных организаций НАН Беларуси с учреждениями образования.

Список использованных источников

1. Ashkin, A. Acceleration and Trapping of Particles by Radiation Pressure // Physical Review Letters. – 1970. – Vol. 24, № 4. – P. 156–159.
2. Kazak, N.S. Methods of formation of gradient light fields / N.S. Kazak, A.A. Ryzhevich, E.G. Katranji, A.N. Khilo // Seventh International conference on Laser and Laser-Information technologies: Proceedings of SPIE, Suzdal, Russia, 22–26 June 2001 / Ed. by V.Ya. Panchenko, V.S. Golubev. – Suzdal, Russia, 2001. – Vol. 4644. – P. 520–529.
3. Способ формирования переменного градиентного светового поля; пат. на изобр 10393 Респ. Беларусь, МПК G 02F 1/01 / А.А. Рыжевич, Ю.А. Куприянова ; заявитель ГНУ «Институт физики Б.И. Степанова НАН Беларуси». – № а 20050993; заявл. 17.10.2005 ; опубл. 28.02.2008 // Афіцыйны бюл. / Нац. цэнтр інтэлектуал. уласнасці. – 2008. – № 1 (60). – Ч. 1. – С. 146–147.

УДК 539.194:547.262

Г.С. Баранов, Я.В. Полякова, А.Ю. Мухина, Г.А. Пищевич, А.Э. Малевич

Белорусский государственный университет

ВРАЩЕНИЕ ГИДРОКСИЛЬНЫХ ГРУПП В МОЛЕКУЛЕ БОРНОЙ КИСЛОТЫ

Исследованы спектрально-структурные свойства молекулы борной кислоты с тремя гидроксильными группами. Расчетами определены конформации, туннельные расщепления, высоты барьеров. Обнаружено 2 конформера. Теоретически оценены расщепления торсионных колебательных состояний и высоты потенциальных барьеров.

Ключевые слова: борная кислота, конформеры, торсионные колебания, туннелирование, потенциальный барьер.

Введение. Молекула борной кислоты ($\text{B}(\text{OH})_3$) была впервые синтезирована Хомбергом в 1702 году, а ее состав был впервые определен лишь в 1808 году. В кристаллической фазе молекула $\text{B}(\text{OH})_3$ имеет триклиническую решетку, формируя плоские слои, в которых молекулы соединены водородными связями. Борная кислота (БК) также неплохо растворяется, в частности, в воде, и в других растворителях. Однако, долгое время считалось, что в газовой фазе молекула крайне нестабильна, и за очень короткое время распадается. В настоящее время БК находит множество применений. Ее раствор в этиловом спирте используется в качестве антисептика, а сама молекула – для изготовления ряда медпрепаратов. Также она используется в качестве поглотителя нейтронов в ядерных реакторах, в производстве керамики, стекла, оптоволокна, в составе электролитов и веществ для защиты древесины.

Спектрально-структурные характеристики молекулы исследовались главным образом в кристаллической фазе, однако эти свойства для свободной молекулы представляют значительный интерес, поскольку она содержит три гидроксильные группы, которые являются некооксиальными внутренними волчками. Одновременное присутствие трех таких волчков делает молекулу БК уникальной. Возможность вращения О-Н групп вокруг В – О связей ведет к реализации двух конформеров, каждый из которых имеет несколько эквивалентных конфигураций. Между эквивалентными конфигурациями возможно туннелирование. Совокупность этих свойств позволяет отнести БК к нежестким молекулам, а ряд ее колебаний должен характеризоваться большой амплитудой. Интерес к этим свойствам стал предметнее после того, как исследования с помощью масс-спектрометрии и анализ ИК спектров в матричной изоляции [1] показали, что мономерные молекулы БК существуют в газовой фазе и при этом вполне стабильны. Авторы смогли зарегистрировать ИК спектры изолированных молекул БК в азотной матрице при низкой температуре. Предполагая, что равновесная конфигурация молекулы $\text{B}(\text{OH})_3$ принадлежит к точечной группе симметрии $\text{C}_{3\text{h}}$, и опираясь на результаты работы [2], в которой было показано, что три торсионных колебания относятся к типам симметрии A'' и E'' , авторы смогли отнести полосу поглощения 513 см^{-1} к торсионному колебанию гидроксильных групп типа A'' , при этом согласно групповому анализу дважды вырожденное торсионное колебание типа E'' не активно в ИК спектре. Несмотря на безусловную ценность работы [1], доказавшей существование и стабильность молекулы в газовой фазе, информация о свойствах торсионных колебаний гидроксильных групп не приемлема для свободной молекулы, поскольку любая и особенно азотная матрица существенно влияет на молекулярные характеристики, может стабилизировать одни конформеры и препятствовать реализации других. Авторам не удалось зарегистрировать туннельные расщепления колебательных уровней энергии и оценить на основании спектральных данных высоты потенциальных барьеров к вращению гидроксильных групп. Поэтому целью настоящей работы был анализ конформаций и эквивалентных конфигураций молекулы БК, теоретическое определение туннельных расщеплений ее торсионных колебательных состояний, а также оценка высот потенциальных барьеров.

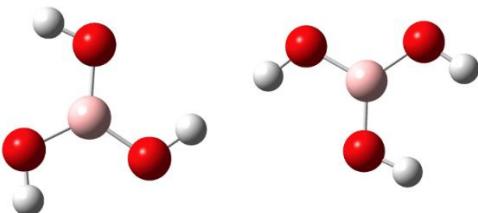


Рисунок 1 – Равновесные конфигурации конформера А (слева) и В (справа) молекулы борной кислоты

Как показано на рисунке 1, молекула БК реализуется в виде двух конформеров. На рисунке слева конформер А принадлежит к точечной группе $\text{C}_{3\text{h}}$, а справа конформер В, который принадлежит к точечной группе Cs . Переход от одного конформера к другому может быть осуществлен за счет вращения одной из гидроксильных групп на угол 180° . Такие вращения сопровождаются преодолением потенциальных барьеров.

Конформер А реализуется в виде двух эквивалентных конфигураций, а конформер В – в виде шести эквивалентных конфигураций. Между эквивалентными конфигурациями возможно туннелирование. Это означает, что все колебательные (в том числе и торсионные) уровни энергии конформера А должны расщепляться на два подуровня за счет конфигурационного взаимодействия. В случае конформера В конфигурационное взаимодействие должно вести к расщеплению соответствующих уровней энергии на шесть подуровней. Всевозможные конфигурации объединяет группа молекулярной симметрии (ГМС) $D_{3h}(M)$. Она содержит 12 инверсно – перестановочных операций симметрии, включая тождественную. Для описания торсионных колебаний гидроксильных групп были введены три торсионные координаты: γ_1 , γ_2 и γ_3 . Для конформера А на рисунке 1 значения всех трех координат равны нулю. Для конформера В значения двух торсионных координат равны нулю, а значение третьей координаты равно 180° . Под действием операций симметрии ГМС значения торсионных координат меняются согласно уравнению (1).

$$\begin{aligned} (\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3) &\Rightarrow (-\gamma_1, -\gamma_2, -\gamma_3) \Rightarrow (-\gamma_3, -\gamma_2, -\gamma_1) \Rightarrow (-\gamma_2, -\gamma_1, -\gamma_3) \\ &\Rightarrow (\gamma_1, \gamma_3, \gamma_2) \Rightarrow (\gamma_3, \gamma_2, \gamma_1) \Rightarrow (\gamma_2, \gamma_1, \gamma_3) \Rightarrow (-\gamma_1, -\gamma_2, -\gamma_3) \Rightarrow (\gamma_3, \gamma_1, \gamma_2) \quad (1) \\ &\Rightarrow (\gamma_3, \gamma_1, \gamma_2) \Rightarrow (\gamma_2, \gamma_3, \gamma_1) \Rightarrow (-\gamma_3, -\gamma_1, -\gamma_2) \Rightarrow (-\gamma_2, -\gamma_3, -\gamma_1) \end{aligned}$$

Для определения энергий стационарных торсионных состояний молекулы $B(OH)_3$ была рассчитана 3D ППЭ путем вращения трех О-Н групп вокруг О-В связей. Расчеты выполнялись на уровне теории MP2/dAug-cc-pVDZ с помощью квантово-химического пакета ORCA 5.0.0 [3]. Значения торсионных координат γ_1 , γ_2 и γ_3 варьировались от 0° до 350° с интервалом 10° . Конфигурация из четырех атомов BO_3 фиксировалась плоской. В каждой точке 3D ППЭ с заданной тройкой торсионных координат выполнялась оптимизация энергии по всем остальным колебательным координатам. Рассчитанная 3D ППЭ в проекции на одну из 2D координатных плоскостей представлена на рисунке 2. Значения энергий стационарных торсионных состояний могут быть получены путем численного решения колебательного уравнения Шредингера ограниченной размерности [4,5]:

$$\left[\begin{array}{c} -F_{\gamma_1\gamma_1}(\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3) \frac{\delta^2}{\delta \gamma_1^2} - F_{\gamma_2\gamma_2}(\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3) \frac{\delta^2}{\delta \gamma_2^2} - F_{\gamma_3\gamma_3}(\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3) \frac{\delta^2}{\delta \gamma_3^2} - \\ -F_{\gamma_1\gamma_2}(\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3) \frac{\delta^2}{\delta \gamma_1 \delta \gamma_2} - F_{\gamma_1\gamma_3}(\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3) \frac{\delta^2}{\delta \gamma_1 \delta \gamma_3} - \\ -F_{\gamma_2\gamma_3}(\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3) \frac{\delta^2}{\delta \gamma_2 \delta \gamma_3} + U(\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3) \end{array} \right] \Psi(\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3) = E\Psi(\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3) \quad (2)$$

Здесь (2) F_{ij} – кинетические коэффициенты, которые рассчитывались с помощью формализма \vec{b} векторов Вильсона [5], $U(\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3)$ – потенциальная энергия молекулы как функция трех торсионных координат $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$, описывающих вращение трех гидроксильных групп вокруг О – В связей, $\Psi(\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3)$ – трехмерная волновая функция. Уравнение (1) решалось численно с помощью комплексных рядов Фурье с последующим составлением матрицы Гамильтониана:

$$H_{(m,n,l)(m',n',l')} = -m^2 F_{m-m',n-n',l-l'}^{\gamma_1 \gamma_1} - n^2 F_{m-m',n-n',l-l'}^{\gamma_2 \gamma_2} - l^2 F_{m-m',n-n',l-l'}^{\gamma_3 \gamma_3} - mn F_{m-m',n-n',l-l'}^{\gamma_1 \gamma_2} - ml F_{m-m',n-n',l-l'}^{\gamma_1 \gamma_3} - nl F_{m-m',n-n',l-l'}^{\gamma_2 \gamma_3} + U_{m-m',n-n',l-l'} \quad (3)$$

Диагонализация матрицы Гамильтонiana позволила получить в качестве собственных значений – энергий стационарных торсионных состояний, а в качестве собственных векторов – волновые функции, описывающие торсионные состояния молекулы.

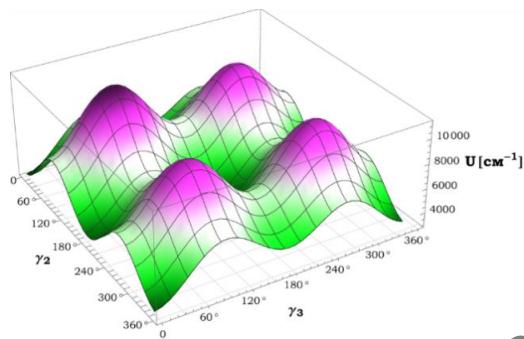


Рисунок 2 – Рассчитанная на уровне теории MP2/dAug-cc-pVQZ 2D ППЭ молекулы БК для значения координаты $\gamma_1 = 90^\circ$

Потенциальный барьер к вращению одной О-Н группы в конформере А при его конверсии в конформер В оказался равным 3133 см^{-1} . Обратный процесс характеризуется потенциальным барьером 1513 см^{-1} , а внутренняя энергия конформера В на 1620 см^{-1} больше внутренней энергии конформера А. При переходе из одной эквивалентной конфигурации в другую в случае конформера А все три гидроксильных волчка должны одновременно или поочередно преодолеть потенциальные барьеры, в то время как в случае конформера В переход из одной из шести эквивалентных конфигураций в другую может осуществляться как за счет вращения одного гидроксильного волчка, так и за счет вращения двух волчков. Рассчитанные значения энергий ряда стационарных торсионных состояний молекулы БК представлены в таблице 1.

Таблица 1 – Рассчитанные на уровне теории MP2/Aug-cc-pVTZ значения энергий стационарных торсионных состояний и их расщеплений за счет туннелирования для двух конформеров молекулы B(OH)_3

Номер уровня энергии	Тип конформера	Энергия [см^{-1}]	Расщепление уровня [см^{-1}]
1	A	0	$8.2 \cdot 10^{-6}$
2	A	0	
3	A	454.9	$3.2 \cdot 10^{-4}$
4	A	454.9	
5	A	511.6	0
6	A	511.6	$3.4 \cdot 10^{-5}$
7	A	511.6	
8	A	511.6	0
9	A	911.5	$1.3 \cdot 10^{-3}$

10	A	911.5	
11	A	948.0	0
12	A	948.0	$4.8 \cdot 10^{-5}$
13	A	948.0	
14	A	948.0	0
15	A	1007.6	$3.0 \cdot 10^{-4}$
16	A	1007.6	
17	A	1019.2	0
18	A	1019.2	$5.0 \cdot 10^{-5}$
19	A	1019.2	
20	A	1019.2	0
21	A	1366.8	$7.7 \cdot 10^{-4}$
22	A	1366.8	
23	A	1380.5	0
24	A	1380.5	$2.6 \cdot 10^{-4}$
25	A	1380.5	
26	A	1380.5	0
27	B	1414.9	$4.4 \cdot 10^{-7}$
28	B	1414.9	
29	B	1414.9	$9.5 \cdot 10^{-6}$
30	B	1414.9	
31	B	1414.9	$3.8 \cdot 10^{-5}$
32	B	1414.9	

Поскольку основной конформер А реализуется в двух эквивалентных конфигурациях, то все колебательные уровни должны быть дублетными за счет конфигурационного вырождения. При этом также следует иметь ввиду, что в конформере А реализуются невырожденные и дважды вырожденные колебания. Поэтому некоторые уровни энергии должны быть дублетными, а некоторые – расщепленными на четыре подуровня, что и наблюдается в результатах расчетов. Основное торсионное состояние должно быть дублетным. Как следует из таблицы 1 основное состояние конформера А расщеплено за счет туннелирования, и рассчитанная величина расщепления оказалась равной $8.2 \cdot 10^{-6} \text{ см}^{-1}$. Оценка этой величины выполнено впервые и представляет большой интерес. Из таблицы 1 также следует, что частота фундаментального невырожденного колебания оказалась равной 455 см^{-1} , что существенно ниже экспериментально установленного значения (513 см^{-1}). Здесь следует учесть тот факт, что экспериментальное определение этой частоты осуществлялось в азотной матрице, которая, как известно, вносит наибольшие в сравнении с другими типами матриц возмущения в относительные расположения колебательных уровней. В тоже время расчеты выполнялись для свободной молекулы. Отметим также, что туннельные расщепления торсионных состояний конформера В молекулы БК носят сложный характер. В частности, величины туннельных расщеплений основного колебательного состояния конформера В (номера уровней 27–32) между некоторыми уровнями составляют порядка $10^{-7} – 10^{-5} \text{ см}^{-1}$, а между другими компонентами мультиплета – $10^{-3} – 10^{-2} \text{ см}^{-1}$. Этот факт мы связываем с отмеченными выше различными

механизмами туннелирования в случае конформера В с участием одного или двух гидроксильных волчков.

Список использованных источников

1. Ogden, J.S. The Characterisation of Molecular Boric Acid by Mass Spectrometry and Matrix Isolation Infrared Spectroscopy / J.S. Ogden, N.A. Young // J. Chem. Soc. Dalt. Trans. – 1988. – P. 1645–1652.
2. Cyvin, S.J. Spectroscopic Studies on X(YZ)3 Type Molecules II. Application of Complex Symmetry Coordinates to Molecular Vibrations of Boric Acid with Symmetry C3H / S.J. Cyvin, R.W. Mooney, J. Brunvoll, L.A. Kristiansen // Act. Chem. Scand. – 1965. – Vol. 19, iss. 5. – P. 1031–1038.
3. Neese, F. The ORCA quantum chemistry program package / F. Neese, F. Wernmohs, U. Becker, C. Riplinger / J. Chem. Phys. – 2020. – Vol. 152, iss. 22. – P. 152–155.
4. Pitsevich, G.A. Symmetry Properties, Tunneling Splittings of Some Vibrational Energy Levels and Torsional IR Spectra of the Trans – and Cis – Conformers of Hydroquinone Molecule / G.A. Pitsevich, A.E. Malevich // J. Mol. Spectr. – 2024. – Vol. 404, iss. 6. – P. 501–509.
5. Pitsevich, G.A. How Symmetry Helps to Improve the Estimation of the Hyperfine Splitting of Torsional Levels Due to Tunneling. The Case of the HSSSH Molecule / G.A. Pitsevich, A.E. Malevich, A.A. Kamnev // Spectrochim. Acta Part A. – 2025. – Vol. 2, iss. 3. – P. 327.
6. Pitsevich, G.A. Simple Method of the Formation of the Hamiltonian Matrix for Some Schrödinger Equations Describing the Molecules with Large Amplitude Motions / G.A. Pitsevich, A.E. Malevich // Optics and Photonic Journal. – 2012. – Vol. 4, iss. 2. – P. 322–337.

УДК 004.942

С.Р. Бондарь, А.С. Пилипейко

Мозырский государственный педагогический университет имени И.П. Шамякина

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕПЛА В ПАКЕТЕ PDE TOOLBOX MATLAB

Выполнено компьютерное моделирование распределения температуры в кирпичном помещении, состоящем из двух комнат в которых работают два компьютера, сервер и кондиционер с использованием пакета PDE Toolbox.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, графический интерфейс, matlab, параболическое уравнение, граничные условия.

Параболические уравнения – класс дифференциальных уравнений в частных производных, описывающих нестационарные процессы.

Нахождение решения задач с уравнением параболического типа рассматривается совокупность краевых и начальных условий. Так как по времени уравнение имеет первый порядок, то накладывается одно начальное условие на исходную функцию.

Для численного решения параболических уравнений используют метод конечных элементов, метод конечных разностей, метод конечных объёмов, а также их комбинации и другие численные методы, подходящие под решаемую задачу [1].

Примеры уравнений параболического типа:

- уравнения описывающие процессы конвекции и диффузии, в том числе уравнение диффузии и его частный случай – уравнение теплопроводности;
- система уравнений Навье-Стокса, описывающее движение жидкости и газов, является системой параболических уравнений с дивергентными ограничениями;
- для некоторых типов сред из уравнений Максвелла можно получить параболические уравнения относительно векторов \mathbf{A} или \mathbf{E} .

В настоящее время практически в любой сфере профессиональной деятельности используются компьютерная и оргтехника, поэтому одной из актуальных задач является обеспечение условий для нормального функционирования данных устройств.

Оптимальная температура для помещений, в которых работают компьютеры: 17–20°C, однако допустимым является также диапазон при эксплуатации: от +15 до +32°C.

Если температура в помещении, где эксплуатируется сервер, выше 28°C, то в корпусе сервера она приблизится к 50°C. Для большинства современных микросхем критичной считается температура в 71°C, и, если в помещении отсутствует вытяжная и приточная вентиляция, порог в 71°C будет быстро достигнут.

Конечно, микросхемы не выйдут из строя, сработают всяческие защиты, но на деле мы получим либо существенное замедление работы, либо экстренное выключение оборудования.

Задача с уравнением параболического типа представлена задачей о нестационарном распределении температуры в рабочем кирпичном помещении, состоящем из двух комнат, соединенных коридором. Стены одной комнаты теплоизолированы и в ней находятся два рабочих компьютера, на одной из стен установлен кондиционер, который охлаждает воздух согласно линейному закону $-2*t$, два компьютера выделяют тепло 35°C. В соседней комнате расположен сервер, который выделяет температуру 50°C. Температура внешней среды 25°C. Начальная внутренняя температура 25°C. Найти распределение температуры $T(t)$ в области.

Решение задачи начинается с установки вида расчета «Heat Transfer» и проектирования помещения серверной комнаты и находящейся в ней техники (рисунок 1).

При рисовании программа дает каждой области индивидуальное наименование, в данном случае таких областей здесь семь, и они получили названия: R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7. В строке Set Formula можно исключить какое-либо множество из расчета, но для данном случае в строке Set Formula будет запись: R2+R3-R7+R1-R4-R5-R6. В результате в рабочей области получим необходимый нам вид сечения проводника (рисунок 1).

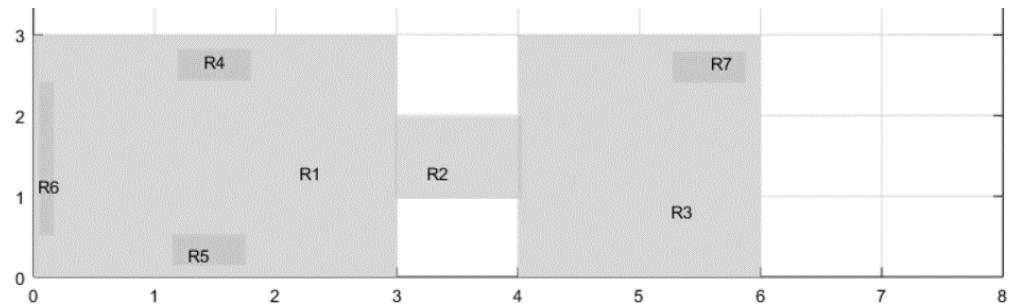
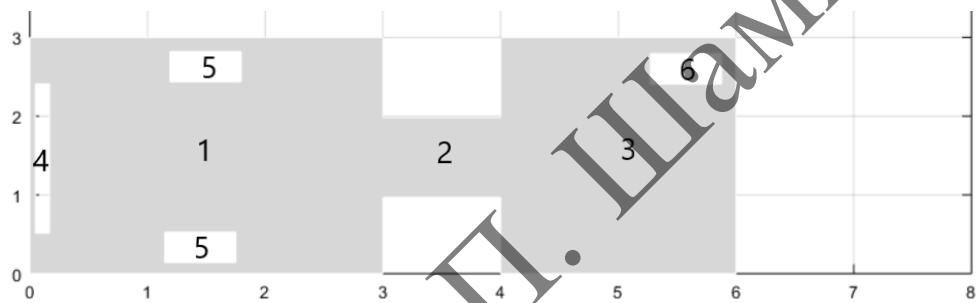


Рисунок 1 – Вид помещения в рабочей области

Далее определяются граничные условия на каждом участке. Для этого в группе команд Boundary, активируется режим Boundary Mode. После в рабочей области появится изображение помещений, поделенных на сегменты (рисунок 2) для который необходимо задавать граничные условия [2].



1 – первая комната с теплоизолированными стенами, 2 – коридор, 3 – вторая комната,
4 – кондиционер, 5 – компьютер, 6 – сервер

Рисунок 2 – Вид помещения в рабочей области

Для помещения с теплоизолированными стенами задаются нулевые краевые условия Неймана. Для оборудования устанавливаются граничные условия Дирихле с температурами, которые заданы в условиях задачи. После этого определяется вид дифференциального уравнения и указываются все его коэффициенты в группе команд PDE Specification (рисунок 3).

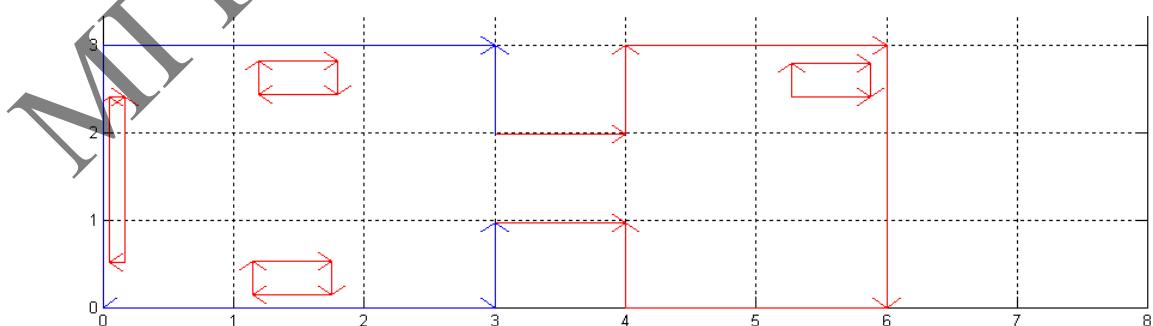


Рисунок 3 – Выделение границы для задания краевых условий

После определения всех необходимых условий и коэффициентов выполняется триангуляция расчетной области (рисунки 4, 5).

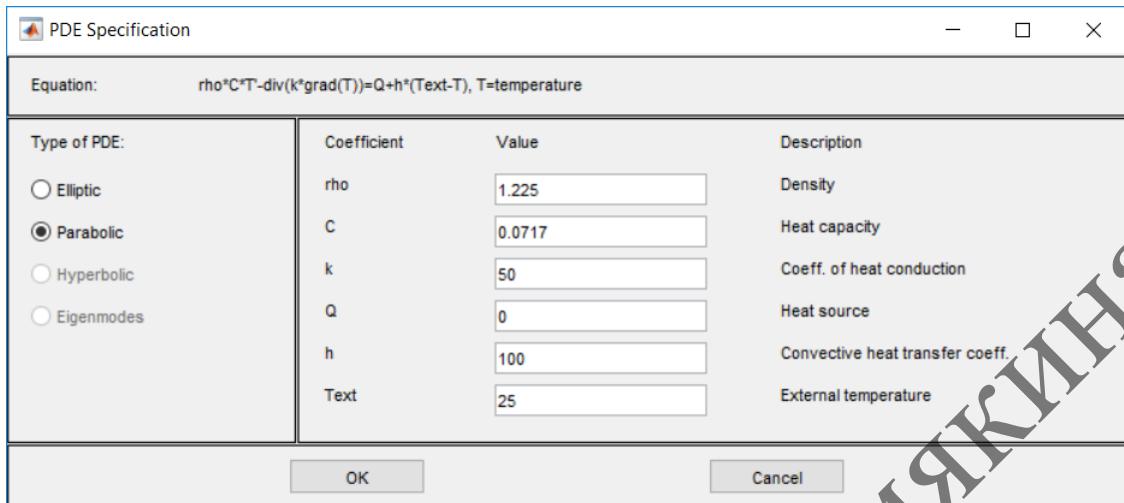


Рисунок 4 – Задание типа уравнения и его коэффициентов для комнаты с сервером

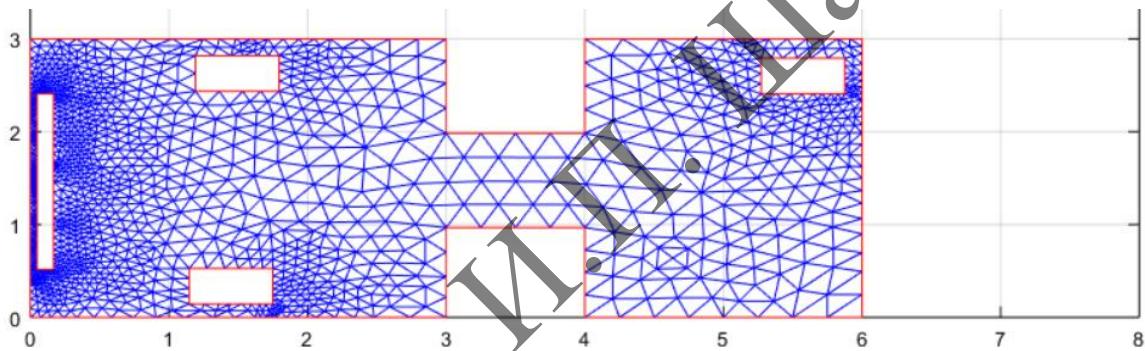


Рисунок 5 – Построение сетки на исследуемой области

Для получения решения активируется команда Solve PDE в группе команд Solve, полученное в результате решение представлено на рисунке 6.

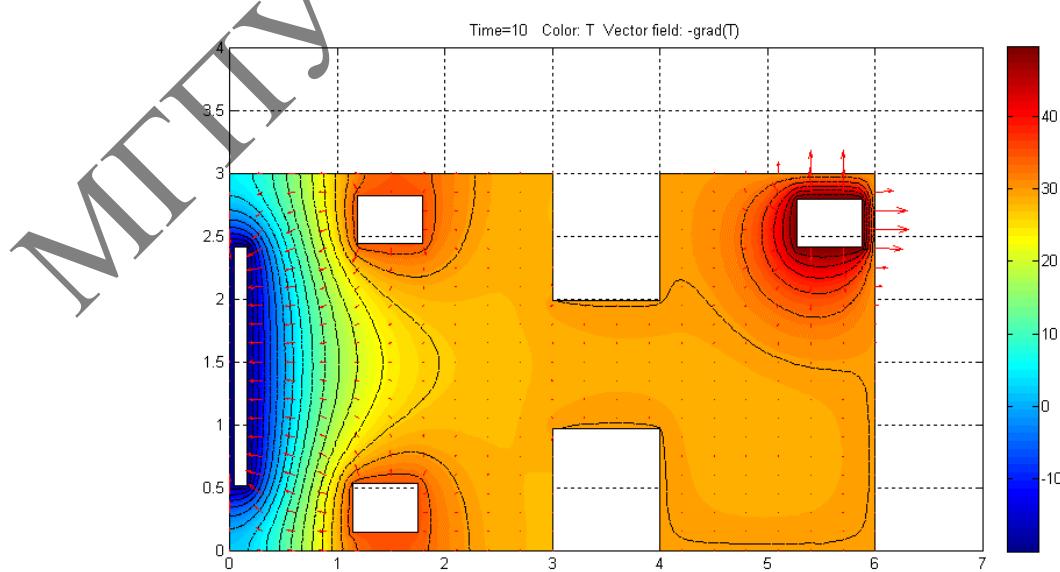


Рисунок 6 – Вид двухмерного решения

PDE Toolbox предоставляет в распоряжение пользователя около пятидесяти функций, предназначенных для реализации этапов решения задачи от задания геометрии области до визуализации результата. Графический интерфейс пакета дает возможно работать с двухмерной моделью без особых знаний в программировании.

Использование программы PDE Toolbox для решения физических задач методом конечных элементов оправдано, так как при минимальных затратах времени и неглубоких знаниях в программировании можно получить точное решение поставленных задач.

Список использованных источников

1. Ануфриев, И.Е. MATLAB 7 / И.Е. Ануфриев, А.Б. Смирнов, Е.Н. Смирнова. – СПб. : БХВ-Петербург, 2005. – 1104 с.
2. Дьяконов, В.П. MATLAB. Полный самоучитель / В.П. Дьяконов. – М. : ДМК Пресс, 2012. – 768 с.

УДК 612.13+519.6+004.921

М.В. Гольцев, В.А. Мансуров, Л.Д. Рагунович, Н.А. Трушель

Белорусский государственный медицинский университет

ДЕФОРМАЦИЯ СОСУДИСТОЙ СТЕНКИ В МЕСТЕ СЛИЯНИЯ ПОЗВОНОЧНЫХ АРТЕРИЙ В БАЗИЛЯРНУЮ

Посредством численного моделирования взаимодействия упругой стенки сосуда с потоком вязкой жидкости исследованы картины течения и напряжено-деформированного состояния стенки сосуда в месте слияния позвоночных артерий в базилярную для установления морфологических предпосылок развития цереброваскулярной патологии.

Ключевые слова: численное моделирование, изотропное упругое тело, напряженно-деформированное состояние, взаимодействие жидкости и упругой среды, позвоночные артерии, базилярная артерия.

Введение. В последние годы интерес к исследованиям в области математического моделирования кровотока в артериях головного мозга постоянно растет. Вероятно, это можно связать с постоянным ростом сердечно-сосудистых заболеваний [1–3]. Следует отметить, что сосудистая система имеет несколько особенностей, которые затрудняют моделирование ее механики: сложная анатомия, кровеносные сосуды, как правило, эластичные, а кровь представляет собой гетерогенную жидкость. Артерии ветвятся в преимущественно древовидной структуре [4–6].

Большая часть артерий головного мозга разветвляется, однако на нижней поверхности головного мозга имеется участок сосудов, где две артерии (позвоночные) соединяются в одну (базилярную) (рисунок 1). Такое соединение существенно меняет тип движения крови в сосудистом сегменте, такое соединение артерий в один сосуд усложняет картину течения крови в этом сегменте, особенно в связи с патологическими явлениями на стенах артерий и может привести к возникновению аневризм [4].

Актуальность исследования особенностей кровотока в сосудах головного мозга обусловлена стенотическими поражениями внутристерной части позвоночных и базилярной артерий, а также образованием аневризм базилярной артерий [3]. Целью данной работы является численное моделирование взаимодействия упругой стенки сосуда с потоком вязкой жидкости чтобы выяснить картину напряженно-деформированного состояния стенки сосуда и картины течения для установления морфологических предпосылок развития цереброваскулярной патологии.

Материалы и методы. Макроскопически изучены морфометрические показатели на 30 препаратах головного мозга взрослых людей обоего пола с разной формой черепа. На основании полученных морфометрических показателей установлены средние значения средних размеров артерий и углов ветвления в зависимости от формы черепа человека (таблица 1).

Таблица 1 – Геометрия соединений базилярных артерий в зависимости от формы черепа

	Долихокраны	Мезокраны	Брахиокраны
Диаметр основного сосуда, мм	5	4,4	4,2
Диаметр левого сосуда, мм	3,5	2,9	3,2
Диаметр правого сосуда, мм	4,3	2,7	2,9
Угол соединения, °	77	76,8	54
Толщина стенки, мм	0,65	0,65	0,6

По этим данным построены численные трехмерные геометрические модели соединения сосудов, состоящие из отрезков одинаковой длины (35 мм) с симметричным расположением отрезков дочерних сосудов относительно центральной линии отрезка основного сосуда (рисунок 2).

Геометрия модели состоит из двух соединяющихся каналов одинаковой длины и различного сечения, которые переходят в один канал, каналы ограничены упругой стенкой (анизотропией пренебрегается [5]). Жидкость

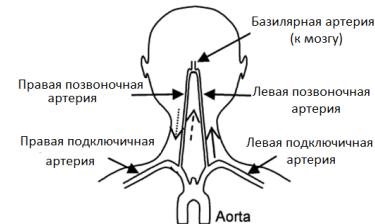


Рисунок 1 – Схема слияния позвоночных артерий в базилярную

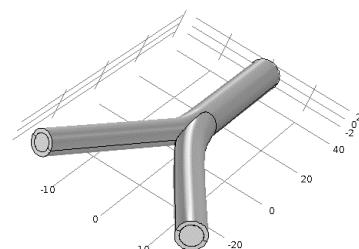


Рисунок 2 – Численная геометрическая модель слияния позвоночных артерий в базилярную (Долихокраны)

движется по соединенным каналами и смешивается в области их соединения. На стенках канала создается механическое напряжение, возникающее в результате вязкого сопротивления и давления жидкости. Свойства упругой и вязкой среды находятся таблице 2 [7].

Таблица 2 – Использованные свойства упругой и вязкой среды

Свойство	Жидкость	Упругость
Плотность, кг/м ³	1050	1150
Вязкость, мПа•с	5	-
Модуль Юнга, Па	-	10 ⁵
Коэффициент Пуассона	-	0,45

Известно, что средние скорости течения на входе толстого дочернего сосуда находятся в диапазоне 10,7 \div 18,5 см/с (среднее значение – 15 см/с), на входе тонкого дочернего сосуда – 12 \div 19,5 см/с (среднее значение – 16 см/с). На стенке сосуда условия прилипания, окончания отрезков сосудов – неподвижны [5].

Основным методом моделирования этого взаимодействия был метод конечно-разностного интегрирования уравнения Навье-Стокса и условий механического равновесия сосудистой стенки для связанных задач течения вязкой жидкости и деформации упругой среды. Поток жидкости может деформировать стенку, поэтому для численного моделирования профиля течения в непрерывно деформируемой геометрии необходимо использовать метод Лагранжа-Эйлера (ALE – arbitrary Lagrange-Euler). Этот метод использует динамику деформирующей геометрии и движущихся границ с помощью движущейся сетки (moving mesh). Следовательно, поток жидкости также следует новому пути, поэтому течение в исходной геометрии будет отличаться от течения деформируемой геометрии [8, 9].

Результаты и обсуждение. Для всех рассматриваемых бифуркаций в месте соединения трех отрезков бифуркации возникает выпуклая деформация сосудистой стенки. Для анализа результатов использовались два параметра: максимальная абсолютная деформация и максимальное напряжение фон Мизеса [10]. Для главных напряжений тензора напряжений $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ напряжение фон Мизеса выражается как:

$$\sigma_{\text{vonMises}} = \sqrt{[(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2 + (\sigma_1 - \sigma_3)^2]/2}$$

Теория утверждает, что пластичный материал начинает повреждаться в местах, где напряжение по Мизесу становится равным предельному напряжению (таблица 3).

Таблица 3 – Результаты моделирования

	Долихокраны	Мезокраны	Брахиокраны
Максимальное напряжение фон Мизеса, Ра	2200	840	2060
Максимальная абсолютная деформация, м	$4 \cdot 10^{-5}$	$1 \cdot 10^{-5}$	$2,3 \cdot 10^{-5}$

Максимальная абсолютная деформация возникает в области соединения дочерних сосудов (рисунки 2–4). В этом же месте наблюдается максимум напряжение фон Мизеса. Стенка сосуда в данном сечении вытягивается в одном направлении и сжимается в другом, так как в случае сложной геометрии эти деформации могут быть несимметричны, что может вызывать вторичные течения в жидкости. Также видно из этого рисунка соединение двух потоков жидкости.

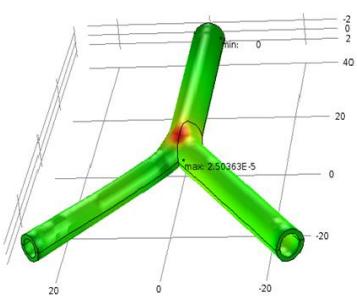


Рисунок 4 – Максимальная абсолютная деформация (выпячивание стенки)

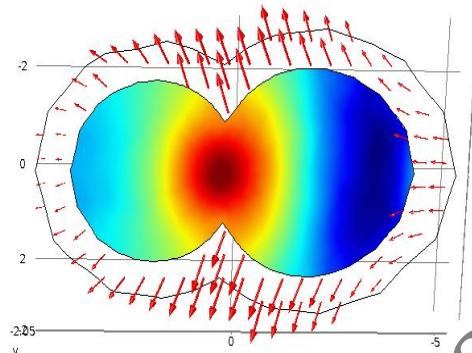


Рисунок 3 – Давление (цвет), величина и направление абсолютной деформации для сечения в точке максимальной деформации

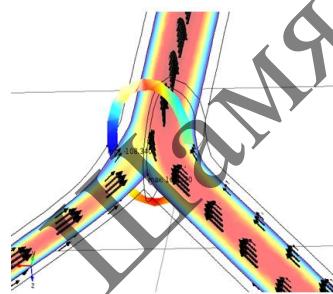


Рисунок 5 – Картина течения (поле скоростей течения - стрелки), максимальное напряжение фон Мизеса для сечения в точке максимальной деформации

Объяснить выпячивание стенки можно суммированием динамического давления при взаимодействии двух потоков. В центре давление максимально (рисунок 3) примерно 45 Па так скорости движения жидкости увеличивается (на стенке сосуда примерно 40 Па). Соответственно и деформация стенки в месте соединения дочерних сосудов имеет разнонаправленное действие.

Чтобы понять, как изменяются напряжение фон Мизеса и абсолютная деформация по сечению в точке максимальной деформации в зависимости от угла бифуркации, была предпринята попытка его математического изменения. Для этого угол первой рассматриваемой бифуркации (долихокранная форма черепа) менялся в пределах анатомически значимых углов с шагом в 10 градусов от 77° до 47° при сохранении других геометрических параметров (рисунки 5, 6).

На рисунке 5 видно, что максимальное напряжение фон Мизеса уменьшается с увеличением угла данного слияния. Это является следствием изменения динамического давления в центре сосуда да в зависимости от угла (меньшим углам соответствует большее динамическое давление).

Из рисунка 7 видно, что максимальная деформация стенки с увеличением угла имеет немонотонный характер с минимальным значением в области 65° . Вероятно, это связано с минимумом местных гидравлических сопротивлений для некоторых углов ветвления [11]. Местные сопротивления вызывают изменение величины или направления скорости движения жидкости на отдельных участках артерии, что связано

с появлением дополнительных потерь давления. Это приводит к тому, что при некоторых углах можно наблюдать минимум коэффициента местных гидравлических потерь и, следовательно, снижение динамического давления. Поэтому для этих углов риск возникновения сосудистых патологий должен быть меньше.

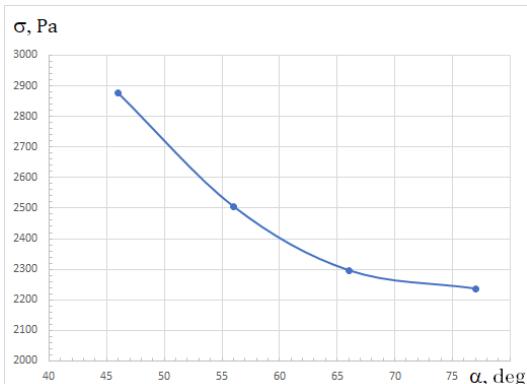


Рисунок 6 – Максимальное напряжение фон Мизеса в зависимости от угла соединения артерий

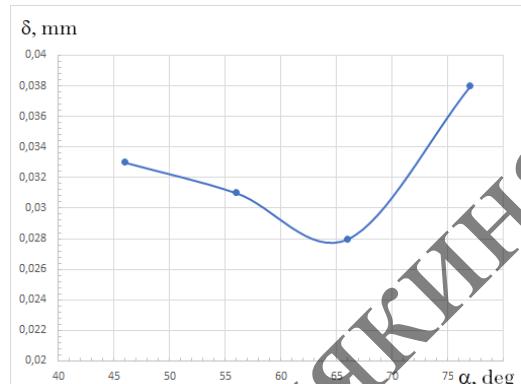


Рисунок 7 – Максимальная деформация стенки сосуда в зависимости от угла соединения артерий

Заключение. Математическое моделирование процессов течения в месте соединения артерий, в которых сливаются два потока, показывает, что в месте слияния возникает дополнительное динамическое давление, которое приводит к деформации стенки сосуда или выпячиванию стенки сосуда, что способно спровоцировать рост аневризмы. В результате численного математического моделирования обнаружено, что напряжение и деформация уменьшаются с увеличением угла слияния. Это позволяет предположить, что рост аневризмы с большей вероятностью провоцируется при малых углах соединения сосудов, а значит, у брахицранов, по сравнению с мезо- и долихокранами, риск развития цереброваскулярных заболеваний (аневризм и атеросклеротических бляшек) выше.

Список использованных источников

1. Гамилов, Т.М. Роль численного эксперимента в исследовании патологий сердечно-сосудистой системы / Т.М. Гамилов, С.С. Симаков, А.С. Холодов // Трансляционная медицина. – 2013. – Т. 23, № 6. – С. 5–13.
2. Formaggia, L. The circulatory system: from case studies to mathematical modelings / L. Formaggia, A. Quarteroni, A. Veneziani // Complex Systems in Biomedicine. – Milan : Springer, 2006 – P. 243–287.
3. Features of the Structure of Cerebral Vessels in Persons who Died from Rupture of Cerebral Artery Aneurysm / N.A. Trushel', N.I. Nechipurenko, R.R. Sidorovich [et al.] // Žurnal anatomii i histopatologii. – 2019. – Vol. 7, № 4. – P. 75–80.
4. Анатомо-физиологические особенности кровоснабжения центральной нервной системы и общие принципы ее защиты в хирургии грудной аорты / Г.Г. Хубулава, Н.Н. Шихвердиев, А.С. Пелешок [и др.] // Вестник Российской военно-медицинской академии. – 2016. – № 54. – С. 195–201.

5. Pedley, T.J. Fluid Mechanics of Large Blood Vessels / T.J. Pedley. – 1th ed. – West Nyack : Cambridge University Press, 1980. – 446 p.
6. Humphrey, J.D. Mechanics of the arterial wall: review and directions / J.D. Humphrey // Crit Rev Biomed Eng. – 1995. – Vol. 23, № 1–2. – P. 1–162.
7. A computational fluid–structure interaction model to predict the biomechanical properties of the artificial functionally graded aorta / A. Khosravi, M.S. Bani, H. Bahreinizade, A. Karimi // Bioscience Reports. – 2016. – Vol. 36, № 6. – P. e00431.
8. Yakhlef, O. Numerical Simulation of Dynamic Fluid-Structure Interaction with Elastic Structure–Rigid Obstacle Contact / O. Yakhlef, C.M. Murea // Fluids. – 2021. – Vol. 6, № 2. – P. 51.
9. Quarteroni, A. Mathematical Modelling and Numerical Simulation of the Cardiovascular System / A. Quarteroni, L. Formaggia // Handbook of Numerical Analysis // A. Quarteroni, L. Formaggia. – Elsevier, 2004. – Vol. 12. – P. 3–127.
10. Hill, R. The mathematical theory of plasticity : The Oxford engineering science series / R. Hill. – Oxford : Clarendon Press, 2009. – Вып. 11. – 355 с.
11. Rosen, R. Optimality Principles in Biology / R. Rosen. – New York, NY : Springer, 1967. – 209 p.

УДК 537.633.2:004.4'6

А. А. Григорьев

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ЧАСТИЦЫ В НЕОДНОРОДНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ В СРЕДЕ MATHCAD

Рассматривается технологизация процесса обучения посредством визуализации результатов моделирования в математическом редакторе MATHCAD.

Ключевые слова: технологизация процесса обучения, MATHCAD, электромагнетизм.

Введение. Достижения в области программного обеспечения сделали доступным широкий спектр компьютерных средств обучения для преподавания теории электромагнетизма. Учебные пособия и визуализации обычно нацелены на конкретные фундаментальные темы, для разработки которых требуются подробные знания программного обеспечения, и позволяют установить элементарную связь с другими соответствующими практическими темами.

Наличие приложений позволяют исследовать альтернативы в рамках представленного материала. Электронные книги *MATHCAD* обеспечивают платформу для обучения студентов, которая позволяет избежать недостатков других учебных программ и сочетает их с реальными лабораторными измерениями, для улучшения учебного опыта учащихся.

Процесс технологизации охватывает всю структуру образования, в том числе и предметное обучение. Наиболее важно технологизировать процессы, состоящие из большого числа последовательных этапов, стадий. Основной смысл технологизации заключен в том, чтобы определить и целесообразно распределить порядок процедур, обеспечивающих ход учебно-воспитательного процесса, стремясь при этом к достижению максимальной последовательности, рациональности и простоте выполнения операций. Технологические схемы учебно-воспитательного процесса базируются на следующих методологических требованиях: концептуальность, управляемость, системность и эффективность и ориентированы на принятие своевременных педагогических решений по конкретизации исходных принципов и идей обучения, для составления методических систем, для рационализации и индивидуализации учения.

При обучении естественнонаучным дисциплинам необходимо использовать программное обеспечение, которое может являться средой общения, редактирования математических объектов, моделирования процессов и средством презентации материала в лекционном режиме.

MATCAD – система компьютерной алгебры из класса систем автоматизированного проектирования, ориентированная на подготовку интерактивных документов с вычислениями и визуальным сопровождением. Среда математического моделирования *MATCAD* используется в сложных проектах, чтобы визуализировать результаты математического моделирования, путем использования распределённых вычислений и традиционных языков программирования. *MATCAD* достаточно удобно использовать для обучения, вычислений как физических, так и инженерных расчетов. Открытая архитектура приложения в сочетании с поддержкой технологий .NET и XML позволяют легко интегрировать *MATCAD* практически в любые ИТ-структуры и инженерные приложения. Есть возможность создания электронных книг (*e-Book*).

Для экспериментального исследования характеристик движения частиц, имеющих магнитный момент, применяется неоднородное магнитное поле. В качестве меры его неоднородности вдоль вертикальной оси *OZ* (рисунок 1) используется функция градиента $\frac{\partial B_z}{\partial z}$. Рассмотрим модель, в которой используется неоднородное магнитное поле, созданное двумя длинными параллельными проводниками, в которых токи текут в противоположных направлениях.

$$D(t, v) := \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{p_m \cdot 2 \cdot \mu \cdot V_5 \cdot 10^4}{\pi \cdot [a^2 + (V_5)^2]} \\ v \\ 0 \\ 0.005 \cdot v \end{bmatrix} \quad v = \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_0 \\ V_1 \\ V_2 \\ V_3 \\ V_4 \\ V_5 \end{pmatrix} \quad V_0(k) := \begin{pmatrix} v \\ 0 \\ v \\ 0 \\ \frac{a}{10} \cdot k \\ z_0 \end{pmatrix}$$

Рисунок 1 – а) вектор производная; б) вектор переменных; в) вектор начальных значений

Рассмотрим, как в среде *MATHCAD* можно произвести расчет величины индукции магнитного поля на оси *OZ* проводников с токами *I*, которые удалены на расстояние $2a$ друг от друга, и расположены симметрично относительно оси *OX*.

Воспользуемся известной формулой для индукции поля системы проводников: $B_z = \mu_0 2I \frac{a}{\pi(z^2 + a^2)}$. Средствами *MATHCAD* выполняем дифференцирование данного выражения по переменной *z* и получим величину производной индукции магнитного поля как функцию координаты *z*: $\frac{\partial B_z}{\partial z} = \frac{4\mu_0 azl}{\pi(z^2 + a^2)}$. Для анализа траектории движения частицы с магнитным моментом в неоднородном магнитном поле перейдём от векторной формы 2-го закона Ньютона к системе дифференциальных уравнений 1-го порядка для проекций скоростей и координат.

Численно решим данную систему дифференциальных уравнений, применив метод Рунге-Кутта 4-го порядка, которому в среде *MATHCAD* соответствует встроенная функция: $V_k = rkfixed(V0(k), t0, t, N, D)$, где *V0* – вектор начальных скоростей и координат; *t0* – начальное значение времени; *t* – конечное; *N* – число разбиений данного временного интервала; *D* – векторная функция, составленная из выражений правых сторон системы дифференциальных уравнений для проекций скоростей и координат (рисунок 1).

Получив функции координат от времени, можно построить график траектории движения частицы с магнитным моментом. На графике (рисунок 2) наблюдаем ее отклонение вверх. Отклонение вниз получается при противоположном знаке проекции магнитного момента на направление магнитного поля.

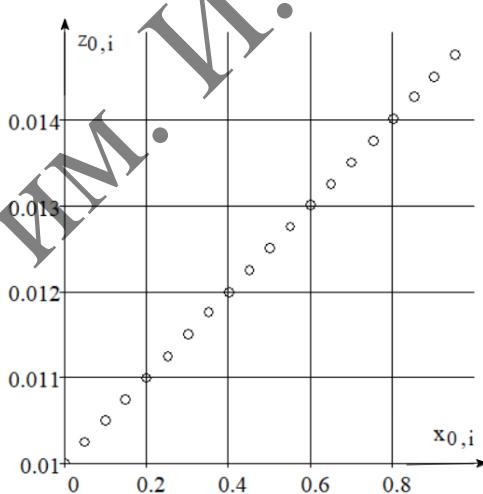


Рисунок 2 – Траектория движения частицы в вертикальной плоскости *ZOX*

Данная модель может быть применена для визуализации расщепления пучка атомов при объяснении опыта Штерна-Герлаха.

Концептуально информационные технологии дают возможность использовать программную среду не только как средство обучения, но и как средство усиления интеллектуального потенциала студентов, что способствует улучшению их развития.

Эти технологии используются как для повышения управляемости учебной работы, так и как средство телекоммуникации.

В рамках педагогических технологий значительно усиливается организованность учебного процесса, повышается эффективность и привлекательность процесса обучения за счет использования программных продуктов и визуализации результатов работы.

УДК 537.622.4-022.532:004.94

И.Л. Дорошевич

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники

МИКРОМАГНИТНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МАГНИТНОГО ГИСТЕРЕЗИСА СФЕРИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ ЖЕЛЕЗА

В статье представлены результаты расчета петель магнитного гистерезиса наночастиц железа сферической формы, который проводился с помощью программного пакета микромагнитного моделирования Nmag.

Ключевые слова: наночастицы, микромагнитное моделирование, магнитный гистерезис.

Введение. Ферромагнитные наночастицы имеют большие перспективы в области создания устройств магнитной записи и хранения информации сверхвысокой плотности, биофункциональных наноматериалов, применяемых в диагностике, адресной терапии, регенерации биологических тканей и др.

В качестве объектов исследования были выбраны изолированные ферромагнитные наночастицы железа сферической формы с радиусами от 5 до 30 нм. Данный выбор определялся двумя факторами: 1) железо является одним из основных ферромагнитных материалов, среди которых оно имеет самую большую распространенность в природе; 2) наибольшее значение критического радиуса R_0 сферической ферромагнитной частицы, при котором её однородная намагниченность в процессе перемагничивания во внешнем магнитном поле сохраняется, полученное Е.И. Кондорским [1], для железа составляет 12,5 нм.

Исследование магнитных свойств сферических наночастиц железа проводилось в рамках континуальной модели и основывалось на созданном Л.Д. Ландау и Е.М. Лифшицем фундаментальном подходе к описанию стационарных и динамических свойств ферромагнетиков на масштабах, значительно превышающих межатомные расстояния [2]. Указанный подход был развит W.F. Brown (Jn.), который сформулировал основные принципы и методы данного направления в теории магнетизма, получившего название микромагнетизм [3].

При этом магнитное тело разбивается на достаточно малые элементы (линейные размеры не должны превышать обменную длину), каждый из которых имеет однородную намагниченность, представляемую в виде $\vec{M} = \vec{m} \cdot M$, где M – величина вектора \vec{M} , \vec{m} – единичный вектор намагниченности. В однородных образцах величина

намагниченности всех элементов считается одинаковой и равной намагниченности насыщения M_s , а ее направление (\vec{m}) при переходе от элемента к элементу может оставаться как постоянным, так и достаточно плавно изменяться, т. е. поворачиваться. Равновесное распределение намагниченности $\vec{M}(\vec{r})$ или $\vec{m}(\vec{r})$ в магнитном теле находят путем минимизации его свободной энергии, которая представляется в виде некоторого функционала от \vec{M} (или \vec{m}).

Свободная энергия Гиббса E_{tot} включает в себя обменную энергию E_{exch} , магнитостатическую энергию E_{demag} , энергию кристаллографической анизотропии E_{anis} , энергию поверхностной анизотропии E_{anis}^{surf} , энергию во внешнем магнитном поле E_{ext} [3]:

$$E_{tot} = E_{exch} + E_{demag} + E_{anis} + E_{anis}^{surf} + E_{ext}, \quad (1)$$

В данной работе минимум свободной энергии (1), которому соответствует равновесное распределение намагниченности $\vec{M}(\vec{r})$ в сферических наночастицах железа, определялся решением уравнения временной эволюции намагниченности Ландау – Лифшица [2] с учетом диссипации и релаксационным слагаемым в форме Гильберта [4] (уравнение Ландау – Лифшица – Гильберта):

$$\frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = -\frac{|\tilde{\gamma}|}{1+\alpha^2} [\vec{M} \times \vec{H}_{eff}] - \frac{|\tilde{\gamma}| \alpha}{(1+\alpha^2) M_s} [\vec{M} \times [\vec{M} \times \vec{H}_{eff}]],$$

где $\tilde{\gamma}$ – гиромагнитное отношение электрона;

α – параметр затухания (феноменологический параметр диссипации);

\vec{H}_{eff} – напряженность эффективного поля, являющегося производной объемной плотности свободной энергии $\mathcal{E}_{tot} = \frac{dE_{tot}}{dV}$ по отношению к намагниченности \vec{M} :

$$\vec{H}_{eff} = -\frac{1}{\mu_0} \frac{\delta \mathcal{E}_{tot}}{\delta \vec{M}}.$$

Гиромагнитное отношение электрона равно $\tilde{\gamma} = g \frac{\mu_0 e}{2m_e} = -2,21 \cdot 10^5 \text{ м/(A·с)}$, для

ферромагнетиков фактор $g = 2$, e – заряд электрона, m_e – его масса.

При динамическом подходе микромагнитный расчет состоит из следующих основных этапов. Исследуемый объект разбивается на элементы (ячейки счета), линейный размер которых меньше или сравним с обменной длиной. Затем для каждой ячейки счета задается начальное направление вектора намагниченности, вычисляется напряженность эффективного поля и решается уравнение Ландау – Лифшица – Гильберта

до тех пор, пока по всему образцу отношение $\frac{[\vec{M} \times \vec{H}_{eff}]}{M_s^2}$ не станет меньше заданного

малого числа. При этом достигается условие локального минимума свободной энергии и $\frac{d\vec{M}}{dt} = 0$.

Методы и методология исследования. Поскольку расчет магнитной структуры трехмерного объекта требует самосогласованного интегрирования нелинейных дифференциальных уравнений для всех элементов, на которые разбивается тело, то одним из эффективных методов решения данной задачи является компьютерное моделирование.

Определение равновесного распределения намагниченности проводилось с помощью пакета микромагнитного моделирования Nmag с гибким методом конечных элементов с пользовательским интерфейсом на основе языка программирования Python [5]. Выбор данного программного обеспечения основывался на том, что этот пакет для проведения микромагнитных расчетов удовлетворяет требованиям, позволяющим решить поставленные задачи:

- метод конечных элементов применительно к геометрии сетки счета позволяет максимально корректно аппроксимировать шарообразную форму объектов исследования ячейками-тетраэдрами;
- алгоритм расчета пакета Nmag основан на численном решении уравнения Ландау – Лифшица – Гильберта;
- микромагнитное моделирование позволяет определить не только распределение намагниченности, но и соответствующие различным энергетическим вкладам скалярные и векторные поля, из детального анализа которых можно получить информацию о базовых физических механизмах.
- возможность удобного вывода данных результатов моделирования и их визуализация.

Во всех микромагнитных расчетах, проводимых при температуре ниже температуры Кюри, использовались следующие значения параметров: намагниченность насыщения $M_S = 1,7 \cdot 10^6$ А/м, постоянная обменного взаимодействия $A = 2,1 \cdot 10^{-11}$ Дж/м, константа анизотропии $K_u = 4,2 \cdot 10^4$ Дж/м³, параметр затухания $\alpha = 0,5$. Построение пространственной сетки счета проводилось методом конечных элементов, средний линейный размер элементарной ячейки составлял 1÷3 нм. При расчетах слагаемое E_{anis}^{surf} в свободную энергию в явном виде не входило, поскольку искажение локальной симметрии окружения ближайшими соседями поверхностных элементов сетки счета учитывалось при интегрировании уравнения Ландау – Лифшица – Гильберта.

Данные результатов моделирования извлекались в текстовые файлы *plot.dat*, *_dat.ndt* и **.vtk* файлы. Построение петель гистерезиса по данным файлов *plot.dat* выполнялось в приложении Microsoft Office Excel.

Результаты исследования и их обсуждение. Начальная намагниченность сферических наночастиц железа всех размеров определялась как однородная и направленная по оси *Ox*, которая также являлась осью легкого намагничивания (ОН). Для получения петель гистерезиса внешнее магнитное поле прикладывалось вдоль оси *Ox*, а проекция его напряженности на *Ox* изменялась от 500 до –500 кА/м и обратно с шагом 50 кА/м.

На рисунке 1 представлены результаты расчетов петель гистерезиса ферромагнитных наночастиц железа сферической формы различных радиусов. Для частиц с радиусами $5\div 12$ нм петли имеют одинаковую прямоугольную форму (сплошная линия). Начиная с радиуса 13 нм, вид кривой намагничивания меняется и с увеличением размера частицы принимает форму, характерную для процессов зарождения и эволюции вихревой магнитной структуры [6].

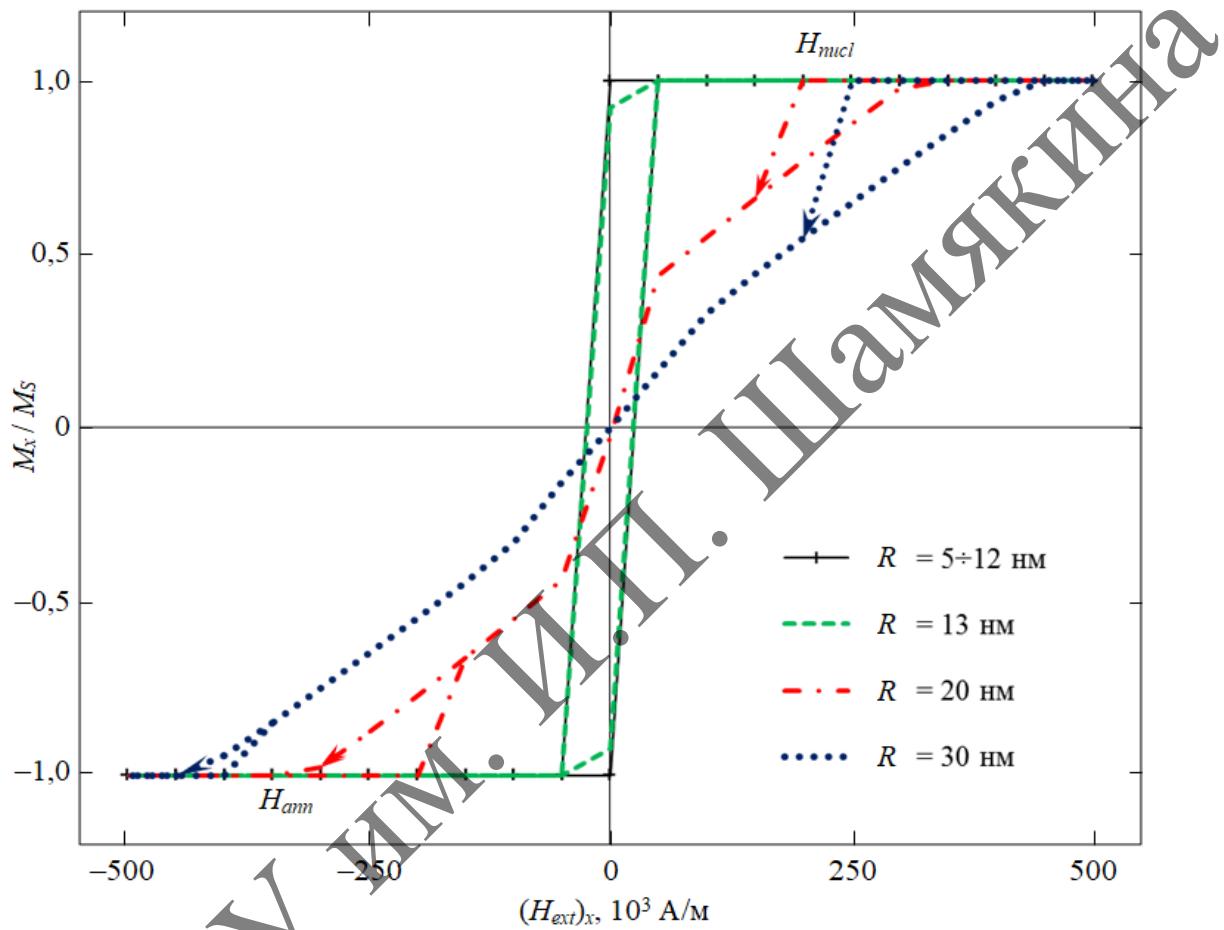


Рисунок 1 – Петли гистерезиса ферромагнитных наночастиц железа сферической формы различных радиусов

Из рисунка 1 видно, что для наночастиц железа с радиусами $5\div 12$ нм коэрцитивная сила H_c составляет 25 кА/м. Полученное нами значение хорошо согласуется с теоретическим пределом коэрцитивной силы однодоменной сферической частицы с однородным вращением намагниченности [7] и для железа равным ~ 39 кА/м.

Значения x -компоненты приведенной остаточной намагниченности сферических наночастиц железа в зависимости от их радиуса приведены на рисунке 2. Видно, что на графике выделяются три области, в которых зависимость имеет разный характер: для частиц с радиусами от 5 до 12 нм значение $(M_r)_x/M_S = 1$, при $12 \text{ нм} \leq R \leq 16$ нм остаточная намагниченность резко уменьшается, а для $R \geq 16$ нм она практически равна нулю.

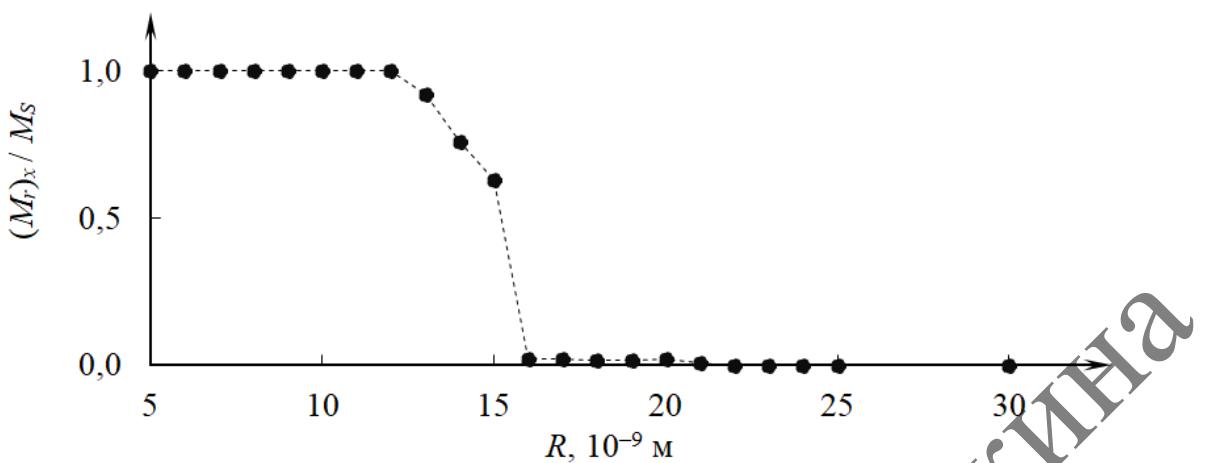


Рисунок 2 – Зависимость величины x -компоненты приведенной остаточной намагниченности ферромагнитной наночастицы железа сферической формы от ее радиуса.
Штриховая линия добавлена для визуализации

Заключение. Полученные результаты свидетельствуют, что частицы с радиусами от 5 до 12 нм сохраняют состояние однородного намагничивания, а изменение направления намагниченности в переключающем поле на противоположное осуществляется когерентным поворотом. При радиусах, превышающих 12 нм, изменение внешнего поля приводит к нарушению однородной намагниченности частицы, возникновению и развитию вихревой магнитной структуры.

Для частиц, размеры которых сопоставимы с шириной доменной стенки и обменной длиной для данного материала, минимизация свободной энергии обеспечивается не разбиением материала на домены (как это имеет место в макрообразцах), а формированием вихревой структуры, уменьшающей собственное магнитное поле частицы в ее окрестности.

Список использованных источников

1. Кондорский, Е.И. Природа высокой коэрцитивной силы мелкодисперсных ферромагнетиков и теория однодоменной структуры / Е.И. Кондорский // Известия академии наук СССР, серия физическая. – 1952. – Т. 16, № 4. – С. 398–411.
2. Ландау, Л.Д. К теории дисперсии магнитной проницаемости ферромагнитных тел / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц // Л. Д. Ландау : Собрание трудов : в 2 т. – М., 1969. – Т. 1. – С. 128–143.
3. Браун, У.Ф. Микромагнетизм / У.Ф. Браун ; пер. А.Г. Гуревича. – М. : Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1979. – 160 с.
3. Gilbert, T.L. A Lagrangian formulation of gyromagnetic equation of the magnetization field / T.L. Gilbert // Physical Review. – 1955. – Vol. 100, № 3. – P. 1243–1246.
4. A Systematic Approach to Multiphysics Extensions of Finite-Element-Based Micromagnetic Simulations: Nmag / T. Fischbacher [et al.] // IEEE Transactions on Magnetics. – 2007. – Vol. 43, № 6. – P. 2896–2898.

5. Adeyeye A.O. Large area patterned magnetic nanostructures / A.O. Adeyeye, N. Singh // Journal of Physics D: Applied Physics. – 2008. – Vol. 41, № 15. – P. 153001-1–153001-29.

6. Магнитные наночастицы: методы получения, строение и свойства / С.П. Губин [и др.] // Успехи химии. – 2005. – Т. 74, № 6. – С. 539–574.

УДК 621.396; 681.7

А.К. Есман, Г.Л. Зыков

Белорусский национальный технический университет

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ПРИЕМНИКА СУБМИЛЛИМЕТРОВОГО ДИАПАЗОНА

В данной работе представлена трехмерная модель селективного и компактного приемника субмиллиметрового диапазона, разработанного для эффективного (~97%) приема сигналов на двух резонансных частотах. Предлагаемое устройство, основанное на оригинальном сочетании аподизированных микрорезонаторных структур, согласующей линии треугольной формы и детектирующего диода, предназначено для применения в диапазоне субмиллиметрового излучения, получившего название Т-лучи в 2001 году, и имеет большое значение в таких областях, как медицинская диагностика, безопасность и связь.

Ключевые слова: субмиллиметровое излучение, приемник излучения, детектирующий диод, резонансная длина волны, эффективность преобразования.

Введение. Одной из ключевых задач современной прикладной физики является создание компактных и надежных приемников субмиллиметрового диапазона. Это обусловлено уникальным расположением терагерцового диапазона [1], который находится между областями, где доминируют радиофизические и оптические методы, что делает традиционные подходы неэффективными [2; 3].

В докладе рассматривается селективный приемник Т-лучей (рисунок 1), разработанный на основе двух открытых аподизированных периодических микрорезонаторных структур [4]. Коэффициент заполнения этих структур меняется линейно, и они соединены с детектирующим диодом через согласующие элементы. Предложенный приемник Т-лучей был исследован в диапазоне длин волн от 0,3 до 1 мм с помощью компьютерного моделирования. Для этого использовался современный программный пакет HFSS, обеспечивающий возможность моделирования сложных трехмерных конфигураций [5; 6].

Принцип работы устройства заключается в следующем: чувствительные элементы 4 эффективно поглощают Т-лучи из окружающей среды благодаря их согласованному волновому сопротивлению. Далее это излучение передается на детектирующий диод 6 через согласующие элементы 5, которые также обеспечивают оптимальное согласование с чувствительными элементами. В результате на диод 6

поступают высокочастотные токи, соответствующие частоте принятого субмиллиметрового излучения. Электрический сигнал, сгенерированный диодом 6, передается через согласующие элементы 5 и выходные линии 2 на контактные площадки 3, представляющие собой выход устройства.

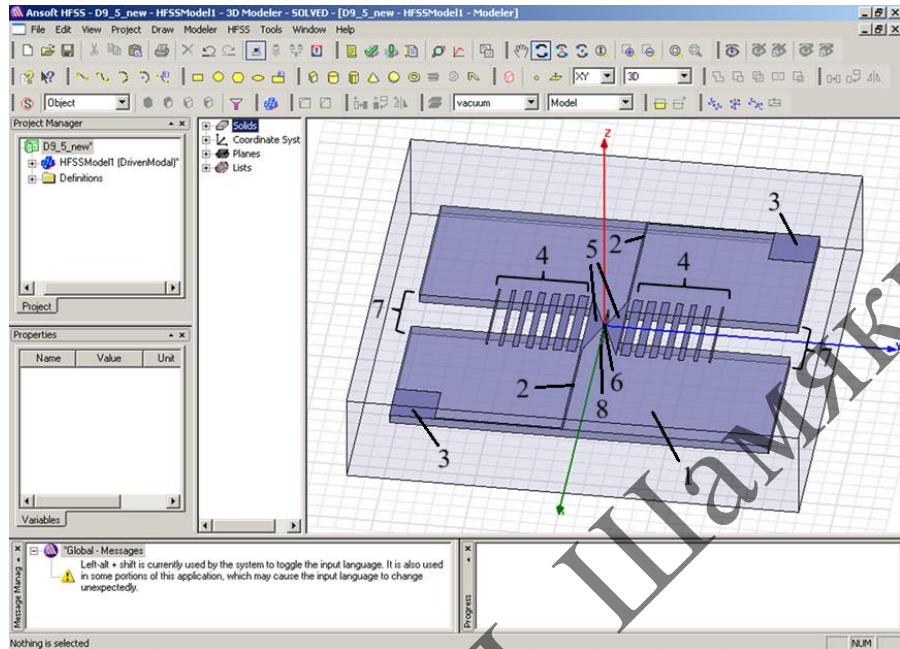


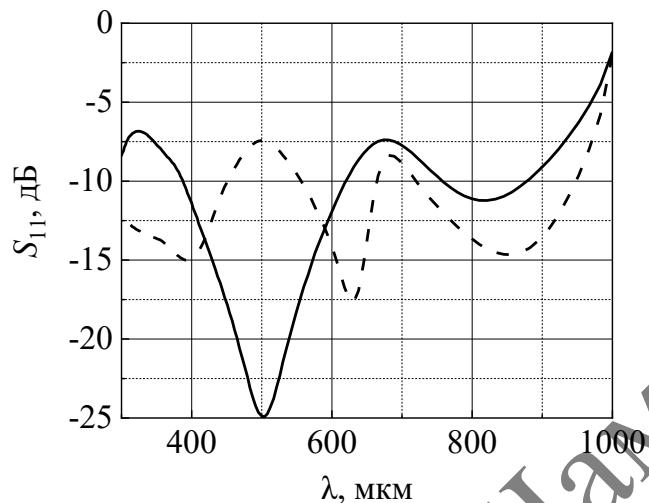
Рисунок 1 – Скриншот разработанной модели приемника Т-лучей в программной среде HFSS:
1 – подложка, 2 – выходные линии, 3 – контактные площадки, 4 – чувствительные элементы,
5 – согласующие элементы, 6 – детектирующий диод, 7 – вырезы прямоугольной формы,
8 – воздушная полость

Для оптимального приема излучения чувствительные элементы 4 имеют волновое сопротивление, согласованное с окружающей средой. Согласующие элементы 5 с переменным волновым сопротивлением, обеспечивают эффективную передачу сигнала на диод 6. Конфигурация выходных линий 2 и расположение контактных площадок 3 минимизируют потери на отражение. В качестве детектора используется диод 6 с пониженным барьером Шоттки, который зарекомендовал себя как эффективный и практически безальтернативный нелинейный элемент для преобразования Т-лучей [7].

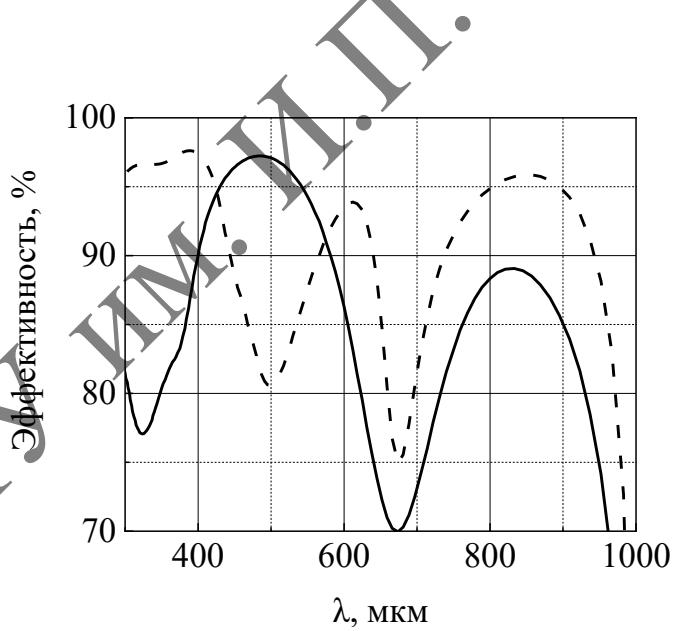
На рисунках 2 и 3 приведены расчетные характеристики приемника для крайних значений параметра h (100 и 0 мкм) в рамках рассматриваемого диапазона: потери на отражение S_{11} (рисунок 2) и эффективность преобразования (рисунок 3) в зависимости от длины волны.

Максимальная эффективность преобразования излучения субмиллиметрового диапазона на длинах волн 500 мкм (при $h = 100$ мкм) и 400 мкм (при $h = 0$ мкм) составляет 97,2 и 97,6 % соответственно. Оптимальные значения потерь на отражение $S_{11} = -24,93$ дБ наблюдаются на длине волны 500 мкм (при $h = 100$ мкм). По мере приближения контактных площадок 3 к чувствительному элементу 4 вместе с уменьшением резонансной длины волны происходит увеличение потерь на отражение S_{11} .

Проведенное моделирование показывает, что предложенная структура приемника Т-лучей обладает высокой эффективностью до 97,6 % преобразования на двух резонансных длинах волн рассматриваемого диапазона 500 мкм (при $h = 100$ мкм) и 400 мкм (при $h = 0$ мкм) соответственно.



**Рисунок 2 – Зависимость потерь на отражение S_{11} Т-лучей от длины волны для двух крайних значений h (сплошная линия – 100 мкм) и (штриховая линия – 0 мкм)
при активном сопротивлении $R = 75$ Ом**



**Рисунок 3 – Зависимость эффективности приемника Т-лучей от длины волны
для двух крайних значений h (сплошная линия – 100 мкм) и (штриховая линия – 0 мкм)
при активном сопротивлении $R = 75$ Ом**

Таким образом, оригинальная конструкция построения приемной части 1 делает открытую микрорезонаторную структуру на основе аподизированных решеток привлекательной для построения интегральных высокоэффективных компактных приемников субмиллиметрового излучения. Такие приемные устройства могут быть

использованы не только в радиоастрономии по исследованию космического микроволнового излучения, но и для решения задач безопасности и медицинской диагностики (пассивное сканирование).

Список использованных источников

1. Zandonella, C. T-ray specs / C. Zandonella // Nature. – 2003. – V. 424. – P. 721–722.
2. Есман, А.К. Приемник субмиллиметрового диапазона длин волн на искусственных материалах / А.К. Есман, В.А. Потачиц, Г.Л. Зыков, В.К. Кулешов // Приборы и методы измерений. – 2015. – № 1 (10). – С. 5–9.
3. Многоэлементный приемник для субмиллиметрового диапазона с пленочным чувствительным элементом на основе полуметаллов в тепловизорах смотрящего типа / М.А. Кик [и др.] // Российский технологический журнал. – 2019. – Т. 7, № 6. – С. 122–133.
4. Детектирующая антenna терагерцового диапазона : пат. на пол. модель 7220 Респ. Беларусь: МПК Н 01 Q 13/00 / А.К. Есман, В.К. Кулешов, Г.Л. Зыков ; дата публ. 30.04.11.
5. Wang, Zh. A 285 GHz tripler using planar Schottky diode / Zh. Wang // Optics and Photonics Journal. – 2023. – V. 13, № 8. – P. 209–216.
6. Есман, А.К. Терагерцовый приемник на основе электромагнитных материалов / А.К. Есман, В.К. Кулешов, Г.Л. Зыков // Измерительная техника. – 2013. – № 7. – С. 55–57.
7. Есман, А.К. ИК приемник на основе перехода Шоттки с резонанснымиnano- и микроструктурами / А.К. Есман, В.К. Кулешов, Г.Л. Зыков, В.Б. Залесский // Нано- и микросистемная техника. – 2014. – № 3. – С. 44–46.

УДК 519.63: 538.911

Ф.Ф. Комаров¹, Н.С. Ковалчук², Г.М. Заяц³, О.В. Мильчанин¹, Ю.В. Харлович¹

¹НИУ «Институт прикладных физических проблем имени А.Н. Севченко» БГУ

²ОАО «Интеграл»

³Институт математики НАН Беларуси

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ФОРМИРОВАНИЯ СЛОЕВ КРЕМНИЯ, ГИПЕРПЕРЕСЫЩЕННЫХ АТОМАМИ СЕЛЕНА МЕТОДОМ ИОННОЙ ИМПЛАНТАЦИИ С ПОСЛЕДУЮЩИМ ЛАЗЕРНЫМ ОТЖИГОМ

Для описания процесса перераспределения концентрации атомов селена, ионной имплантацией в кристаллический кремний с последующим наносекундным лазерным отжигом, приведено решение диффузионных уравнений с учетом жидкофазного и твердофазного состояний модифицируемого слоя.

Ключевые слова: кремний, имплантация, селен, лазерный отжиг, уравнения диффузии.

Введение. Последние годы исследователи все чаще прибегают к радикальным подходам для реализации новых возможностей управления свойствами полупроводников. Одним из таких подходов является внедрение в полупроводники примесей

в концентрациях, превышающих их равновесную растворимость (гипердопирование). По прогнозам, новые свойства гипердопированного кремния позволяют существенно расширить области его применения [1]. Гипердопирование кремния халькогенами или переходными металлами приводит к эффективному поглощению излучения в ближнем ИК-диапазоне. При ширине запрещенной зоны 1,12 эВ кремний является прозрачным в спектральном диапазоне длин волн более 1,1 мкм. Вследствие этого кремниевые фотодетекторы нечувствительны в области основных полос оптоволоконных телекоммуникационных систем: S (1,46–1,53) мкм, C (1,53–1,565) мкм и L (1,565–1,625) мкм [2], а кремниевые солнечные батареи пропускают инфракрасную часть солнечного спектра (1,1–3,0) мкм, что составляет ~30% общего потока солнечной энергии [3]. Поэтому ведутся интенсивные разработки материалов для недорогих ИК-фотодетекторов, совместимых с КМОП-технологией. Наибольший коэффициент поглощения света в ИК-диапазоне ($\sim 10^4 \text{ см}^{-1}$) наблюдается в монокристаллическом кремнии, гипердопированном атомами халькогенов (S, Se, Te) [4]. Для создания гипердопированных халькогенами слоев обычно используют ионную имплантацию с последующим импульсным лазерным отжигом.

Методика эксперимента. Пластины Si (111) р-типа проводимости с удельным сопротивлением $\rho = 10 \text{ Ом}\cdot\text{см}$ были имплантированы ионами $^{80}\text{Se}^+$ с энергией 125 кэВ, флюенсом $1 \times 10^{16} \text{ см}^{-2}$. Импульсная лазерная обработка (ИЛО) имплантированных слоёв проводилась в экспериментальных условиях с оптико-пирометрической диагностикой *in situ* фазовых превращений (ОПД ФП) [5], инициируемых импульсом излучения рубинового лазера (длительность $\approx 70 \text{ нс}$ по уровню 0,5), при однородном распределении энергии импульса по зоне ИЛО диаметром 4 мм. Плотность энергии W в лазерном импульсе (зоне ИЛО) задавалась равной 1,5, 2 и 2,5 Дж/см². Применение методики ОПД позволило получить данные о времени $\tau_m(W)$ существования жидкой фазы Si, т.е. о длительности ФП, и о температуре расплавленного слоя на заключительной стадии отвердевания.

Анализ распределения Se по глубине, доли атомов примеси в узлах решётки кремния и степени кристалличности имплантированных слоев проводился методом Резерфордовского обратного рассеяния ионов He⁺ с энергией 1,4 МэВ с использованием режима канализирования.

Результаты теории и эксперимента и их обсуждение

1. Время жизни жидкой фазы кремния при ИЛО

Энергетический порог лазерно-индукционного плавления имплантированной поверхности составляет $\approx 0,3 \text{ Дж/см}^2$ в условиях нашего эксперимента. Таблица 1 показывает измеренное время жизни жидкой фазы кремния $\tau_m(W)$ в зависимости от плотности энергии лазерного импульса.

Таблица 1 – $\tau_m(W)$

Плотность энергии (Дж/см ²)	1,5	2,0	2,5
$\tau_m(\text{мкс})$	0,2	0,3	0,4

2. Моделирование процесса перераспределения атомов селена

Для прогнозирования процесса перераспределения атомов селена в кремнии при ИЛО разработана теоретическая модель. Модель базируется на численном решении диффузионных уравнений распределения примеси в процессе плавления и последующей кристаллизации кремниевой мишени. В ней учитывается фактор сегрегации примеси, приводящий к нарушению непрерывности распределения концентрации частиц на границе раздела фаз и оттеснению примеси фронтом кристаллизации к поверхности.

Математическое описание процесса диффузии примеси основано на использовании второго закона Фика. Уравнения диффузии примеси в жидкой (L) и твердой (S) фазах кремния представлены в следующем виде:

$$\frac{\partial C_L}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 C_L}{\partial x^2}, \quad 0 < x < x_{front}(t), \quad (1)$$

$$\frac{\partial C_S}{\partial t} = D_S \frac{\partial^2 C_S}{\partial x^2}, \quad x_{front}(t) < x < l, \quad (2)$$

с граничными условиями:

$$D_L \frac{\partial C_L}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0, \quad C_S|_{x=l} = 0, \quad (3)$$

(при этом значение правой границы l необходимо выбирать достаточно большим, чтобы второе условие в (3) было справедливым) и начальными условиями:

$$C_0 = C_{impl}(x), \quad 0 \leq x \leq l. \quad (4)$$

На подвижной границе раздела фаз $x = x_{front}(t)$ зададим условие непрерывности потока примеси и условие соответствия концентраций:

$$D_L \frac{\partial C_L}{\partial x} \Big|_{x=x_{front}(t)} = D_S \frac{\partial C_S}{\partial x} \Big|_{x=x_{front}(t)}, \quad C_S|_{x=x_{front}(t)} = k_{segr} C_L|_{x=x_{front}(t)}. \quad (5)$$

В системе уравнений (1) – (5) C_L, C_S – концентрации примеси, D_L, D_S – коэффициенты диффузии примеси в жидкой и твердой фазах кремниевой подложки соответственно, t – время, x – пространственная координата, $C_{impl}(x)$ – начальный имплантационный профиль примеси, k_{segr} – коэффициент сегрегации примеси, $x = x_{front}(t)$ – фронт кристаллизации (временная зависимость координаты границы раздела твердой и жидкой фаз кремния).

В представленной модели диффузия примеси моделируется в жидкой и в твердой фазах. На каждой стадии процесса кристаллизации отношение концентраций в твердой и жидкой фазах на границе раздела фаз определяется значением k_{segr} . Примесь, не встроившаяся в решетку, накапливается на границе раздела фаз и диффундирует в оставшийся слой расплава по закону, определяемому уравнением диффузии (1), а диффузия примеси вглубь кристалла от границы раздела фаз происходит по закону, определяемому уравнением диффузии (2).

Решение задачи (1) – (5) осуществляется численно конечно-разностным методом, согласно которому дифференциальные уравнения заменяются дискретными аналогами, полученными на разностной сетке [6]. Решение построенной системы линейных алгебраических уравнений находится методом прогонки [6].

Для расчетов выбраны следующие значения параметров: $l = 0,9 \cdot 10^{-4}$ см, $D_L = 2,4 \cdot 10^{-4}$ см 2 /с, $D_S = 5 \cdot 10^{-5}$ см 2 /с, $k_{segr} = 0,15$, $v_{kr} = 1,9$ м/с (v_{kr} – скорость движения фронта кристаллизации) [5]. Скорость кристаллизации легко оценить, зная толщину расплавленной области и время ее существования τ_p^{max} . Типичные значения скорости движения фронта кристалл – расплав в Si в процессе действия импульса составляют 10 м/с (фронт движется в глубь образца) и 1–2 м/с при последующем затвердевании (фронт движется к поверхности) для температуры подложки 300 K. Коэффициент диффузии селена в жидкой фазе задается постоянной величиной, приведенной в [7], а коэффициент диффузии в кристаллической фазе в данной модели задается средней (подгоночной к эксперименту) величиной. Величина коэффициента сегрегации определялась при моделировании из требования наилучшего соответствия теоретического концентрационного распределения экспериментальному профилю. В качестве $C_{impl}(x)$ взят экспериментальный начальный имплантационный профиль концентрации атомов селена. Для описания фронта кристаллизации $x_{front}(t)$ используются результаты, полученные в работе [8]. Расчет концентрационного профиля продолжается до тех пор, пока граница раздела не достигнет положения 10 нм от поверхности. Предполагается, что примесь, оставшаяся в этом слое, выходит на поверхность, и на этом расчет прекращается.

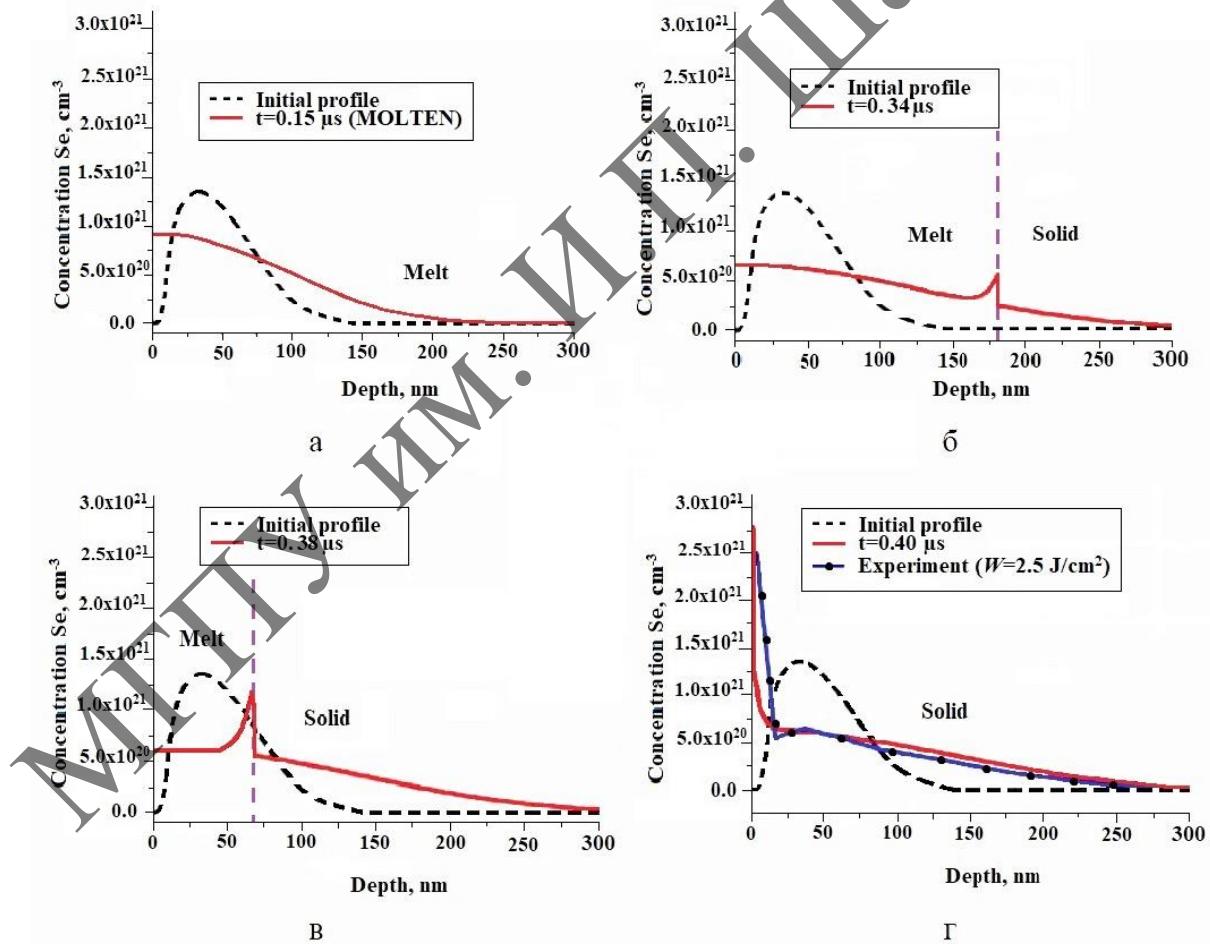


Рисунок 1 – Динамика перераспределения имплантированного селена в кремнии в процессе лазерного отжига ($W = 2,5$ Дж/см 2 , $\tau = 70$ нс)

На рисунке 1 представлены результаты расчетов перераспределения имплантированного селена в кремнии ($E = 125$ кэВ, $D = 1 \times 10^{16}$ см $^{-2}$) в процессе лазерного отжига ($W = 2,5$ Дж/см 2 , $\tau = 70$ нс). Отражена динамика распределения примеси в зависимости от движения фронта кристаллизации. К концу действия лазерного импульса плавление заканчивается и наблюдается уширение профиля распределения селена (рисунок 1а). Далее на начальной стадии отвердевания (рисунок 1б) начинается оттеснение селена фронтом кристаллизации к поверхности. Процесс сегрегации развивается по мере движения межфазной границы к поверхности (рисунок 1в). На конечной стадии процесса (рисунок 1г) на поверхности возникает концентрационный пик селена (в приповерхностном слое толщиной, примерно, 20 нм). Результатирующее распределение селена достаточно хорошо согласуется с экспериментальными данными.

Заключение. Таким образом, разработана физико-математическая модель и программное обеспечение, позволяющие провести расчет распределения ионно-имплантированной примеси в кремнии при лазерном отжиге в наносекундном диапазоне длительностей воздействующего импульса с учетом стадии плавления и кристаллизации модифицированного ионами слоя в кремнии. Хорошее соответствие расчетных с экспериментальными профилей распределении селена в кремнии после лазерного отжига позволило определить коэффициент диффузии селена в твердой фазе при затвердевании (фронт кристаллизации движется к поверхности). В дальнейшем предполагается ввести функциональную зависимость коэффициентов диффузии примеси как в жидкой фазе, так и в твердой от температуры отжигаемой области полупроводника, которая определяется из уравнения теплопроводности.

Список использованных источников

1. Hyperdoped silicon: Processing, properties, and devices / Zh. Tong, M. Bu, Y. Zhang, D. Yang, X. Pi // Journal of Semiconductors. – 2022. – Vol. 43, iss. 9. – P. 093101 (15pp).
2. Visible and near-infrared responsivity of femtosecond-laser microstructured silicon photodiodes / J.E. Carey, C.H. Crouch, M. Shen, E. Mazur // Optics Letters. – 2005. – Vol. 30, iss. 14. – P. 1773–1775.
3. Luque, A. Understanding Intermediate-Band Solar Cells / A. Luque, A. Martí, C. Stanley // Nature Photonics. – 2012. – Vol. 6. – P. 146–152.
4. Umezu, I. Emergence of very broad infrared absorption band by hyperdoping of silicon with chalcogens / I. Umezu, J.M. Warrender, S. Charnvanichborikarn [et al.] // J. Appl. Phys. – 2013. – Vol. 113. – P. 213501(5pp).
5. Broad infrared absorption band through ion beam hyperdoping of silicon with selenium / F. Komarov, I. Parkhomenko, A. Alzhanova [et al.] // Applied Surface Science. – 2023. – Vol. 639. – P. 158168(9pp).
6. Самарский, А.А. Теория разностных схем / А.А. Самарский. – М. : Наука, 1989. – 432 с.
7. Импульсный отжиг полупроводниковых материалов / А.В. Двуреченский, Г.А. Каучурин, Е.В. Нидаев, Л.С. Смирнов. – М. : Наука, 1982. – 208 с.
8. Raman, P.A. Temple and C.E. Hathaway. Multiphonon Spectrum of Silicon / P.A. Raman // Phys. Rev. B. – 1973. – Vol. 7. – P. 3685–3697.

С.О. Комаров^{1,2,4}, А.К. Горбацевич^{2,4}, Г.В. Верещагин³, А.С. Гаркун^{2,4}

¹*Институт физики имени Б.И. Степанова НАН Беларусь, ICRA-Net-Minsk*

²*Белорусский государственный университет*

³*Координационный центр ИКРА-Нет, Пескара, Италия*

⁴*Институт прикладной физики НАН Беларусь*

ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЕ ПОЛЕ КОЛЬЦЕВОГО ЗАРЯДА ВБЛИЗИ МЕДЛЕННО ВРАЩАЮЩЕЙСЯ ЧЕРНОЙ ДЫРЫ

В работе представлен алгоритм вычисления электрического поля, создаваемого круговым зарядом вблизи медленно вращающейся черной дыры. При этом гравитационное поле описывается метрикой Керра в линейном приближении по моменту импульса черной дыры, а сама черная дыра находится на оси симметрии кольца. Для заданных параметров кольца и черной дыры численно получены компоненты электрического поля, построены графики его силовых линий. Обсуждается применимость полученных результатов в задачах релятивистской астрофизики.

Ключевые слова: черная дыра Керра, уравнение Тью колльского, уравнения Максвелла в искривленном пространстве-времени.

Введение. Теоретическое исследование таких явлений, как квазары, гамма-всплески и многих других основывается на моделях вращающихся черных дыр, окруженных плазмой (см., напр. [1; 2]). Первые модели, описывающие электрическое и магнитное поля в окрестности черных дыр были разработаны для пульсаров [3; 4]. Позднее было показано, что мощные электро- и магнитосфера должны также иметь и астрофизические черные дыры (см., напр. [1]).

Теоретические исследования электрического поля, создаваемого зарядами вблизи сферически-симметричных черных дыр были впервые начаты Копсоном [5], который нашел аналитическое решение для случая фиксированного в пространстве заряда. Исследования этого решения были продолжены в работах [6; 7]. Поведение электрического поля, возникающего при падении заряда в сферически-симметричную черную дыру, проанализировано в [8]. Исследования электрического поля вблизи вращающихся черных дыр представлены в [9; 10].

В настоящей работе представлены численные результаты для линий электрического поля кольцевого заряда, расположенного вблизи медленно вращающейся черной дыры. Линии построены для случаев колец различных размеров, находящихся в экваториальной плоскости черной дыры.

В работе используется система единиц, в которой как гравитационная постоянная G , так и скорость света в вакууме с равны 1. Сигнатура метрики $\{+, +, +, -\}$

Уравнения электромагнитного поля в окрестности черной дыры.

Электромагнитное поле, создаваемое током j^l в окрестности черной дыры, может быть найдено из уравнений Максвелла в искривленном пространстве-времени (см., напр. [11]):

$$F^{lm}_{;m} = 4\pi j^l , \quad (1)$$

$$F_{[lm;k]} = 0 , \quad (2)$$

где F^{lm} – тензор электромагнитного поля, а точка с запятой обозначает ковариантную производную. Из второго тензорного уравнения (2) следует, что тензор электромагнитного поля может быть выражен через потенциалы:

$$F_{lm} = A_{m,l} - A_{l,m} ,$$

где запятая обозначает частную производную.

В координатах Бойера-Линдквиста $\{\rho, \theta, \varphi, t\}$ метрика Керра имеет вид (см., напр. [12]):

$$ds^2 = \frac{\rho^2}{\Delta} dr^2 + \rho^2 d\theta^2 + \frac{\Sigma^2}{\rho^2} \sin^2 \theta d\varphi^2 - \frac{4aM^2 r}{\rho^2} \sin^2 \theta dt d\varphi - \left(1 - \frac{2Mr}{\rho^2}\right) dt^2 .$$

Здесь M – масса черной дыры, L – момент импульса черной дыры, $a = L/M^2$ – параметр Керра. Также введены обозначения:

$$\rho^2 = r^2 + M^2 a^2 \cos^2 \theta ; \quad \Delta = r^2 - 2Mr + M^2 a^2 ; \quad \Sigma^2 = (r^2 + a^2)\rho^2 + 2M^3 r a^2 \sin^2 \theta .$$

Тогда ток для заряженного кольца, может быть представлен в виде:

$$j^l(x^k) = q \frac{\delta(r-r_0)\delta(\theta-\theta_0)}{2\pi\sqrt{-g}u^4} u^l(x^4, \hat{x}^\alpha(x^4)). \quad (3)$$

Здесь координаты r_0 и θ_0 соответствуют положению кольцевого заряда, δ – дельта-функция Дирака, $u^l(x^k)$ – вектор 4-скорости элементарных зарядов, образующих кольцо, в пространственно-временной точке x^k , q – электрический заряд кольца, функция $\hat{x}^\alpha(x^4)$ – представляет собой закон движения элементарного заряда.

Для решения уравнений (1) запишем компоненты электромагнитного поля в формализме Ньюмена-Пенроуза [9]. Для этого введем изотропную тетраду $\{l^k; n^k; m^k; \tilde{m}^k\}$:

$$l^k = \left\{ 1; 0; \frac{aM}{\Delta}; \frac{r^2 + M^2 a^2}{\Delta} \right\}; \quad n^k = \frac{1}{2} \left\{ -\frac{\Delta}{\rho^2}; 0; \frac{aM}{\rho^2}; \frac{r^2 + M^2 a^2}{\rho^2} \right\}; \quad (4)$$

$$m^k = \left\{ 0; 1; \frac{i}{\sin \theta}; i a M \sin \theta \right\} / ((r + i a M \cos \theta) \sqrt{2}). \quad (5)$$

Здесь «тильда» означает комплексное сопряжение. Учитывая (4) и (5), введем следующие компоненты поля:

$$\Phi_0 = F_{ij} l^i m^j = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-\frac{r F_{24}}{(r-2M)(r+iMa \cos \theta)} \right) + iaM \frac{\sin \theta}{r} F_{14} + \frac{i F_{13}}{r \sin \theta} + \frac{1}{r} F_{12} + O(a^2); \quad (6)$$

$$\Phi_1 = \frac{1}{2} (F_{ij} l^i n^j - F_{ij} m^i \tilde{m}^j) = \frac{1}{2} F_{14} + \frac{i F_{32}}{r M \sqrt{2} \sin \theta} + \frac{ia \sin \theta}{r \sqrt{2}} F_{42} + O(a^2). \quad (7)$$

Для компонент (6) и (7) из (1) получим следующие уравнения:

$$\frac{1}{\Delta} \frac{\partial}{\partial r} \left[\Delta^2 \frac{\partial \Phi_0}{\partial r} \right] + 2\Phi_0 + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Phi_0}{\partial \theta} \right) - \frac{\Phi_0}{\sin^2 \theta} = J(x^k); \quad (8)$$

$$(r - iMa \cos \theta) \frac{\partial \Phi_1}{\partial r} + 2\Phi_1 - \frac{1}{\sqrt{2} \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \Phi_0) + \frac{iaM \sin \theta}{(r - iMa \cos \theta) \sqrt{2}} \Phi_0 = \frac{1}{2} (r - iMa \cos \theta) j_k l^k. \quad (9)$$

Здесь:

$$J(x^k) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left((r - iMa \cos \theta) \frac{\partial}{\partial r} + 2 \right) \frac{\Sigma}{(r - ia \cos \theta)} j_k m^k - \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\partial}{\partial \theta} (r - iMa \cos \theta) j_k l^k.$$

(8) называется уравнением Тьюокольского.

Силовые линии электрического поля.

Наша цель заключается в построении силовых линий электрического поля. Получим дифференциальное уравнение:

$$\frac{1}{r} \frac{dr}{d\theta} = \frac{E_r}{E_\theta} = \sqrt{\Delta} \frac{\Sigma^2 F_{14} + 2ar F_{13}}{\Sigma^2 F_{24} + 2ar F_{23}}. \quad (10)$$

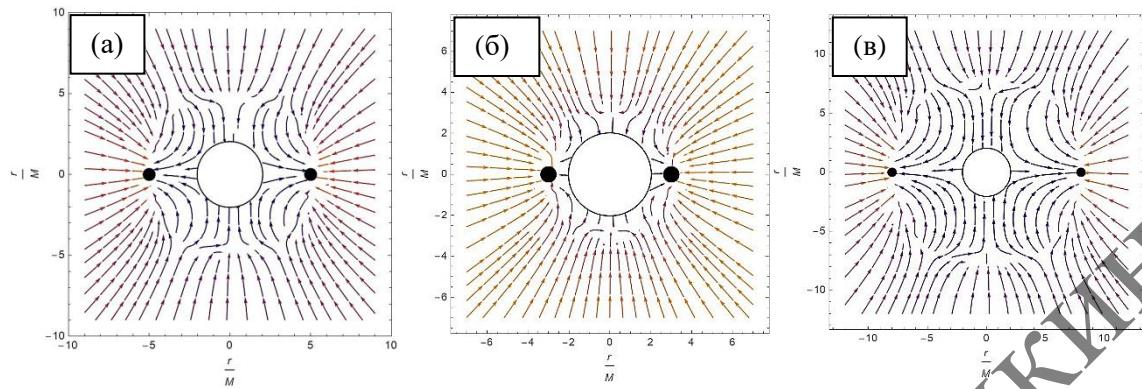
Здесь E_r и E_θ – соответственно r и θ компоненты электрического поля в ортонормированной системе координат ZAMO (см., напр. [9]). Таким образом, в обычной полярной системе координат на плоскости силовые линии могут быть найдены из решения уравнения (10).

Для решения уравнений (8) и (9) будем использовать линейное по параметру Керра приближение. Для построения линий электрического поля нам будет достаточно найти действительные части компонент Φ_0 и Φ_1 . Представим их в виде разложений:

$$Re[\Phi_0] = \sum_{l=0}^{\infty} \hat{R}_l(r) \frac{\partial}{\partial \theta} P_l(\cos \theta); \quad Re[\Phi_1] = \sum_{l=0}^{\infty} R_l(r) P_l(\cos \theta). \quad (11)$$

Здесь $P_l(x)$ – полиномы Лежандра порядка l от переменной x , а $\hat{R}_l(r)$ и $R_l(r)$ – некоторые функции. Подставляя (11) в (6) и (7), для функций $\hat{R}_l(r)$ и $R_l(r)$ получим дифференциальные уравнения второго порядка. Граничные условия для них заключаются в том, что при $r \rightarrow \infty$ обе функции должны стремиться к 0, а на горизонте событий ($r = 2M$ в линейном по a приближении) должны быть ограничены (см., напр. [13]). На практике, аналитические решения данных краевых задач можно получить лишь для конечного набора мультипольных компонент ($l \in [0, N]$, где N – некоторое конечное

число.) В данной работе найдены аналитические решения для $N=6$. Силовые линии, построенные на основе (10) с использованием указанных решений, представлены на рисунке 1.



**Рисунок 1 – Силовые линии электрического поля кольцевого заряда с координатами:
а – ($\theta_0 = \pi/2, r_0 = 5M$); б – ($\theta_0 = \pi/2, r_0 = 3M$); в – ($\theta_0 = \pi/2, r_0 = 8M$)**

Заключение. Таким образом, в данной работе выполнено численное построение силовых линий электрического поля кольцевого заряда вблизи медленно вращающейся черной дыры. При этом использованы подходы, разработанные в работах [9; 10]. Видимые разрывы линий вблизи сферы $r = r_0$ являются численными артефактами и следствием того факта, что в качестве решения взято лишь конечное число членов медленно сходящегося вблизи данной сферы мультипольного ряда. В будущих работах авторы планируют увеличить число рассматриваемых слагаемых для получения более точных результатов вблизи указанной сферы.

Основные особенности решения, однако, видны и из рисунка 1. Они заключаются в том, что вблизи горизонта событий черной дыры силовые линии ортогональны последнему, а асимптотическое поведение является кулоновским, как и в случае плоского пространства времени.

Полученные результаты могут быть использованы при качественном рассмотрении поведения плазмы вблизи вращающихся черных дыр, определяющего многие астрофизические процессы (см., напр. [14;15]).

Список использованных источников

1. Ruffini, R. The blackholic quantum / R. Ruffini, J.A. Rueda // The European Physical Journal C. – Vol. 30, № 300. – 2020.
2. Piran, T. The physics of gamma-ray bursts / Tsvi Piran // Reviews of Modern Physics. – 2005. – Vol. 76. – P. 1143.
3. Goldreich, P. Pulsar Electrodynamics / Peter Goldreich, William H. Julian // The Astrophys. J. – 1969. – Vol. 157. – P. 869.
4. Sturrock, P.A. A Model of Pulsars / P.A. Sturrock // The Astrophys. J. – 1971. – Vol. 161. – P. 529.
5. Copson, E.T. On Electrostatics in Gravitational Field / E.T. Copson // Roy. Soc. Proc. A. – 1927. – Vol. 116. – P. 720.

6. Linet, B. Electrostatics and magnetostatics in the Schwarzschild metric / B. Linet // J. Phys. A: Math. Gen. – 1976. – Vol. 9, No 7. – Pp. 1081–1087.
7. Hanni, R.S. Lines of Force of a Point Charge near a Schwarzschild Black Hole / Richard Squier Hanni and Remo Ruffini // Phys. Rev. D. – 1972. – Vol. 8, No 10. – Pp. 3259–3265.
8. Komarov, S.O. Electromagnetic field of a charge asymptotically approaching a spherically symmetric black hole / S.O. Komarov, A. K. Gorbatsievich, G.V. Vereshchagin // Physical Review D. – 2023. – Vol. 108. – P. 104056.
9. Bičák, J. Stationary Electromagnetic Fields Around Black Holes. II. General Solutions and the Fields of Some Special Sources Near a Kerr Black Hole / J. Bičák and L. Dvořák // General Relativity and Gravitation. – 1976. – Vol. 7, No 12. – Pp. 959–983.
10. Petterson, J.A. Magnetic field of a current loop around a Schwarzschild black hole. / Jacobus Petterson // Phys. Rev. D. – 1974. – Vol. 10, No 10. – Pp. 3166–3170.
11. Misner, C.W. Gravitation / C.W. Misner, K.S. Thorne, J.A. Wheeler. – San Francisco : W. H. Freeman and company, 1973.
12. Чандraseкар, С. Математическая теория черных дыр : в 2 ч. / С. Чандraseкар ; пер. с англ. В.А. Березина. – М. : Мир, 1986. – Ч. 2 – 355 с.
13. Прайс, Р. Черные дыры: Мембранный подход / Р. Прайс, К. Торн, Д. Макдоналд [и др.] ; пер. с англ. А.Г. Полнарева. – М. : Мир, 1988. – 428 с.
14. The inner engine of GeV-radiation-emitting gamma-ray bursts / R. Ruffini, J.A. Rueda, R. Moradi [et al.] // arXiv:1811.01839v4 [astro-ph.HE] 18 Jul 2019. – P. 1–7.
15. On the GeV emission of the type I BdHN GRB 130427A / R. Ruffini, R. Moradi, J.A. Rueda [et al.] // The Astrophysical Journal. – 2019. – Vol. 886, №82. – P. 10.3847/1538-4357/ab4ce6.

УДК 535:681.7.068.4

Д.В. Понкратов, А.Б. Сотский

Могилевский государственный университет имени А.А. Кулешова

МЕТОД ФУНКЦИЙ ГРИНА В ТЕОРИИ ОТКРЫТЫХ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ВОЛНОВОДОВ СЛОЖНОГО СЕЧЕНИЯ

Представлен метод функций Грина для моделирования модовых характеристик открытых диэлектрических волноводов сложного сечения. Метод позволяет анализировать собственные и вытекающие моды фотонно-кристаллических волноводов при строгой постановке электродинамической задачи на собственные значения.

Ключевые слова: диэлектрические волноводы, слоистое покрытие, метод функций Грина, полиномы Фурье, рекуррентное соотношение.

Введение. Современное развитие фотоники требует создания новых типов волноводов. Здесь для снижения затрат на разработку новых устройств востребованы

эффективные инструменты компьютерного моделирования. Существуют коммерческие программные пакеты, использующие численные методы расчета электромагнитных (ЭМ) полей в волноводах. К ним относятся Ansys Lumerical Mode Solutions, COMSOL Multiphysics, Ansys HFSS [1]. Они базируются на методах конечных элементов и конечных разностей, предполагающих ограниченное в пространстве расчетное окно. Методы конечных разностей и конечных элементов требуют дискретизации поперечного сечения волновода в ограниченной расчетной области и введения искусственных границ в виде идеально согласованных слоев (perfectly matched layers, PML), моделирующих открытое пространство [2]. До сих пор остается открытой проблема оптимального задания размеров расчетных окон и толщины PML [2].

Метод функций Грина представляет собой новый подход к моделированию открытых диэлектрических волноводов. Этот метод позволяет изучать собственные и вытекающие моды диэлектрических волноводов сложных сечений с нарушенной цилиндрической симметрией при строгом учете открытого характера электродинамических задач [3]. В настоящей работе выполнено развитие этого метода с целью строгого анализа мод диэлектрических волноводов со слоистыми покрытиями. Поперечное сечение рассматриваемых волноводов представлено на рисунке 1.

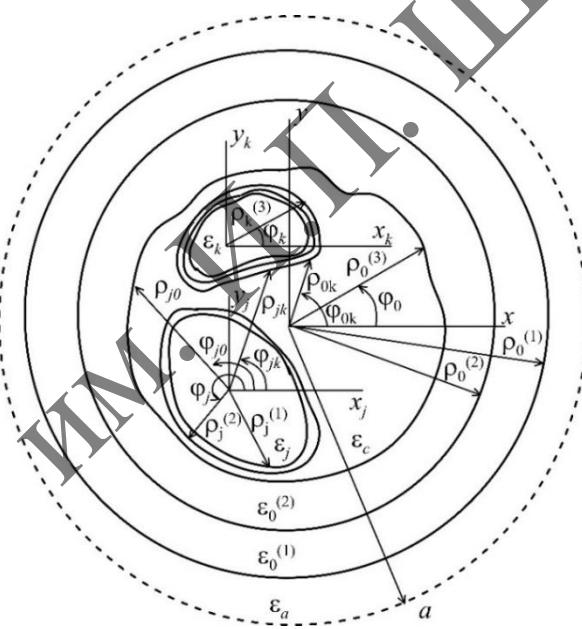


Рисунок 1 – Поперечное сечение волновода со слоистым покрытием и системами координат

Поперечное сечение волновода состоит из слоистых покрытий и N направляющих каналов (на рисунке 1 $N = 2$), которые расположены в центральной области волновода с диэлектрической проницаемостью ϵ_c . Каждый канал с номером j внутри имеет однородную среду с диэлектрической проницаемостью ϵ_j и окружен n_j однородными слоями. Слой с номером k ($k = 1, 2, \dots, n_j$) имеет диэлектрическую проницаемость $\epsilon_j^{(k)}$. Нумерация слоев идет от центра канала. Каждый канал описывается

локальной системой координат $0_j x_j y_j$ ($j = \overline{1, N}$). Его ближайшая к началу локальной системы координат канала граница описывается уравнением $r_j = \rho_j^{(k)}(\varphi_j)$, где r_j и φ_j – локальные полярные координаты j -го канала. Уравнение внешней границы канала имеет вид $r_j = \rho_j^{(n_j+1)}(\varphi_j)$. Волокно окружено однородной средой с диэлектрической проницаемостью ϵ_a . Покрытие волокна состоит из n_0 однородных слоев с диэлектрическими проницаемостями $\epsilon_0^{(k)}$, где k – номер слоя. Нумерация слоев покрытия идет от окружающей среды. Внешняя граница k -го слоя описывается уравнением $r_0 = \rho_0^{(k)}(\varphi_0)$, где r_0 и φ_0 глобальные полярные координаты. Штриховая линия – окружность, радиуса a , охватывающая волновод в глобальной системе координат $0xy$ (рисунок 1).

Пусть волноводная мода распространяется вдоль оси $0z$. Ее поле пропорционально фактору $\exp(i\omega t - ik_0 \beta z)$, где $k_0 = 2\pi/\lambda$ – волновое число вакуума, β – безразмерная постоянная распространения моды. Продольные компоненты ЭМ поля H_z , E_z на границах раздела сред и их производные ищем в виде полиномов Фурье

$$\begin{aligned} (\bar{E}_z, H_z) \Big|_{r_j=\rho_j^{(k)}} &= \sum_{v=-m}^m e_v^{(jk)}, h_v^{(jk)} \exp(iv\varphi_j), \\ \frac{\partial(\bar{E}_z, H_z)}{\partial n} \Big|_{r_j=\rho_j^{(k)} \pm 0} &= k_0 \sum_{v=-m}^m e_v'^{(jk)\pm}, h_v'^{(jk)\pm} \exp(iv\varphi_j), \end{aligned}$$

где $\partial / \partial n$ – производные по направлениям внешних нормалей к границам раздела сред, $\bar{E}_z = \sqrt{\epsilon_0 / \mu_0} E_z$, $e_v^{(jk)}$, $e_v'^{(jk)\pm}$, $h_v^{(jk)}$, $h_v'^{(jk)\pm}$ – неизвестные коэффициенты полиномов порядка m .

Поскольку в однородных средах структуры волновода продольные компоненты ЭМ поля удовлетворяют двумерному уравнению Гельмгольца, в каждой из однородных частичных областей структуры выполняется теорема Грина [4]. В области $r_0 \geq a$ будем считать, что поле волноводной моды имеет асимптотику, совпадающую с асимптотиками функций Ханкеля второго рода $H_v^{(2)}(z)$. Тогда применение этой теоремы по схеме, описанной в [5], в области $\rho_0^{(k)}(\varphi_0) < r_0 < a$ (рисунок 1) для k -го слоя покрытия волновода приводит к уравнениям,

$$\sum_{v=-m}^m (KH_{\mu v}^{(0k0)} h_v^{(0k)} + LH_{\mu v}^{(0k0)} h_v'^{(0k)-} - KH_{\mu v}^{(0k1)} h_v^{(0k+1)} - LH_{\mu v}^{(0k1)} h_v'^{(0k+1)+}) = 0, \quad (1)$$

$$\sum_{v=-m}^m (KJ_{\mu v}^{(0k0)} h_v^{(0k)} + LJ_{\mu v}^{(0k0)} h_v'^{(0k)-} - KJ_{\mu v}^{(0k1)} h_v^{(0k+1)} - LJ_{\mu v}^{(0k1)} h_v'^{(0k+1)+}) = 0, \quad (2)$$

$$KH_{\mu v}^{(jk1)} = \int_0^{2\pi} d\varphi \left\{ \left[k_0 \chi_j^{(k)} \rho_j^{(k+l)} H_\mu^{(2)'}(k_0 \chi_j^{(k)} \rho_j^{(k+l)}) + i\mu \frac{\rho_j'^{(k+l)}}{\rho_j^{(k+l)}} H_\mu^{(2)}(k_0 \chi_j^{(k)} \rho_j^{(k+l)}) \right] \exp[i(v-\mu)\varphi] \right\}, \quad (3)$$

$$LH_{\mu\nu}^{(jkl)} = \int_0^{2\pi} d\varphi \sqrt{(\rho_j'^{(k+l)})^2 + (\rho_j^{(k+l)})^2} H_\mu^{(2)}(k_0 \chi_j^{(k)} \rho_j^{(k+l)}) \exp[i(v-\mu)\varphi], \quad (4)$$

$$KH_{\mu\nu}^{(jkl)} = \int_0^{2\pi} d\varphi \left\{ \left[k_0 \chi_j \rho_j^{(k+l)} J'_\mu(k_0 \chi_j^{(k)} \rho_j^{(k+l)}) + i\mu \frac{\rho_j'^{(k+l)}}{\rho_j^{(k+l)}} J_\mu(k_0 \chi_j^{(k)} \rho_j^{(k+l)}) \right] \exp[i(v-\mu)\varphi] \right\}, \quad (5)$$

$$LJ_{\mu\nu}^{(jkl)} = \int_0^{2\pi} d\varphi \sqrt{(\rho_j'^{(k+l)})^2 + (\rho_j^{(k+l)})^2} J_\mu(k_0 \chi_j^{(k)} \rho_j^{(k+l)}) \exp[i(v-\mu)\varphi], \quad (6)$$

где $\mu = -m, -m+1, \dots, m$, $\rho_j^{(k+l)} = \rho_j^{(k+l)}(\varphi)$, $\rho_j'^{(k+l)} = d\rho_j^{(k+l)}/d\varphi$, $\chi_j^{(k)} = \sqrt{\varepsilon_j^{(k)} - \beta^2}$. Уравнения (1) и (2) получены в согласии с теоремой сложения Графа [6] для цилиндрических функций, учтена линейная независимость цилиндрических функций Бесселя $J_\mu(\chi_a r_0) \exp(i\mu\varphi_0)$, относящих к различным μ . Согласно (1), (2)

$$\begin{aligned} \mathbf{h}^{(0k+1)} &= [\mathbf{KH}^{(0k1)} - \mathbf{LH}^{(0k1)} (\mathbf{LJ}^{(0k1)})^{-1} \mathbf{KJ}^{(0k1)}]^{-1} [\mathbf{KH}^{(0k0)} - \mathbf{LH}^{(0k0)} (\mathbf{LJ}^{(0k1)})^{-1} \mathbf{KJ}^{(0k0)}] \mathbf{h}^{(0k)} - \\ &- [\mathbf{KH}^{(0k1)} - \mathbf{LH}^{(0k1)} (\mathbf{LJ}^{(0k1)})^{-1} \mathbf{KJ}^{(0k1)}]^{-1} [\mathbf{LH}^{(0k0)} - \mathbf{LH}^{(0k1)} (\mathbf{LJ}^{(0k1)})^{-1} \mathbf{LJ}^{(0k0)}] \mathbf{h}'^{(0k)-}, \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{h}'^{(0k+1)+} &= [\mathbf{KH}^{(0k1)} (\mathbf{KJ}^{(0k1)})^{-1} \mathbf{LJ}^{(0k1)} - \mathbf{LH}^{(0k1)}]^{-1} [\mathbf{KH}^{(0k0)} - \mathbf{KH}^{(0k1)} (\mathbf{KJ}^{(0k1)})^{-1} \mathbf{KJ}^{(0k0)}] \mathbf{h}^{(0k)} - \\ &- [\mathbf{KH}^{(0k1)} (\mathbf{KJ}^{(0k1)})^{-1} \mathbf{LJ}^{(0k1)} - \mathbf{LH}^{(0k1)}]^{-1} [\mathbf{LH}^{(0k0)} - \mathbf{KH}^{(0k1)} (\mathbf{KJ}^{(0k1)})^{-1} \mathbf{LJ}^{(0k0)}] \mathbf{h}'^{(0k)-}. \end{aligned} \quad (8)$$

При условии замен $\mathbf{h}^{(0k+1)} \rightarrow \mathbf{e}^{(0k+1)}$, $\mathbf{h}^{(0k)} \rightarrow \mathbf{e}^{(0k)}$, $\mathbf{h}'^{(0k)-} \rightarrow \mathbf{e}'^{(0k)-}$ формулы (7) и (8) остаются в силе и при рассмотрении компоненты поля E_z .

В соответствии с условием непрерывности тангенциальных компонент электромагнитного поля на границах слоев покрытия волновода [3]

$$\begin{aligned} \begin{Bmatrix} \mathbf{h}^{(0k+1)-} \\ \mathbf{e}'^{(0k+1)-} \end{Bmatrix} &= \left(\frac{\chi_0^{(k+1)}}{\chi_0^{(k)}} \right)^2 \frac{\varepsilon_0^{(k)}}{\varepsilon_0^{(k+1)}} \begin{Bmatrix} \mathbf{h}'^{(0k+1)+} \\ \mathbf{e}'^{(0k+1)+} \end{Bmatrix} + \left[1 - \left(\frac{\chi_0^{(k+1)}}{\chi_0^{(k)}} \right)^2 \right] \beta \mathbf{T}^{(0k+1)} \begin{Bmatrix} \mathbf{e}^{(0k+1)} \\ \mathbf{h}^{(0k+1)} \end{Bmatrix}, \end{aligned} \quad (9)$$

$$\text{где } T_{\mu\nu}^{(jk)} = \frac{i\nu}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{\exp[i(v-\mu)\varphi]}{k_0 \sqrt{(\rho_j'^{(k)})^2 + (\rho_j^{(k)})^2}}.$$

Выражения (1) – (9) представляют собой рекуррентные формулы, связывающие амплитуды разложений полиномов Фурье на границах слоев покрытия с последовательно возрастающими номерами от 1 до n_0 . Ввиду линейности соотношений (7) – (9) имеем

$$\begin{Bmatrix} h_v^{(0n_0+1)} \\ e_v^{(0n_0+1)} \\ h_v'^{(0n_0+1)-} \\ e_v'^{(0n_0+1)-} \end{Bmatrix} = \sum_{\mu=-m}^m \begin{Bmatrix} CHH_{v\mu}^{(0)} \\ CEH_{v\mu}^{(0)} \\ CHH'_{v\mu}^{(0)} \\ CEH'_{v\mu}^{(0)} \end{Bmatrix} h_\mu^{(01)} + \begin{Bmatrix} CHE_{v\mu}^{(0)} \\ CEE_{v\mu}^{(0)} \\ CHE'_{v\mu}^{(0)} \\ CEE'_{v\mu}^{(0)} \end{Bmatrix} e_\mu^{(01)}, \quad (10)$$

где

$$\mathbf{CHH}^{(0)}, \mathbf{CHE}^{(0)}, \mathbf{CHH}'^{(0)}, \mathbf{CHE}'^{(0)}, \mathbf{CEH}^{(0)}, \mathbf{CEE}^{(0)}, \mathbf{CEH}'^{(0)}, \mathbf{CEE}'^{(0)} \quad (11)$$

— некоторые матрицы размерности $(2m+1) \times (2m+1)$. Для нахождения этих матриц можно воспользоваться произволом в выборе векторов $\mathbf{h}^{(01)}$ и $\mathbf{e}^{(01)}$. Вычислив по рекуррентной схеме (7) – (9) с начальными условиями $h_{\mu}^{(01)} = \delta_{\mu\delta}$, $e_{\mu}^{(01)} = 0$ ($\delta_{\mu\delta}$ – символ Кронекера), мы найдем столбцы $\mathbf{CHH}_{v\delta}^{(0)}$, $\mathbf{CHH}'_{v\delta}^{(0)}$, $\mathbf{CEH}_{v\delta}^{(0)}$, $\mathbf{CEH}'_{v\delta}^{(0)}$. Аналогичные вычисления при начальных условиях $h_{\mu}^{(01)} = 0$, $e_{\mu}^{(01)} = \delta_{\mu\delta}$ дадут столбцы $\mathbf{CHE}_{v\delta}^{(0)}$, $\mathbf{CHE}'_{v\delta}^{(0)}$, $\mathbf{CEE}_{v\delta}^{(0)}$, $\mathbf{CEE}'_{v\delta}^{(0)}$. Матрицы, входящие в (7) – (9), не зависят от номера δ , что при последовательном изменении δ от $-m$ до m позволяет реализовать полный расчет матриц (11) по параллельному алгоритму.

По аналогии с вышесказанным определены рекуррентные формулы для каждого j -ого канала, которым соответствуют аналогичные матрицы $\mathbf{CHH}^{(j)}$, $\mathbf{CHE}^{(j)}$, $\mathbf{CHH}'^{(j)}$, $\mathbf{CHE}'^{(j)}$, $\mathbf{CEH}^{(j)}$, $\mathbf{CEE}^{(j)}$, $\mathbf{CEH}'^{(j)}$, $\mathbf{CEE}'^{(j)}$.

В итоге, применив теорему Грина [4] к функциям $H_z(x, y)$, $\bar{E}_z(x, y)$ в многосвязной внутренней области волокна, приходим к уравнениям

$$\sum_{k=0}^N \sum_{v=-m}^m \left(\begin{array}{l} \left\{ \begin{array}{l} HH_{\mu v}^{(jk)} \\ EH_{\mu v}^{(jk)} \end{array} \right\} h_v^{(k1)} + \left\{ \begin{array}{l} HE_{\mu v}^{(jk)} \\ EE_{\mu v}^{(jk)} \end{array} \right\} e_v^{(k1)} \end{array} \right) = 0, \quad (12)$$

где $j = \overline{0, N}$, $\mu = \overline{-m, m}$,

$$\begin{aligned} \mathbf{HH}^{(jk)} &= \mathbf{T1}^{(jk)} \mathbf{CHH}^{(k)} - \mathbf{T2}^{(jk)} \mathbf{CHH}'^{(k)}, \quad \mathbf{HE}^{(jk)} = \mathbf{T1}^{(jk)} \mathbf{CHE}^{(k)} - \mathbf{T2}^{(jk)} \mathbf{CHE}'^{(k)}, \\ \mathbf{EH}^{(jk)} &= \mathbf{T1}^{(jk)} \mathbf{CEH}^{(k)} - \mathbf{T2}^{(jk)} \mathbf{CEH}'^{(k)}, \quad \mathbf{EE}^{(jk)} = \mathbf{T1}^{(jk)} \mathbf{CEE}^{(k)} - \mathbf{T2}^{(jk)} \mathbf{CEE}'^{(k)}, \end{aligned}$$

$$T1_{\mu v}^{(jk)} = \frac{is_k}{4} \int_0^{2\pi} d\varphi_k \left[k_0 \chi_c \rho_k^{(n_k+1)} H_{\mu}^{(2)}(k_0 \chi_c \rho_{jk}) \left(\frac{\partial \rho_{jk}}{\partial \rho_k^{(n_k+1)}} + \frac{\rho_k^{(n_k+1)\prime} \rho_{jk}}{\rho_k^{(n_k+1)}} \frac{\partial \varphi_{jk}}{\partial \rho_k^{(n_k+1)}} \right) - \right. \quad (13)$$

$$\left. - i\mu H_{\mu}^{(2)}(k_0 \chi_c \rho_{jk}) \left(\rho_k^{(n_k+1)} \frac{\partial \varphi_{jk}}{\partial \rho_k^{(n_k+1)}} - \frac{\rho_k^{(n_k+1)\prime}}{\rho_{jk}} \frac{\partial \rho_{jk}}{\partial \rho_k^{(n_k+1)}} \right) \right] \exp(i\varphi_k - i\mu \varphi_{jk}),$$

$$T2_{\mu v}^{(jk)} = \frac{is_k}{4} \int_0^{2\pi} d\varphi_k \sqrt{(\rho_k^{(n_k+1)\prime})^2 + (\rho_k^{(n_k+1)})^2} H_{\mu}^{(2)}(k_0 \chi_c \rho_{jk}) \exp(i\varphi_k - i\mu \varphi_{jk}), \quad (14)$$

при $j = \overline{1, N}$, $\chi_c = \sqrt{\epsilon_c - \beta^2}$, $\rho_k^{(n_k+1)\prime} = d\rho_k^{(n_k+1)} / d\varphi_k$, ρ_{jk} и φ_{jk} – полярные координаты внешней границы k -го канала в локальной системе координат j -го канала (рисунок 1), $s_k = 1$ при $k = 0$, $s_k = -1$ при $k = \overline{1, N}$, при $j = 0$ в (13) и (14) необходимо заменить $H_{\mu}^{(2)}(\dots) \rightarrow J_{\mu}(\dots)$, $H_{\mu}^{(2)}(\dots) \rightarrow J'_{\mu}(\dots)$.

Уравнения (12) составляют однородную алгебраическую систему размерности $(N+1)(4m+2) \times (N+1)(4m+2)$. Возможные значения комплексной постоянной распространения моды β могут быть найдены либо из условия равенства нулю ее определителя, либо путем формирования дисперсионного уравнения путем исключения из системы одной неизвестной, имеющей смысл амплитуды моды [3]. После решения задачи на собственные значения продольные компоненты электромагнитного поля моды H_z , E_z допускают численный расчет в квадратурах на основании теоремы Грина. Последующее вычисление поперечных компонент поля моды можно осуществить дифференцированием продольных компонент ЭМ поля.

В заключение отметим, что разработанная теория моделирования ЭМ волн в диэлектрических волноводах со слоистыми покрытиями расширяет возможности компьютерного моделирования. При $n_j = 0$ ($j = \overline{1, N}$) $n_0 = 0$ она аналитически переходит метод функций Грина, разработанный в [3] для микроструктурных волокон без покрытий и с однородными направляющими каналами. Предельным случаем данной теории является и классическое точное решение волноводной задачи для круглого диэлектрического волновода [7]. В настоящее время на основании развитого подхода выполнены расчеты модовых характеристик коаксиальных диэлектрических волноводов для терагерцового диапазона частот.

Работа выполнена в рамках Государственной программы научных исследований Республики Беларусь «1.15 Фотоника и электроника для инноваций».

Список использованных источников

1. Li, J. Recent progress on mathematical analysis and numerical simulations for Maxwell's equations in perfectly matched layers and complex media: a review / J. Li // Electronic Research Archive. – 2024. – Vol. 32, iss. 3. – P. 1901–1922.
2. On Time-Domain NRBC for Maxwell's Equations and Its Application in Accurate Simulation of Electromagnetic Invisibility Cloaks / B. Wang [et. al] // Journal of Scientific Computing. – 2021. – Vol. 86, № 20. – P. 20-1–20-34.
3. Сотский, А.Б. Фурье-анализ мод микроструктурных оптических волокон // А.Б. Сотский, Д.В. Понкратов, Л.И. Сотская // ЖТФ. – 2022. – Т. 92, вып. 12. – С. 1898–1908.
4. Корн, Г. Справочник по математике / Г. Корн, Т. Корн. – М. : Наука, 1977. – 831 с.
5. Сотский, А.Б. Теория оптических волноводных элементов : моногр. / А.Б. Сотский. – Могилев : УО «МГУ им. А.А. Кулешова», 2011. – 456 с.
6. Иванов, Е.А. Дифракция электромагнитных волн на двух телах / Е.А. Иванов. – Минск : Наука и техника, 1968. – 584 с.
7. Маркузе, Д. Оптические волноводы / Д. Маркузе. – М. : Мир, 1974. – 578 с.

Хасанов О.Х.¹, Федотова О.М.², Смирнова Т.В.³, Русецкий Г.А.¹, Писцова К.В¹.

¹*Научно-практический центр НАН Беларусь по материаловедению*

²*Российский государственный социальный университет, Минский филиал*

³*Международный государственный экологический институт
имени А.Д. Сахарова БГУ*

УСЛОВИЯ СТАБИЛЬНОГО РАСПРОСТРАНЕНИЯ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В ДИСПЕРСНЫХ СРЕДАХ С УЧЕТОМ СИЛ СВЕТОВОГО ДАВЛЕНИЯ

Рассмотрены механизмы, обеспечивающие глубокое проникновение лазерного пучка в среды сnano- и микрочастицами, где многократное рассеяние приводит к ослаблению и изменению направления распространения излучения. Показано, что стабильное распространение возможно при балансе между дифракционной расходностью пучка и оптической нелинейностью среды, вызванной перераспределением частиц под действием градиентных сил светового давления. Предложена модель на основе нелинейного уравнения Шредингера и уравнения конвекции-диффузии для анализа сценариев распространения излучения, включая солитонный режим и самофокусировку. Выявлено влияние входной мощности лазерного пучка, длины волны, температуры среды и других параметров на процесс распространения.

Ключевые слова: лазерное излучение, наночастица, микрочастица, биосуспензия, солитонный режим, самофокусировка, диссипация, силы светового давления, оптическая нелинейность.

Как известно, существует проблема глубокого проникновения лазерного излучения в дисперсные среды, такие, как, например, кровь и другие биосуспензии, из-за многократного рассеяния на nano- и микрочастицах. В результате излучение ослабляется и может изменять направление распространения. Изучение механизмов, обеспечивающих глубокое проникновение лазерного излучения в биосуспензии и ткани, позволит развить лазерные технологии. Более того, становится возможным управление локализацией микро- и наночастиц в поле излучения с использованием сил светового давления, что может способствовать развитию методов медицинской диагностики и терапии.

Отметим, что стабильное распространение лазерного излучения в среде возможно в условиях баланса влияния дифракционной расходности пучка и оптической нелинейности среды. Суспензии с биочастицами в слабых полях не проявляют оптическую нелинейность. В тоже время поляризуемость микро и наночастиц в поле мощного излучения и их перераспределение по объёму рассматриваемой среды под действием сил светового давления формируют нелинейный отклик среды. При этом пучок действует на диэлектрические микро- и наночастицы с градиентной силой, направленной вдоль градиента интенсивности поля и перемещающей частицы в область большей интенсивности, если диэлектрическая проницаемость частиц больше диэлектрической проницаемости окружения, или в область меньшей интенсивности, если соотношение диэлектрических проницаемостей обратное. В результате формируется

волновод с неравновесным распределением концентрации частиц. Другими словами, оптическая нелинейность таких сред имеет концентрационную природу. Баланс динамически формируемой оптической нелинейности среды и дифракции пучка, как показывает анализ, может способствовать его устойчивому распространению в суспензии.

Помимо градиентной силы \vec{F}_{grad} на частицу действуют силы вдоль направления распространения пучка, состоящие из силы рассеяния \vec{F}_{scat} и силы поглощения \vec{F}_{abs} [1]:

$$F_{grad} = \frac{|\alpha|}{2} \nabla I \quad (1)$$

$$F_{scat} = \frac{n_m \sigma_{scat} I}{c}, \quad (2)$$

$$F_{abs} = \frac{n_m \sigma_{abs} I}{c} \quad (3)$$

Здесь I – интенсивность излучения, действующего на биочастицу, ∇ – оператор градиента, $\alpha = 3V \frac{n_p^2 - n_m^2}{n_p^2 + 2n_m^2}$ – поляризуемость биочастицы, V – ее объем, n_p – показатель преломления материала частицы, n_m – показатель преломления жидкости, σ_{scat} и σ_{abs} – сечения рассеяния поглощения, соответственно. Как известно, сечение рассеяния частиц, размеры которых существенно меньше длины волны (рэлеевское рассеяние), прямо пропорционально размеру частиц в шестой степени и обратно пропорционально длине волны в четвертой степени: $\sigma_{scat} = \frac{k_m^4 |\alpha|^2}{4\pi}$. С увеличением размера частиц расчет сечения рассеяния становится более сложной задачей. В то же время, в ряде частных случаев расчет сечений рассеяния существенно упрощается. Если размер частиц существенно превышает длину волны $a > \lambda$, но диэлектрическая проницаемость частиц ϵ_p незначительно отличается от диэлектрической проницаемости жидкости ϵ_m и $(\epsilon_p - \epsilon_m)ak_m < 1$, то процесс рассеяния можно рассматривать в рамках борновского приближения. В этом случае для рассеяния вперед можно использовать рэлеевское приближение. Так, в работе [2], в которой анализировалось распространение лазерного излучения в суспензии цианобактерий, размер которых превышал длину волны лазерного пучка, использовался именно такой подход. Если размер биочастиц значительно превышает длину волны $a \gg \lambda$ и нарушаются условия борновского приближения: $(\epsilon_p - \epsilon_m)ak_m > 1$, но $(\epsilon_p - \epsilon_m) < 1$, справедливо использовать ВКБ приближение [3]. Указанным условиям удовлетворяют суспензии эритроцитов. Для расчета сечения рассеяния используют оптическую теорему, согласно которой полное сечение σ_t биочастицы равно сумме сечения рассеяния и сечения поглощения. Полное сечение, связанное с мнимой частью амплитуды рассеяния вперед, как и сечение поглощения легко рассчитывается, предполагая нормальное падение волны на частицу. Такое предположение оправдано в условиях $(\epsilon_p - \epsilon_m) < 1$.

Проанализируем условия стабильного распространения лазерного пучка в биосусpenзии в зависимости от входных параметров излучения и среды. В условиях небольшой концентрации частиц корректно использовать приближение эффективной среды [4] с показателем преломления $n_{eff} = n_m \sqrt{1 + 2\rho V \frac{n_p - n_m}{n_m}}$. Очевидно, что

нелинейный вклад в показатель преломления среды n_{nl} вносит неравновесное перераспределение частиц в поле излучения: $n_{nl} = (n_p - n_m)\rho(r, z)V$, где концентрация частиц является результатом решения уравнения конвекции-диффузии:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla}[\rho \vec{v}(\vec{r}) - D \vec{\nabla} \rho] = 0, \quad (4)$$

где D – коэффициент диффузии, t – время, v – скорость частиц, обусловленная действием градиентной силы F_{grad} и силы рассеяния вперед F_{scat} : $\vec{v} = \mu \vec{F}(|E|^2)$, μ – подвижность частиц, $\vec{F} = \vec{F}_{grad} + \vec{F}_{scat}$. Исследование распространения излучения сводится к совместному решению модифицированного нелинейного уравнения Шредингера (2) и уравнения конвекции-диффузии (1) [2]:

$$i \frac{\partial E}{\partial z} + \frac{1}{2k_o n_m} \Delta E + k_o V(n_p - n_m)\rho(\vec{r})E + i \frac{\sigma}{2} \rho(\vec{r})E = 0 \quad (5)$$

Как показывает анализ, движение частиц под действием градиентных сил определяет локальный характер оптической нелинейности супензии, в то время как действие сил рассеяния вперед приводит к нелокальной зависимости показателя преломления от z .

В условиях локальной оптической нелинейности супензии, когда влиянием сил рассеяния вперед и поглощением можно пренебречь, как показал анализ, возможно распространение лазерного пучка в солитонном режиме. При этом форма солитона будет определяться экспоненциальным типом нелинейности. На рисунке 1 представлено устойчивое распространение солитона с длиной волны 500 нм в кювете длиной 4 см и сечением 0.6 см × 0.6 см с супензией эритроцитов.

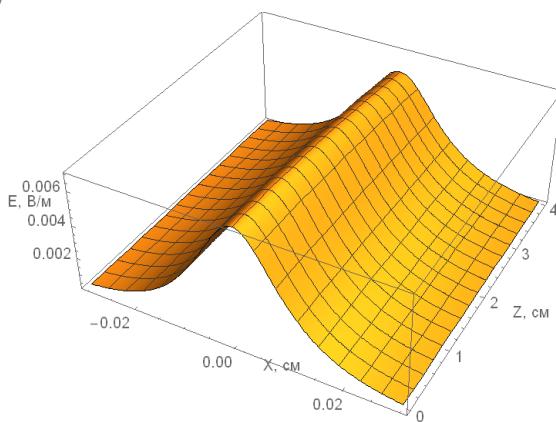


Рисунок 1 – Трехмерное изображение распределения напряженности лазерного поля $E(x,z)$ при распространении в солитонном режиме (длина волны 500 нм) в кювете длиной 4 см и сечением 0.6 см × 0.6 см с супензией эритроцитов

При одновременном анализе всех сил светового давления система уравнений (1–2) решалась численно и в рамках вариационного подхода. Как показал анализ, нелинейный сценарий распространения зависит от входной мощности лазерного пучка и может изменяться от дифракционной расходимости пучка до самофокусировки. В работе проведена оценка критической мощности самофокусировки $P_{\text{крит}}$. Как известно, порог определяется условием смены режима дифракционной расходимости пучка его самоканализированием [5]. Согласно нашим оценкам $P_{\text{крит}} = \frac{(1.22\lambda)^2 c K_B T}{32(n_p - n_m) V \rho_0 \alpha}$. Как следует

из расчетов, критическая мощность самофокусировки в биосуспензиях зависит от длины волны излучения, температуры среды, объема биочастицы, начальной концентрации частиц, их поляризуемости и разности показателей преломления частиц и жидкости. Пучки с входной мощностью $P_{\text{вх}}$ меньше критической должны испытывать дифракционную расходимость, а при $P_{\text{вх}} > P_{\text{крит}}$ будет происходить их самофокусировка. Проведенные расчеты подтверждают сделанные предположения. Нужно отметить, что влияние диссипации по мере распространения излучения может привести к смене режима самофокусировки на расходимость. На рисунке 2 приведены результаты численного моделирования нелинейных сценариев распространения лазерных пучков длиной волны 500 нм в кювете с суспензией эритроцитов с учетом силы рассеяния вперед и диссипации в зависимости от входной мощности пучка относительно критической величины.

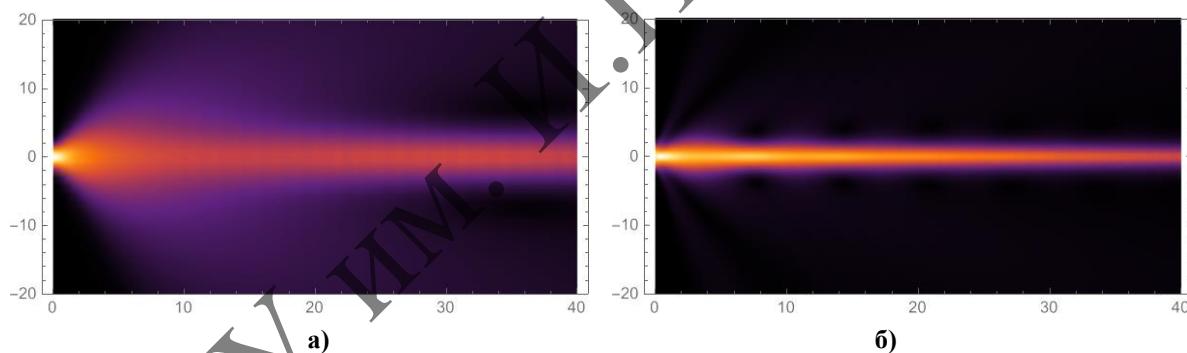


Рисунок 2 – Динамика распространения лазерного излучения в суспензии эритроцитов с учетом силы рассеяния вперед и диссипации в зависимости от входной мощности $P_{\text{отн}} = P_{\text{вх}}/P_{\text{крит}}$: а) $P_{\text{отн}} = 0.81$, б) $P_{\text{отн}} = 0.81$

Расчеты получены при безразмерных значениях сечения рассеяния вперед $b = 0.05$ и параметра диссипации $\delta = 0.01$. Поперечное сечение пучка и продольные координаты представлены в безразмерном виде. Рисунок 2а демонстрирует дифракционную расходимость пучка. В тоже время нужно отметить, что влияние рассеяния вперед способствует филаментации пучка, несколько сглаживая процесс расходимости. Что касается сценария, представленного на рисунок 2б, можно видеть процесс самофокусировки. Однако, влияние концентрационной нелинейности на самофокусировку ослабляется за счет слабой диссипации пучка.

Список использованных источников

1. Движение серебряных наночастиц в жидкости с различной вязкостью под действием сил светового давления / А.А. Афанасьев, Л.С. Гайда, Е.В. Матук, А.Ч. Свистун // Проблемы физики, математики и техники. – 2016. – № 4 (29). – С. 7–12.
2. Nonlinear Self-Action of Light through Biological Suspensions / A. Bezryadina, T. Hansson, R. Gautam [et al.] // Phys. Rev. Lett. – 2017. – Vol. 119. – P. 58101.
3. Исимару, А. Распространение и рассеяние волн в случайно-неоднородных средах / А. Исимару. – М. : Мир, 1981. –Т. 1.
4. Soliton dynamics and self-induced transparency in nonlinear nanosuspensions / R. El-Ganainy, D.N. Christodoulides, C. Rotschild, M. Segev // Optics Express. – 2007. – Vol. 15, iss. 16. – P. 10207–10218.
5. Шен, И.Р. Принципы нелинейной оптики / И.Р. Шен. – М. : Наука, 1989. – 560 с.

УДК 004.942

Е.Ю. Цырулик, А.В. Макаревич

Мозырский государственный педагогический университет имени И.П. Шамякина

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ТЕЛА В ВЯЗКОЙ СРЕДЕ ПРИ ЛИНЕЙНОМ ПО СКОРОСТИ ХАРАКТЕРЕ СИЛЫ СОПРОТИВЛЕНИЯ

Выполнено компьютерное моделирование падения тела сферической формы в жидкости при его ламинарном режиме обтекания средой. Представлен вывод уравнений для математического описания рассматриваемого процесса, установлен характер движения тела с приведением физического объяснения моделируемого процесса.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, численный анализ, вязкая среда, число Рейнольдса, ламинарный режим.

Введение. При движении тела в вязкой среде (жидкости или газе) на него действует сила сопротивления, которая в отличие от силы сухого трения скольжения существенно зависит от его скорости, определяющей характер обтекания тела потоком набегающей на него среды [1, 2].

В случае ламинарного (слоистого) обтекания (рисунок 1, а) величина силы сопротивления \vec{F}_c оказывается прямо пропорциональна модулю скорости \vec{v} движения объекта относительно среды ($F_c \sim v$).

Физика возникновения силы сопротивления в этом случае заключается в том, что между движущимся телом и средой всегда существует взаимодействие, поэтому слои среды, находящиеся вблизи поверхности объекта, условно говоря «прилипают» к нему. Эти «прилипшие» слои трутся с соседними слоями, что и приводит возникновению силы

сопротивления. Одним из ключевых факторов, определяющим величину силы сопротивления в данном случае, является вязкость среды.

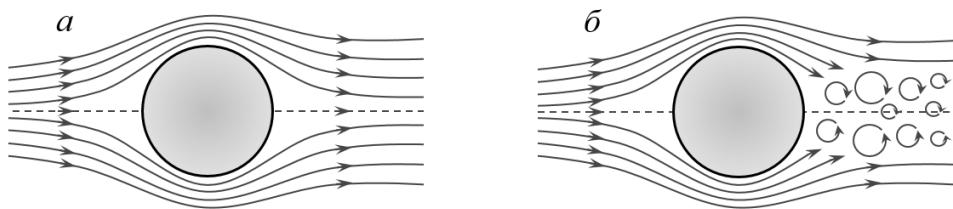


Рисунок 1 – Условное изображение потока набегающей среды при ламинарном (фрагмент а) и турбулентном (фрагмент б) режимах обтекания тела

При турбулентном (вихревом) режиме обтекания тела (рисунок 1,б) частицы набегающей среды позади него начинают двигаться более или менее случайным образом. За телом происходит разрыв линий тока с образованием вихревой зоны. Вязкость среды при этом перестает играть существенную роль, а определяющей становится ее плотность. В этом случае сила сопротивления оказывается пропорциональна квадрату скорости тела ($F_c \sim v^2$) [1].

Критерием перехода от ламинарного к турбулентному режиму обтекания является значение так называемого безразмерного числа Рейнольдса, вычисляемого как

$$Re = \frac{\rho_0 v l}{\mu},$$

где ρ_0 – плотность среды, μ – ее динамическая вязкость, v – скорость тела относительно среды, l – характерный поперечный размер тела (например, для шара – его радиус).

В случае тела сферической формы иногда условно считают, что при $Re \leq 10^2$ имеет место ламинарный режим обтекания, а при $Re > 10^2$ – турбулентный [2]. Хотя очевидно, что на практике участок $Re \leq 10^2$ включает переход от ламинарного режима обтекания к турбулентному. Подтверждением этому служит приведенное на рисунке 2 фото реальных иллюстраций течений воды за шаром при двух различных значениях чисел Рейнольдса [3].

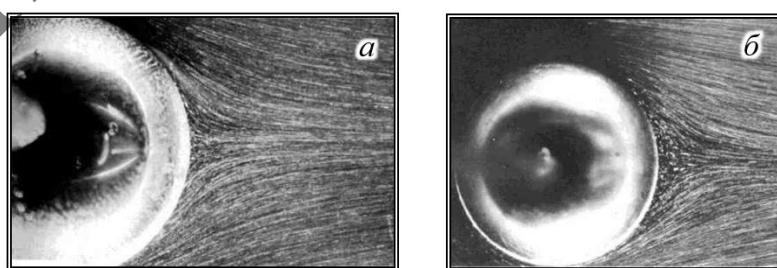


Рисунок 2 – Течение воды за шаром: а – при $Re = 17,9$, б – при $Re = 26,8$ (визуализация потока получена с помощью взвешенного в воде алюминиевого порошка)

Из этого рисунка видно, что при $Re = 17,9$ (фрагмент а) еще наблюдается ламинарное обтекание шара, однако уже при $Re = 26,8$ (фрагмент б) поток в кормовой

области становится явно отрывным, обуславливая возникновение турбулентного режима обтекания. Дальнейшее увеличение значения числа Рейнольдса за счет роста скорости шара относительно среды приводит к более выраженному отрыву потока и нарастанию турбулентности. Ниже рассмотрим особенности моделирования движения тел, когда $F_c \sim v$.

В случае ламинарного обтекания значение действующей на рассматриваемый объект силы сопротивления вычисляется согласно выражению

$$F_c = kv, \quad (1)$$

где k – коэффициент, зависящий от геометрии тела и свойств среды, v – скорость набегающего потока среды.

Для тела сферической формы известно значение $k = 6\pi\mu r$, где r – его радиус. Тогда выражение (1) приобретает вид

$$F_c = 6\pi\mu rv. \quad (2)$$

Формула (2) носит название закона Стокса [1].

С учетом этого построим математическую модель падения без начальной скорости объекта сферической формы в жидкости.

При погружении тела массой m в жидкость на него действуют сила тяжести $m\vec{g}$ и сила Архимеда \vec{F}_A (рисунок 3).

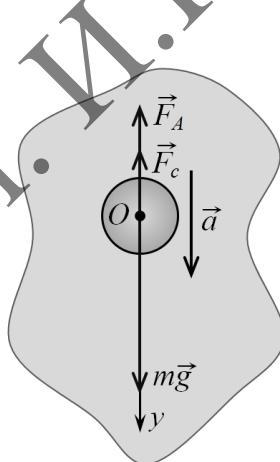


Рисунок 3 – Падение тела сферической формы в жидкости

Если $mg > F_A$, то рассматриваемый объект приобретает ускорение \vec{a} , направленное в сторону силы тяжести. По мере увеличения скорости тела на него также начинает действовать сила сопротивления \vec{F}_c , противоположная направлению движения и возрастающая в соответствии с (2) пропорционально модулю скорости \vec{v} набегания среды.

При построении математической модели будем пренебрегать изменением плотности и вязкости жидкости с глубиной, а также считать тело однородным и падающим без вращения.

Второй закон Ньютона для рассматриваемого случая имеет вид

$$m\vec{g} + \vec{F}_c + \vec{F}_A = m\vec{a}. \quad (3)$$

Проектируя векторное уравнение (3) на ось Oy , получим

$$Oy: mg - F_c - F_A = ma. \quad (4)$$

Учитывая (2) и то, что $m = \rho V = \frac{4\pi r^3 \rho}{3}$, где ρ – плотность тела, V – его объем,

а также что $F_A = \rho_0 g V = \frac{4\pi r^3 \rho_0 g}{3}$, выражение (4) можно преобразовать к виду

$$g\left(1 - \frac{\rho_0}{\rho}\right) - \frac{9\mu v}{2r^2 \rho} = a. \quad (5)$$

Принимая во внимание, что ускорение тела есть первая производная скорости по времени $\left(a = \frac{dv}{dt}\right)$, а скорость тела – первая производная координаты по времени $\left(v = \frac{dy}{dt}\right)$, на основании (5) получим рабочую систему дифференциальных уравнений для рассматриваемого случая

$$\begin{cases} \frac{dv}{dt} = g\left(1 - \frac{\rho_0}{\rho}\right) - \frac{9\mu v}{2r^2 \rho}, \\ \frac{dy}{dt} = v. \end{cases} \quad (6)$$

Начальные условия будут иметь вид: $v(0) = 0$, $y(0) = 0$.

В качестве конкретного примера смоделируем падение ртутного шарика радиуса $r = 2,57 \cdot 10^{-3} \text{ м}$ в глицерине при значении ускорения свободного падения $g = 9,81 \text{ м/с}^2$. Будем считать, что вся система находится при температуре $t = 20^\circ\text{C}$. В этом случае плотность ртути $\rho = 13,55 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$, плотность глицерина $\rho_0 = 13,55 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$, динамическая вязкость глицерина $\mu = 1,48 \text{ Па}\cdot\text{с}$.

Результаты численного решения системы уравнений (6) с использованием метода Рунге-Кутты 4-го порядка представлены на рисунке 4. Шаг интегрирования по времени Δt выбирался равным 10^{-4} с .

Из фрагмента 4, *a* видно, что при данных условиях моделирования скорость рассматриваемого тела вначале возрастает, а затем к моменту времени около $0,1 \text{ с}$ выходит на постоянное значение, равное приблизительно $0,12 \text{ м/с}$.

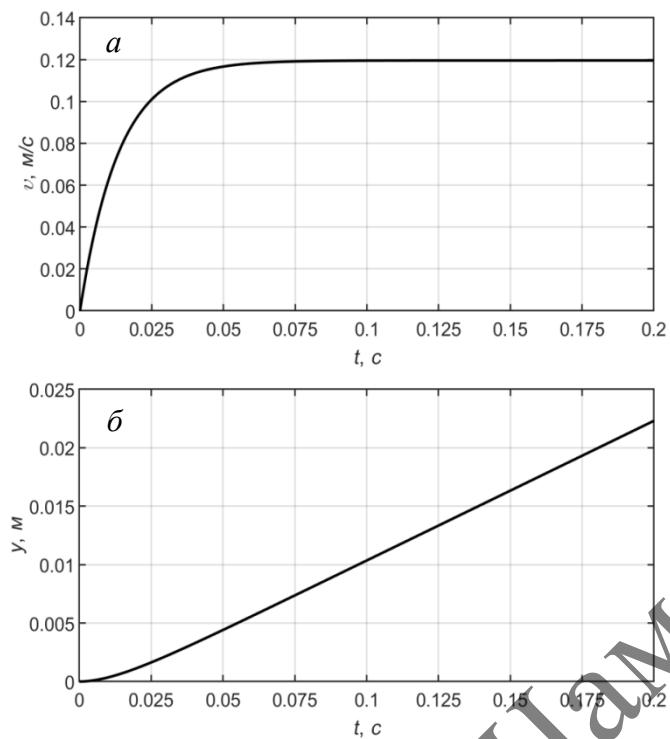


Рисунок 4 – Графики зависимости скорости (фрагмент *a*) и координаты (фрагмент *б*) ртутного шарика от времени

Равноускоренный характер движения шарика проявляется также и на рисунке 4, *б*, поскольку при малых значениях t в графической зависимости $y(t)$ просматривается фрагмент параболы. Далее движение переходит в равномерное, о чем свидетельствует линейный вид графика $y(t)$.

Таким образом, анализ представленных на рисунке 4 зависимостей $v(t)$ и $y(t)$ позволяет сделать вывод о том, что скорость моделируемого объекта вблизи момента времени $0,1\text{ с}$ возрастает до значения, при котором сила сопротивления \vec{F}_c совместно с силой Архимеда \vec{F}_A начинают компенсировать силу тяжести $m\vec{g}$.

В рассматриваемом случае максимальное значение числа Рейнольдса составило 0,054 при скорости тела равной $0,12\text{ м/с}$, что явно не соответствует турбулентному режиму его обтекания.

Таким образом, построение и компьютерная реализация подобных математических моделей дает возможность проанализировать характер движения исследуемых объектов в вязких средах, определить основные факторы, влияющие на их движение, а также глубже понять физику рассматриваемых процессов и взаимодействий тел со средой.

Список использованных источников

1. Ландау, Л.Д. Физика для всех. Движение. Термодинамика / Л.Д. Ландау, А.И. Китайгородский. – М. : Наука, 1974. – 392 с.
2. Алешкович, В.А. Механика сплошных сред. Лекции. / В.А. Алешкович, Л.Г. Деденко, В.А. Караваев ; под ред. В.А. Алешковича. – М. : Изд-во Физического факультета МГУ, 1998. – 92 с.
3. Van Dyke, M. An Albom of Fluid Motion / M. Van Dyke. – Stanford : Parabolic Press, 1982. – 177 p.

Содержание



Секция 1 Оптика и акустооптика кристаллов

АМАНОВА М.А., НАВНЫКО В.Н., МАКАРЕВИЧ А.В., ШЕПЕЛЕВИЧ В.В. ВЛИЯНИЕ ПЬЕЗОЭФФЕКТА И ОПТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ НА ДИФРАКЦИОННУЮ ЭФФЕКТИВНОСТЬ ГОЛОГРАММ В ФОТОРЕФРАКТИВНОМ КРИСТАЛЛЕ $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$	5
БАЛЫКИН И.В., РЫЖЕВИЧ А.А., ЖЕЛЕЗНИКОВА Т.А., КАЗАК Н.С. ОПТИМАЛЬНЫЕ ПАРАМЕТРЫ ОПТИЧЕСКОЙ СХЕМЫ ДЛЯ ФОРМИРОВАНИЯ ОДНОКОЛЬЦЕВОГО СВЕТОВОГО ПУЧКА В ОДНООСНОМ КРИСТАЛЛЕ	8
БАЛЫКИН И.В., РЫЖЕВИЧ А.А., КАЗАК Н.С. САМОДИФРАКЦИЯ МНОГОКОЛЬЦЕВЫХ СВЕТОВЫХ ПУЧКОВ НЕБЕССЕЛЕВА ТИПА	13
БЕЛЫЙ В.Н., ХИЛО Н.А., РОПОТ П.И., ХИЛО П.А. АКУСТООПТИЧЕСКАЯ КРУГОВАЯ РАЗВЕРТКА СВЕТОВОГО ЛУЧА ПРИ КВАЗИКОЛЛИНЕАРНОЙ ДИФРАКЦИИ В АНИЗОТРОПНЫХ КРИСТАЛЛАХ	18
БОРОДАВЧЕНКО О.М., ЖИВУЛЬКО В.Д., УСЕНКО К.В., МУДРЫЙ А.В., ЯКУШЕВ М.В. СВОБОДНЫЕ ЭКСИТОНЫ В ОПТИЧЕСКИХ СПЕКТРАХ МОНОКРИСТАЛЛОВ И ТОНКИХ ПЛЕНОК CuInSe_2	21
ВАРАПАЙ Н.В., КОВГАР В.В., РОМАНЕНКО А.А., ПРУСОВА И.В. СИНТЕЗ И СПЕКТРАЛЬНО-ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА КВАРЦЕВЫХ ГЕЛЬ-СТЕКОЛ, ЛЕГИРОВАННЫХ Cr, Yb И Er	25
ВЕКШИН М.М., ПОЛОТОВА О.Е. ГИБРИДНЫЕ МОДЫ ВЫСОКОКОНТРАСТНЫХ ПОЛОСКОВЫХ ОПТИЧЕСКИХ As_2S_3 ВОЛНОВОДОВ И ИХ ПРИМЕНЕНИЕ	29
ДАВЫДОВСКАЯ В.В., НАВНЫКО В.Н., ФЕДОРОВА А.В., БЛОЦКАЯ Д.С., ЗАВАЛЕЙ С.Н. ОСОБЕННОСТИ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ВИХРЕВОГО СВЕТОВОГО ПУЧКА В ФОТОРЕФРАКТИВНОМ КРИСТАЛЛЕ	33
КОНСТАНТИНОВА А.Ф., ГОЛОВИНА Т.Г., ДУДКА А.П., БУТАШИН А.В., КОЗЛОВА Н.С., ЗАБЕЛИНА Е.В., КАСИМОВА В.М. ОПТИЧЕСКИЕ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ СЕМЕЙСТВА ЛАНГАСИТА И ИХ СВЯЗЬ С АТОМНОЙ СТРУКТУРОЙ	36
КУЛАК Г.В., КАЗАКОВ В.И., РОПОТ П.И., ШАКИН О.В. ДИФРАКЦИЯ ИГОЛЬЧАТЫХ СВЕТОВЫХ ПУЧКОВ НА УЛЬТРАЗВУКЕ В ОДНООСНЫХ КРИСТАЛЛАХ	41
КУЛАК Г.В., НИКОЛАЕНКО Т.В., ТОЗИК Л.А. РАСПРОСТРАНЕНИЕ СВЕТОВЫХ ВОЛН В ТРЕХМЕРНЫХ ФОТОННЫХ КРИСТАЛЛАХ	46
КУРИЛКИНА С.Н., БЕЛЫЙ В.Н., ХИЛО Н.А. ОПТИЧЕСКИЕ И АКУСТИЧЕСКИЕ ВИХРЕВЫЕ ПУЧКИ	51
МАКАРЕВИЧ А.В., НАВНЫКО В.Н., ШАНДАРОВ С.М., ЦЫРУЛИК Е.Ю. ОСОБЕННОСТИ И ВОЗМОЖНОСТИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАНИЯ ВЫХОДНЫХ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ГОЛОГРАММ В ФОТОРЕФРАКТИВНЫХ КРИСТАЛЛАХ	55

НИЧИПОРКО С.Ф. ВЛИЯНИЕ ВНЕШНЕГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА ПОЛЯРИЗАЦИОННЫЕ ЗАВИСИМОСТИ ДИФРАКЦИОННОЙ ЭФФЕКТИВНОСТИ ГОЛОГРАММ В ФОТОРЕФРАКТИВНЫХ КРИСТАЛЛАХ СРЕЗА (111)	60
ПОНКРАТОВ Д.В., ВЕРХОВ И.А., СОТСКАЯ Л.И., ЧУДАКОВ Е.А., СОТСКИЙ А.Б. ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ ТОНКОПЛЕНОЧНЫХ МЕТАЛЛОДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ РЕФРАКТОМЕТРОВ.....	63
ТИМОЩЕНКО Е.В., ЮРЕВИЧ В.А., ЮРЕВИЧ Ю.В. НУТАЦИОННАЯ СТРУКТУРА ИНТЕНСИВНОСТИ В ИМПУЛЬСНЫХ ЛАЗЕРАХ НА ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ	68
ТОЛСТИК А.Л. ГОЛОГРАФИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ УПРАВЛЕНИЯ СВЕТОВЫМИ ПОЛЯМИ И ДИАГНОСТИКИ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ МАТЕРИАЛОВ	73
ФУРС А.Н. ОДНОНАПРАВЛЕННОЕ РАСПРОСТРАНЕНИЕ ПОВЕРХНОСТНЫХ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН В РТ-СИММЕТРИЧНЫХ ГИРОТРОПНЫХ СТРУКТУРАХ	78
ХАРТОН М.М., НОВИЦКИЙ А.В. РАССЕЯНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН УПОРЯДОЧЕННОЙ СИСТЕМОЙ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ЦИЛИНДРОВ	83
ЧУДАКОВ Е.А., ФЕДОСЕНКО Н.Н., КУЛЕШ Е.А., СТАСЬКОВ Н.И. ОБРАТНАЯ ЗАДАЧА СПЕКТРОФОТОМЕТРИИ ДЛЯ ИНТЕРФЕРЕНЦИОННЫХ ПОКРЫТИЙ НА КРЕМНИИ	87
ШАНДАРОВ С.М., ЗЛОБИН А.О., БУРИМОВ Н.И., КОЛЕСНИКОВ Д.С., НАВНЫКО В.Н., БРЮШИНН М.А., СОКОЛОВ И.А. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ВОЛН С ЦИРКУЛЯРНОЙ ПОЛЯРИЗАЦИЕЙ НА ФОТОРЕФРАКТИВНЫХ ГОЛОГРАММАХ В КУБИЧЕСКИХ ГИРОТРОПНЫХ КРИСТАЛЛАХ	90
ШАПОВАЛОВ П.С. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ В ВЕЩЕСТВЕ ПРИ НАГРЕВЕ КРУГОВЫМ И КОЛЬЦЕВЫМ ЛАЗЕРНЫМ ПУЧКОМ	95

Секция 2

Теоретическая физика

IVASKEVICH A.V., RED'KOV V.M., OVSIIYUK E.M. COMPLETELY AND PARTIALLY POLARIZED LIGHT, JONES 4-SPINOR, STOKES VECTOR AND TENSOR	99
KISEL V.V., BURY A.V., SACHENOK P.O., OVSIIYUK E.M. SPIN 1/2 PARTICLE WITH ANOMALOUS MAGNETIC MOMENT AND POLARIZABILITY IN THE EXTERNAL MAGNETIC FIELD	105
KRYLOVA N.G., OVSIIYUK E.M., IVASHKEVICH A.V., RED'KOV V.M. GEOMETRICAL MODELLING ON THE MEDIA IN ELECTRODYNAMICS	109
OVSIIYUK E.M., SACHENOK P.O., MARTYNENKO A.S., IVASHKEVICH A.V. S=0 PARTICLE WITH THE COX STRUCTURE AND POLARIZABILITY, IN PRESENCE OF MAGNETIC FIELD	115
АНДРЕЕВ В.В., МАКАРЕНКО В.В. ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ ПОЛЯРИЗАЦИОННЫХ ФРАКЦИЙ W-БОЗОНОВ К СР-ЧЁТНЫМ АНОМАЛЬНЫМ КОНСТАНТАМ ТРЁХБОЗОННЫХ ВЕРШИН В ПРОЦЕССЕ ПАРНОГО РОЖДЕНИЯ НА CMS LHC	118
БОЙЧЕНКО С.Е., ТЛЯЧЕВ В.Б. ОСОБЕННОСТИ УГЛОВОЙ ДЕКОНЦЕНТРАЦИИ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ПРИ РАДИАЦИОННОМ ТОРМОЖЕНИИ В УЛЬТРАРЕЛЯТИВИСТСКОМ СЛУЧАЕ	124
ГАВРИШ В.Ю., АНДРЕЕВ В.В. ПАРАМЕТРЫ ПУАНКАРЕ-КОВАРИАНТНОЙ КВАРКОВОЙ МОДЕЛИ МЕЗОНОВ ТЯЖЕЛОГО СЕКТОРА	128

ГАЛИНСКАЯ Д.С., КОСОБУЦКИЙ В.Д., ЕРЕМЕНКО П.В., ПИЦЕВИЧ Г.А.	
НЕЛИНЕЙНЫЕ ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЖК МОЛЕКУЛЫ С32H59NO	133
ЖУК Е.А., ИЛЬЯСОВ А.В., ЛОМАКО К.Д., ПИЦЕВИЧ Г.А., МАЛЕВИЧ А.Э.	
ТОРСИОННЫЙ ИК СПЕКТР МОЛЕКУЛЫ МЕТАНТИОЛА	137
КРЫЛОВА Н.Г., ГРУШЕВСКАЯ Г.В. ТЕРМОДИНАМИКА ЧЕРНЫХ ДЫР С АКСИАЛЬНО-СИММЕТРИЧНОЙ ОБОБЩЕННОЙ МЕТРИКОЙ НЬЮМЕНА-УНТИ- ТАМБУРИНО	143
НОВИКОВА О.В., ТЮМЕНКОВ Г.Ю. О ДЖОУЛЬ-ТОМСОНОВСКОМ РАСШИРЕНИИ ЗАРЯЖЕННОЙ АдС ЧЁРНОЙ ДЫРЫ И ЖИДКОСТИ БЕРТЛО	148
ОВСИЮК Е.М., ИВАШКЕВИЧ А.В., РЕДЬКОВ В.М. СПИНОРНЫЙ ПОДХОД В ТЕОРИИ МАКСВЕЛЛА	153
ОВСИЮК Е.М., ИВАШКЕВИЧ А.В., РЕДЬКОВ В.М. РАЗДЕЛЕНИЕ ПЕРЕМЕННЫХ В СПИНОРНЫХ УРАВНЕНИЯХ МАКСВЕЛЛА, СФЕРИЧЕСКИЕ КООРДИНАТЫ	156
ПЛЕТЮХОВ В.А. МАССИВНЫЕ КАЛИБРОВОЧНО-ИНВАРИАНТНЫЕ ПОЛЯ В ТЕОРИИ РЕЛЯТИВИСТСКИХ ВОЛНОВЫХ УРАВНЕНИЙ	162
СЕРЫЙ А.И. ОБ ЭФФЕКТЕ БАРЫШЕВСКОГО-ЛЮБОШИЦА В ВОДОРОДЕ В КОСМИЧЕСКИХ УСЛОВИЯХ	165
СИНЕГРИБОВ Д.В., АНДРЕЕВ В.В., СЕРЕНКОВА И.А. ОПТИМАЛЬНЫЕ НАБЛЮ- ДАЕМЫЕ ДЛЯ ФЕНОМЕНОЛОГИИ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО Z ¹ -БОЗОНА НА КОМПАКТНОМ ЛИНЕЙНОМ КОЛЛАЙДЕРЕ	169

Секция 3

Компьютерное моделирование физических процессов и явлений

GRUSHEVSKAYA H., KRYLOV G. CONFINEMENT OF MAJORANA-LIKE STATES IN GRAPHENE P-N JUNCTIONS	174
ZERNICA D.A. FEATURES OF STRUCTURE FORMATION OF MULTI-COMPONENT ALLOYS, Sn _{55,18} Zn _{44,50} Si _{0,23} Al _{0,09} , OBTAINED UNDER STRONGLY NON-EQUILIBRIUM CRYSTALLIZATION CONDITIONS	178
АНДРИАНОВ В.М., КОРОЛЕВИЧ М.В. КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И ИНФРАКРАСНЫХ СПЕКТРОВ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ МОЛЕКУЛ КЛАССА ФИТОГОРМОНАЛЬНЫХ СТЕРОИДОВ	182
БАЛЫКИН И.В., РЫЖЕВИЧ А.А., СМЕХОВИЧ О.А., ВИЗГИН А.П., ЦИРКУН Т.Д. СТАЦИОНАРНЫЕ ТРАЕКТОРИИ МИКРОЧАСТИЦ В ДИНАМИЧЕСКОМ ЧЕТЫРЁХЛУЧЕВОМ ИНТЕРФЕРЕНЦИОННОМ ПОЛЕ	187
БАРАНОВ Г.С., ПОЛЯКОВА Я.В., МУХИНА А.Ю., ПИЦЕВИЧ Г.А., МАЛЕВИЧ А.Э. ВРАЩЕНИЕ ГИДРОКСИЛЬНЫХ ГРУПП В МОЛЕКУЛЕ БОРНОЙ КИСЛОТЫ	192
БОНДАРЬ С.Р., ПИЛИПЕЙКО А.С. МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕПЛА В ПАКЕТЕ PDE TOOLBOX MATLAB	197
ГОЛЬЦЕВ М.В., МАНСУРОВ В.А., РАГУНОВИЧ Л.Д., ТРУШЕЛЬ Н.А. ДЕФОРМАЦИЯ СОСУДИСТОЙ СТЕНКИ В МЕСТЕ СЛИЯНИЯ ПОЗВОНОЧНЫХ АРТЕРИЙ В БАЗИЛЯРНУЮ	201
ГРИГОРЬЕВ А.А. МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ЧАСТИЦЫ В НЕОДНОРОДНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ В СРЕДЕ MATHCAD	206

ДОРОШЕВИЧ И.Л. МИКРОМАГНИТНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МАГНИТНОГО ГИСТЕРЕЗИСА СФЕРИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ ЖЕЛЕЗА	209
ЕСМАН А.К., ЗЫКОВ Г.Л. КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ПРИЕМНИКА СУБМИЛЛИМЕТРОВОГО ДИАПАЗОНА	214
КОМАРОВ Ф.Ф., КОВАЛЬЧУК Н.С., ЗАЯЦ Г.М., МИЛЬЧАНИН О.В., ХАРЛОВИЧ Ю.В. МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ФОРМИРОВАНИЯ СЛОЕВ КРЕМНИЯ, ГИПЕРПЕРЕСЫЩЕННЫХ АТОМАМИ СЕЛЕНА МЕТОДОМ ИОННОЙ ИМПЛАНТАЦИИ С ПОСЛЕДУЮЩИМ ЛАЗЕРНЫМ ОТЖИГОМ	217
КОМАРОВ С.О., ГОРБАЦЕВИЧ А.К., ВЕРЕЩАГИН Г.В., ГАРКУН А.С. ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЕ ПОЛЕ КОЛЬЦЕВОГО ЗАРЯДА ВБЛИЗИ МЕДЛЕННО ВРАЩАЮЩЕЙСЯ ЧЕРНОЙ ДЫРЫ	222
ПОНКРАТОВ Д.В., СОТСКИЙ А.Б. МЕТОД ФУНКЦИЙ ГРИНА В ТЕОРИИ ОТКРЫТЫХ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ВОЛНОВОДОВ СЛОЖНОГО СЕЧЕНИЯ	226
ХАСАНОВ О.Х., ФЕДОТОВА О.М., СМИРНОВА Т.В., РУСЕЦКИЙ Г.А., ПИСЦОВА К.В. УСЛОВИЯ СТАБИЛЬНОГО РАСПРОСТРАНЕНИЯ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В ДИСПЕРСНЫХ СРЕДАХ С УЧЕТОМ СИЛ СВЕТОВОГО ДАВЛЕНИЯ	232
ЦЫРУЛИК Е.Ю., МАКАРЕВИЧ А.В. МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ТЕЛА В ВЯЗКОЙ СРЕДЕ ПРИ ЛИНЕЙНОМ ПО СКОРОСТИ ХАРАКТЕРЕ СИЛЫ СОПРОТИВЛЕНИЯ	236